

13.5

Den "uperturberte" versjonen av denne oppgaven er allerede gjort under 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) Spin-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:

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle \psi_{11} | V_1 | \psi_{11} \rangle = \left(\frac{2}{a}\right)^2 K \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \delta(x_1 - x_2) \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \\ &= \left(\frac{2}{a}\right)^2 K \int_0^a dx_1 \left\{ \int_0^a dx_2 \sin^2\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \delta(x_1 - x_2) \right\} \sin^2\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \\ &= \left(\frac{2}{a}\right)^2 K \int_0^a dx \sin^4\left(\frac{\pi x}{a}\right) \leftarrow \begin{array}{l} \text{Her kan} \\ \text{inkluden sløyfes} \end{array} \\ &= \frac{4K}{a^2} \frac{a}{\pi} \int_0^\pi dy \sin^4 y \quad \begin{array}{l} \text{etter substitusjonen} \\ \frac{\pi x}{a} = y, \quad dx = \frac{a}{\pi} dy \end{array} \end{aligned}$$

Hjelperegning:

Integralit kan beregnes ved å sette i gang med delvis integrasjon osv. men vi går til tabeller her.  $\int$  Abramowitz & Stegun "Handbook of Mathematical Functions" finnes

$$\begin{aligned} \int \sin^m(x) \cos^n(x) dx &= -\frac{\sin^{m-1}(x) \cos^{n+1}(x)}{m+n} + \frac{m-1}{m+n} \int \sin^{m-2}(x) \cos^n(x) dx \\ m=4, n=0 \text{ gir: } \int_0^\pi \sin^4 x dx &= \left[ -\frac{\sin^3 x \cos x}{4+0} \right]_0^\pi + \frac{3}{4} \int_0^\pi \sin^2 x dx \\ \int_0^\pi \sin^2 x dx &= \frac{\pi}{2} \quad \leftarrow \text{Som vi vet fra før, eller i alle fall kan beregnes i en økt} \end{aligned}$$

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

Og altså:

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

\*) Bruk  $\sin^4 x = \sin^2 x - \sin^2 x \cos^2 x$  og integrer  $(2 \sin x \cos x)^2$  int. fra 0 til  $2\pi$ : 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  $\delta$ -funksjonen:

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

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

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

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

c) Forekseren 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 veksler roller, blir integranden der ikke 0. Egentlig et korollar til Paulis eksklusjonsprinsipp.

13.7

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

- For gitt  $n$ :  $n-1$   $l$ -verdier
- " "  $l$ :  $2l+1$   $m_l$ -verdier
- " gitt  $(l, m_l)$ -verdier: 2 spinntilstander

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

# plasser i skall n

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

n ledd

$$= 2 \times n \times \frac{1}{2} (1 + (2(n-1) + 1))$$

gjenn. leddverdi

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

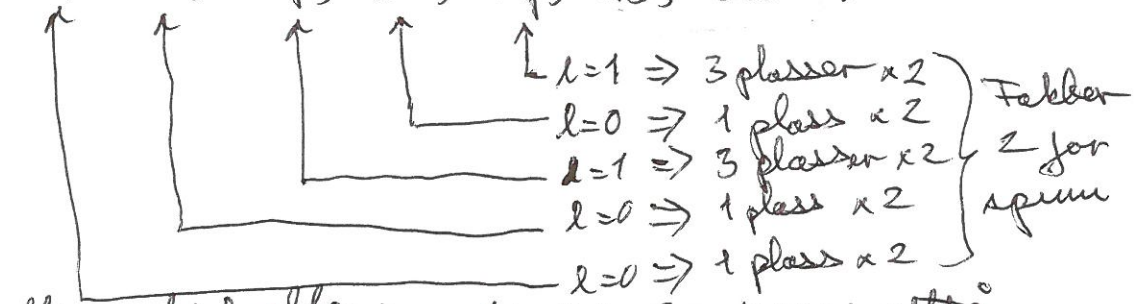
som skulle vises.

13.8

Som vist i løseboksa:  
skallene fylles i rekkefølgen

Modifikasjon pga. skjerming

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

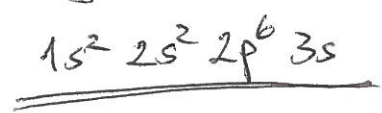


For å fylle subskallene 1s, 2s, 2p trengs altså

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

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

Elektronkonfigurasjonen i grunntilstanden for natrium er derfor



Jordt da er alle elektronene plassert ved lavest mulig energi.