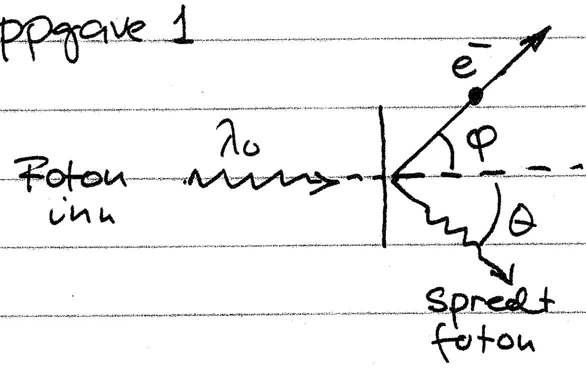
SIF 4065 ATOM OG MOLEKYLFYSIKK

EKSAMEN DES. 2002.

Oppgave 1

a)



Elektronet er i ro før støtet, $p_e = 0$, slik at energien tilsvarer hvilemassen.
Fotonet er uten masse slik at $E_0 = p_0 c$
Etter støtet har fotonet impuls p_f og energi $E_f = c p_f$. Etter støtet har elektronet ~~momentet~~ impuls p_e
Dette gir da

b) Impulsbevaring:

$$p_0 = p_f \cos\theta + p_e \cos\varphi$$

$$p_f \sin\theta = p_e \sin\varphi$$

Kvadrerer og adderer

$$(p_0 - p_f\cos\theta)^2 + p_f^2 \sin^2\theta = p_e^2$$

$$p_0^2 + p_f^2 - 2 p_f p_0 \cos\theta = p_e^2$$

(I) $$(p_0 - p_f)^2 + 2 p_f p_0 (1-\cos\theta) = p_e^2$$

Energibevarelse:

$$p_0 c - p_f \cdot c = \sqrt{p_e^2 c^2 + m c^4} - mc^2$$

(II) $$(p_0 - p_f)^2 + 2mc(p_0 - p_f) = p_e^2$$

I + II gir tilsammen

$$1-\cos\theta = mc\left(\frac{1}{p_f}-\frac{1}{p_0}\right)=\frac{mc}{h}(\lambda_f-\lambda_i)$$

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1-\cos\theta) = \lambda_c(1-\cos\theta)$$

Comptonbølgelengden er gitt av

$$\lambda_c = \frac{h}{mc}$$

Tallverdi:

$$\lambda_c = \frac{1.24\cdot 10^4\,\mathrm{eV}\cdot\text{Å}}{0.511\cdot 10^6\,\mathrm{eV}} = 0.0243\,\text{Å} = 0.00243\,\mathrm{nm}.$$

Oppgave 2.

a) Bølgefunksjonen er gitt av

$$\psi(x) = \frac{N}{(x^2+a^2)^2}$$

Slik at: $\psi' = -4N\dfrac{x}{(x^2+a^2)^3}$

og $\psi'' = \dfrac{4N}{(x^2+a^2)^4}\cdot(5x^2-a^2)$

Vi setter inn i Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{4N\cdot(5x^2-a^2)}{(x^2+a^2)^4} + U(x)\frac{N}{(x^2+a^2)^2} = E\cdot\frac{N}{(x^2+a^2)^2}$$

Ligningen gjelder også for $x=0$ der vi kjenner verdien av $U(x)$

$x=0 \Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{4N(-a^2)}{a^8} - \frac{2\hbar^2}{ma^2}\frac{N}{a^4} = E\cdot\frac{N}{a^4}$$

$$0 = E\cdot\frac{N}{a^4} \quad \text{ɔ:} \quad E=0$$

og dermed fra ligningen øverst på siden med $E=0$ får vi:

$$U(x) = \frac{2\cdot\hbar^2}{\cancel{2}m}\frac{5x^2-a^2}{(x^2+a^2)^2}$$

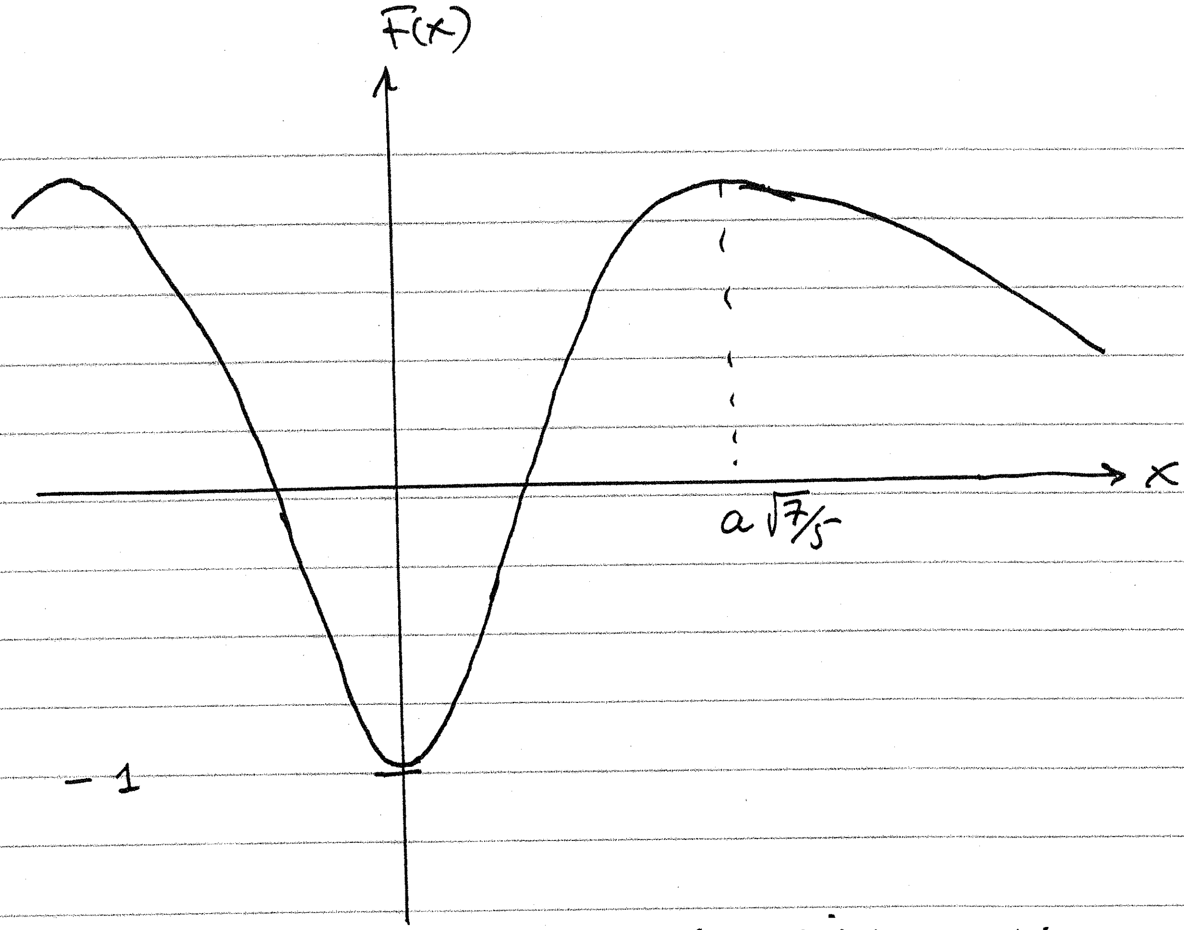
b) Vi plotter forholdet $U(x)/|U_0|$

$$F(x) = \frac{U(x)}{|U_0|} = a^2\frac{5x^2-a^2}{(x^2+a^2)^2}$$

$F(0) = -1$, $F=0$ for $x = \pm\frac{a}{\sqrt{5}}$

$F(\infty) = 0$

F har maksimum når $F'=0$. Dette skjer for $x = \pm a\sqrt{\frac{7}{5}}$. der verdien blir $25/24$.



Klassisk vendepunkt: I et slikt punkt er den kinetiske energi null og den potensielle energi lik totalenergien. Siden $E=0$ betyr dette at de klassiske vendepunktene er der $U(x)=0$; dvs for $x = \pm a/\sqrt{5}$.

c) $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx$

Integralet er antisymmetrisk og $\langle x \rangle = 0$

Det samme gjelder også for $\langle p \rangle$ p_{op} er antisymmetrisk. Vi kan også ta utgangspunkt i $\langle p_x \rangle = \frac{d}{dt}\langle x \rangle = 0$.

d) Generelt har vi

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$$

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$$

For vårt tilfelle med $\langle x\rangle = \langle p_x\rangle = 0$ får vi

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \sqrt{\langle x^2\rangle} \cdot \sqrt{\langle p^2\rangle} = \frac{a}{\sqrt{5}} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{5}} \cdot \frac{\sqrt{7}}{a}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{5}\sqrt{7} = 0.529\,\hbar$$

Ifølge Heisenbergs usikkerhetsrelasjon må vi generelt ha at $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$
Heisenbergs relasjon er oppfylt, men vi ligger nær grensen.

Oppgave 3.

Vi tar utgangspunkt i 3.4

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right)\psi(r,\theta,\varphi) + U(\vec{r})\psi(r,\theta,\varphi)$$

$$= E\psi(r,\theta,\varphi)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)\psi + U\psi = E\psi$$

Vi kan nå forkorte $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ siden den eneste operasjon som gjenstår er derivasjon m.h.p. r.

Dette gir da

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}U(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)R(r) = 0$$

Kvantetallet ℓ kan generelt anta verdiene $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ opp til $n-1$
For hver verdi av ℓ kan m_ℓ anta verdiene $m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots 0, \ell-1, \ell$

Normeringsbetingelsen:

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = \int R_{n,\ell}^2 |Y_\ell^m|^2 \cdot r^2 dr d\Omega$$

$$= \int_0^\infty R_{n,\ell}^2 r^2 dr = 1.$$

b)

Med $g(r) = r \cdot R(r)$

Dette gir $R' = \dfrac{g'}{r} - \dfrac{g}{r^2}$

$$R'' = \frac{g''}{r} - \frac{2g'}{r^2} + \frac{2g}{r^3}$$

Settes dette inn for punkter inne i kula der $U(r) = 0$

$$\frac{1}{r}g'' - \frac{2}{r^2}g' + \frac{2}{r^3}g + \frac{2}{r}\left(\frac{1}{r}g' - \frac{1}{r^2}g\right)$$

$$- \frac{l(l+1)}{r^2}\cdot\frac{1}{r}\cdot g + k^2\frac{g}{r} = 0 \quad ; \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Ordner vi denne ligningen fås:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) g(r) = 0$$

For $r > r_0$ er $U(r) = \infty$. Dette fører til at $\psi(r) = 0$ for $r > 0$. Kontinuitets-ligningen for $r = r_0$ gir da at $\psi(r_0) = 0$ som grensebetingelse. ~~på~~ b.f. inne i kula. $\Rightarrow g(r) = 0$ for $r = r_0$.

c) For $l = 0$ får vi følgende ligning for $g(r)$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right) g_0(r) = 0.$$

som generelt har en løsning av formen

$$g_0(r) = A \cdot \sin kr + B \cos kr.$$

Betingelsen $g_0(r=0) = 0$ gir $B = 0$

Betingelsen $g_0(r = r_0)$ gir $kr_0 = n\pi$

$n = 1, 2, 3.$

$$g_{0,n}(r) = A \cdot \sin(n\pi r/r_0) = N_{0,n} \sin(n\pi r/r_0)$$

Betingelsen $kr_0 = n\pi$ gir for de kvantiserte energiene

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2\pi^2}{r_0^2} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Normeringen er gitt av:

$$\int_0^\infty r^2 R^2(r)\, dr = \int_0^{r_0} g_{0,n}^2(r)\, dr =$$

$$= N_{0,n}^2 \int_0^{r_0} \sin^2 n\pi r/r_0 \, dr$$

Nå er: $\int_0^{r_0} dr \sin^2 n\pi r/r_0 \, dr = \frac{1}{2} r_0$

Som gir: $N_{0,n} = \sqrt{\frac{2}{r_0}}$

$$\underline{\underline{R_{0,n} = \sqrt{\frac{2}{r_0}} \cdot \frac{1}{r} \cdot \sin n\pi r/r_0}}$$

d) Krafta fra en partikkel i grunntilstanden er gitt av

$$dE = F \cdot dr_0$$

$$F = \frac{dE}{dr_0} = \frac{d}{dr_0}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{r_0^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{2\pi^2}{r_0^3}$$

$$= \frac{-2E_0}{r_0}$$

Trykket (tallverdien)

$$p = \frac{2E_0}{4\pi r_0^2 \cdot r_0} = \frac{2}{3}\frac{E_0}{\frac{4\pi}{3} r_0^3} = \frac{2}{3} u$$

der u er energitettheten i kula.

Oppgave 4

Ar har fulle skall. Vekservirkningen er derfor av typen dipol - dipol ɔ: instantan dipol → indusert dipol Dette er den såkalte Van der Waals vekselvirkning som for lange avstander er proporsjonal med $1/R^6$

$$V_{LJ} = 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{R}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6\right)$$

med $n = 12$

$$V_{LJ} = 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6\right)$$

Vi beregner krummingen i likevekts-posisjonen

$$V''(R) = \frac{4\epsilon}{R^2}\left[12\cdot 13\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - 6\cdot 7\left(\frac{\sigma}{R}\right)^6\right]$$

$$V'(R_0) = -\frac{4\epsilon}{R_0}\left[12\left(\frac{\sigma}{R_0}\right)^{12} - 6\left(\frac{\sigma}{R}\right)^6\right] = 0$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\sigma}{R_0}\right)^6 = \frac{1}{2} \qquad R_0 = 2^{1/6}\cdot\sigma$$

Som innsatt gir:

$$V''(R_0) = \frac{4\epsilon}{2^{1/3}\sigma^2}\left(\frac{12\cdot 13}{4} - \frac{6\cdot 7}{2}\right) = \frac{72\epsilon}{2^{1/3}\cdot\sigma^2}$$

Kraftkonstanten er lik $V''(R_0)$; vi rekkeutvikler omkring R_0

$$V(R) = V(R_0) + \frac{1}{2} V''(R_0) (R-R_0)^2 + \cdots$$

$$\therefore\ K = V''(R_0)$$

Nullpunktsenergien er $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{K}{\mu}}$

For Ar_2:

$$K = \frac{72 \cdot (1.05 \cdot 10^{-2} eV)\, 1.6 \cdot 10^{-19}\ J/eV}{2^{1/3} \cdot (3.4 \cdot 10^{-10} m)^2} = 0.83\ J/m^2$$

som gir: $E_0 = \frac{1}{2}\, 1.05 \cdot 10^{-34} \sqrt{\frac{0.83}{\frac{39.95}{2} \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}}} = 2.6 \cdot 10^{-22} J$

$= 1.6 meV$

Bindingsenergien:

$$E_B = \epsilon - E_0 = (10.5 - 1.6)\,meV = 8.9\,meV$$

b)

Energiforskjellen mellom de to laveste tilstandene er $\Delta E = \hbar\omega_0$

$$\Delta E = \hbar\omega_0 = 1.054 \cdot 10^{-34} \cdot 2\pi \cdot 6.51 \cdot 10^{13} / 1.6 \cdot 10^{-19}\ eV$$

$$= 0.27 eV$$

Laveste tilstand ligger $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ (nullpunkts-energien) over bunnen av potensialbrønnen. Det betyr at

$$E_B = A - \frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

$$A = E_B + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 = 9.73\ \text{eV}$$

Videre er a bestemt av ω_0

$$V'' = A(4a^2 e^{-2ax} - 2a^2 e^{-ax})$$

$$x = 0: \quad k = V''$$

$$k = 2Aa^2$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \Rightarrow \omega_0^2 \mu = 2Aa^2$$

som gir

$$a^2 = \frac{\omega_0^2 \mu}{2A}, \qquad \mu = \frac{1.99 \cdot 2.66}{1.99 + 2.66} \cdot 10^{-26}\ \text{kg}$$

$$= 1.14 \cdot 10^{-26}\ \text{kg}$$

$$a = \omega_0 \sqrt{\frac{\mu}{2A}} =$$

$$= 2\pi \cdot 6.51 \cdot 10^{13} \sqrt{\frac{1.14 \cdot 10^{-26}}{2 \cdot 9.73 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}} = 2.47 \cdot 10^{10}\ \text{m}^{-1}$$

c) Uttrykket for E_v har et maksimum for en bestemt v. Den finnes ved derivering

$$\frac{dE_v}{dv} = \hbar\omega_0\left(1 - 2x_e\left(v+\tfrac{1}{2}\right)\right) = 0$$

$$v_{max} = \frac{1}{2x_e} - \frac{1}{2}$$

Dette kan skrives på formen

$$v_{max} = \frac{2\mu\omega_0}{2\hbar a^2} - \frac{1}{2} = \frac{2\mu\omega_0^2}{2\hbar\omega_0 a^2} - \frac{1}{2}$$

$$= \frac{2\mu \cdot \frac{2Aa^2}{\mu}}{2\hbar\omega_0 a^2} - \frac{1}{2} = \frac{A}{\hbar\omega_0/2} - \frac{1}{2}$$

Innsatt for A og ω_0 får vi

$$v_{max} = \frac{9.73}{0.27/2} - \frac{1}{2} = 71.6$$

$$\therefore\ v_{max} = 71.$$