13.5

Den "uperturberte" versjonen av denne oppgaven er allerede gjort unna i eksempel 13.3 side 290.
Forskjellen er at nå skal de to partiklene vekselvirke innbyrdes med et potensial $V_1(x) = K\,\delta(x_1 - x_2)$, og vi skal beregne energiforandringen med laveste ordens perturbasjonsteori.

a)
Spinn-singlett-tilstanden er antisymmetrisk, så romdelen av bølgefunksjonen må være symmetrisk. Laveste energitilstand har $m = n = 1$:

$$\psi_{11} = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)$$

Laveste ordens perturbasjonsresultat:

$$E^{(1)} = \langle \psi_{11}|V_1|\psi_{11}\rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^2 K \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)\delta(x_1-x_2)\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)$$

$$= \left(\frac{2}{a}\right)^2 K \int_{x_1=0}^{a} dx_1 \underbrace{\left\{\int_{x_2=0}^{a} dx_2 \sin^2\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)\delta(x_1-x_2)\right\}}_{\sin^2\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)} \sin^2\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)$$

$$= \left(\frac{2}{a}\right)^2 K \int_0^a dx \sin^4\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Her kan indeksen sløyfes

$$= \frac{4K}{a^2}\frac{a}{\pi}\int_0^\pi dy \sin^4 y$$

Etter substitusjonen $\frac{\pi x}{a} = y$, $dx = \frac{a}{\pi}dy$

Hjelperegning:
Integralet kan beregnes ved å sette i gang med delvis integrasjon osv.*), men vi går til tabeller her. I Abramowitz & Steguns "Handbook of Mathematical Functions" finnes

$$\int \sin^m(x)\cos^n(x)\,dx = -\frac{\sin^{m-1}(x)\cos^{n+1}(x)}{m+n} + \frac{m-1}{m+n}\int \sin^{m-2}(x)\cos^n(x)\,dx$$

$m = 4$, $n = 0$ gir:

$$\int_0^\pi \sin^4 x\,dx = \underbrace{\left[-\frac{\sin^3 x\cos x}{4+0}\right]_0^\pi}_{=0} + \frac{3}{4}\int_0^\pi \sin^2 x\,dx$$

$$\int_0^\pi \sin^2 x\,dx = \frac{\pi}{2}$$

Som vi vet fra før, eller i alle fall kan beregne i en fart

Dvs.

$$\int_0^\pi \sin^4 x\,dx = \frac{3}{8}\pi$$

Og altså:

$$E^{(1)} = \frac{3}{2}\frac{K}{a}$$

*) Bruk $\sin^4 x = \sin^2 x - \sin^2 x \cos^2 x$ og innfør $(2\sin x\cos x)^2$, int. fra 0 til 2π; hver halvdel av int. intervallet gir samme bidrag!

b)
Pga. symmetrien til triplettdelen (spinn) for bølgefunksjonen, må romdelen av bølgefunksjonen være antisymmetrisk. Laveste energitilstand blir her (se side 290)

$$\psi_{12}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{2}{a}\left[\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{2\pi x_2}{a} - \sin\frac{2\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a}\right]$$

Integrer ut en av de variable ved hjelp av δ-funksjonen:

$$E^{(1)} = \langle\psi_{12}|V_1|\psi_{12}\rangle = K\int_{x_1=0}^{a}dx_1 \underbrace{\int_{x_2=0}^{a}dx_2\, \psi_{12}^{(*)}(x_1,x_2)\,\delta(x_1-x_2)\,\psi_{12}(x_1,x_2)}_{\boxed{\psi_{12}^2(x_1,x_1)}}$$

$$= K\int_{x=0}^{a}dx\, \psi_{12}^2(x,x)$$

$$= \underline{\underline{0}}$$

fordi $\psi_{12}(x_1,x_1) = \psi_{12}(x_2,x_2) = 0.$

c)
Foreleseren lurer på om ikke den beste fysiske begrunnelsen er den som ble brukt i forrige punkt:

Pga. bølgefunksjonens antisymmetri $(\psi_{12}(x_1,x_2) = -\psi_{12}(x_2,x_1))$ som medfører $\psi_{12}(x_1,x_1) = \psi_{12}(x_2,x_2) = 0$ der hvor partiklene vekselvirker, blir integranden der lik 0. Egentlig et korollar til <u>Paulis eksklusjonsprinsipp</u>.

13.7

Så lenge vi kan se bort fra interne v.v. mellom elektronene, er alle elektronene i et skall degenerert i energi.

For gitt n: $n-1$ l-verdier

" " l: $2l+1$ m_l-verdier

" gitte (l, m_l)-verdier: 2 spinnretninger

Å finne # elektroner i skall n blir ekvivalent med å finne degenerasjonsgraden for energi E_n:

./.

\# el-plasser i skall n

$$= 2 \times \underbrace{\sum_{l=0}^{n-1}}_{n \text{ ledd}} (2l+1)$$

$$= 2 \times n \times \underbrace{\frac{1}{2}\Big(1 + (2(n-1)+1)\Big)}_{\text{gjsn. leddverdi}}$$

$$= \underline{\underline{2n^2}}$$

som skulle vises.

13.8

Som vist i læreboka:
Skallene fylles i rekkefølgen

Modifikasjon pga. skjerming

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, ...

$l=1 \Rightarrow$ 3 plasser $\times 2$
$l=0 \Rightarrow$ 1 plass $\times 2$
$l=1 \Rightarrow$ 3 plasser $\times 2$
$l=0 \Rightarrow$ 1 plass $\times 2$
$l=0 \Rightarrow$ 1 plass $\times 2$

Faktor 2 for spinn

For å fylle subskallene 1s, 2s, 2p trengs altså

$$2 \times (1+1+3) = 10$$

elektroner.
Dvs. 1 stk. til overs for natrium, som har $Z=11$.

Elektronkonfigurasjonen i grunntilstanden for natrium er derfor

$$\underline{1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s}$$

fordi da er alle elektronene plassert med lavest mulig energi.