

Dugga Tillämpad kvantfysik (TIF100)

Tid: 7 december 2013, 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. Vågfunktionen för en väteatom i ett energiegentillstånd är:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = Nr^2 \left(6 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{4a_0}} \sin 2\theta e^{i\varphi}$$

N är en normeringskonstant och a_0 Bohrradien. Bestäm kvanttalen n , l och m . (För poäng krävs en motivering, dock inte någon beräkning. (2p)

2. Ge en kvantmekanisk förklaring till det periodiska systemet. (2p) Ange även: (2p)

- (a) Orsaken till antalet kolumner.
- (b) Hur atomradien ändras i rad 4.
- (c) Hur jonisationspotentialen ändras i rad 4.

3. N_2 molekylen är den mest stabila diatomiska homonukleära molekylen.

- (a) Ange elektronkonfigurationen för N_2 . Ange explicit molekykens spintillstånd. (1p)
- (b) Skissa ett energinivådigram för molekykens orbitalenergier. (1p)
- (c) Skissa utseendet på molekykens valensorbitaler. (1p)
- (d) Förklara varför N_2 är stabilare än både C_2 och O_2 . (1p)

4. Spinn-bankoppling är en effekt som påverkar atomernas energitillstånd.

- (a) Skissa kvalitativt energiuppspaltningen orsakad av spinn-ban kopplingen för energinivåerna i en en-elektronatom för $l=0, 1$, och 2 . (1p)
- (b) Ange hur spinn-bankopplingen skalar med Z (atomnummer). (1p)
- (c) Skissa i fallet med $l=1$ hur ett svagt magnetfält åstadkommer ytterligare energiuppsplittring. (1p)

5. Antag att icke-växelverkande partiklar med massan m är bundna till en tredimensionell harmonisk oscillator potential. Enpartikel hamiltonianen ges av:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2$$

- (a) Beräkna grundtillståndetsenergin för fallet med 8 elektroner. (2p)
(b) Beräkna grundtillståndetsenergin för fallet med 8 spinn-1 partiklar. (1p)

Ledning: Schrödingerekvationen behöver inte lösas.

6. En partikel befinner sig i en endimensionell potentialbrunn (längd L) med oändliga väggar. Brunnen har en svag störning så att den effektiva potentialen är:

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

$$V(x) = -b \quad (0 < x < L/2) \quad (2)$$

$$V(x) = 0 \quad (L/2 < x < L) \quad (3)$$

Använd första ordningens störningsräkning för att uppskatta grundtillståndetsenergin. (4p)

7. Två identiska fermioner med spinn $1/2$ är i en gemensam endimensionell oändlig potentialbrunn med längd L . Fermionerna växelverkar bara genom sina spinn så att hamiltonianen blir:

$$H = H_1 + H_2 - A \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

Här är H_1 och H_2 hamiltonianerna för partikel 1 och 2. A är en konstant. Bestäm grundtillståndetsenergin som funktion av A . (4p)

Ledning: Bestäm grundtillståndetsenergin för singlett och triplett tillstånd.

UPPGIFT 1

=

$$\Psi(n, \theta, \varphi) = N r^2 \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/4a_0} \sin \theta e^{i\varphi}$$

φ -beroendet är $e^{i\varphi}$. För väts kan vi
 att φ -beroendet är $e^{\pm im\varphi}$. Detta ger
 att $m = 1$.

Vid små n skalar vägfunktionen som $\sim r^b$.
 Väts vägfunktionen skalar som $\sim r^b$. Vi kan
 således att $b = 2$.

I den radiala delen har vi $e^{-r/4a_0}$ vilket
 betyder att $n = 4$. Man kan se detta även
 i att vägfunktionen har en nod. Det skall
 därför vara den andra d-orbitalen $\rightarrow n = 4$

$$n = 4$$

$$l = 2$$

$$m = 1$$

Det periodiska systemet kan förstås med hjälp av centralfältsapproximationen och Pauliprincipen vilket ger aufbau-principen.

Centralfältsapproximationen; Vi betraktar alla atomer som om de rör sig i en sfäriskt symmetrisk potential. Detta ger enpartikel hamiltonianer:

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r)$$

Lösningarna är lika värdets vägfunktioner.

Pauliprincipen; Varje fermion har unik uppsättning kvanttal.

Uppbyggingsprincipen säger att vi fyller på elektronerna enligt:

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 \dots$$

a) Antalet kolonner är 18 eftersom

s-tillstånd	ta	2	elektroner
p-tillstånd	ta	6	"
d-tillstånd	ta	10	elektroner

I de första två kolonnerna fylls ns-subskal

Därefter fylls $(n-1)$ d-subskal och slutligen fylls KP-subskal.

- b) Atomradien är störst för K och minst för Kv.
- c) Ionisationspotentialen är störst för Kv och minst för K.

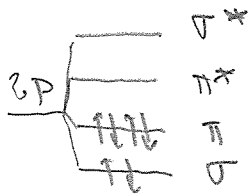
UPPGIFT 3

=

N kan elektronkonfigurationen $1s^2 2s^2 2p^3$.

För molekyl får vi:

a)



Elektronkonfigurationen

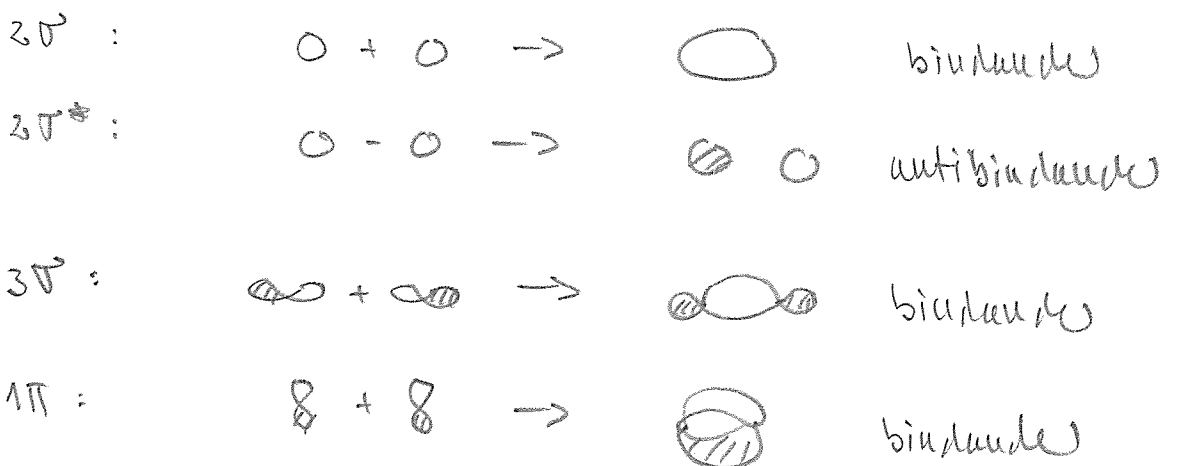
är:

$$(1\sigma)^2 (1\sigma^*)^2 (2\sigma)^2 (2\sigma^*)^2 (3\sigma)^2 (1\pi)^4$$

Molekylen har ett slutet skal
varför spinntillståndet är
singlett, ($S=0$)

b)

Till valensvärken får vi $2s$ och $2p$



c)

Vi har fler antal bindande orbitaler ockuperade
i förhållande till antibindande. För C_2 är 1π
fullt och för O_2 är π^* fylld med 2e.

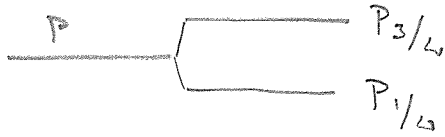
U P P G I F T 4

=

2) $l = 0$



$l = 1$

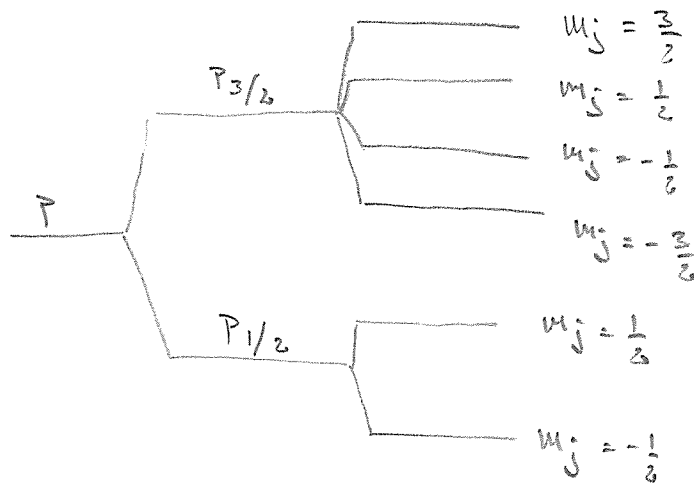


$l = 2$



b) spinnbau kopplungen skalen $s_{001} z^4$

c) $l = 1$



UPPGIFT 5

a) Energier för en tredimensionell harmonisk oscillator ges av:

$$E(n_x, n_y, n_z) = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \hbar \omega$$

$$n_i = 0, 1, \dots$$

Kvanttal Energi E_i ($\hbar \omega$)

n_x n_y n_z

$$0 \quad 0 \quad 0 \quad \quad \quad 3/2$$

$$1 \quad 0 \quad 0 \quad \quad \quad 5/2$$

$$0 \quad 1 \quad 0 \quad \quad \quad 5/2$$

$$0 \quad 0 \quad 1 \quad \quad \quad 5/2$$

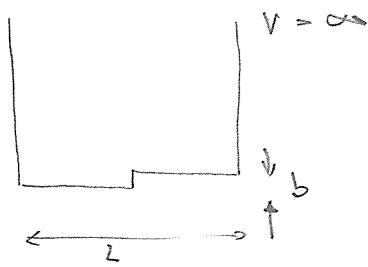
Grundtillståndets energi är (Pauli-principen)

$$E = (\frac{3}{2} \hbar \omega + 3 \frac{3}{2} \hbar \omega) \cdot 8 = \underline{\underline{18 \hbar \omega}}$$

b) Alla kan vara i $(0, 0, 0)$ tillståndet

$$E = 8 \frac{3}{2} \hbar \omega = \underline{\underline{12 \hbar \omega}}$$

UPPGIFT 6



Utan störning

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad \text{För}$$

grundtillståndet

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Första ordningens störning är $\langle \psi | H' | \psi \rangle$.

$$H' = -b \quad 0 < x < L/2$$

$$\Delta E^{(1)} = \int_0^{L/2} \psi_1^* (-b) \psi_1 dx = -\frac{2b}{L} \int_0^{L/2} \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx = -\frac{2b}{L} \left(\frac{L}{4} \right) = -\frac{b}{2}$$

Grundtillståndets energi är $E_1 + \Delta E^{(1)}$ till första ordning

$$E_1 + \Delta E^{(1)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} - \frac{b}{2}$$

=

UTPPÅIFT 7

$$H = H_1 + H_2 - A \varphi_1 \cdot \varphi_2$$

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

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$\varphi^2 = (\varphi_1 + \varphi_2)^2 \Rightarrow \varphi_1 \cdot \varphi_2 = \frac{1}{2} (\varphi^2 - \varphi_1^2 - \varphi_2^2)$$

Låt $\chi(1, 2)$ vara spinnväg funktionen.

$$\begin{aligned} \varphi_1 \cdot \varphi_2 \chi(1, 2) &= \frac{1}{2} \left(s(s+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) \right) \hbar^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \left(s(s+1) - \frac{3}{2} \right) \end{aligned}$$

Singlet tillstånd ($s=0$)

Bägge elektronerna kan vara i $n=1$

$$E_{s=0} = 2 \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} - \frac{A}{2} \hbar^2 \left(-\frac{3}{2} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + \frac{3}{4} A \hbar^2$$

Triplet tillstånd ($s=1$)

Elektronerna måste vara i olika n

$$\begin{aligned}
 E_{S=1} &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} - \frac{A}{2} \hbar^2 \left(2 - \frac{3}{2} \right) = \\
 &= \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} - \frac{A\hbar^2}{4}
 \end{aligned}$$

Vi ser att kurvorna trippelt och singlett system är lägst i energi beroende på A . Samma energi erhålls om:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + \frac{3}{4} A_0 \hbar^2 = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} - \frac{A_0 \hbar^2}{4}$$

$$A_0 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Om $A > A_0 \rightarrow$ trippelt

$A < A_0 \rightarrow$ singlett