

Tenta Tillämpad kvantfysik (TIF101)

Tid: 2 maj 2020, 8.30-12.30

Examinator: Henrik Grönbeck, 070-2862459

Hjälpmedel: Alla

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

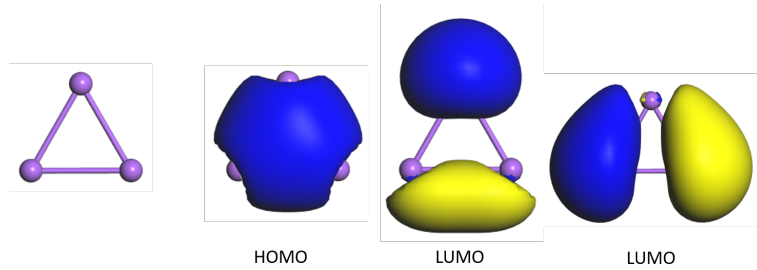
1. En väteatom befinner sig i ett tillstånd som är en superposition av tre egentillstånd $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ enligt:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{200}(\mathbf{r}) - 2i\psi_{21-1}(\mathbf{r}) + 4\psi_{320}(\mathbf{r})$$

- (a) Vilka är de möjliga resultaten av en mätning av energin och vilken sannolikhet har de olika möjligheterna? (Bortse från finstruktur.) (1p)
- (b) Beräkna väntevärdet av energin. (1p)
- (c) Vilka är de möjliga resultaten av en mätning av rörelsemängdsoperatoren \mathbf{L}^2 ? (1p)
- (d) Vilka är de möjliga resultaten av en mätning av projektionen av rörelsemängdsoperatoren, dvs \mathbf{L}_z ? (1p)
2. En exciterad heliumatom med elektronkonfigurationen ($1s^15p^1$) kan finna sig i två multiplettillstånd.
- (a) Ge LS-termsymbolerna för tillstånden. (1p)
- (b) Vilket av tillstånden bör ha lägst energi? Motivera svaret. (1p)
- (c) Teckna de totala vågfunktionerna (rum och spinn) för de två tillstånden. (2p)

3. Jonisering av Na_3 ger Na_3^+ som är en molekyl där strukturen är en liksidig triangel. Molekylens struktur tillsammans med tre valansorbitaler visas i figuren: Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO) tillsammans med Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO) som är degenererad (två tillstånd). Na har en valenselektron (3s). Valansorbitalerna är olika lineärkombinationer av 3s-tillstånd.

- (a) Ge ett fysikaliskt argument varför HOMO är mer stabil än LUMO. (1p)
- (b) Ange multipliciteten för Na_3^+ . (1p)
- (c) Ange och motivera multipliciteten för den första exciterade nivån för Na_3^+ . (1p)
- (d) Givet orbitalerna för Na_3^+ , vilken struktur bör den icke joniserade Na_3 molekyl ha? (1p)



4. Väteatomens hamiltonian kan beskrivas:

$$H = H_0 + H_{SB} + H_B$$

där H_{SB} och H_B kan anses vara störningar till H_0 . H_{SB} beskriver spinn-ban effekter och H_B effekter av ett externt magnetfält. Betrakta fallet då $H_{SB} \gg H_B$. (5p)

- Beskriv hur störningarna påverkar 1s och 2p nivåerna.
- Beskriv kvantitativt (i termer av konstanter och magnetfält) hur spektrallinjen 2p→1s splittras när störningarna beaktas.
- Vid vilket magnetfält är störningarna jämförbara?

5. En partikel med massan m rör sig i en endimensionell potentialbrunn. Potentialen ($V(x)$) ges av:

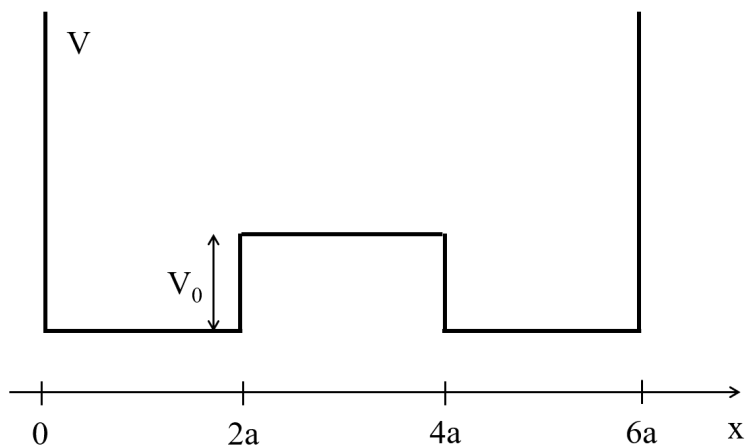
$$V(x) = \infty \quad (x < 0, x > 6a) \quad (1)$$

$$V(x) = 0 \quad (0 < x < 2a) \quad (2)$$

$$V(x) = V_0 \quad (2a < x < 4a) \quad (3)$$

$$V(x) = 0 \quad (4a < x < 6a) \quad (4)$$

Se även figuren. Behandla V_0 som en störning till fallet med $V_0 = 0$ och använd första ordningens störningsräkning för att uppskatta grundtillståndsennergi. (4p)



6. Vid behandling av atomer med många elektroner används vanligen centralfältsapproximationen. Detta leder till en uppdelning av hamiltonianen i en del som är sfäriskt symmetrisk (H_c) och en del med icke-sfäriska bidrag (H_{non-c}):

$$H = H_c + H_{non-c}$$

- (a) Beskriv centralfältsapproximationen.(1p)
(b) Sätt upp hamiltonianen för helium och visa att:

$$[H, L_z] = 0$$

L_z är rörelsemängdsmomentoperatören i z-led.(3p)

UPPLIFT 1

2)

$$\Psi(n) = \Psi_{200}(n) - 2i \Psi_{21-1}(n) + 4 \Psi_{320}(n)$$

Vi normaliserar

$$|\Psi(n)|^2 = 1 + 4 + 16 = 21$$

Normaliserad vågfunktion:

$$\Psi(n) = \frac{1}{\sqrt{21}} \Psi_{200}(n) - \frac{2i}{\sqrt{21}} \Psi_{21-1}(n) + \frac{4}{\sqrt{21}} \Psi_{320}(n)$$

$$E_{\text{mellan}} = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^2} \quad (\text{Hz})$$

↑ kvadrant

Möjliga värden på energin är:

$$\Psi_{200} : E_{200} = -\frac{1}{2} \frac{1}{4} = -\frac{1}{8} \text{ Hz}$$

$$\Psi_{21-1} : E_{21-1} = -\frac{1}{8} \text{ Hz}$$

$$\Psi_{320} : E_{320} = -\frac{1}{2} \frac{1}{9} = -\frac{1}{18} \text{ Hz}$$

$$P(E_{200}) = \frac{1}{21} + \frac{4}{21} = \frac{5}{21}$$

$$P(E_{320}) = \frac{16}{21}$$

b) Väntevärdet för energin:

$$\bar{E} = -\frac{1}{8} \frac{5}{21} - \frac{1}{18} \frac{16}{21} = -0.0721 \text{ H}_2$$

c) Möjliga resultat vid mätning av L^2 :

$$|L^2| = \nu(\nu+1) \hbar^2$$

$$\Psi_{200} : L^2 = 0$$

$$\Psi_{21-1} : L^2 = 2\hbar^2$$

$$\Psi_{320} : L^2 = 6\hbar^2$$

d) Möjliga resultat vid mätning av L_z :

$$|L_z| = m\hbar$$

$$\Psi_{200} : L_z = 0$$

$$\Psi_{21-1} : L_z = -1\hbar = -\hbar$$

$$\Psi_{320} : L_z = 0$$

UPPGIFT 2

a) Exaktat A_0 ($1s^1 5p^1$)

$$v_1 = 0$$

$$v_2 = 1$$

$$L = 1$$

$$S = 0, 1$$

$$J = |L - S| \dots |L + S|$$

Möjliga kvanter:

$${}^3P_{0,1,2}$$

$1P_1$

b) Hund's regel $\Rightarrow {}^3P_0$

Triplet är lägre än singlet eftersom elektronerna är lägre i energi när de är parallella.

c) $\Psi = \chi_{\pm} \cdot X_{\mp}$

$$\chi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{1s}(m_1) \psi_{5p}(m_2) \pm \psi_{1s}(m_2) \psi_{5p}(m_1) \}$$

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \alpha(1) \beta(2) - \alpha(2) \beta(1) \} \quad S = 0 \quad \chi_{+}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \{ \alpha(1) \beta(2) + \alpha(2) \beta(1) \}$$

$$\alpha(1) \alpha(2)$$

$$\beta(1) \beta(2)$$

$$S = 1 \quad \chi_{-}$$

Totala vägfunktioner skall vara antisym.
Med bytt av koordinater.

UPPGIFT 3

=

a) Homo har ingen nod mellan atomerna vilket ger låg kinetisk energi.

b) Tillstånd:

———— LUMO

↑↓ Homo

Multiplicitet är 1 (singlett)

$$2S+1 = 1$$

c) Vid excitation ockuperas LUMO.

↑

↑

Multiplicitet är 3 (triplett)

$$2S+1 = 3$$

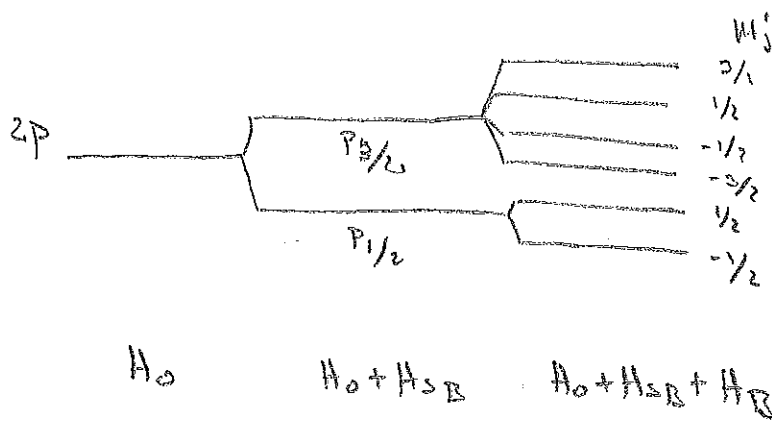
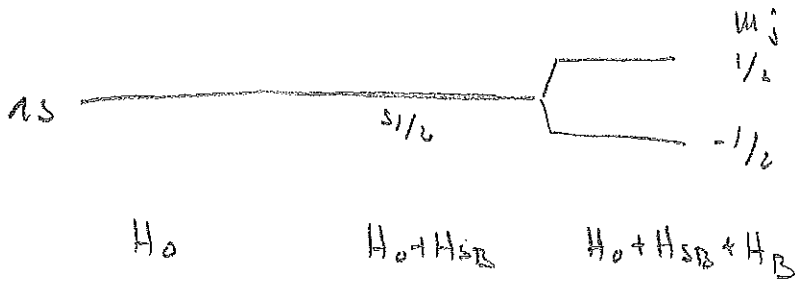
d) Någon av LUMO nivåerna ockuperas.

Detta ger antingen en triangel med trubbig eller spetsig vinkel.



UPPGIFT 4

2)



b) $H_{SR} = \alpha \hbar \cdot \mathcal{L}$

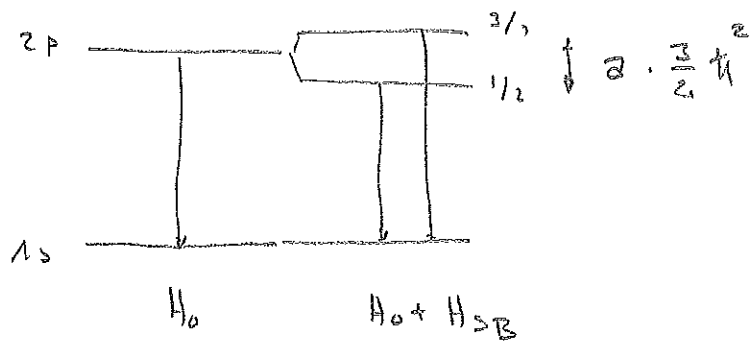
$$\alpha = \frac{z}{8\pi\epsilon_0} \left(\frac{e}{m c} \right)^2 \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \quad (\alpha \approx 1)$$

$$\hbar \cdot \mathcal{L} = \frac{1}{2} \hbar^2 \{ j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \}$$

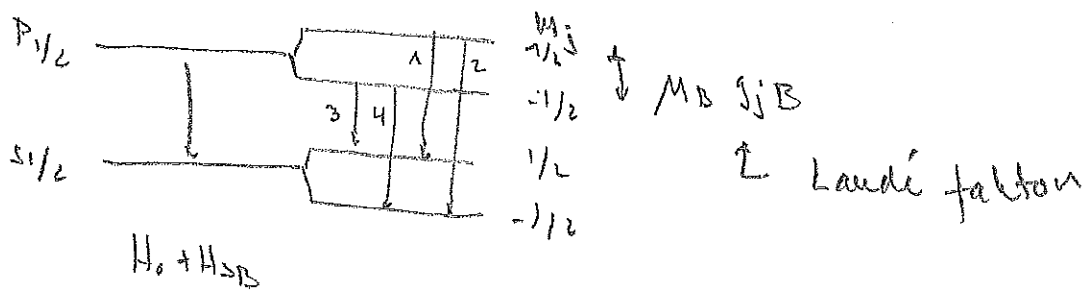
$$\hbar \cdot \mathcal{L} (s=1/2) = 0$$

$$\hbar \cdot \mathcal{L} (P_{1/2}) = -\hbar^2$$

$$\hbar \cdot \mathcal{L} (P_{3/2}) = \frac{1}{2} \hbar^2$$



Med spinn base splittras klyven i två med
 energi separation $\frac{3}{2} \sigma^2$.



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

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

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

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

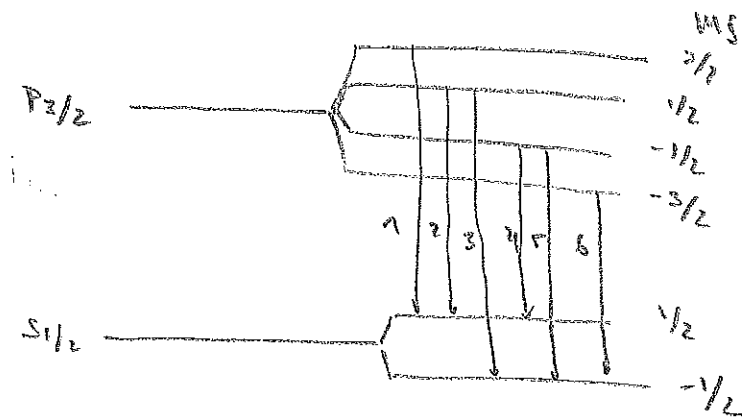
$P_{1/2} \rightarrow S_{1/2}$ splittas i 4 linjer med

$$\Delta E(1) = -\frac{2}{3} \mu_B B$$

$$\Delta E(2) = \frac{4}{3} \mu_B B$$

$$\Delta E(3) = -\frac{4}{3} \mu_B B$$

$$\Delta E(4) = \frac{2}{3} \mu_B B$$



$$\Delta E(1) = \mu_B B$$

$$\Delta E(2) = -\frac{1}{3} \mu_B B$$

$$\Delta E(3) = \frac{5}{3} \mu_B B$$

$$\Delta E(4) = -\frac{5}{3} \mu_B B$$

$$\Delta E(5) = \frac{1}{3} \mu_B B$$

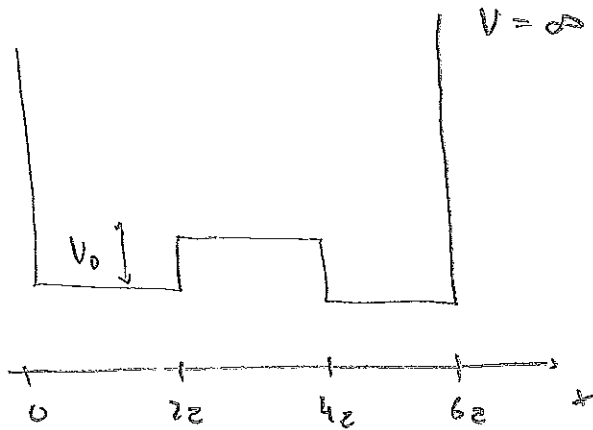
$$\Delta E(6) = -\mu_B B$$

c) Störningarna blir jämförbara

$$\mu_B B_{SI} \approx 2IL \cdot \lambda$$

För $P=1/2$ är detta:

$$B \approx \frac{2 \cdot \frac{1}{2} \cdot I^2}{\mu_B \frac{4}{3}}$$



För det ostörda fallet kan vi:

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{72 m a^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

$$\psi_{11}^{(0)} = \sqrt{\frac{1}{3a}} \sin \frac{n\pi x}{6a}$$

Speciellt för grundtillståndet gäller att:

$$E_1^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{72 m a^2}$$

$$\psi_1^{(0)} = \sqrt{\frac{1}{3a}} \sin \frac{\pi x}{6a}$$

Energi korrekturen till första ordningen

ges av:

$$E^{(1)} = \langle \psi_1^{(0)} | V_0 | \psi_1^{(0)} \rangle$$

$$E^{(1)} = \int_{-2a}^{2a} \psi_1^{(0)*} V_0 \psi_1^{(0)} dx =$$

$$= \frac{V_0}{3a} \int_{-2a}^{2a} \sin^2 \frac{\pi x}{6a} dx = V_0 \left(\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \right)$$

grundtillståndets energi är till första ordning:

$$E = E_1^{(0)} + E^{(1)}$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^3}{72 m a^2} + V_0 \left(\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \right)$$

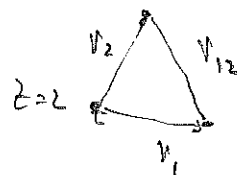
UPPGIFT 6

=

- a) Elektronerna anses vöra sig i ett medelfält av de övriga elektronerna. Fältet är sfäriskt symmetriskt.

- b) Hamiltonianen är:

$$H = \underbrace{-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{Z}{r_1}}_{h_1} - \underbrace{\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_2}}_{h_2} + \frac{1}{r_{12}}$$



$$H = h_1 + h_2 + \frac{1}{r_{12}} = H_c + H_{nonc}$$

$$H_{nonc} = \frac{1}{r_{12}}$$

Vi tecknar r_{12} i sfäriska koordinater

$$x_1 = r_1 \sin \theta_1 \cos \varphi_1$$

$$x_2 = r_2 \sin \theta_2 \cos \varphi_2$$

$$y_1 = r_1 \sin \theta_1 \sin \varphi_1$$

$$y_2 = r_2 \sin \theta_2 \sin \varphi_2$$

$$z_1 = r_1 \cos \theta_1$$

$$z_2 = r_2 \cos \theta_2$$

$$r_{12} = \left((x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2 \right)^{1/2}$$

$$r_{12} = \left(r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 (\sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \cos\theta_1 \cos\theta_2) \right)^{1/2}$$

$$L_z = L_{z_1} + L_{z_2} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \right)$$

$$\left[L_z, \frac{1}{r_{12}} \right] = L_z \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{12}} L_z$$

Vi betraktar $L_z \frac{1}{r_{12}}$:

$$L_z \frac{1}{r_{12}} \psi = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \right) \frac{1}{r_{12}} \psi =$$

$$= -i\hbar \frac{1}{r_{12}} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_1} \psi + \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \psi \right) + i\hbar \psi \frac{1}{r_{12}^2} \left(\frac{\partial r_{12}}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial r_{12}}{\partial \varphi_2} \right)$$

$= 0$

$$\ast) \quad \frac{\partial r_{12}}{\partial \varphi_1} = \frac{r_1 r_2}{r_{12}} \sin\theta_1 \sin\theta_2 \sin(\varphi_1 - \varphi_2)$$

$$\frac{\partial r_{12}}{\partial \varphi_2} = -\frac{r_1 r_2}{r_{12}} \sin\theta_1 \sin\theta_2 \sin(\varphi_1 - \varphi_2)$$

$$L_z \frac{1}{r_{12}} \psi = -i\hbar \frac{1}{r_{12}} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial \psi}{\partial \varphi_2} \right) = \frac{1}{r_{12}} L_z \psi$$

$$[L_z, \frac{1}{r_{12}}] = L_z \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{12}} L_z = \frac{1}{r_{12}} L_z - \frac{1}{r_{12}} L_z = 0$$