Chalmers tekniska högskola
Fysik
Henrik Grönbeck

Dugga Tillämpad kvantfysik (TIF100)

Tid: 11 april 2017
Examinator: Henrik Grönbeck, 070-2862459
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 tillståndet med kvanttal $n = 3$, $l = 0$.

   (a) Ange vågfunktionen för atomen. (1p)

   (b) Skissa utseendet på vågfunktionen för tillståndet. (1p)

   (c) Bestäm möjliga värden på det utsända ljusets frekvens om atomen emitterar en foton. (2p)

2. Förklara följande:

   (a) Born-Oppenheimer approximationen. (1p)

   (b) MO-LCAO metoden. (1p)

   (c) Bindande och antibindande orbital. (2p)

   (d) Varför är Li_2 en stabil molekyl medan He_2 inte är stabil? (2p)

3. Betrakta en tvådimensionell harmonisk oscillator med potentialen

$$V(x, y) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}ky^2$$

   där k är en reell konstant.

   (a) Bestäm energiegenvärdena för en partikel i potentialen. Lösningarna till den endimensionella harmoniska oscillatorn kan anses kända. (1p)

   (b) Tre bosoner med massa m placeras i potentialen. Vad blir grundtillståndsenergin? (Försumma växelverkan mellan partiklarna.) (1p)

   (c) Tre fermioner med spinn 1/2 placeras i potentialen. Vad blir grundtillståndsenergin? (Försumma växelverkan mellan partiklarna.) (1p)

   (d) Skriv ner hur vågfunktionen för tillståndet ser ut för fermionerna i c)-uppgiften. (2p)

4. Variationsprincipen säger att

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0$$

där E_0 är grundtillståndsenergin, $\hat{H}$ är Hamiltonoperatorn och ψ är en godtycklig normerad vågfunktion.

(a) Bevisa variationsprincipen. (2p)

(b) Betrakta en partikel med massan m som rör sig i den endimensionella potentialen:

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x < 0 \\ V(x) &= \frac{x}{a} V_0 & 0 \leq x \leq a \\ V(x) &= \infty & x > a \end{aligned}$$

där a och V_0 är positiva, reella tal. Uppskatta med störningsräkning grundtillståndets energi. (2p)

(c) Uppskatta med störningsräkning energin hos första exciterade tillståndet för partikeln i b-uppgiften. (1p)

5. Elektronkonfigurationen för kalium är [Ar]4s^1 och jonisationsenergin är uppmätt till 35009.78 cm^{-1}. Tabellen nedan anger excitationsenergier för de tre lägst liggande exciterade elektronkonfigurationerna. Med excitationsenergi menas energin för tillståndet i förhållande till grundtillståndet.

(a) Förklara varför 4p- och 5s-elektroner har lägre energi än 3d-elektroner. (Bortse från spinn-ban koppling.) (1p)

(b) Beräkna med hjälp av angiven data excitationsenergin för 5p $^2P_{3/2}$. (3p)

Elektronkonfiguration	LS-term	Excitationsenergi (cm^{-1})
4p	$^2P_{1/2}$	12985.17
4p	$^2P_{3/2}$	13042.88
5s	$^2S_{1/2}$	21026.55
3d	$^2D_{5/2}$	21534.68
3d	$^2D_{3/2}$	21536.99

1a) Vågfunktionen för H med $n=3$, $l=0$ är:

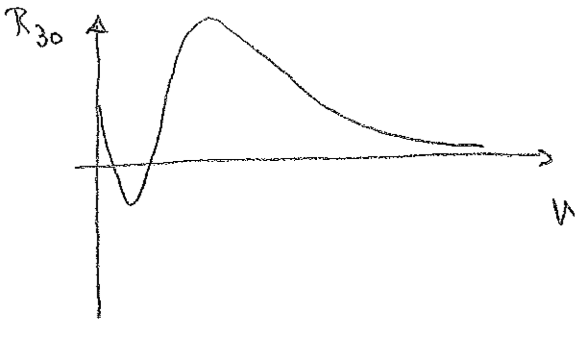
$$\psi_{300} = R_{30} Y_{00}$$

$$R_{30} = \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} (6 - 6\rho + \rho^2) e^{-\rho/2}$$

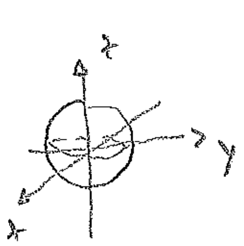
$$\rho = \frac{2r}{3a_0}$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

b) Radiella delen:

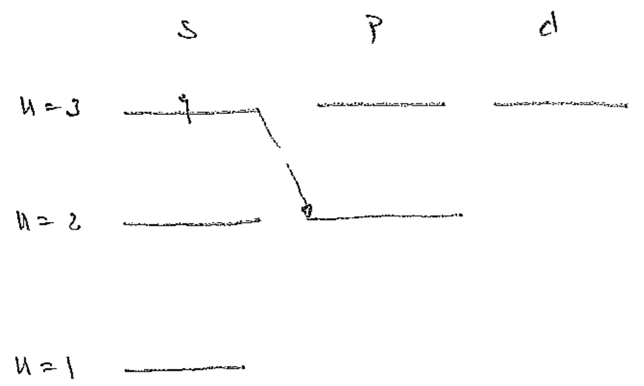


Klotyt delen:



(sfäriskt symmetrisk)

c)



(dipolstråln.)

Om vi antar dipolstrålning är $3s \to 2p$ möjlig.

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} \qquad E_1 = -13.6 \text{ eV}$$

$$\Delta E = E_3 - E_2 = \left(\frac{1}{9} - \frac{1}{4}\right) E_1$$

$$\nu = \frac{\Delta E}{h}$$

$$\nu_{32} = \frac{5}{36} \, 13.6 \, \frac{1}{h} = \frac{5}{36} \, \frac{13.6 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}{6.62 \cdot 10^{-34}} = 4.6 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$$

Om fotonen sänds ut med annan strålning än dipolstrålning är dipolstrålning möjlig

$$\nu_{31} = 2.9 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$$

2 a) Born-Oppenheimer approximationen

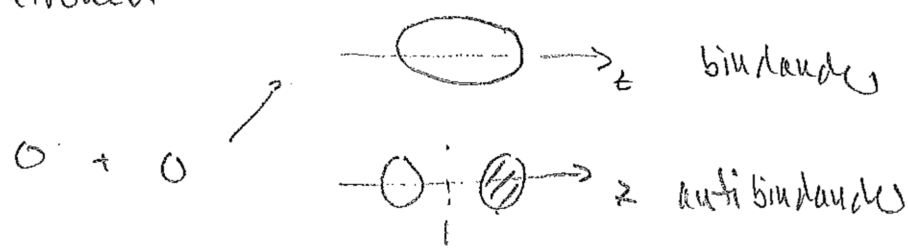
innebär att den totala vågfunktionen kan separeras i elektronisk och kärn del. Anledningen till att detta fungerar är att elektronmassan << kärnmassan vilket gör att elektronerna snabbt kan ändra sig då kärnans position ändras.

b) MO-LCAO innebär att totala ψ för ett system med många atomer skrivs som linjärkombination av atomernas ψ.

$$\psi_{MO} = \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i$$

total vågf. — atomär vågf.

c) Bindande orbital har laddning mellan atomerna medan en antibindande orbital har en nod. För s-elektronen

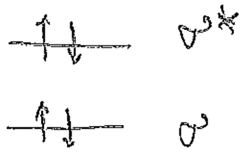


d) Elektronkonfigurationen för He och Li:

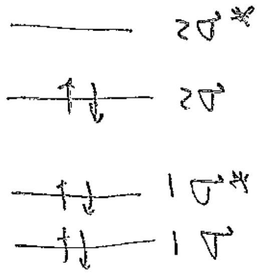
He: $1s^2$

Li: $1s^2\,2s^1$

He_2



Li_2



He_2 har lika många elektroner i bindande som antibindande orbitalen. Detta ger noll nettobindning

Li_2 har två elektroner i bindande orbital som netto:

$$BO = \frac{1}{2}(\#\text{bind} - \#\text{antib.}) = \frac{1}{2}\,2 = 1$$

3 a)

$$V(x,y) = \frac{1}{2} k x^2 + \frac{1}{2} k y^2$$

Den allmänna lösningen är:

$$\psi(x,y) = \varphi(x)\,\phi(y)$$

$\varphi(x)$ och $\phi(y)$ är lösningar till det endimensionella fallet.

$$E_{n_x} = (n_x + \tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$E_{n_y} = (n_y + \tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$n_x = 0, 1 \dots$

$n_y = 0, 1 \dots$

$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

massan för partikeln.

Den totala energin ges av:

$$E_{n_x n_y} = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega$$

b) Tre bosoner kan alla vara i grundtillståndet

$$E_0 = 3E_{00} = 3\hbar\omega$$

c) För två fermioner kan två vara i grundtillståndet medan den tredje skall vara i första exciterade tillståndet. Det första exciterade är $n_x = 1, n_y = 0$ eller $n_x = 0, n_y = 1$.

$$E_0 = 2E_{00} + E_{10} =$$

$$= 2\hbar\omega + 2\hbar\omega = 4\hbar\omega$$

d) Beteckna spinnvågf α och β.
Beteckna rumsvågf för första tillståndet ψ_{00} och för andra ψ_{10}. (Detta kan även vara ψ_{01}.)

Elektron 1 : $\varphi_\alpha = \psi_{00}\alpha$

2 $\varphi_\beta = \psi_{00}\beta$

3 $\varphi_\gamma = \psi_{10}\alpha$ (eller $\psi_{10}\beta$)

Den totala vågf. måste vara antisymmetrisk map utbyte av koordinater. Vi skriver denna genom Slater determinanten :

$$\Psi = N \begin{vmatrix} \varphi_\alpha(q_1) & \varphi_\beta(q_1) & \varphi_\gamma(q_1) \\ \varphi_\alpha(q_2) & \varphi_\beta(q_2) & \varphi_\gamma(q_2) \\ \varphi_\alpha(q_3) & \varphi_\beta(q_3) & \varphi_\gamma(q_3) \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned} = N \big(& \varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_2)\varphi_\gamma(q_3) + \varphi_\beta(q_1)\varphi_\gamma(q_2)\varphi_\alpha(q_3) + \\ & \varphi_\gamma(q_1)\varphi_\alpha(q_2)\varphi_\beta(q_3) - \varphi_\alpha(q_1)\varphi_\beta(q_3)\varphi_\gamma(q_2) - \\ & \varphi_\alpha(q_2)\varphi_\beta(q_1)\varphi_\gamma(q_3) - \varphi_\alpha(q_3)\varphi_\beta(q_2)\varphi_\gamma(q_1) \big) \end{aligned}$$

4z)

Antag att egenfunktionerna till H är ψ_n.
För dessa gäller:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$$

Egenfunktionerna utgör ett fullständigt basset. Vi kan således skriva:

$$\phi = \sum_n a_n \psi_n \qquad a_n = \int \psi_n^* \phi \, dv$$

Försöksvågfunktion

Vi beräknar energin med försöksvågfunktionen,

$$\langle \phi | H | \phi \rangle = \int \phi^* H \phi \, dv = \int \phi^* H \left(\sum_n a_n \psi_n \right) dv =$$

$$= \sum_n a_n \int \phi^* H \psi_n \, dv = \sum_n a_n E_n \underbrace{\int \phi^* \psi_n \, dv}_{a^*} =$$

$$= \sum_n |a_n|^2 E_n$$

Från denna bryter vi ut grundtillståndsenergin.

$$\langle \phi | H | \phi \rangle = \sum_n (E_n - E_0) |a_n|^2 + E_0 \sum_n |a_n|^2$$

Vi beräknar normeringen för ϕ.

$$\langle \phi | \phi \rangle = \int \left(\sum_n a_n \psi_n \right)^* \left(\sum_m a_m \psi_m \right) dv = \sum_n |a_n|^2$$

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$$

Vi har således för energin:

$$E = \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = E_0 + \frac{\sum_n (E_n - E_0) |a_n|^2}{\sum_n |a_n|^2} \geq E_0$$

Detta visar att vilken ϕ vi än väljer så ger den en energi som är högre än för ψ. (om nu inte $\phi = \psi$.)

4b)

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$V_x = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ \frac{x}{a} V_0 & x \le x \le a \\ \infty & x > a \end{cases}$$

Betrakta fallet med

$$V_x = \begin{cases} \infty & 0 < 0 \\ 0 & x \le x \le a \\ \infty & x > a \end{cases}$$

och låt störningen vara $\frac{x}{a} V_0$.

För det ostörda fallet är

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

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

Antag första ordningens störningsräkning.

$$\Delta E = \langle \psi_1 | H' | \psi_1 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a V_0 \frac{x}{a} \sin^2 \frac{\pi x}{a} \, dx =$$

$$= \frac{1}{2} V_0$$

Energin för grundtillståndet blir:

$$E = E_1 + \Delta E =$$

$$= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{V_0}{2}$$

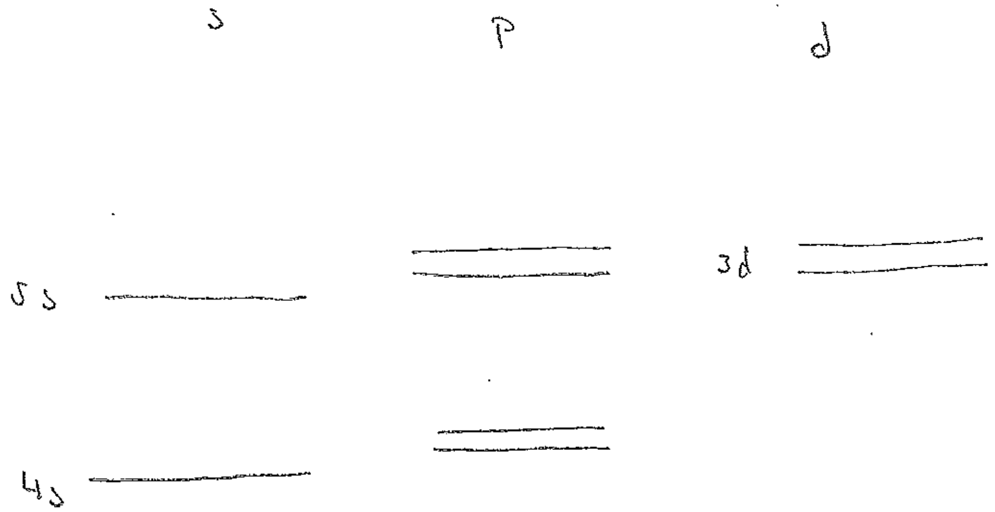
c) På samma sätt som i b:

$$\Delta E = \langle \psi_2 | H' | \psi_2 \rangle = \frac{V_0}{2}$$

$$E = E_2 + \Delta E = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{V_0}{2} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2} + \frac{V_0}{2}$$

UPPGIFT 5

b



		cm^{-1}	eV
4p	$^2P_{1/2}$	12985.17	1,610
4p	$^2P_{3/2}$	13042.88	1.6171
5s	$^2S_{1/2}$	21026.55	2,607
3d	$^2D_{5/2}$	21534,68	2,670
3d	$^2D_{3/2}$	21536.99	2,6702

$$E = -13.606 \frac{1}{(n-\delta_l)^2}$$

IP = 35009.78 cm^{-1}

$$E(4s) = -13.606 \frac{1}{(4-\delta_s)^2} = -4,3407$$

$$\delta_s = 2,2295$$

För 4p excitationsenergin:

$$\frac{1.610 + 1.6171}{2} = 4.3407 - 13.606 \frac{1}{(4-\delta_p)^2}$$

$$\Rightarrow \delta_p = 1.762$$

$$E(5p) = -13.606 \frac{1}{(5-1.762)^2} = -1.2979$$

Excitationsenergin är $E(5p) - E(4s) = \underline{\underline{3.0428\,eV}}$

1 cm^{-1} är energin 24542 cm^{-1}

IIc

4p och 5s har lägre energi eftersom dessa tillstånd ligger närmare kärnan.