

Dugga Tillämpad kvantfysik (TIF100)

Tid: 19 december 2014, 8.30-12.30

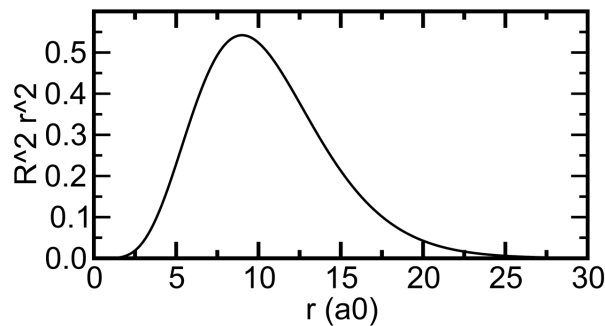
Examinator: Henrik Grönbeck, 031-7722963, 070-2862459

Hjälpmedel: Physics Handbook, Beta Mathematics Handbook, räknedosa

Betygsgränser (inkluderat bonuspoäng): Betyg 3: 17 p, betyg 4: 25 p, betyg 5: 31 p.

1. Figuren visar den radiella sannolikhetsfördelningen ($R_{nl}^2 r^2$) för en elektron i väte.

- (a) I vilken tillstånd befinner sig elektronen? Motivera och ange kvanttal n och l . (1p)
- (b) Ange absolutbeloppet för tillståndets rörelsemängdsmoment. (1p)



2. Förklara följande begrepp och approximationer som är väsentliga för förståelsen av atomer med flera elektroner. (3p)

- (a) Centralfältsapproximationen.
- (b) Pauliprincipen.
- (c) Uppbyggnadsprincipen (aufbau).

3. Betrakta väteatomen. Om vi bortser från finstruktur, hyperfinstruktur och andra mindre korrekationer till energinivåerna är E_2 -nivån ($n=2$) degenererad med 8 olika tillstånd.

- (a) Till hur många energinivåer splittras E_2 om finstruktur beaktas? Ange även degenerationsgrad. (2p)
- (b) Vilken upppliftring av energinivåerna sker i ett svagt magnetfält (B)? Skriv upp uttryck för den magnetiska energiupppliftringen av tillstånden uttryckt i B . (1p)

4. De lägst liggande tillstånden i enkeljoniserat kalcium (Ca^+) är (hänsyn är ej tagit till spinn-ban koppling):

4s	0 cm^{-1}
3d	1400 cm^{-1}
4p	25000 cm^{-1}
5s	52000 cm^{-1}
4d	57000 cm^{-1}

- (a) Rita ett schematiskt energinivådiagram.
(b) Ange LS-termer för tillstånden. (1p)
(c) Ett av tillstånden är metastabilt (kan ej återgå till grundtillståndet genom dipolstrålning). Vilket tillstånd är metastabilt och varför? (2p)
5. Kväveoxid (NO) är en molekyl som bildas från N_2 och O_2 vid förbränning i luft.
- (a) Använd LCAO-metoden för att skissa utseendet på molekylens valensorbitaler. Valensorbitalerna utgörs av de atomära 2s och 2p orbitalerna. (2p)
(b) Skissa ett energinivådiagram för molekylens orbitalenergier. (1p)
(c) Ange elektronkonfigurationen för NO. Ange molekylens spinnstillstånd. (1p)
(d) Förklara varför bindningen i NO är svagare än i N_2 men starkare än i O_2 . (1p)

Ledning: Molekylorbitalerna för NO kan konstrueras på samma sätt som för en homonukleär diatomisk molekyl.

6. Två partiklar med samma massa m är placerade i en endimensionell låda (sidan a) med oändlig potential. Systemet befinner sig i grundtillståndet och partiklarna växelverkar genom potentialen $V = A\delta(x_1 - x_2)$ där A är en konstant. Använd första ordningens störningsräkning för att beräkna systemets lägsta möjliga energi i följande två fall:
- (a) Partiklarna är bosoner. (2p)
(b) Partiklarna är fermioner i tripplett tillstånd. (2p)

7. Betrakta den endimensionella potentialen:

$$\begin{aligned} V(x) &= cx & x \geq 0 \\ V(x) &= \infty & x < 0 \end{aligned}$$

och vågfunktionen:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= xe^{-\alpha x} & x \geq 0 \\ \psi(x) &= 0 & x < 0 \end{aligned}$$

- (a) Bestäm den normaliserade vågfunktionen. (1p)
(b) Bestäm totalenergin för systemet som funktion av α . (1p)
(c) Använd variationsmetoden för att uppskatta en övre gräns av grundtillståndsenergin. (2p)

UPPGIFT 1

=

- a) | Bohrs atommodell skalar radien som n^2 . Detta motsvarar maximum i $R_{nl} \propto n^2$ vilket ger att $l = 2$. Eftersom $R_{n2} \propto n^2$ vid små n kan man naturligt sluta sig till att $l = 2$ från figuren. Annars gäller att vid $n = 3$ är det endast 3d som saknar radiell nod.

$$n = 3$$

$$l = 2$$

b) $|l| = \sqrt{l(l+1)} \hbar = \sqrt{6} \hbar$

UPPGIFT 2

1

=

- a) Hamiltonianen för en atom med N elektroner och kärna Z ges av:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i \neq j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}$$

Här bortses vi från relativistiska effekter.

I centralfältapproximationen ersätts potentialen från kärnan och de övriga elektronerna med en sfäriskt symmetrisk effektiv potential.

Hamiltonianen blir:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V(r_i) \right)$$

Varje elektron rör sig på detta sätt i ett medelfält av de övriga elektronerna.

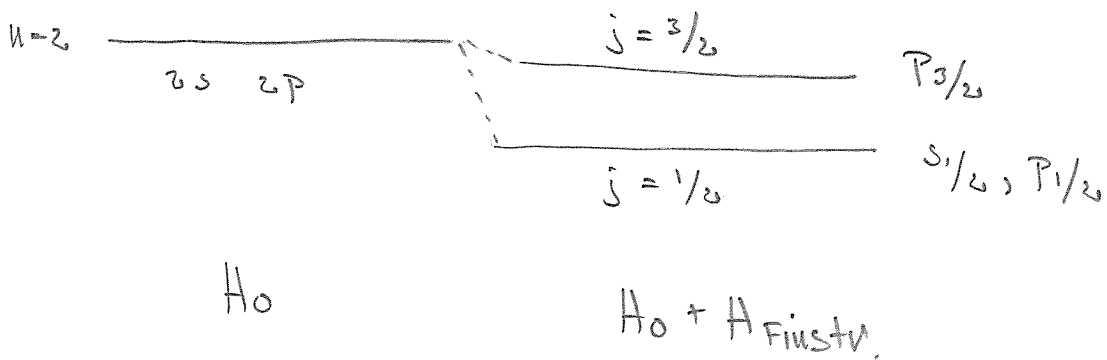
- b) Pauliprincipen säger att varje elektron måste ha en unik uppsättning kvanttal.

c) Löser man centralfältsproblemet
erhålls orbitaler $\psi_{1s}, \psi_{2s}, \psi_{2p}, \dots$
svarande till tillstånd $1s, 2s, 2p$.

I uppbyggnadsprincipen ockuperas
tillstånden enligt Pauliprincipen med
2 elektroner i s -tillstånd, 6 elektroner
i p -tillstånd, 10 elektroner i d -tillstånd
etc. Detta ger periodiska systemets
uppbyggnad.

UPPGIFT 3

a)



$P_{3/2}$ har fyra tillstånd $m_j = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$

$P_{1/2}$ har två tillstånd $m_j = \pm \frac{1}{2}$

$S_{1/2}$ har två tillstånd $m_j = \pm \frac{1}{2}$

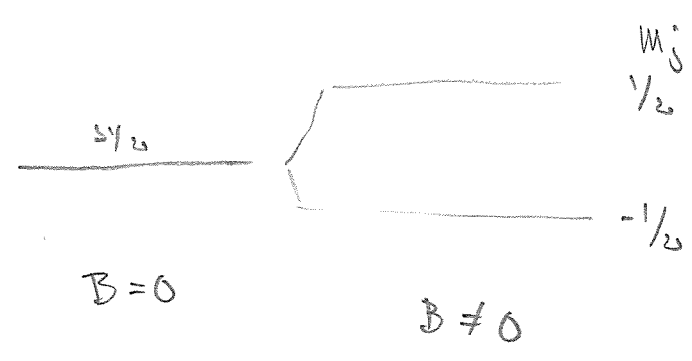
b) I ett svagt fält är spin-orbit bidraget större än den magnetiska uppsplittringen. I detta fall skall störningen beräknas på $l_j m_j$ -representationen.

$$\Delta E_{m_j} = \zeta M_B B m_j$$

‡ Landé faktor

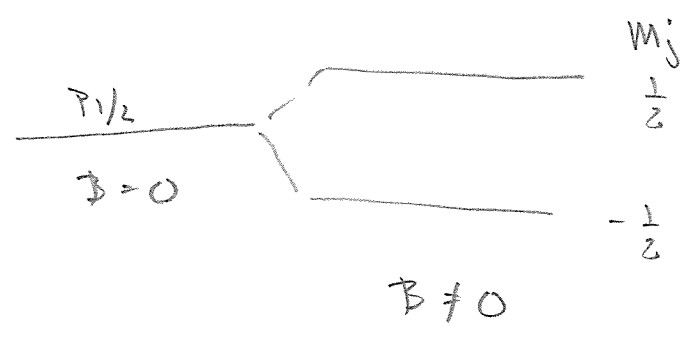
$s_{1/2} :$ $\Delta E_{m_j} = g(s_{1/2}) \mu_B B m_j$

$g(s_{1/2}) = 2$



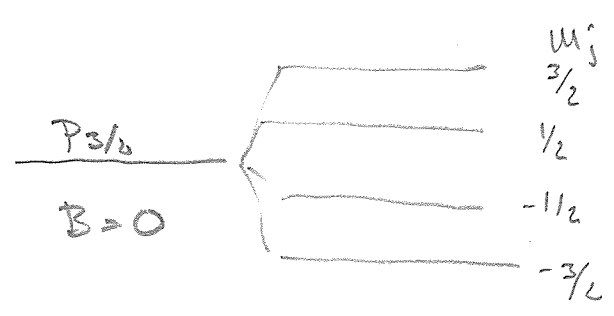
$p_{1/2} :$ $\Delta E_{m_j} = g(p_{1/2}) \mu_B B m_j$

$g(p_{1/2}) = \frac{2}{3}$



$p_{3/2} :$ $\Delta E_{m_j} = g(p_{3/2}) \mu_B B m_j$

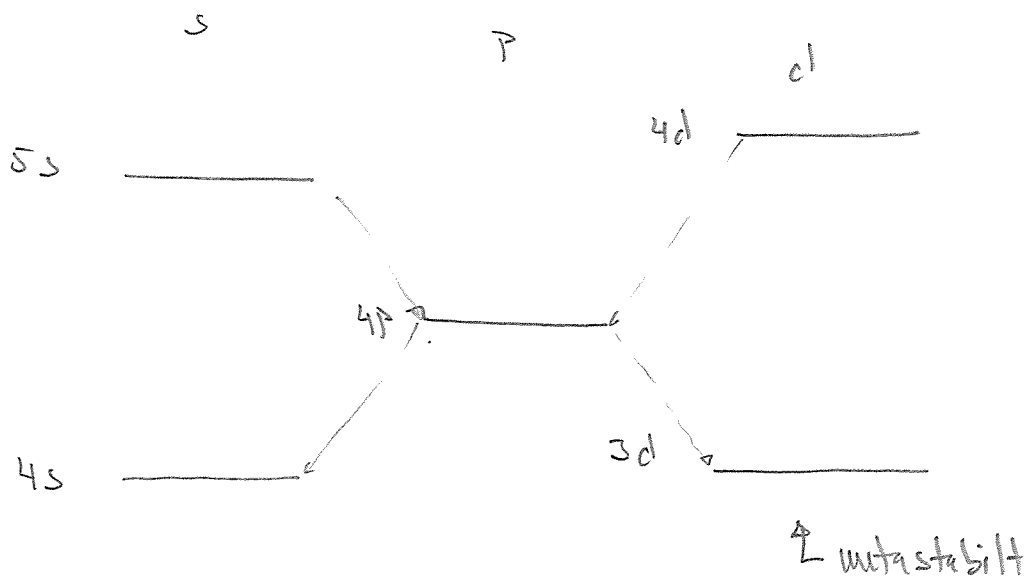
$g(p_{3/2}) = \frac{4}{3}$



UPPGIFT 4

=

2) C^{2+} har valenskonfiguration $4s^1$



- b)
- $5s : 2 S_{1/2}$
 - $3d : 2 D_{3/2, 5/2}$
 - $4p : 2 P_{1/2, 3/2}$
 - $5s : 2 S_{1/2}$
 - $4d : 2 D_{3/2, 5/2}$

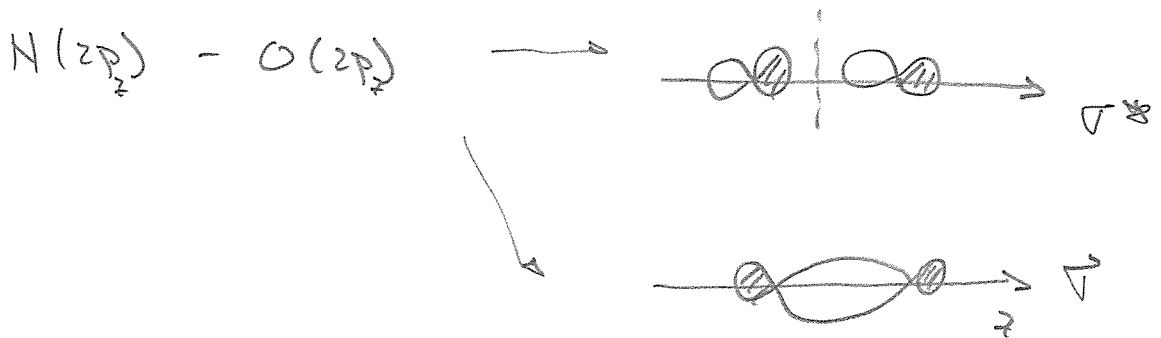
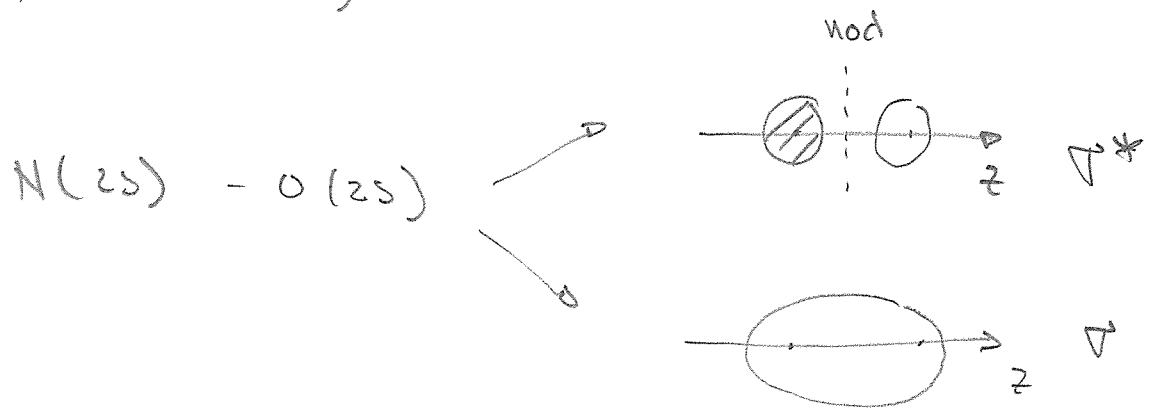
c) $3d$ är metastabilt eftersom $\Delta l = \pm 1$ vid dipolstrålning.

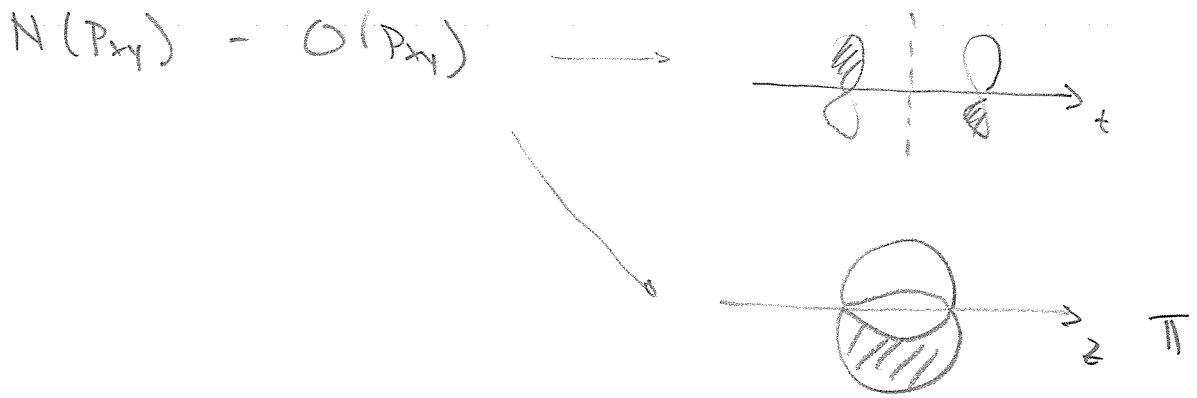
UPPGIFT 5

=

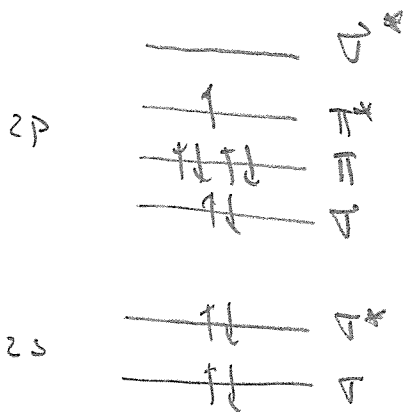
- a) N har valenskonfiguration $1s^2 2s^2 2p^3$
 O har valenskonfiguration $1s^2 2s^2 2p^4$

Vi antar att orbitalerna ser ut som för de homonukleära fallen. (Vilket stämmer bra med skillnaden att de i verkligheten är lite polariserade.)



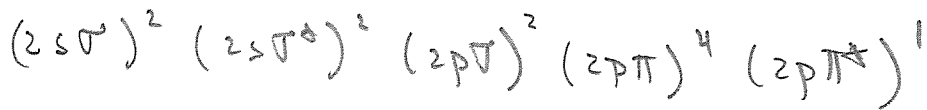


b)



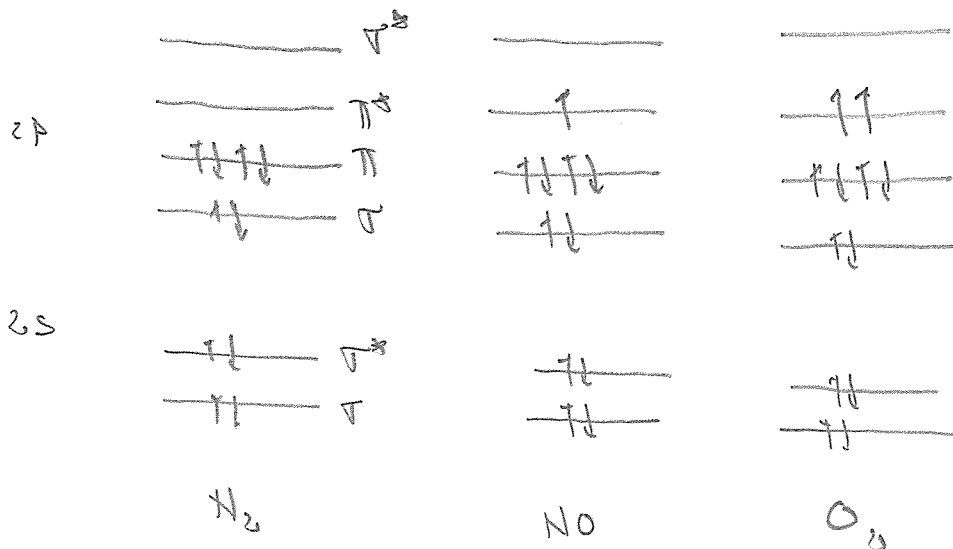
Molekylen har 11 valenselektroner.

c)



Molekylen är en dublett, $2s^1 + 1 = 2 \frac{1}{2} + 1 = \underline{\underline{2}}$

d)



Bindnings tal :

$$BO = \frac{1}{2} (\# e \text{ i bind orb} - \# e \text{ i antibind orb})$$

$$BO(N_2) = \frac{1}{2} (8 - 2) = 3$$

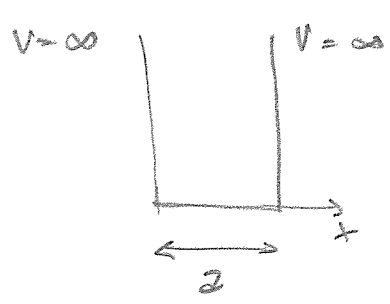
$$BO(NO) = \frac{1}{2} (8 - 3) = \frac{5}{2}$$

$$BO(O_2) = \frac{1}{2} (8 - 4) = 2$$

N_2 har färre elektroner i antibindande orbitaler
medan O_2 har fler.

UPPGIFT 6

=



$$E_n = \frac{\frac{2^2 \pi^2 \hbar^2}{2M a^2}}$$

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

a) Partiklarna är bosoner, den totala vågfunktionen skall vara symmetrisk. Båga partiklarna befinner sig i $n=1$. Den ostörda energin är således:

$$E = 2 \cdot \frac{\frac{2^2 \pi^2 \hbar^2}{2M a^2}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{M a^2}$$

Vågfunktionen ges av:

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \psi_1(x_2)$$

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{\pi x_2}{a}$$

Störningen ges av $V = A \delta(x_1 - x_2)$,

$$\Delta E = \langle \Psi | V | \Psi \rangle$$

$$\Delta E = \int_0^a \int_0^a \frac{4}{a^2} \sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{\pi x_2}{a} A \delta(x_1 - x_2) \sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{\pi x_2}{a} dx_1 dx_2 =$$

$$= \frac{4}{a^2} A \int_0^a \sin^4 \frac{\pi x_1}{a} dx_1 = \frac{4}{a^2} A \frac{3}{8} a = \frac{3}{2} \frac{A}{a}$$

Energin är således till första ordningen

$$E^{(1)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m a^2} + \frac{3}{2} \frac{A}{a}$$

b) För fermioner skall totala vågfunktionen vara antisymmetrisk.

$$\Psi = \underbrace{\psi(x_1, x_2)}_{\text{rumdel}} \underbrace{\chi(\sigma_1, \sigma_2)}_{\text{spin-del}}$$

Triplet betyder att χ är symmetrisk, således måste ψ vara antisymmetrisk.

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) - \psi_1(x_2) \psi_2(x_1)$$

Systemet måste vara exciterat eftersom elektronerna har parallella spinn; $n=1$ och $n=2$ för de två elektronvägfunktionerna.

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int_0^a \int_0^a \frac{4}{a^2} \left(\sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{2\pi x_2}{a} - \sin \frac{\pi x_2}{a} \sin \frac{\pi x_1}{a} \right) A \delta(x_1 - x_2) \\ &\quad \left(\sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{2\pi x_2}{a} - \sin \frac{\pi x_2}{a} \sin \frac{\pi x_1}{a} \right) dx_1 dx_2 = \\ &= \int_0^a \frac{4A}{a^2} \cdot 0 dx_1 = 0 \end{aligned}$$

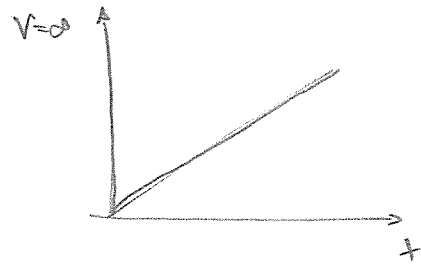
Till första ordning finns ingen korrektion.

$$E^{(1)} = E^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2} (1 + 4) = \frac{5}{2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m a^2}$$

=

$$V(x) = cx \quad x \geq 0$$

$$V(x) = \infty \quad x < 0$$



$$\psi(x) = x e^{-\alpha x} \quad x \geq 0$$

$$\psi(x) = 0 \quad x < 0$$

$$a) \quad \langle \psi | \psi \rangle = \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x} dx = \frac{1}{4\alpha^3}$$

$$\psi_{\text{NORM}} = \sqrt{2\alpha^{3/2}} e^{-\alpha x}$$

b)

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + cx$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \int_0^{\infty} (x e^{-\alpha x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + cx \right) (x e^{-\alpha x}) dx \\ &= \int_0^{\infty} x e^{-\alpha x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\alpha^2 x - 2\alpha) + cx^2 \right) e^{-\alpha x} dx \end{aligned}$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \int_0^{\infty} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\alpha^2 x^2 - 2\alpha x) + Cx^3 \right) e^{-2\alpha x} dx =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{4\alpha} - \frac{2}{4\alpha} \right) + \frac{6C}{(2\alpha)^4} =$$

$$= \frac{\hbar^2}{8m\alpha} + \frac{3C}{8\alpha^4}$$

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + \frac{3C}{2\alpha}$$

$$c) \quad \frac{dE}{d\alpha} = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha - \frac{3C}{2\alpha^2}$$

$$\frac{dE}{d\alpha} = 0 \quad \rightarrow \quad \alpha_0 = \left(\frac{3mC}{2\hbar^2} \right)^{1/3}$$

$$E(\alpha_0) = \frac{3}{2} \left(\frac{9C^2 \hbar^2}{4m} \right)^{1/3}$$

=