

Dugga Tillämpad kvantfysik (TIF100)

Tid: 16 april 2015, 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.

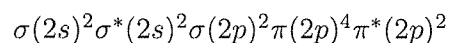
- Elektronkonfigurationen för koppar är $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 4p^0$.
 - Skissa den radiella delen av enelektronvågfunktionen för 3d, 4s och 4p. (2p)
 - Antag att koppar kan beskrivas som ett enelektronsystem där 4s bestämmer atomens egenskaper. Skissa ett energinivådiagram för s, p och d-tillstånd med $n=4$ och $n=5$ (n är huvudkvanttal). Finstruktur behöver inte beaktas. (1p)
 - Rita in tillåtna dipolövergångar i energinivådiagramet. (1p)
- För beräkningar inom kvantfysik används vanligen variationsmetoden eller störningsräkning. Beskriv principerna för dessa två metoder. På vilka antaganden bygger metoderna? När kan de användas? (2p)
- Betrakta följande vågfunktion för en elektron i en vätelik potential:

$$\psi(\mathbf{r}) = C[4\psi_{100}(\mathbf{r}) - 2\psi_{211}(\mathbf{r}) + 2\psi_{210}(\mathbf{r}) + i\psi_{21-1}(\mathbf{r})]$$

$\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ är normerade egentillstånd med energier $E_n = E_1/n^2$. E_1 är grundtillståndets energi.

- Bestäm C så att $\psi(\mathbf{r})$ är korrekt normerad. (1p)
 - Bestäm väntevärdet av systemets energi uttryckt i E_1 . (1p)
 - Bestäm väntevärdet av \mathbf{L}^2 . (1p)
- Det första exciterade tillståndet för magnesium (Mg) är $3s3p$. Man kan för detta system antaga att LS-koppling gäller.
 - Vilka värden på L och S är möjliga? Ange tillståndens LS-termer. (1p)
 - Skriv upp tillståndens vågfunktioner om rumsdelen av enpartikelvågfunktionerna ges av $\psi_{3s}(\mathbf{r})$ och $\psi_{3p}(\mathbf{r})$? (2p)
 - Vilken tillstånd har lägst energi och varför? Ge ett fysikaliskt argument. (1p)

5. Valenskonfigurationen för syremolekylen (O_2) är:



- (a) Beskriv kvalitativt hur molekylorbitalerna är uppbyggda. Rita skisser. (1p)
- (b) Vad är bindningstalet (bond-order) för O_2 ? (1p)
- (c) Varför är bindningsenergin för N_2 högre än för O_2 ? (1p)

6. Kalium har tvåspektrallinjer (ofta kallad dublett) som härrör från övergångar från $4p_{3/2}$ till $4s_{1/2}$ och $4p_{1/2}$ till $4s_{1/2}$.

- (a) Rita ett energinivådiagram med övergångarna inritade. (1p)
- (b) Hur splittras spektrallinjerna upp i ett svagt yttre magnetfält? (1p)
- (c) Beräkna uppsplittringen (i energi) för i ett svagt yttre magnetfält med styrkan 1 T. (2p)

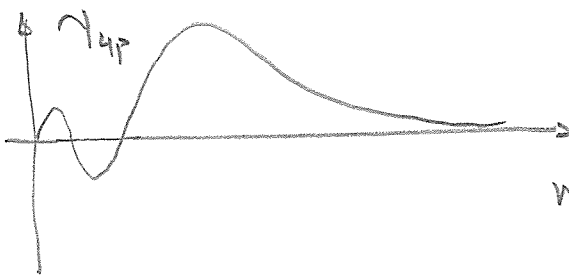
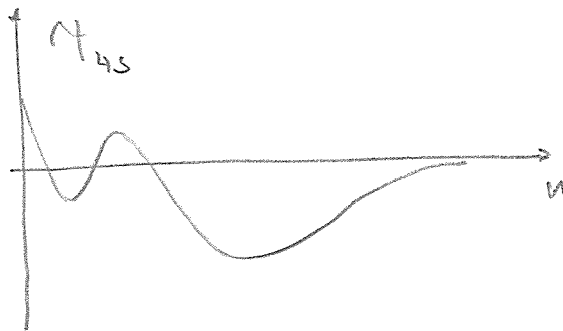
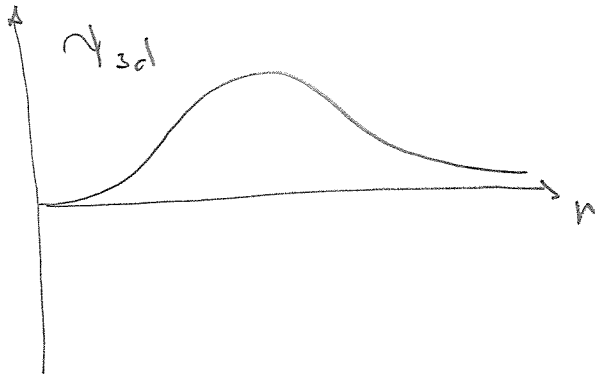
7. Två identiska icke-växelverkande partiklar, bägge med massa m och spinn 0, är bundna i en gemensam endimensionell harmonisk oscillator potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$.

- (a) Bestäm systemets grundtillståndens energi. (1p)
- (b) Bestäm energin för första exciterade tillståndet. (1p)
- (c) Bestäm första ordningens korrektion till grundtillståndens energi från en störning $H' = c(x_1 - x_2)^2$, där x_1 och x_2 är partiklarnas koordinater och $c > 0$ en konstant. (2p)

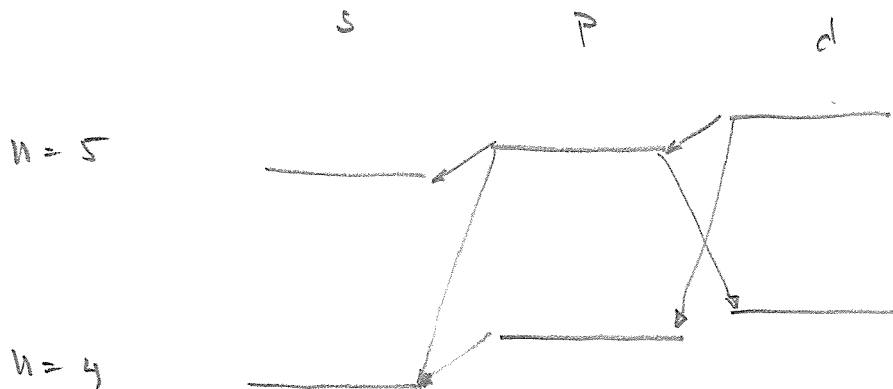
UPPGIFT 7

=

a)



b c)



$\Delta l = \pm 1$ för dipolstrålning

UPPGIFT 3

==

$$2) \quad \psi(\mathbb{M}) = C (4\psi_{100}(\mathbb{M}) - 2\psi_{211}(\mathbb{M}) + 2\psi_{210}(\mathbb{M}) + i\psi_{21-1}(\mathbb{M}))$$

ψ_{100} , ψ_{211} , ψ_{210} och ψ_{21-1} är normerade.

Vi kan således

$$\langle \psi(\mathbb{M}) | \psi(\mathbb{M}) \rangle = |C|^2 (16 + 4 + 4 + 1) = 25 |C|^2$$

$$C = \frac{1}{5}$$

==

$$b) \quad \langle E \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle =$$

$$= \frac{1}{25} (16 E_1 + 4 E_2 + 4 E_2 + E_6) =$$

$$= \frac{1}{25} (16 E_1 + \frac{4 E_1}{4} + \frac{4 E_1}{4} + \frac{E_1}{4}) = \frac{73}{100} E_1$$

==

$$c) \quad \langle L^2 \rangle = \frac{1}{25} (16 \cdot 0 + 4 \cdot 4\hbar^2 + 4 \cdot 2\hbar^2 + 2\hbar^2) =$$

$$= \frac{18}{25} \hbar^2$$

==

UPPGIFT 4

=

a) Det första kvadranta tillståndet är $3s^1 3p^1$.

$$L = |l_1 - l_2| \dots |l_1 + l_2| = |0 - 1| \dots |0 + 1| = 1$$

$$S = |s_1 - s_2| \dots |s_1 + s_2| = 0, 1$$

b) Vågfunktionens nummer kan vara symmetrisk eller antisymmetrisk mot utbytet av koordinater,

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{3s}(r_1) \psi_{3p}(r_2) + \psi_{3s}(r_2) \psi_{3p}(r_1))$$

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{3s}(r_1) \psi_{3p}(r_2) - \psi_{3s}(r_2) \psi_{3p}(r_1))$$

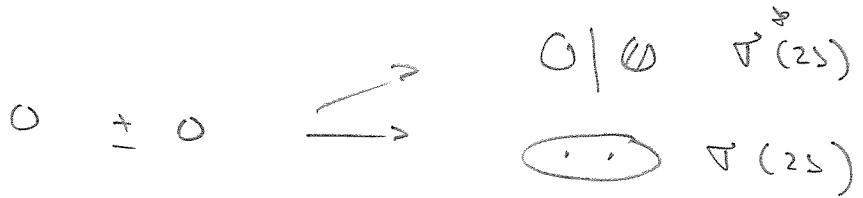
c) Eftersom totala \bar{I} skall vara antisymmetrisk skall ψ_S kombineras med antisym. spinnväg ψ_A kombineras med sym. spinnväg

Triplet systemet (symm. spinnväg.) har
lägst energi eftersom Coulomb repulsionen
mellan elektronerna är lägst i detta fall.

UPPGIFT 5

a)

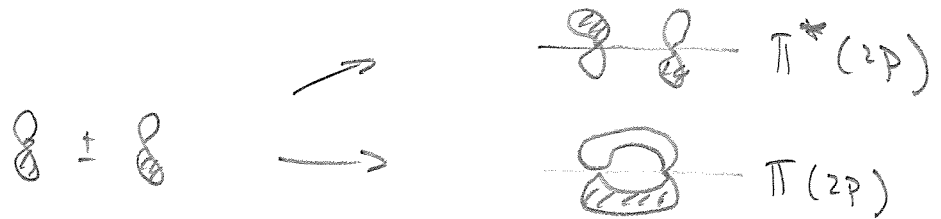
2s



2p_z



2p_{x,y}



b) Bindningsstal \bar{n} är # elektroner i bindande -
 # elektroner i antibind. orbitaler
 (delat med två)

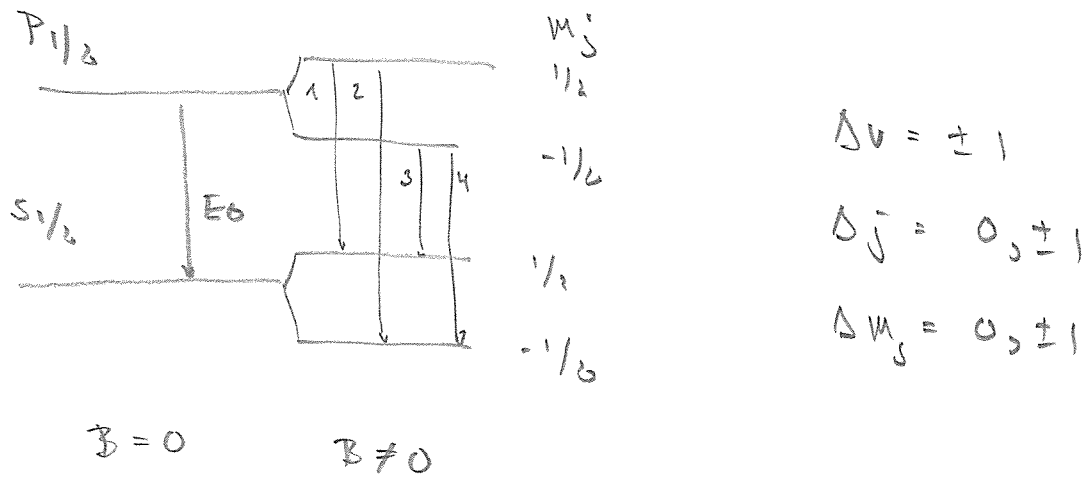
$$BO = \frac{1}{2} (6 - 2) = \frac{1}{2} \cdot 4 = 2$$

c) Antibindande π^* är ej ockuperad för N₂
 (N : 1s²2s²2p³) :

$$BO = \frac{1}{2} (6 - 0) = 3$$

UPPGIFT 6

svagt magnet fält \rightarrow Zeeman effekt.



I B-fält sker uppsplitting till 4 linjer.

$$V_{m_j} = m_j g_j \mu_B B$$

$$\Delta m_j, m_{j+1} = g_j \mu_B B$$

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

$$g_j (S_{1/2}) = 2$$

$$g_j (P_{1/2}) = 2/3$$

$$g_j (P_{3/2}) = 4/3$$

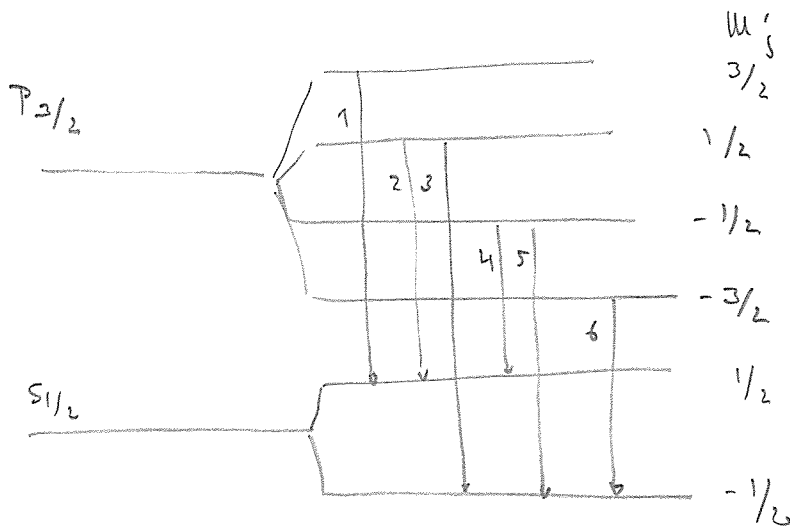
$$\textcircled{1} \quad \Delta E = -\frac{2}{3} \mu_B B$$

$$\textcircled{2} \quad \Delta E = \frac{4}{3} \mu_B B$$

$$\textcircled{3} \quad \Delta E = -\frac{4}{3} \mu_B B$$

$$\textcircled{4} \quad \Delta E = \frac{2}{3} \mu_B B$$

$$\mu_B \cdot B = 3.8 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \quad (B = 1 \text{ T})$$



$$\textcircled{1} \quad \Delta E = \mu_B B \quad \textcircled{4} \quad \Delta E = -\frac{5}{3} \mu_B B$$

$$\textcircled{2} \quad \Delta E = -\frac{1}{3} \mu_B B \quad \textcircled{5} \quad \Delta E = \frac{1}{3} \mu_B B$$

$$\textcircled{3} \quad \Delta E = \frac{5}{3} \mu_B B \quad \textcircled{6} \quad \Delta E = -\mu_B B$$

UPPGIFT 7

7

- a) Partiklarna kan kulliga spinn och kan ett symmetrisk grundtillstånd med utbyte av partiklarna.

Energivärdena för systemet ges av:

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right) \hbar \omega \quad (\text{en partikel})$$

Rumsvägfunktionen för grundtillståndet är,

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2} \quad (\text{en partikel})$$

Partiklarna kan båda befinna sig i E_0 , grundtillståndets energi är således

$$E = 2 E_0 = 2 \hbar \omega \frac{1}{2} = \underline{\underline{\hbar \omega}}$$

- b) Första exciterade tillståndet har energin

$$E = E_0 + E_1 = \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{3}{2} \hbar \omega = \underline{\underline{2 \hbar \omega}}$$

c) Systemet utsätts för en störning H'

$$H' = c(x_1 - x_2)^2$$

Våg funktionen för systemet är :

$$\Psi(x_1, x_2) = \underbrace{\Psi_0(x_1)}_{\text{spinnvågfunctn}} \underbrace{\chi_0(x_2)}_{\text{Längsvågfunctn}}$$

Första ordningens korrektion är :

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle \Psi | H' | \Psi \rangle = \\ &= \langle \Psi_0(x_1) \chi_0(x_2) | c(x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2) | \Psi_0(x_1) \chi_0(x_2) \rangle \\ &= \langle \Psi_0(x_1) | cx_1^2 | \Psi_0(x_1) \rangle + \\ &\quad \langle \chi_0(x_2) | cx_2^2 | \chi_0(x_2) \rangle - \\ &\quad 2 \underbrace{\langle \Psi_0(x_1) | x_1 | \Psi_0(x_1) \rangle}_{=0} \underbrace{\langle \chi_0(x_2) | x_2 | \chi_0(x_2) \rangle}_{=0} \\ &= 2 \langle \Psi_0(x) | cx^2 | \Psi_0(x) \rangle \\ &= 2c \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right) e^{-\alpha^2 x^2} cx^2 dx = \\ &= 4 \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right) \int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} cx^2 dx = \end{aligned}$$

$$= 4 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{4} c \frac{1}{\alpha^2} \sqrt{\pi} =$$

$$= \frac{c}{\alpha^2} = \frac{c \hbar}{m \omega}$$

Korrelationen \vec{a}_ν $E^{(1)} = c \frac{\hbar}{m \omega}$
 =