9.2

Vi har $E^{(1)} = \langle \psi_0 | H_1 | \psi_0 \rangle = 0$, samt

$$E^{(2)} = \sum_{i \neq 0} \frac{|\langle \psi_0 | H_1 | \psi_i \rangle|^2}{E_0 - E_i}$$

(grunntilstandens perturbasjon betraktes)

I alle ledd i summen er $|\langle \psi_0 | H_1 | \psi_i \rangle|^2$ en positiv størrelse, og med alle $E_i > E_0$ for $i > 0$, blir $E_0 - E_i < 0$. ~~Altså er~~

$$\underline{\underline{E^{(2)} < 0}}$$

Meget enkelt!

9.3

Vi har

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad \leftarrow \text{(side 46 i læreboka)}$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad \leftarrow (\text{ " } 117 \text{ " } \text{ " })$$

$$H_1 = \lambda \delta\left(x - \frac{a}{2}\right)$$

a)
Siden H_1 skal ha dimensjon energi, og δ har dimensjon 1/lengde (pga. $\int \delta(x)\,dx = 1$), må λ ha dimensjon energi × lengde, dvs. SI-enhet

$$\underline{\underline{\mathrm{J} \times \mathrm{m}}}$$

b)

$$\langle \psi_1 | H_1 | \psi_1 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \lambda \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{2\lambda}{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a} \cdot \frac{a}{2}\right) = \frac{2\lambda}{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{2}\right)$$

$$= \underline{\underline{\frac{2\lambda}{a}}}$$

c)
I uttrykket $E^{(2)} = \sum_{i > 1} \frac{|\langle \psi_1 | H_1 | \psi_i \rangle|^2}{E_1 - E_i}$ vil bare $i = 3, 5, 7, \ldots$ gi bidrag til summen, fordi bare der er $\psi_i \neq 0$ i $x = \frac{a}{2}$. Pga. samme normalisering som ψ_1 blir alle matriseelementene lik $2\lambda/a$. Og for vilkårlig odde j blir nevneren lik

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(1 - (2j+1)^2\right) \quad (j = 1, 2, 3, \ldots)$$

dvs.

$$E^{(2)} = \underbrace{\frac{4\lambda^2}{a^2} \cdot \frac{2ma^2}{\hbar^2 \pi^2}}_{\frac{8m\lambda^2}{\hbar^2 \pi^2}} \sum_{j=1} \frac{1}{1 - (2j+1)^2} = \underline{\underline{-\frac{2m\lambda^2}{\hbar^2 \pi^2}}}$$

Summen kan man grave seg fram til i Rottmann eller en annen formelsamling!

9.7

La oss her og nå se bort fra opplysningen om at et massivt foton ville modifisere protonets elektriske potensial fra

$$V_{Coulomb}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$$

til

$$V_{massiv}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^{-r/r_0}}{r}$$

(Litt vanskelig å begrunne !)

for $r_0 >> a_0$, dvs. i store avstander fra protonet.

I notasjonen for tidsuavhengig perturbasjonsteori kan vi da definere:

$$H = E_{kin} + V_{massiv}$$
$$H_0 = E_{kin} + V_{Coulomb}$$
$$H_1 = H - H_0$$
$$= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{e^{-r/r_0}}{r} - \frac{1}{r}\right]$$
$$= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\left(1 - e^{-r/r_0}\right)$$

med

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}$$

Forventningsverdi/matriseelement for grunntilstandsenergi-forandringen:

$$E^{(1)} = \langle\psi_{100}|H_1|\psi_{100}\rangle$$
$$= \int d^3\vec{r}\, \psi_{100}^* H_1 \psi_{100}$$
$$= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0}\frac{4}{a_0^2}\int_0^\infty r^2 dr\, \frac{1}{r}\left(1-e^{-r/r_0}\right)e^{-2r/a_0}$$

Integranden, med innsatt mult. konstant:

$$r\frac{4}{a_0^2}\Big(\underbrace{e^{-2r/a_0}}_{k_1 = \frac{2}{a_0}} - \underbrace{e^{-r/r_0 - 2r/a_0}}_{k_2 = \frac{2}{a_0} + \frac{1}{r_0}}\Big)$$

$$\Rightarrow$$

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0}\frac{4}{a_0^2}\left(\frac{a_0^2}{4} - \frac{1}{\left(\frac{2}{a_0} + 1/r_0\right)^2}\right)$$

(fra hjelpe-regning 2)

$$= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0}\left(1 - \frac{1}{\left(1+\frac{a_0}{2r_0}\right)^2}\right)$$
$$= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0}\left[1 - \left(1 - 2\cdot\frac{a_0}{2r_0} + \ldots\right)\right]$$
$$= |E_1|\cdot\frac{2a_0}{r_0}\left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{a_0}{r_0}\right)\right)$$

I grensen $a_0 << r_0$ bør altså tidsuavhengig perturbasjonsteori gi et konsistent resultat !

Hjelperegning 1:

$$I(n) = \int_0^\infty r^n e^{-r} dr$$
$$= \underbrace{\left[-r^n e^{-r}\right]_0^\infty}_{(=0)} + n\int_0^\infty r^{n-1}e^{-r}dr$$
$$= n\,I(n-1)$$
$$= n(n-1)(n-2)\cdots 1\cdot I(0)$$
$$I(0) = \int_0^\infty e^{-r}dr = 1$$
$$\Rightarrow \int_0^\infty r^n e^{-r}dr = n!$$

Hjelperegning 2:

$$\int_0^\infty r\,dr\, e^{-kr} = \frac{1}{k^2}\int_0^\infty s\,ds\,e^{-s} = \frac{1}{k^2}$$

Hjelperegning 3:

$$\left.\begin{aligned} a_0 &= \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \\ |E_1| &= \frac{\mu e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{1}{2\hbar^2}\end{aligned}\right\} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0} = \frac{\mu e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} = 2|E_1|$$

9.10

Likning (9.29) lyder:

$$E^{(1)}_{\text{finstruktur}} = E^{(1)}_{\text{spinn-bane}} + E^{(1)}_{\text{relativistisk}}$$

$$= |E_n|\alpha^2 \frac{1}{n^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2}\right]$$

a) Differansen mellom parentesinnholdet for $j = l + \frac{1}{2}$ og $j = l - \frac{1}{2}$:

$$[\,]_+ - [\,]_- = \frac{3}{4} - \frac{n}{l+1} - \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l}\right)$$

$$= \frac{n}{l(l+1)}$$

$$\underline{> 0}$$

Tilstanden med $j = l + \frac{1}{2}$ har altså høyere energi enn den med $j = l - \frac{1}{2}$.

b) Sett parentesinnholdet på felles ~~brøkstrek~~: (Først, $l > 0$)

$$E^{(1)}_{\text{finstruktur}} = |E_n|\alpha^2 \frac{1}{n^2} \frac{\{3(l \pm \frac{1}{2} + \frac{1}{2}) - 4n\}}{4[(l \pm \frac{1}{2}) + \frac{1}{2}]}$$

$$\{\}_+ = 3(l+1) - 4n \le 3(l_{maks}+1) - 4n$$

$$= 3n - 4n$$

$$= -n \quad \underline{\underline{< 0}}$$

$$[\,]_+ = 4(l+1) \quad \underline{\underline{> 0}}$$

$$\{\}_- = 3l - 4n \le 3l_{maks} - 4n$$

$$= 3(n-1) - 4n$$

$$= -(n+3) \quad \underline{\underline{< 0}}$$

$$[\,]_- = 4l \quad \underline{\underline{> 0}}$$

For $l \ge 1$, $E^{(1)}_{\text{finstruktur}} < 0$ alltid!

Sjekk tilfellet $l = 0$, der $j = \frac{1}{2}$:

$$\frac{3}{4} - \frac{n}{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}} = -\left(n - \frac{3}{4}\right) \quad \underline{\underline{< 0}}$$

Uttrykket for finstrukturkorreksjonen til energien er altså alltid <u>negativt</u>.

9.13

For laveste ordens perturbasjonsteori:

$$E^{(1)} = \langle \psi_0 | H_1 | \psi_0 \rangle, \quad \text{der} \quad H_1 = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}|} \quad (R \gg a_0)$$

$$\psi_0 = \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

$$\langle \psi_0 | H_1 | \psi_0 \rangle = -\frac{1}{\pi a_0^3}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int d^3r \frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}|} e^{-2r/a_0}$$

$$\approx -\frac{1}{\pi a_0^3}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{R}\int d^3r\, e^{-2r/a_0}$$

(siden $|\vec{r}-\vec{R}| \approx R$ for r-verdiene som bølgefunksjonen framhever i integralet)

$$= -\frac{4\pi}{\pi a_0^3}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{R}\int_0^\infty r^2 dr\, e^{-2r/a_0}$$

$$= -\frac{4}{a_0^3}\left(\frac{a_0}{2}\right)^3 \frac{1}{R}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_0^\infty s^2 ds\, e^{-s} \quad \left(s = \frac{2r}{a_0}\right)$$

$$= -\frac{1}{2}(2!)\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{R}$$

dvs.

$$\underline{E^{(1)} \approx -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{R}}$$

Siden

$$|\vec{r}-\vec{R}| = R\frac{1}{|1-\frac{r}{R}\cos\theta|}$$

$$= R\frac{1}{1-\mathcal{O}(\frac{a_0}{R})}$$

kan man forvente at $\approx$-tegnet kan erstattes med en korreksjonsfaktor: $(\ll 1)$

$$\underline{\underline{E^{(1)} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{R}\left(1+\mathcal{O}\left(\frac{a_0}{R}\right)\right)}}$$