Chalmers tekniska högskola
Teknisk fysik
Henrik Grönbeck

Dugga Tillämpad kvantfysik (TIF100)

Tid: 18 december 2015, 13.15-17.00
Examinator: Henrik Grönbeck, 031-7722963, 070-2862459
Hjälpmedel: Physics Handbook, Beta Mathematics Handbook, Chalmers godkänd miniräknare
Betygsgränser (inkluderat bonuspoäng): Betyg 3: 17 p, betyg 4: 25 p, betyg 5: 31 p.

---

1. En exciterad heliumatom med elektronkonfigurationen ($1s^1 4d^1$) kan befinna sig i två multiplettillstånd. (4p)

   (a) Ge LS-termsymbolerna för tillstånden.
   (b) Vilket av tillstånden bör ha lägst energi? Motivera svaret.
   (c) Teckna de totala vågfunktionerna (rum och spinn) för de två tillstånden.
   (d) Skissa de radiella rumsvågfunktionen för 1s och 4d.

2. Förklara följande approximationer och begrepp. (5p)

   (a) Born-Oppenheimer approximationen.
   (b) Bindande och antibindande orbital.
   (c) Hur σ- och π-bindningar kan konstrueras som en lineärkombination av atomära s- och p-orbitaler.
   (d) Hur kan en molekyls stabilitet uppskattas från ockupationen av molekylorbitaler?
   (e) Vad innebär sp, sp^2 och sp^3 hybridisering? Vilka typer av molekylära strukturer får man vid de olika hybridiseringarna?

3. Vilka excitationer i en molekyl är av betydelse för spektra i mikrovågs-, infraröd-, synliga och röntgen området. (2p)

4. Antag att en partikel är bunden i en endimensionell potential $V(x) = b|x|$, där b är en positiv konstant. (4p)

   (a) Använd variationsmetoden med en försöksvågfunktion $\psi = Ne^{-ax^2}$ för att uppskatta grundtillståndsenergin. (N är normeringskonstant och a en positiv konstant.)
   (b) Beskriv kortfattat hur du kan gå tillväga för att förbättra uppskattningen i 4(a).

5. 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 $H_{SB} >> H_B$. (5p)

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

Ledning:

Hamiltonianen för spinn-ban koppling ges av:

$$H_{SB} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$$

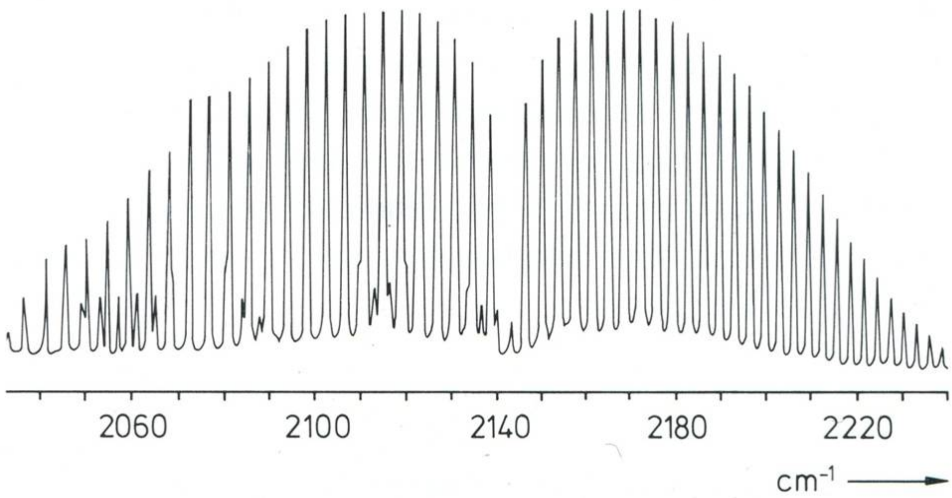
Där m är elektronens massa och c är ljushastigheten. Hamiltonianen för växelverkan med kan skrivas:

$$H_B = \mu_B g_j m_j B$$

Där μ_B är Bohr magnetonen, g_j är Lande-faktorn, m_j är kvanttal och B är magnetfältet.

6. Figuren nedan visar ett rotations- och vibrationsspektrum ($\nu = 1 \rightarrow 0$) för CO molekylen. Beräkna från figuren (4p):

   (a) Vibrationsfrekvensen för CO (i cm^{-1}).
   (b) Bindningsavståndet i CO.



UPPGIFT 7

He i konfigurationen $1s^1 4d^1$.

LS-termer ges av:

$$^{2S+1}L_J$$

a) $^3D_1 \quad ^3D_2 \quad ^3D_3$ (triplett)

$^1D_2$ (singlett)

b) Triplett tillstånden bör ha lägst energi. I triplett har de två elektronerna stor sannolikhet att vara långt ifrån varandra vilket ger en mindre Coulomb repulsion.

c) Den totala vågf skall vara antisym. med avseende på utbyte av koordinater.

$$\Psi = \psi(r_1, r_2)\,\chi(m_{s_1}, m_{s_2})$$

Rums   Spinn

Triplett : Symm spin χ_+

Antisymm raums Ψ_-

Singlett : Antisymm spin χ_-

Symm raums Ψ_+

$$\Psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \varphi_{1s}(r_1)\varphi_{4d}(r_2) \pm \varphi_{1s}(r_2)\varphi_{4d}(r_1) \right\}$$

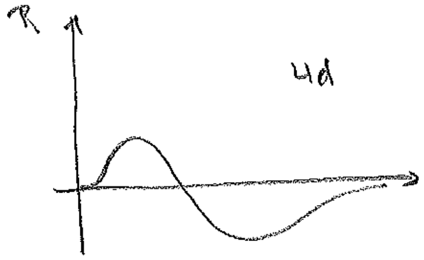
$$\chi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1) \right\}$$

$$\chi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1) \right\}$$

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

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

d)



UPPGIFT 2

a) Vågfunktionen för kärnorna och elektronerna är separerade. Detta kan göras eftersom kärnorna är mkt tyngre än elektronerna

$\frac{m_e}{M_p} \approx \frac{1}{1800}$. Effekten blir att elektroniska vågfunktionen kan beräknas med en potential motsvarande fixa kärnor.

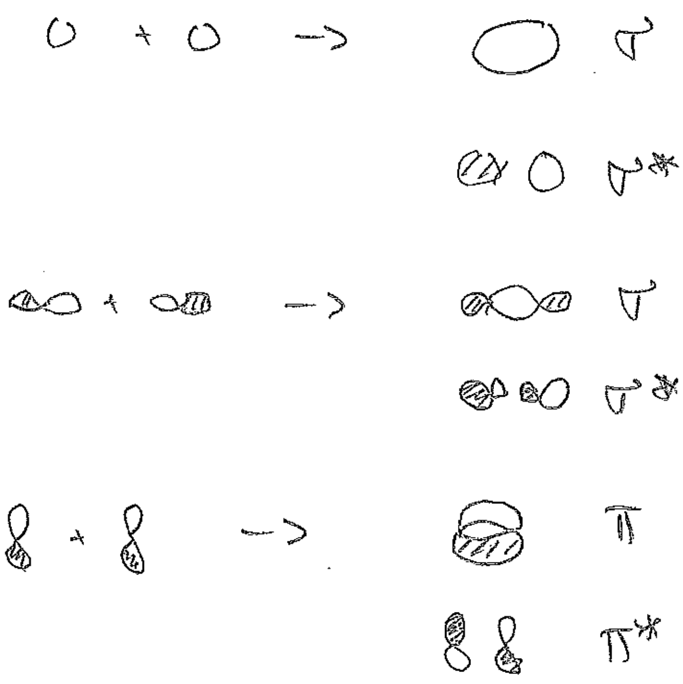
b) Bindande orbital – stor sannolikhet för laddning mellan atomkärnorna

Antibindande orbital – nod i vågfunktionen mellan kärnorna.

c) σ från s :

σ från p :

π från p :



d)

Man kan uppskatta stabiliteten genom att jämföra antalet elektroner i bindande och antibindande orbitaler. Speciellt brukar man använda bindningsordning - bond order. (BO)

$$BO = \frac{1}{2}(\# e \text{ bindande} - \# e \text{ antibindande})$$

e) sp-hybridisering: blandning mellan s och en p-orbital detta ger linjära strukturer.

sp^2-hybridisering: blandning mellan s och två p-orbitalen detta ger plana strukturer med 120° mellan bindningarna

sp^3-hybridisering: blandning mellan s och tre p-orbitalen. Detta ger tre-dimensionella strukturer med tetragonal struktur. Vinklarna är 109°.

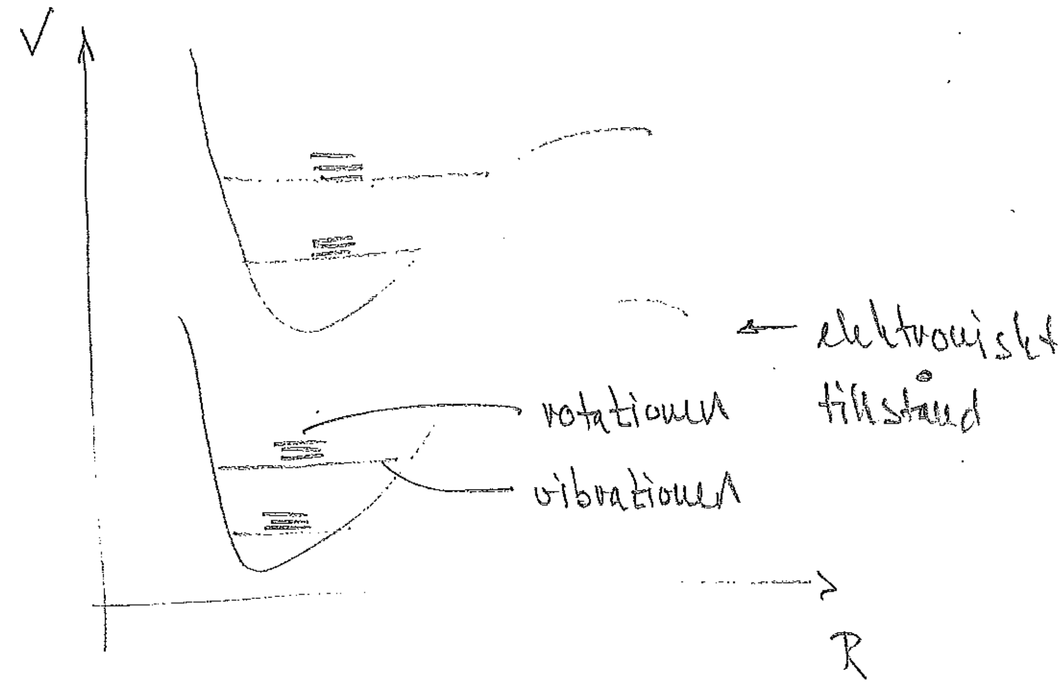
UPPGIFT 3

Mikrovåg - rotationen

Infraröd - vibrationen

Synliga - valenselektroniska övergången

Röntgen - core-elektroniska övergången



UPPGIFT 4

Hamiltonianen ges av

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + b|x|$$

Ansätt: $\psi = N e^{-ax^2}$

Energin ges av

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

$$\langle\psi|\psi\rangle = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2} dx = N^2 \frac{2}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2a}}$$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-ax^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + b|x|\right) e^{-ax^2} =$$

$$= 2N^2 \int_0^{\infty} dx \, e^{-ax^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + bx\right) e^{-ax^2} =$$

$$= 2N^2 \int_0^{\infty} dx \, e^{-2ax^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}(4a^2x^2 - 2a) + bx\right) =$$

$$= 2N^2 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{2a}\sqrt{\pi}}{4} + \frac{b}{4a}\right) =$$

$$= N^2 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{2a}\sqrt{\pi}}{2} + \frac{b}{2a}\right)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{4m}(2a) + \frac{b}{\sqrt{2a}\sqrt{\pi}}$$

$$\frac{dE}{da} = \frac{\hbar^2}{4m} \cdot 2 - \frac{1}{2} \frac{b}{\sqrt{\pi}\sqrt{2}\, a^{3/2}}$$

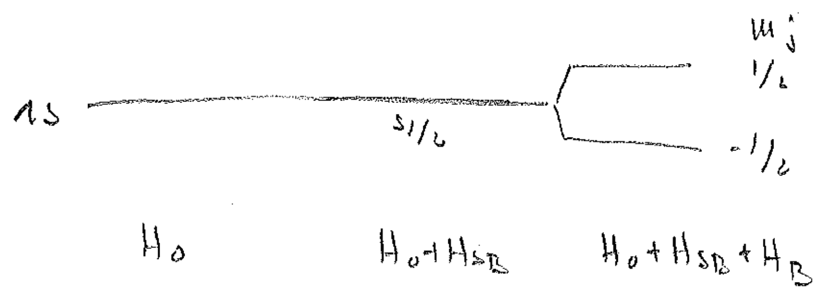
$$\frac{dE}{da} = 0 \Rightarrow \quad a = \frac{1}{2}\left(\frac{2mb}{\hbar^2\sqrt{\pi}}\right)^{2/3}$$

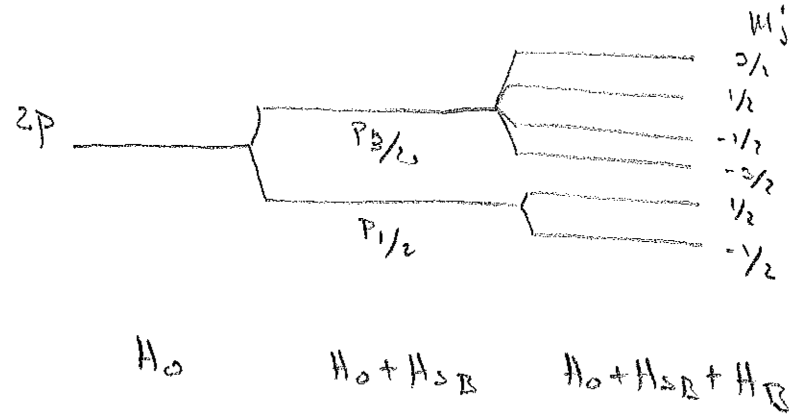
$$E(a_0) = \frac{3}{2}\left(\frac{b^2\hbar^2}{2m\pi}\right)^{1/3}$$

b) Genom att ansätta en annan försöksvågfunktion. Detta kan göras genom annan funktionsform.

UPPGIFT 5

a)





b) $H_{SB} = a\, \mathbb{L} \cdot \mathbb{S}$

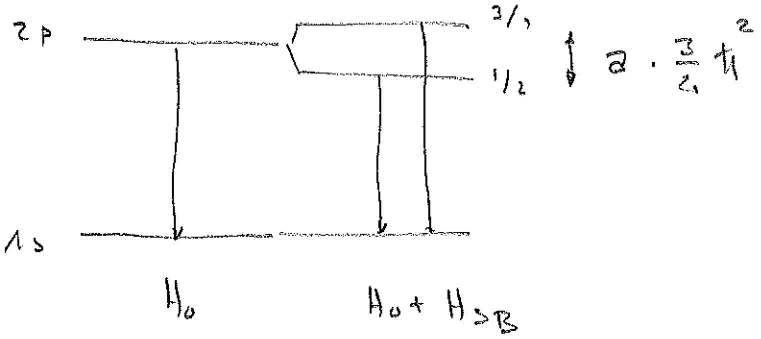
$$a = \frac{Z}{8\pi\varepsilon_0}\left(\frac{e}{mc}\right)^2 \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \qquad (Z=1)$$

$$\mathbb{L}\cdot\mathbb{S} = \frac{1}{2}\hbar^2 \left\{ j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right\}$$

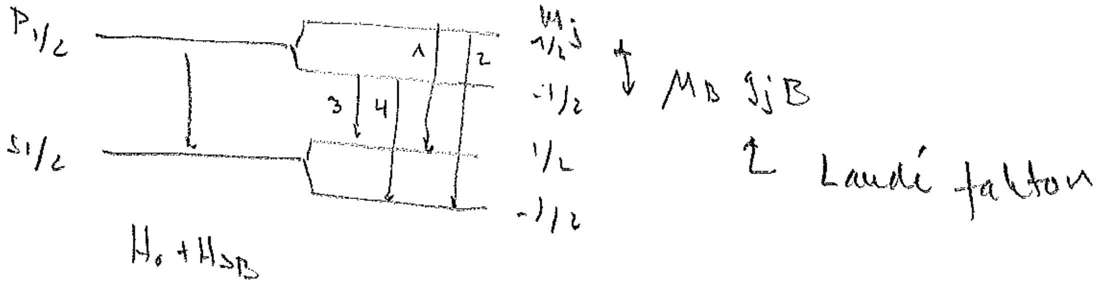
$\mathbb{L}\cdot\mathbb{S}\,(s_{1/2}) = 0$

$\mathbb{L}\cdot\mathbb{S}\,(p_{1/2}) = -\hbar^2$

$\mathbb{L}\cdot\mathbb{S}\,(p_{3/2}) = \frac{1}{2}\hbar^2$



Med spin bana splittras linjen i två med energiseparation $\frac{3}{2} a \hbar^2$.



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

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

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

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

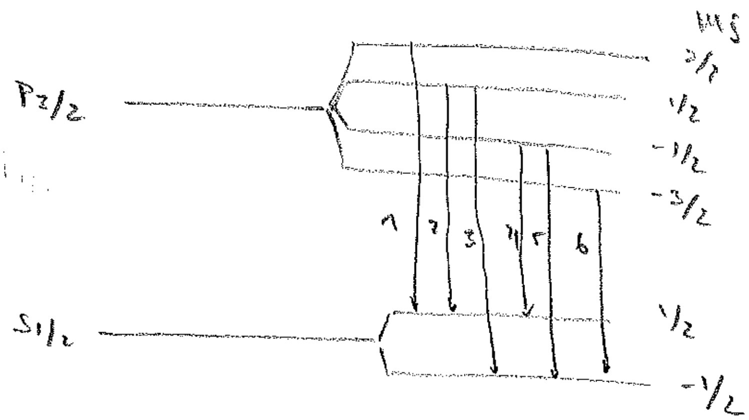
$P_{1/2} \to S_{1/2}$ splittras i 4 linjer med

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

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

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

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



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

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

$$\Delta E(3) = 5/3\,\mu_B B$$

$$\Delta E(4) = -5/3\,\mu_B B$$

$$\Delta E(5) = 1/3\,\mu_B B$$

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

c)

$$E_{so} = a\,\frac{1}{2}\hbar^2\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)$$

$$a = \frac{Z}{8\pi\varepsilon_0}\left(\frac{e}{mc}\right)^2 \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle =$$

$$= \left[Z = 1,\ n = 2,\ l = 1,\ j = \frac{1}{2} \right]$$

$$= \frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{1}{24 a_0^3}$$

$$E_{so} = \frac{\hbar^2}{8\cdot 24\pi\,\varepsilon_0\, a_0^3}\left(\frac{e}{mc}\right)^2 \approx 0.2 \ \text{cm}^{-1}$$

$$E_B = \left[P_{1/2}\right] = \mu_B\left(\frac{2}{3}\right)\cdot\frac{1}{2}\,B = \frac{1}{3}\,\mu_B B$$

$$E_B \approx 0.2 \cdot B \quad \text{cm}^{-1}/\text{T}$$

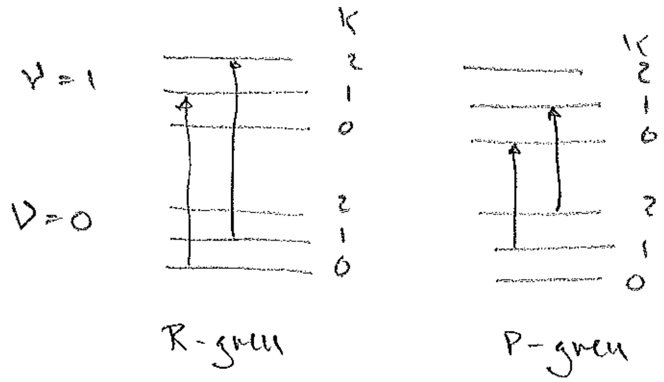
Uppsplittringen är av samma storlek

då $\underline{\underline{B = 1\ \text{T}}}$

UPPGIFT 6

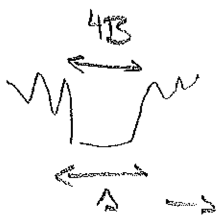
Övergångsregler är $\Delta v = \pm 1$

$\Delta K = \pm 1$



Rotationsenergi $E_K = K(K+1)\frac{\hbar^2}{2I} = K(K+1)B$

Mellan de första topparna i R och P-gren har vi:



$\Delta \Rightarrow$ från figuren $\Delta = 7.7\ \text{cm}^{-1}$

$4B = \Delta$

$B = 1{,}925\ \text{cm}^{-1}$

$B = \frac{\hbar^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2}$

$\mu = 6.871 \Rightarrow R = 1{,}12\ \text{Å}$

Från figuren (mellan R- och P-gren): $\nu_0 = 2143\ \text{cm}^{-1}$

c) Störningarna blir jämförbara

när $\mu_B B g_j \approx a \mathbb{L} \cdot \cancel{S}$

För $P_{3/2}$ är detta:

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