

Dugga Tillämpad kvantfysik (TIF100)

Tid: 16 december 2016, 14.00-18.00

Examinator: Henrik Grönbeck

Kontakt under duggan: Igor Zoric, 0708-304725

Hjälpmedel: Physics Handbook, Beta Mathematics Handbook, av Chalmers godkänd miniräknare
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:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{14}}\psi_{211}(\mathbf{r}) - \frac{2}{\sqrt{14}}\psi_{32-1}(\mathbf{r}) + \frac{3i}{\sqrt{14}}\psi_{422}(\mathbf{r})$$

- (a) Skissa de radiella delarna av $\psi_{211}(\mathbf{r})$, $\psi_{32-1}(\mathbf{r})$ och $\psi_{422}(\mathbf{r})$. (1p)
- (b) Vilka är de möjliga resultaten av en mätning av energin och vilken sannolikhet har de olika möjligheterna? (Bortse från finstruktur.) (1p)
- (c) Beräkna väntevärdet av energin. (1p)
- (d) Vilka är de möjliga resultaten av en mätning av rörelsemängdsoperatoren \mathbf{L}^2 ? (1p)
- (e) Vilka är de möjliga resultaten av en mätning av projektionen av rörelsemängdsoperatoren, dvs \mathbf{L}_z ? (1p)

2. De lägst liggande tillstånden för Ba^+ är:

6s	0 cm^{-1}
5d	5000 cm^{-1}
6p	21000 cm^{-1}
7s	42000 cm^{-1}
6d	46000 cm^{-1}

- (a) Ett av tillstånden är metastabilt (kan ej återgå till grundtillståndet genom dipolstrålning). Vilket tillstånd är metastabilt och varför? (1p)
- (b) Härled övergångsregeln för atomer $\Delta m = 0, \pm 1$ för dipolstrålning. (2p)

Ledning: Sannoliketen för övergång är proportionell mot $(\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle)^2$, där ψ_i och ψ_f är initial- och finaltillstånd.

3. En diatomisk molekyl har tillsammans med elektronisk energi även vibrations- och rotationsenergi.
- (a) Skissa ett energidiagram för en diatomisk molekyl där de olika typerna av energier är representerade. (1p)
 - (b) Vilken molekylinformation finns i ett vibrations- och rotationsspektrum? (1p)
 - (c) Ange storleksordningar på de olika energibidragen och vilken typ av elektromagnetiskstrålning som används för att excitera de olika bidragen. Ange argument för storleken på energibidragen. (2p)

4. Natrium har i grundtillståndet elektronkonfigurationen $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$.

- (a) Bestäm grundtillståndsterm för Na. (1p)
- (b) Uppskatta energi och våglängd för övergången $4s-4p$ i Na givet att jonisationsenergin för atomen är 5.13908 eV och att $3s-3p$ övergången sker vid 589.36 nm. (2p)

5. Kväveoxid (NO) är en molekyl som bildas från N_2 och O_2 vid förbränning i luft.

- (a) Använd LCAO-metoden för att skissa utseendet av molekylens valensorbitaler. Valensorbitalerna utgörs av de atomära $2s$ och $2p$ orbitalerna. (2p)
- (b) Skissa ett energinivådiagram för molekylens orbitalenergi. (1p)
- (c) Ange elektronkonfigurationen för NO. Ange molekylens spintillstånd. (1p)
- (d) Förklara varför bindningen i NO är svagare än N_2 men starkare än i O_2 . (1p)

Ledning: Molekylorbitalerna för NO kan konstrueras på samma sätt som för en homonukleär diatomisk molekyl.

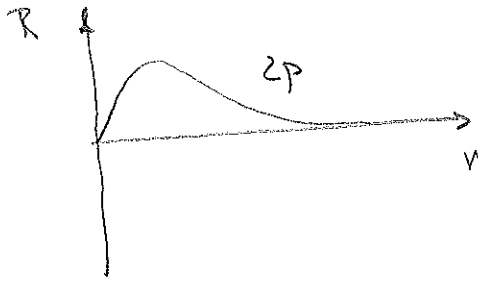
6. Två partiklar med samma massa m är placerade i en endimensionell låda (sidan a) med oändlig potential. Systemet befinner sig i grundtillståndet och partiklarna växelverkar genom potentialen $V = A\delta(x_1 - x_2)$ där A är en konstant. Använd första ordningens störningsräkning för att beräkna systemets lägsta möjliga energi i följande två fall:

- (a) Partiklarna är bosoner. (2p)
- (b) Partiklarna är fermioner i triplett-tillstånd. (2p)

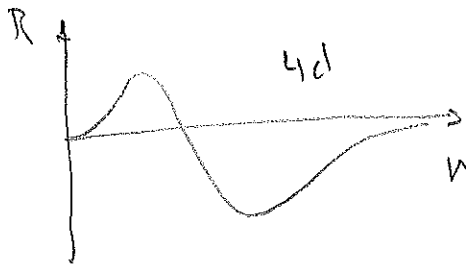
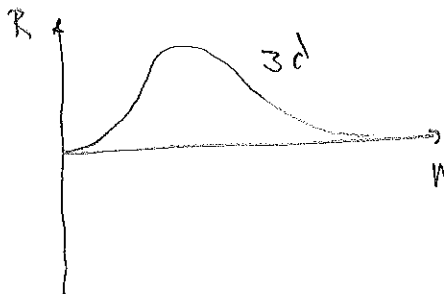
UPPGIFT 7

=

a)



$R \propto r^2$ vid små r



b)

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^2} \text{ a.u.}$$

$$P(E_0) = |\langle 211 | \psi \rangle|^2 =$$

$$= |\langle 211 | \frac{1}{\sqrt{14}} | 211 \rangle|^2 = \frac{1}{14}$$

$$P(E_3) = |\langle 32-1 | \psi \rangle|^2 =$$

$$= |\langle 32-1 | \frac{-2}{\sqrt{14}} | 32-1 \rangle|^2 = \frac{4}{14}$$

$$P(E_4) = |\langle 422 | \psi \rangle|^2 = \frac{9}{14}$$

(Vi ser att ψ är normaliserad.)

Vid mätning kan man erhålla $E_3 = -\frac{1}{8} \frac{1}{4} H_e$,
 $E_3 = -\frac{1}{8} \frac{1}{9} H_e$ eller $E_4 = -\frac{1}{8} \frac{1}{16} H_e$ med
 sannolikheter $\frac{1}{14}$, $\frac{4}{14}$ eller $\frac{9}{14}$.

c)

Väntevärdet av energin är:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{1}{14} \cdot \left(-\frac{1}{8} \frac{1}{4}\right) + \frac{4}{14} \cdot \left(-\frac{1}{8} \frac{1}{9}\right) + \frac{9}{14} \cdot \left(-\frac{1}{8} \frac{1}{16}\right) = \\ &= -0.0449 H_e = \underline{\underline{-1.22 eV}} \end{aligned}$$

d)

Möjliga värden på L^2 är $\hbar^2 l(l+1)$
 vilket ger $2\hbar^2$ eller $6\hbar^2$.

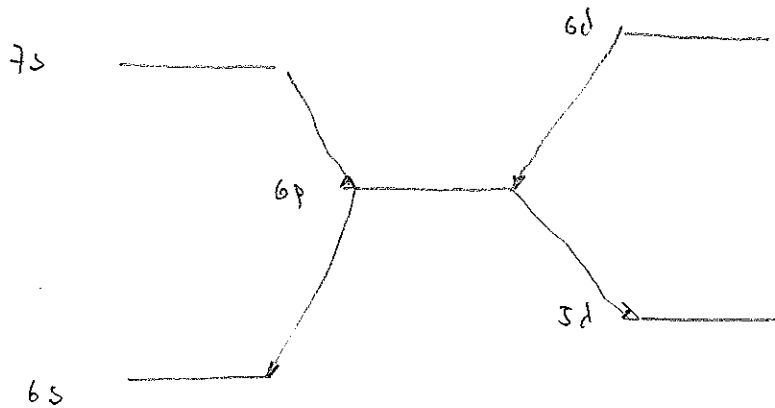
e) Möjliga värden för L_z är $m\hbar$

vilket ger \hbar , $-\hbar$ eller $2\hbar$.

UPPGIFT 2

=

a) Vi ritar ett energinivådiagram,



Vi har övergångsregel $\Delta l = \pm 1$ för elektron system. 5d är metastabilt.

b)

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = R(r) f(\theta) e^{\pm im\varphi}$$

$$x = r \sin\theta \cos\varphi = \frac{1}{2} r \sin\theta (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})$$

Betrakta övergång från ψ_i till ψ_f .

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | x | \psi_i \rangle &\propto \int_0^{2\pi} e^{-im_f\varphi} (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) e^{im_i\varphi} d\varphi = \\ &= \int_0^{2\pi} (e^{i(m_i - m_f + 1)\varphi} + e^{i(m_i - m_f - 1)\varphi}) d\varphi \end{aligned}$$

$$\langle \gamma_f | x | \gamma_i \rangle \neq 0 \quad \text{om}$$

$$m_i - m_f + 1 = 0 \Rightarrow \Delta m = 1$$

$$m_i - m_f - 1 = 0 \Rightarrow \Delta m = -1$$

För $z = r \cos \theta$ för ψ_i :

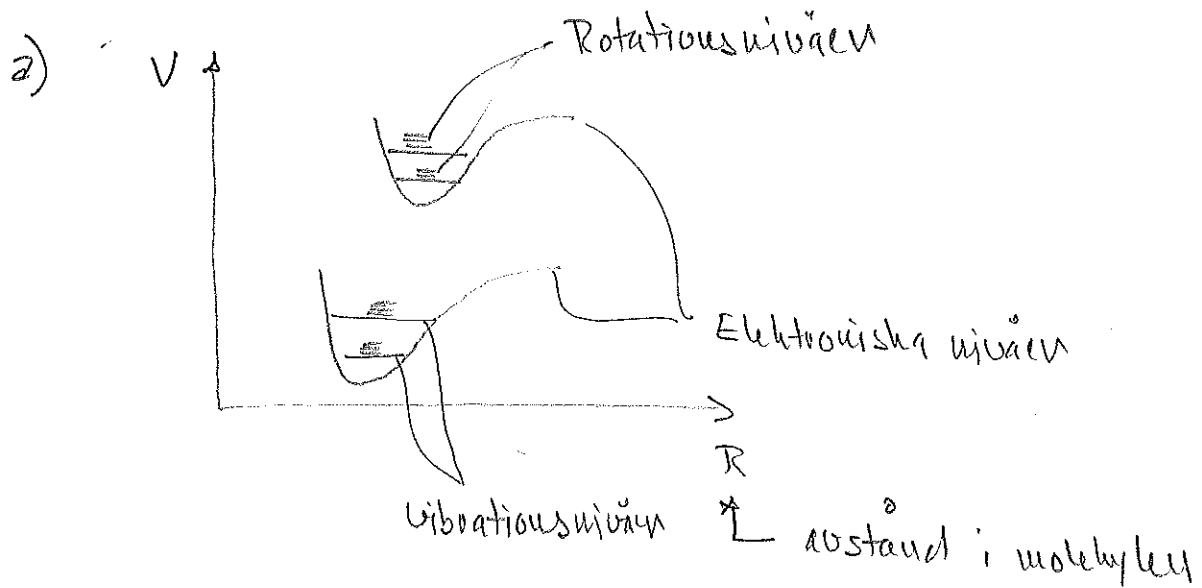
$$\langle \gamma_f | z | \gamma_i \rangle \propto \int_0^{2\pi} e^{i(m_i - m_f)\varphi} d\varphi$$

$$\langle \gamma_f | z | \gamma_i \rangle \neq 0 \quad \text{om}$$

$$m_i - m_f = 0 \Rightarrow \Delta m = 0$$

UPPGIFT 3

=



Molekyler har elektronisk, vibrations och rotationsenergi. (Samt translation, men denna är inte kvantiserad.)

- b) Vibrations spektrum
- Dissociations energi
 - Kraftkonstant

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \sqrt{\frac{2D_0 x''}{\mu}}$$

- Rotations spektrum
- Molekylavstånd
 - Tröghetsmoment

$$E_{ROT} = B K(K+1)$$

$$B = \frac{h^2}{8I}$$

c) Energi för en diatomisk molekyl kan skrivas:

$$E = E_{el} + E_{vib} + E_{rot} = \\ = E_{el} + \left(\nu + \frac{1}{2}\right) h \omega_0 + B K(K+1)$$

Storleksordningen på elektronisk energi är eV vilket vi ser från energier involverade i t.ex. H-atomer och H_e^+ .

Vibrationsenergi är ≈ 0.1 eV

Rotationsenergi är ≈ 0.01 eV

Elektroniska övergångar - optiska området

Vibrations " - IR

Rotations " - Mikrovågor.

UPPGIFT 4

2)

Elektronkonfiguration: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Term ges är $2s+1 L_J$

$$S = \frac{1}{2} \Rightarrow 2s+1 = 2$$

$L = 0$ (elektron i s-tillstånd)

$$J = |L+S| \dots |L-S| = 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

Termen är $2s_{1/2}$

b) Energien ges approximativt av:

$$E_{n,l} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(n-\delta_l)^2}$$

↑
L väntdefekt, beror på l.

Ionisationsenergin är $5,13908 \text{ eV}$

$$E_{3,0} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(3-\delta_0)^2} \Rightarrow \delta_0 = 1,3729$$

$$E_{31} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(3 - \delta_p)^2}$$

$$E_{3p} - E_{30} = 2,10371 \text{ eV} \quad (589,36 \text{ nm})$$

$$E_{3p} - E_{30} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(3 - \delta_p)^2} + \frac{1}{2} \frac{1}{(3 - \delta_s)^2}$$

$$\Rightarrow \delta_p = 0,8846$$

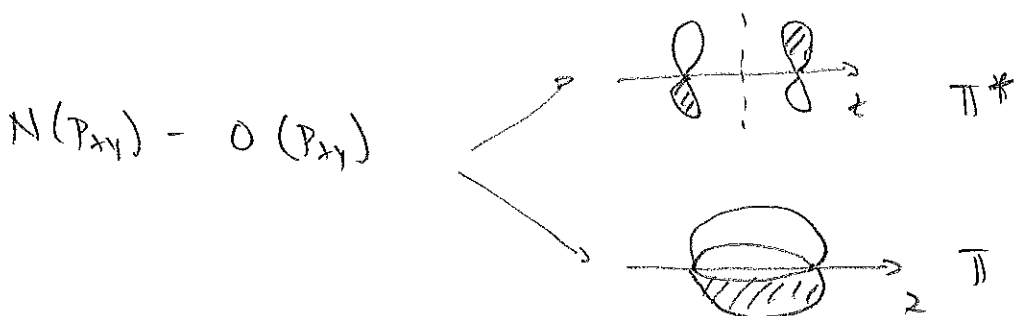
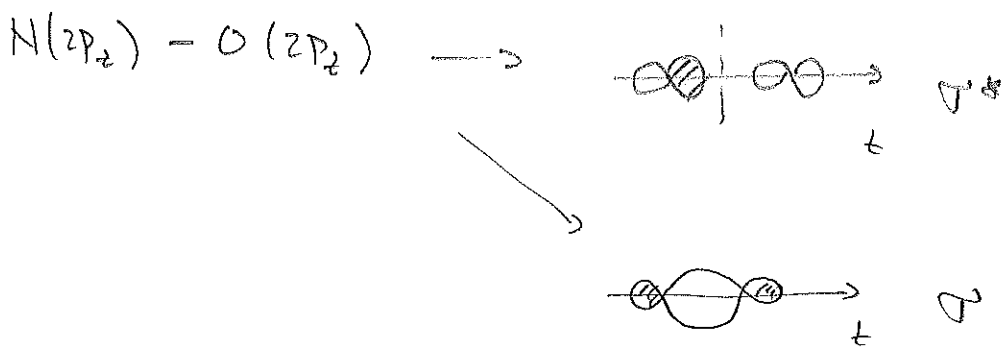
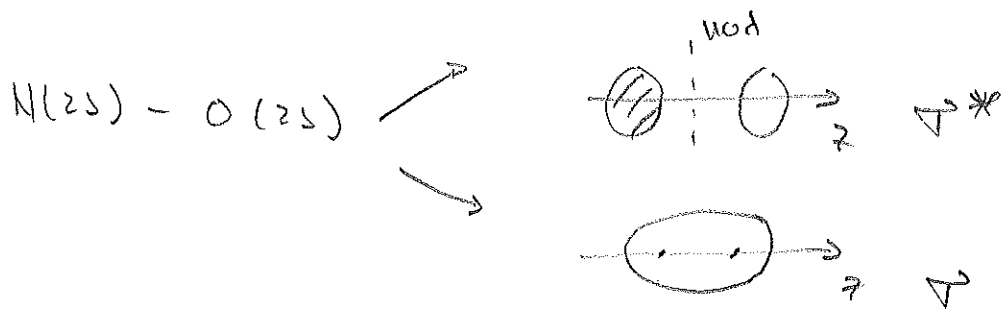
$$E_{4p} - E_{3s} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(4 - \delta_p)^2} + \frac{1}{2} \frac{1}{(4 - \delta_s)^2}$$

$$= 0,5701 \text{ eV} \quad \text{vilket motsvarar } 2175 \text{ nm}$$

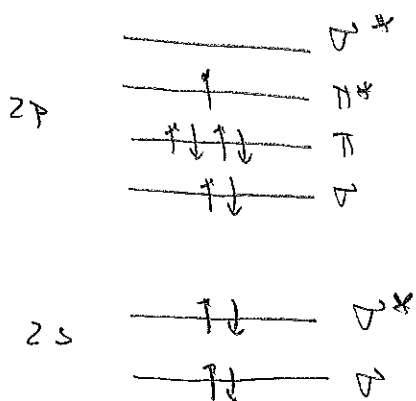
UPPGIFT 5

- a) N har elektronkonf. $1s^2 2s^2 2p^3$
 O har elektronkonf. $1s^2 2s^2 2p^4$

Vi antar att orbitalerna ser ut som för de homonukleära molekylerna, vilket stämmer med skillnaden att de är lite polariserade.

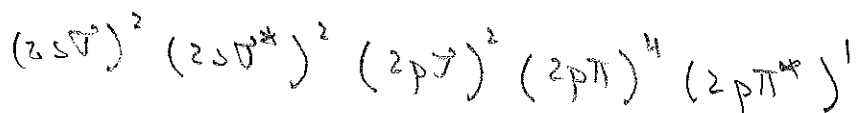


b)



NO har 11 valens-
elektroner

c)



Hokkylen är dublett $2s^1 + 1 = 2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = \underline{\underline{2}}$

d)

N_2	kar	10	valenselektroner
NO	kar	11	"
O_2	kar	12	"

$$BO = \frac{1}{2} (\# b \text{ i bindande orb.} - \# a \text{ i antib. orb.})$$

$$BO(N_2) = \frac{1}{2} (8 - 2) = 3$$

$$BO(NO) = \frac{1}{2} (8 - 3) = \frac{5}{2} = 2.5$$

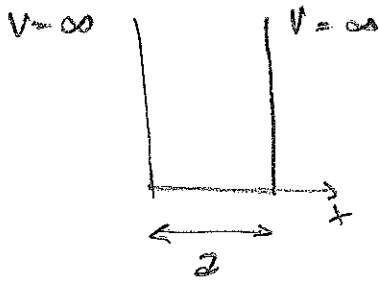
$$BO(O_2) = \frac{1}{2} (8 - 4) = 2$$

För N_2 har vi ingen population i π^*

För O_2 population i π^* med två elektroner,

UPPGIFT 6

=



$$E_n = \frac{\frac{2^2 \pi^2 \hbar^2}{2M a^2}}$$

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

a) Partiklarna "är bosoner", den totala vågfunktionen skall vara symmetrisk. Båge partiklarna befinner sig i $n=1$. Den ostörda energin är således:

$$E = 2 \cdot \frac{\frac{2^2 \pi^2 \hbar^2}{2M a^2}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{M a^2}$$

Vågfunktionen ges av:

$$\bar{\Psi}(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \psi_1(x_2)$$

$$\bar{\Psi}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{\pi x_2}{a}$$

Störningen ges av $V = A \delta(x_1 - x_2)$,

$$\Delta E = \langle \Psi | V | \Psi \rangle$$

$$\Delta E = \int_0^a \int_0^a \frac{4}{a^2} \sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{\pi x_2}{a} A \delta(x_1 - x_2) \sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{\pi x_2}{a} dx_1 dx_2 =$$

$$= \frac{4}{a^2} A \int_0^a \sin^4 \frac{\pi x_1}{a} dx_1 = \frac{4}{a^2} A \frac{3}{8} a = \frac{3}{2} \frac{A}{a}$$

Energin är således till första ordningen

$$E^{(1)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m a^2} + \frac{3}{2} \frac{A}{a}$$

b) För fermioner skall totala vågfunktionen vara antisymmetrisk.

$$\Psi = \psi(x_1, x_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2)$$

\uparrow rumdel \uparrow spinndel

Triplet betyder att χ är symmetrisk. Således måste ψ vara antisymmetrisk.

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) - \psi_1(x_2) \psi_2(x_1)$$

Systemet måste vara exciterat eftersom
 elektronerna har parallella spinn; $n=1$ och $n=2$
 för de två elektronvägfunktionerna.

$$\begin{aligned} \Delta E &= \int_0^a \int_0^a \frac{4}{a^2} \left(\sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{2\pi x_2}{a} - \sin \frac{\pi x_2}{a} \sin \frac{2\pi x_1}{a} \right) A \delta(x_1 - x_2) \\ &\quad \left(\sin \frac{\pi x_1}{a} \sin \frac{2\pi x_2}{a} - \sin \frac{\pi x_2}{a} \sin \frac{2\pi x_1}{a} \right) dx_1 dx_2 = \\ &= \int_0^a \frac{4A}{a^2} \cdot 0 dx_1 = 0 \end{aligned}$$

Till första ordning finns ingen korrektion.

$$E^{(1)} = E^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m a^2} (1 + 4) = \frac{5}{8} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m a^2}$$