Chalmers tekniska högskola
Teknisk fysik
Henrik Grönbeck

Dugga Tillämpad kvantfysik (TIF100)

Tid: 25 april 2019
Examinator: Henrik Grönbeck, 070-2862459
Hjälpmedel: Physics Handbook, Beta Mathematics Handbook, Chalmers godkänd räknedosa
Betygsgränser (inkluderat bonuspoäng): Betyg 3: 17 p, betyg 4: 25 p, betyg 5: 31 p.

---

1. En partikel befinner sig i ett stationärt tillstånd i en sfärisk potential $V(r)$. Vågfunktionen för det stationära tillståndet ges av:

$$\psi(r) = \psi(x, y, z) = Nxye^{-ar}$$

N och a är konstanter.

(a) Det görs en mätning av L^2 och L_z på systemet. Ange vilka värden av L^2 och L_z som är möjliga. (2p)

(b) Beräkna väntevärdena $< L^2 >$ och $< L_z >$. (1p)

2. Variationsmetoden är en viktig metod för approximativa beräkningar inom kvantfysik.

(a) Hamiltonianan för ett system ges av H och grundtillståndsvågfunktionen av ψ_{GS}. Låt ψ vara en uppskattning av vågfunktionen för systemets första exciterade tillstånd. Det gäller att $< \psi|\psi_{GS} >= 0$. Visa att $< \psi|H|\psi >$ är en övre gräns till energin för det första exciterade tillståndet. (2p)

(b) Betrakta ett system där en partikel rör sig i en endimensionell potential $V(x) = a|x|$ där a är en positiv konstant. Uppskatta grundtillståndsenergin med variationsmetoden genom att ansätta en gaussisk försöksvågfunktion:

$$\psi(x) = Ae^{-bx^2}$$

A är normeringskonstant och b en parameter. (2p)

3. Grundämnena inordnas i det periodiska systemet.

(a) Ge en kvantmekanisk förklaring till det periodiska systemet. (2p)

(b) Ange orsaken till antalet kolumner. (1p)

(c) Beskriv och förklara hur jonisationspotentialen ändras i rad 4. (1p)

4. De lägst liggande tillstånden i enkeljoniserat kalcium (Ca^+) är (hänsyn är ej tagit till spinn-ban koppling):

4s	0 cm^{-1}
3d	1400 cm^{-1}
4p	25000 cm^{-1}
5s	52000 cm^{-1}
4d	57000 cm^{-1}

(a) Rita ett schemtatisk energinivådiagram.

(b) Ett av tillstånden är metastabilt (kan ej återgå till grundtillståndet genom dipolstrålning). Vilket tillstånd är metastabilt och varför? (1p)

(c) Ange hur 4s, 3d och 4p splittras om hänsyn tas till spinn-ban koppling. (1p)

(d) Ange hur 4s, 3d och 4p splittras i ett svagt magnetfält där hänsyn tas till spinn-ban koppling. (1p)

5. 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. (1p)

(d) Klor har två isotoper, Cl^{35} och Cl^{37}. Visa att vibrationsspektrat för HCl har tätt liggande dubletter. Beräkna separationen i dubletten uttryckt i molekylens vibrationsfrekvens. (2p)

6. Betrakta två icke växelverkande partiklar i en endimensionell lådpotential med oändliga väggar.

(a) Teckna hamiltonianen för systemet. (1p)

(b) Teckna vågfunktionen och beräkna energin för systemet när det är i grundtillståndet, första och andra exciterade tillståndet om partiklarna är bosoner. (2p)

(c) Upprepa uppgift (b) i fallet då partiklarna är fermioner. (2p)

UPPGIFT 1

$$\psi(r) = N x y e^{-ar}$$

Vi använder sfäriska koordinater:

$$x = r \sin\theta \cos\varphi$$
$$y = r \sin\theta \sin\varphi$$
$$z = r \cos\theta$$

för att skriva $\psi(r)$ på formen $R(r) Y_{lm}(\theta,\varphi)$.

$$\psi = N x y e^{-ar} = N r^2 \sin^2\theta \cos\varphi \sin\varphi \, e^{-ar} =$$

$$= \frac{1}{2} N r^2 \sin^2\theta \sin 2\varphi \, e^{-ar} =$$

$$= \frac{1}{2} N r^2 \sin^2\theta \frac{1}{2i} (e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}) e^{-ar} =$$

$$= N' \left(Y_{22}(\theta,\varphi) - Y_{2-2}(\theta,\varphi) \right) R_{32}(r) .$$

a) Möjliga värden på l är 2 och möjliga värden på m är ± 2.

Mätning av L^2 ger $l(l+1)\hbar^2 = 6\hbar^2$

Mätning av L_z ger $m\hbar = \pm 2\hbar$

b) $\langle L^2 \rangle = 6\hbar^2$

$\langle L_z \rangle = \frac{1}{2} \cdot 2\hbar + \frac{1}{2}(-2)\hbar = 0$

samma sannolikhet för $m = 2$ och
$m = -2$.

UPPGIFT 2

2) $\psi_{us} = \psi_1$ är grundtillstånd

ψ är ansatt vågfunktion för första exciterade tillståndet,

$\langle \psi | \psi_1 \rangle = 0$

egenfunktioner

Vi skriver $\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n$

$$\langle \psi | \psi_1 \rangle = \langle \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n | \psi_1 \rangle = c_1 \Rightarrow c_1 = 0$$

$\langle \psi | \psi_1 \rangle = 0$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \sum_{n=2}^{\infty} c_n \psi_n | H | \sum_{m=2}^{\infty} c_m \psi_m \rangle =$$

$$= \sum_{n=2}^{\infty} |c_n|^2 E_n \geq E_2 \sum_{n=2}^{\infty} |c_n|^2$$

$E_n \geq E_2$

första exciterade

b)

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

Ansatt $\psi(x) = A e^{-bx^2}$

Vi beräknar A

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx = A^2 2 \int_0^{\infty} e^{-2bx^2} = A^2 2 \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2b}}$$

$$A^2 = \sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

Potentiell energi:

$$\langle \psi | a|x| | \psi \rangle = 2a A^2 \int_0^{\infty} x e^{-2bx^2} dx =$$

$$= \frac{a A^2}{2b} = \frac{a}{2b}\sqrt{\frac{2b}{\pi}} = \frac{a}{\sqrt{2b\pi}}$$

Kinetisk energi:

$$\langle \psi | -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} | \psi \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{a}{\sqrt{2b\pi}}$$

Derivera map b

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial b} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{b^{3/2}}$$

För $\dfrac{\partial \langle H \rangle}{\partial b} = 0 \Rightarrow b_0 = \left(\dfrac{m a}{\sqrt{2\pi}\hbar^2} \right)^{2/3}$

En uppskattning av grundtillståndsenergin är därför

$$\langle H(b_0) \rangle = \frac{3}{2} \left(\frac{a^2 \hbar^2}{2\pi m} \right)^{1/3}$$

UPPGIFT 3

a)

Det periodiska systemet kan förstås med hjälp av centralfältsapproximationen och Pauliprincipen. Dessa två ger uppbyggnadsprincipen.

Centralfältsapproximationen: Vi betraktar alla elektroner 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 vätets lösningar.

Pauliprincipen: Varje fermion har unik uppsättning kvanttal.

Uppbyggnadsprincipen säger att vi fyller på elektroner enligt:

$$1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2 \ldots$$

b)

Antalet kolumner är 18 eftersom

s-tillstånd tar 2 elektronen
p-tillstånd tar 6 elektronen
d-tillstånd tar 10 elektronen

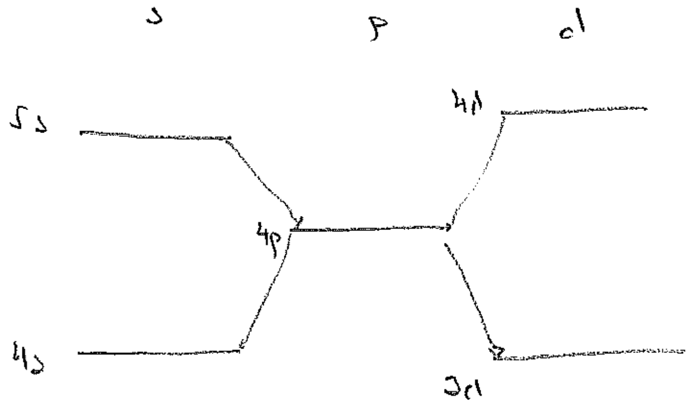
I de första två kolumnerna fylls s, därefter p; detta gäller rad 2 och 3.

För rad 4 fylls ns, sedan (n-1)d och sist np.

c) Jonisationspotentialen är lägst för K och högst för Kr. Skärmningen är högst för K.

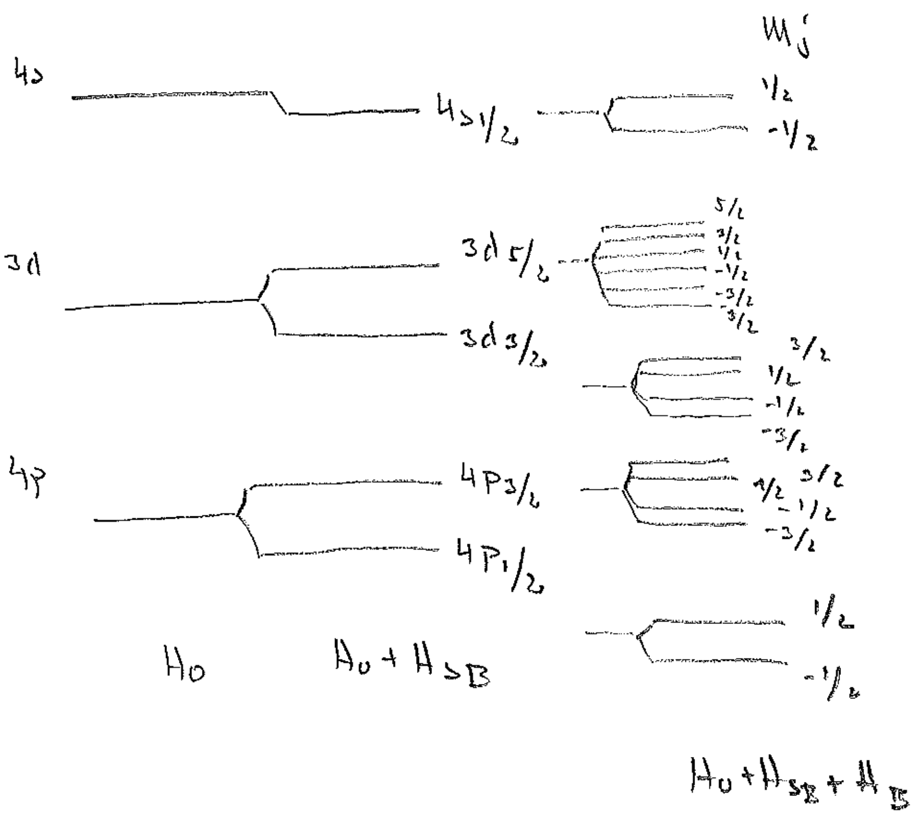
UPPGIFT 4

a)



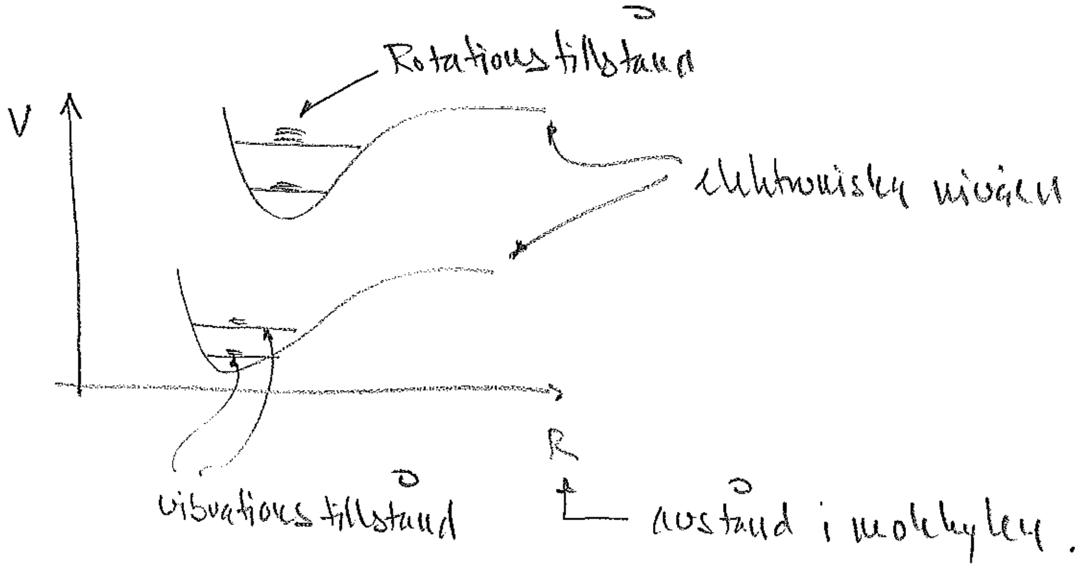
b) 3d är metastabilt eftersom $\Delta l = \pm 1$ för dipolstrålning.

c)



UPPGIFT 5

a)



Molekylen har Elektronisk energi
Vibrations energi
Rotations energi

b) Vibrationsspektrum :
- Dissociationsenergi
- Kraftkonstant

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \sqrt{\frac{2D_0\alpha^2}{\mu}}$$

Rotationsspektrum :
- Molekylavstånd
- Tröghetsmoment

$$E_{Rot} = B\,K(K+1)$$

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

c) Energin för en diatomisk molekyl kan skrivas:

$$E = E_{el} + E_{VIB} + E_{ROT}$$

$E_{el} \sim 1\,eV$ – optiska området

$E_{VIB} \sim 0.1\,eV$ – IR

$E_{ROT} \sim 0.01\,eV$ – Mikrovågor.

d) HCl med Cl^{35} och Cl^{37}

$E = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega = (n+\frac{1}{2})\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}$ ← reducerad massa

Energin för en vibrationsövergång ΔE:

$\Delta E = \hbar\omega$

$\Delta E = h\nu$ ← foton för övergången $(\nu = \frac{\omega}{2\pi})$

Skillnad för frekvensen med Cl^{35} och Cl^{37}:

$$\Delta\nu = \frac{1}{h}\frac{h}{2\pi}\sqrt{k}\left(\frac{1}{\sqrt{\mu}} - \frac{1}{\sqrt{\mu+\Delta\mu}}\right)$$

skillnad i reducerad massa

$$\Delta\nu = \frac{\sqrt{k}}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{\mu}}\left(1 - \frac{1}{(1+\frac{\Delta\mu}{\mu})^{1/2}}\right) =$$

$$= \nu\left(1 - \frac{1}{(1+\frac{\Delta\mu}{\mu})^{1/2}}\right) \approx \frac{1}{2}\nu\frac{\Delta\mu}{\mu}$$

Taylor utv.

$$m_H = 1$$

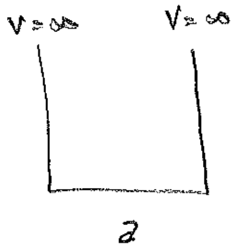
$$m_{Cl^{35}} = 35$$

$$m_{Cl^{37}} = 37$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \Rightarrow \Delta\mu = 0.0015$$

$$\Delta\nu = \frac{1}{2}\,\nu\,\frac{\Delta\mu}{\mu} \approx \underline{\underline{7.5 \cdot 10^{-4}\,\nu}}$$

UPPGIFT 6

a) 

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \qquad n = 1, 2 \dots$$

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

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx_1^2} + \frac{d^2}{dx_2^2}\right)$$; x_1, x_2 är koordinater för de två partiklarna.

b) Bosoner (Vågfunktionen skall vara symmetrisk)

$$\psi_{11}(x_1x_2) = \frac{2}{a}\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a}$$

$$\psi_{12}(x_1x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a}\left(\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{2\pi x_2}{a} + \sin\frac{2\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a}\right)$$

$$\psi_{22}(x_1x_2) = \frac{2}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x_2}{a}$$

$$E_{n_1n_2} = \frac{n_1^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + \frac{n_2^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = K(n_1^2 + n_2^2)$$

$E_{11} = 2K$

$E_{12} = 5K$

$E_{22} = 8K$

c) Fermioner (Pauliprincip)

Vi bortser från spinn och tecknar rumsvåg-funktionerna. Denna skall vara antisymmetrisk

$$\psi_{12}(x_1,x_2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\sin\frac{\pi x_1}{2}\sin\frac{2\pi x_2}{2} - \sin\frac{2\pi x_1}{2}\sin\frac{\pi x_2}{2}\right)$$

$$\psi_{13}(x_1,x_2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\sin\frac{\pi x_1}{2}\sin\frac{3\pi x_2}{2} - \sin\frac{3\pi x_1}{2}\sin\frac{\pi x_2}{2}\right)$$

$$\psi_{23}(x_1,x_2) = \frac{\sqrt{2}}{2}\left(\sin\frac{2\pi x_1}{2}\sin\frac{3\pi x_2}{2} - \sin\frac{3\pi x_1}{2}\sin\frac{2\pi x}{2}\right)$$

$$E_{12} = K(1+4) = 5K$$

$$E_{13} = K(1+9) = 10K$$

$$E_{23} = K(4+9) = 13K$$