

Dugga Tillämpad kvantfysik (TIF100)

Tid: 7 april 2016

Examinator: Henrik Grönbeck, 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.

- Elektronkonfigurationen för kalium är $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^0$.
 - Skissa den radiella delen av enelektronvågfunktionen för 4s, 3p och 3d (2p).
 - Antag att kalium 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)
- Förklara följande begrepp och approximationer som är väsentliga för att förstå atomer med flera elektroner.
 - Centralfältsapproximationen. (1p)
 - Pauliprincipen. (1p)
 - Uppbyggnadsprincipen (aufbau). (1p)
- Betrakta en atom i ett magnetfält.
 - Beskriv generellt uppsplittringen av atomära nivåer i ett svagt magnetfält. Skissa explicit uppsplittringen för ett p -tillstånd. (1.5p)
 - Beskriv generellt uppsplittringen av atomära nivåer i ett starkt magnetfält. Skissa explicit uppsplittringen för ett p -tillstånd. (1.5p)
- Omkring 20% av jordens atmosfären består av syre.
 - Ange elektronkonfigurationen för O_2 . Ange molekylens spintillstånd. (1p)
 - Skissa ett energinivådiagram för molekylens orbitalenergier. (1p)
 - Skissa utseendet på molekylens valensorbitaler. (2p)

5. En endimensionell potential har egentillstånd $\psi_a(x)$, $\psi_b(x)$, $\psi_c(x)$... med tillhörande energiegenvärden $E_a < E_b < E_c$ Två icke växelverkande partiklar placeras i potentialen. Bestäm de två lägst liggande energierna för systemet med tillhörande vågfunktioner. Bestäm även degenerationsgrad. Gör det i fallet med: (4p)

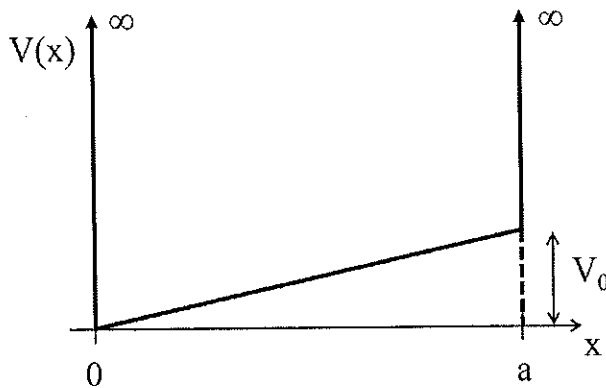
- (a) Två identiska partiklar som båda har spinn $1/2$.
- (b) Två identiska partiklar båda har spinn 0 .

6. Störningsteori och variationsmetoden är de två viktigaste approximationsmetoderna inom tillämpad kvantfysik.

- (a) Beskriv när och hur respektive metod huvudsakligen används. (2p)
- (b) Antag att en Hamiltonian kan skrivas $H = H_0 + H'$ där H' är en störning. Vågfunktionen för den ostörda Hamiltonianen är ψ_0 . Visa att första ordningens korrektion (ΔE_0) i tidsberoende störningsräkning ges av: (2p)

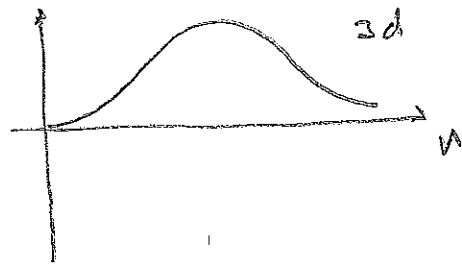
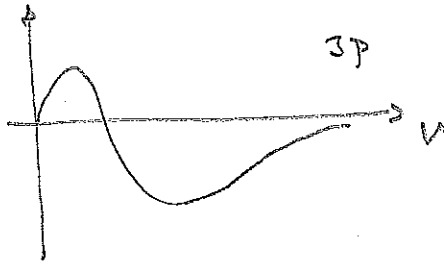
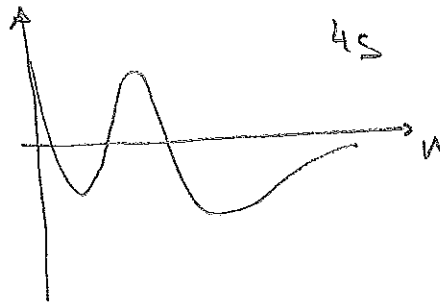
$$\Delta E_0 = \langle \psi_0 | H' | \psi_0 \rangle$$

- (c) Använd första ordningens störningsteori för att beräkna energin för de tre lägsta energinivåerna för en endimensionell potential enligt figuren. (2p)



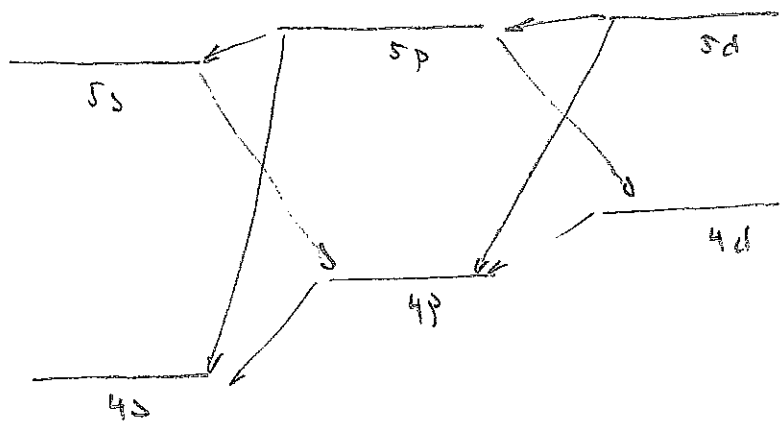
1

a)



b)

c)



$$\Delta l = \pm 1$$

- a) Centralfälts approximationen byggs på en oberoendes partikel modell där varje elektron rör sig i en effektiv potential skapad av kärnan (attraktion) och de övriga elektronerna (repulsion). Den effektiva potentialen antas vara sfäriskt symmetrisk.
- b) Pauliprincipen säger att varje fermion i ett system måste ha en unik uppsättning kvanttal.
- c) Om Schrödingerekvationen löses i centralfälts approximationen så får man en-elektron lösningarna ψ_{1s} , ψ_{2s} , ψ_{2p} etc. Pauliprincipen säger att varje elektron skall ha unikt kvanttal. Detta ger att tillståndet fylls upp enligt:
- $$1s^2 2s^2 2p^6 \dots$$

UPPGIFT 3

=

Hamiltonianen för en atom kan skrivas

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

\uparrow \uparrow
 spin-orbit magnetfält

Vi har då två fall:

1) $H_{SB} \gg H_B$ (svaga B-fält)

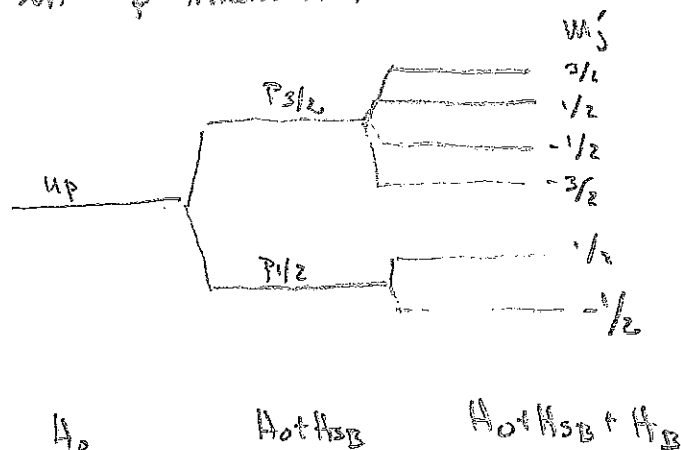
2) $H_{SB} \ll H_B$ (starka B-fält)

2) E-ochten av B-fält beräknas på $\mu_B m_j$

$$\Delta E_{m_j} = g \mu_B B m_j$$

\uparrow Landé faktor (bör vara $g_{L,S,J}$)

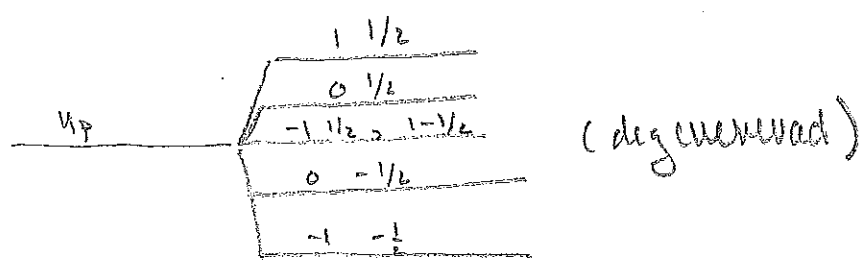
För ett p-tillstånd:



b) Effekten von B-Feld betrachten μ_B

$\Psi_{n l m_l m_s}$

$$\Delta E_{m_l m_s} = \mu_B B (m_l + 2m_s)$$

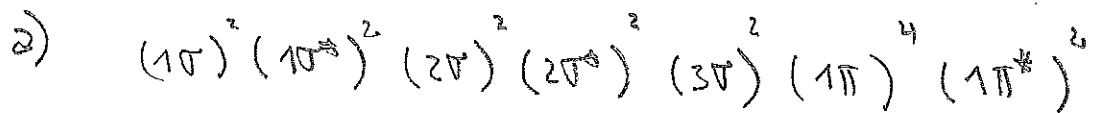
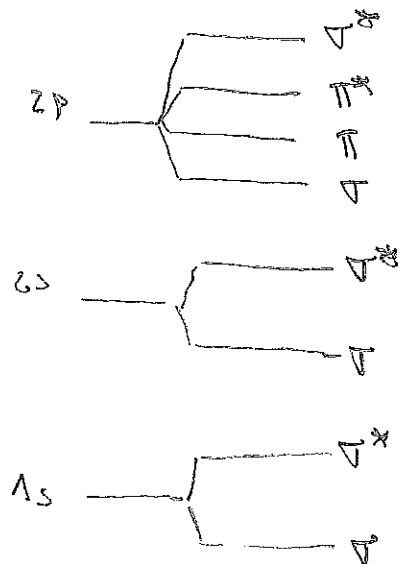
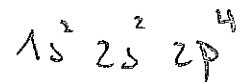


$m_l m_s$

H_0

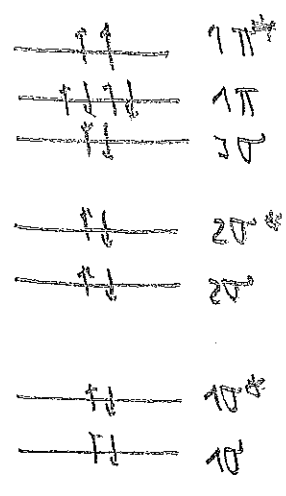
$H_0 + H_B$

0 kan elektronkonfigurationen:

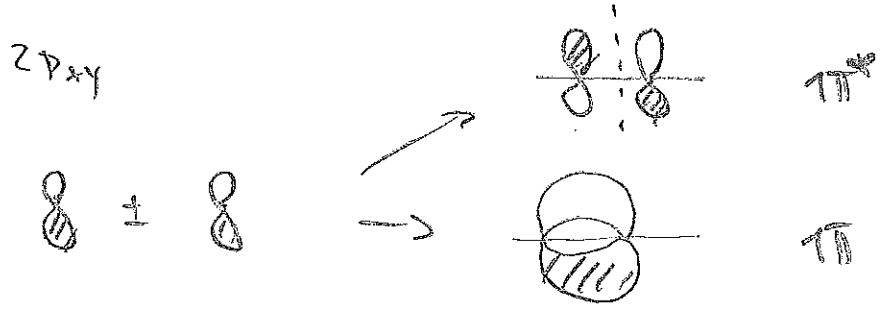
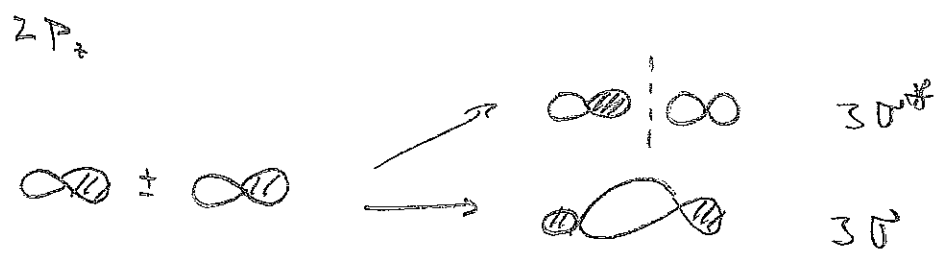
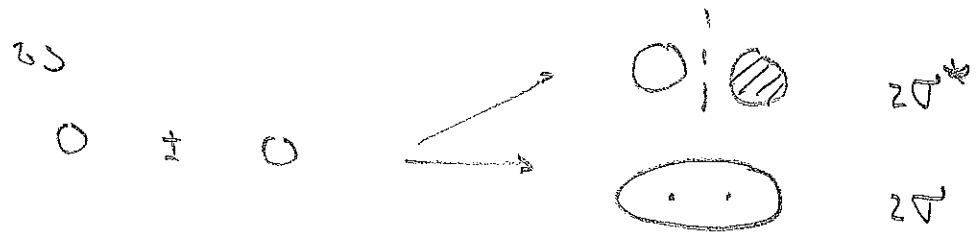


Eftersom varje π -tillstånd tar fyra elektroner så får vi två oparade elektroner p.g.a Hund's regel. Dus spin-tillståndet är en triplet ($S=1$).

b)



c)



UPPGIFT 5

Den totala vågfunktionen ges av:

$$\Psi = \psi \chi$$

där ψ är rumsdelen och χ spindelen. För varje partikel har vi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi_i(x) = E_i \psi_i(x)$$

$i = 2, 6, \dots$

2) Två identiska spin- $\frac{1}{2}$ partiklar, (antisym Ψ)

$E_a < E_b < E_c \Rightarrow$ bägge partiklarna i ψ_a för grundtillståndet. För första exciterade är en partikel i ψ_a och en i ψ_b .

a) Grundtillståndet:

$$\Psi = \psi_a(x_1) \psi_a(x_2) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1))\right)$$

$$E = E_a + E_a$$

Degenerationen är 1.

a Första exciterade tillståndet

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_a(x_1) \gamma_b(x_2) + \gamma_a(x_2) \gamma_b(x_1)) \cdot$$

$$\frac{1}{2} (\alpha(1) \beta(2) - \alpha(2) \beta(1))$$

$$= \frac{1}{2} (\gamma_a(x_1) \gamma_b(x_2) - \gamma_a(x_2) \gamma_b(x_1)) \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{2} (\alpha(1) \beta(2) - \alpha(2) \beta(1))$$

$$= \frac{1}{4} (\gamma_a(x_1) \gamma_b(x_2) - \gamma_a(x_2) \gamma_b(x_1)) \cdot$$

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

$$= \frac{1}{2} (\gamma_a(x_1) \gamma_b(x_2) - \gamma_a(x_2) \gamma_b(x_1)) \cdot$$

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

$$E = E_a + E_b$$

Degeneration är 4.

b) Två identiska spin-0 partiklar.

• Grundtillståndet ges av

$$\Psi = \Psi_2(x_1) \Psi_2(x_2)$$

$$E = E_2 + E_2$$

Degeneration är 1

• Första exciterade tillståndet

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_2(x_1) \Psi_6(x_2) + \Psi_2(x_2) \Psi_6(x_1))$$

$$E = E_2 + E_6$$

Degeneration är 1

UPPGIFT 6a

7

Variationsmetoden lämpar sig bäst för att beräkna grundtillståndsenergi och vågfunktion.

Metodens fundament är att grundtillståndet är den lägsta energin som systemet kan ha.

Antag att vi känner H men inte vet ψ_0 eller E_0 . Då ansätts en försöksvågfunktion ϕ . Metoden säger:

$$E[\phi] = \frac{\int \phi^* H \phi \, dV}{\int \phi^* \phi \, dV} \geq E_0.$$

Störningsräkning används om vi känner lösningen för ett system som är likt det vi är intresserade av. Vi känner lösningen till H_0 , men är intresserade av $H_0 + H'$.

UPPGIFT 6 b

Vi antar att systemet inte har degenererade tillstånd. Lös. till största systemet är:

$$H_0 \psi_k^{(0)} = E_0 \psi_k^{(0)}$$

\downarrow tillstånd

Vi är intresserade av lös. till

$$H = H_0 + \lambda H'$$

Låt:

$$\psi_k = \psi_k^{(0)} + \lambda \psi_k^{(1)} + \dots$$

$$E_k = E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \dots$$

$$H \psi_k = E_k \psi_k$$

$$(H_0 + \lambda H') (\psi_k^{(0)} + \lambda \psi_k^{(1)}) = (E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)}) (\psi_k^{(0)} + \lambda \psi_k^{(1)})$$

Samlan ordningarna.

$$\lambda^0: H_0 \psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \psi_k^{(0)}$$

$$\lambda^1: H_0 \psi_k^{(1)} + H' \psi_k^{(0)} = E_k^{(0)} \psi_k^{(1)} + E_k^{(1)} \psi_k^{(0)} \quad (*)$$

Multiplikera * med $\psi_k^{(0)*}$ och integrera

$$\langle \psi_k^{(0)} | H_0 | \psi_k^{(1)} \rangle + \langle \psi_k^{(0)} | H' | \psi_k^{(0)} \rangle =$$

$$E_k^{(0)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_k^{(1)} \rangle + E_k^{(1)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_k^{(0)} \rangle$$

$$E_k^{(0)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_k^{(1)} \rangle + \langle \psi_k^{(0)} | H' | \psi_k^{(0)} \rangle =$$

$$E_k^{(0)} \langle \psi_k^{(0)} | \psi_k^{(1)} \rangle + E_k^{(1)}$$

Vilket ger oss:

$$E_k^{(1)} = \langle \psi_k^{(0)} | H' | \psi_k^{(0)} \rangle$$

UPPDRIFT 6 c
=

Lösningarna till det ostörda systemet ges av:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8 m a^2}$$

Där m är partikelns massa.

Korrekturen till första ordningen ges av

$$\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \langle \Psi_n | H' | \Psi_n \rangle = \\
&= \frac{2}{a} \frac{V_0}{2} \int_0^a x \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \\
&= \frac{2V_0}{2a} \int_0^a \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a}\right) \frac{x}{2} dx = \\
&\quad \quad \quad \hookrightarrow \text{geometrisk bidrag} \\
&= \frac{V_0}{2a} \left[\frac{1}{2} x^2 \right]_0^a = \frac{V_0}{2}
\end{aligned}$$

Till första ordningen ges energin av:

$$E_n = E_n^{(0)} + \frac{V_0}{2}$$