

Dugga Tillämpad kvantfysik (TIF100)

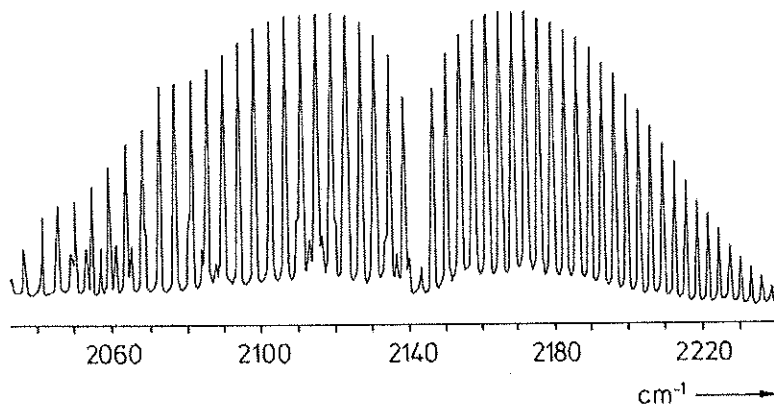
Tid: 23 augusti 2019

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. Betrakta Be^{3+} som är en jon med bara en elektron.
 - (a) Skissa ett energinivådiagram för huvudkvanttalerna $n=1, 2$ och 3 . (1p)
 - (b) Indikera i energinivådiagrammet möjliga dipolövergångar till grundtillståndet. (1p)
 - (c) Beräkna energiskillnaden i elektronvolt (eV) mellan grundtillståndet och första exciterade tillståndet. (1p)
 - (d) Skissa utseendet på vågfunktionen för grundtillståndet och första exciterade tillståndet. Både radialdel och vinkeldel skall skissas. (1p)

2. Figuren visar ett vibrations-rotations spektrum för CO molekylen.



- (a) Förklara spektrumets utseende. (2p)
- (b) Bestäm från figuren vibrationsfrekvensen för CO. (1p)
- (c) Beräkna med hjälp av data från figuren avståndet mellan kol och syre i molekylen. (2p)

3. Tritium ${}^3\text{H}$ i grundtillståndet sönderfaller genom beta-sönderfall till joniserat helium ${}^3\text{He}^+$.

- (a) Beräkna sannolikheten att heliumjonen efter sönderfallet är i 1s-tillstånd. (2p)
- (b) Beräkna sannolikheten att heliumjonen efter sönderfallet är i 2s-tillstånd. (1p)
- (c) Beräkna sannolikheten att heliumjonen efter sönderfallet är i 2p-tillstånd. (1p)

4. 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 på molekylens valensorbitaler. Valensorbitalerna utgörs av de atomära 2s och 2p orbitalerna. (2p)
- (b) Skissa ett energinivådiagram för molekylens orbitalenergier. (1p)
- (c) Ange elektronkonfigurationen för NO. Ange molekylens spinttillstånd. (1p)

Ledning: Antag att molekylorbitalerna för NO kan konstrueras på samma sätt som för en homonukleär diatomisk molekyl.

5. En partikel befinner sig i en endimensionell potentialbrunn (längd L) med oändliga väggar. Brunnen har en svag störning så att den effektiva potentialen är:

$$V(x) = \infty \quad (x < 0, x > L) \quad (1)$$

$$V(x) = -b \quad (0 < x < L/2) \quad (2)$$

$$V(x) = 0 \quad (L/2 < x < L) \quad (3)$$

Använd första ordningens störningsräkning för att uppskatta grundtillståndets energi. (3p)

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:

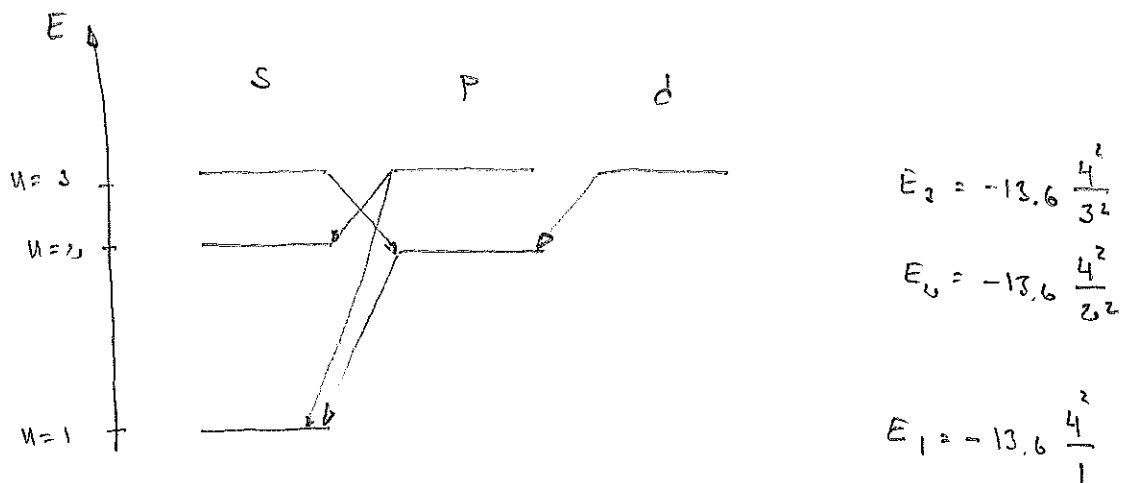
- (a) Partiklarna är bosoner. (2p)
- (b) Partiklarna är fermioner i triplett-tillstånd. (2p)

UPPGIFT 7
=

2) Vi betraktar B^{3+} som har en elektron. Energivärden ges av:

$$E_n = -13.6 \frac{Z^2}{n^2}$$

där vi bortser från relativistiska effekter



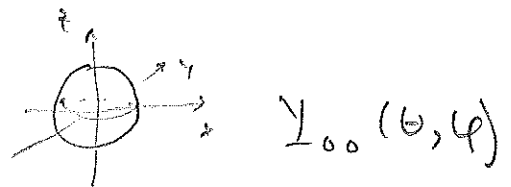
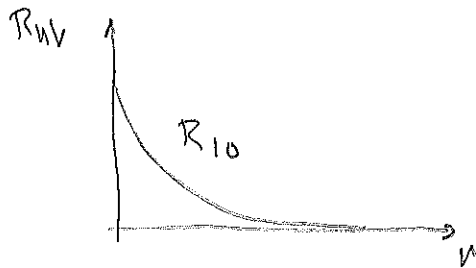
b) Övergångsregel $\Delta l = \pm 1$

c) $\Delta E = -13.6 \cdot 4^2 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{1} \right) = 163.2 \text{ eV}$

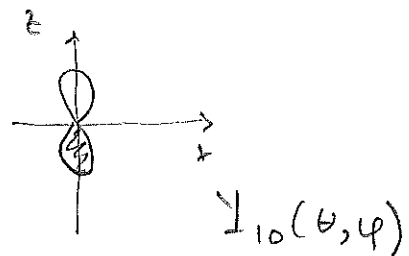
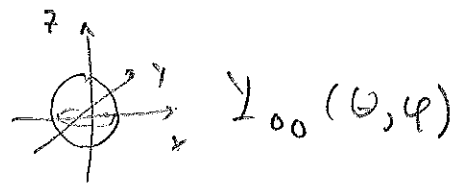
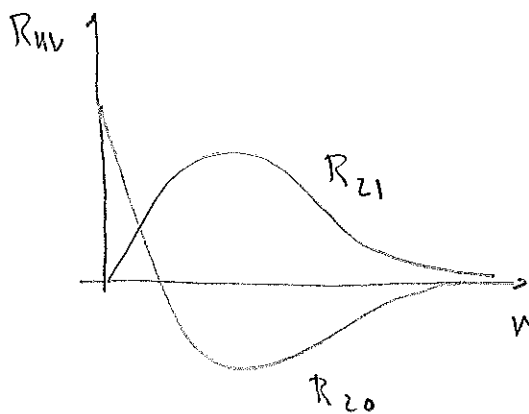
d)

$$n = 1$$

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$



$$n = 2$$



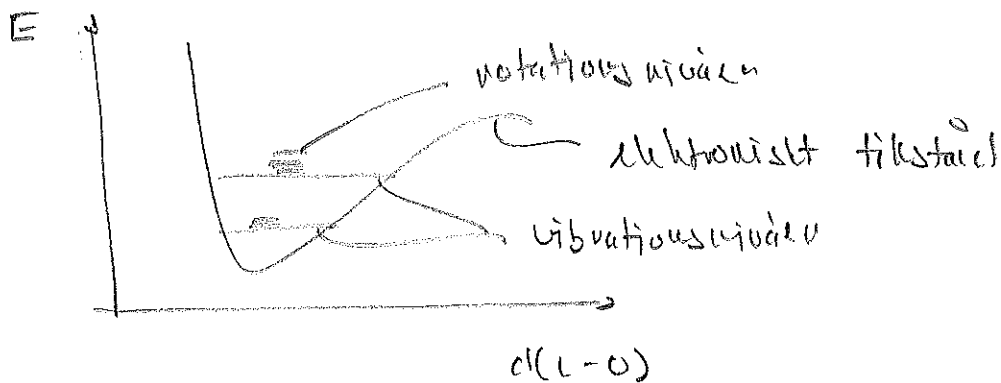
PSS för p-orb.
i x och y.

Grundtillståndet är ett tillstånd, Första
exciterade kan vara fyra: $2s$ samt $2p$ som
är totaltdigt degenererat.

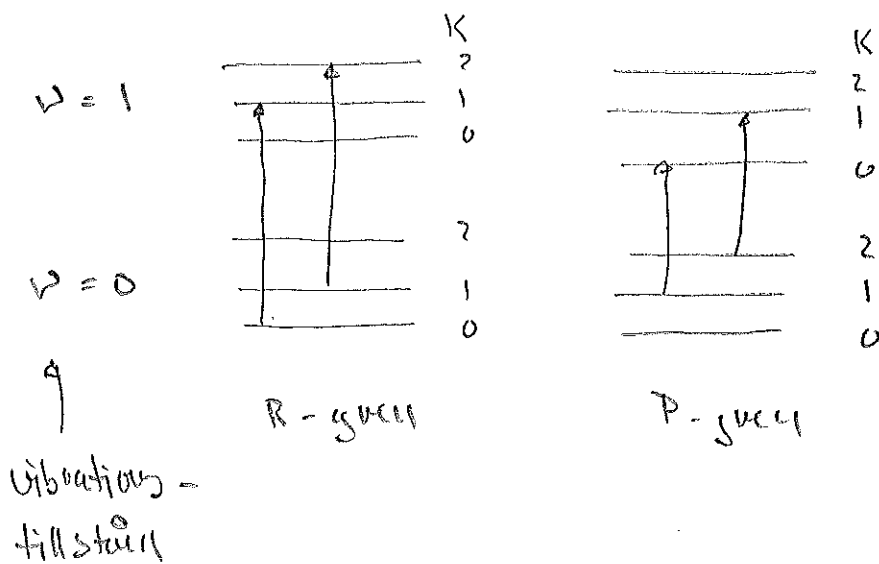
UPPGIFT 2

=

2) Vi ser ett vibrations-rotations spektrum,



På varje vibrationsövergång finns överlagrade rotationsnivåer.



Övergångsregler är

$$\Delta v = \pm 1$$

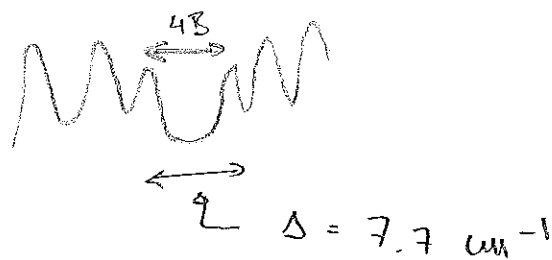
$$\Delta K = \pm 1$$

Rotations energi: $E_k = k(k+1) \frac{\hbar^2}{2I} = k(k+1) B$

Beräkna på R- eller P- gren för max toppar på två sidor om vibrationsfrekvensen. Delta gen spektrumet

b) Från figuren får vi skill mellan P- och R- gren $\nu_0 = 2143 \text{ cm}^{-1}$.

c) I figuren mäter vi mellan de första topparna i R- och P- gren.



$$4B = \Delta \Rightarrow B = 1.925 \text{ cm}^{-1}$$

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

$$\mu = 6.871 \text{ u} \Rightarrow R = 1.12 \text{ \AA}$$

UPPGIFT 3

=

Vi söker överlapp mellan $3H$ i grundtillståndet
och $3H_{0+}$ i $1s$, $2s$ och $2p$ tillstånd.

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Överlappet ges av:

$$a_{nlm} = \int (\psi_{nlm}^{H_0})^* \psi_{100}^H dV,$$

Sannolikheten ges av

$$P = |a_{nlm}|^2$$

2)

$$\begin{aligned} a_{100} &= \int (\psi_{100}^{H_0})^* \psi_{100}^H dV = \\ &= \left(\frac{2^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} 4\pi \int_0^\infty e^{-2r/a_0} e^{-r/a_0} r^2 dr = \\ &= 4 \cdot 2^{3/2} \left(\frac{1}{a_0^3}\right) \int_0^\infty r e^{-3r/2a_0} dr = \\ &= 4 \cdot 2^{3/2} \left(\frac{1}{a_0^3}\right) a_0^3 \frac{1}{3^3} \cdot 2 = 2^3 \cdot 2^{3/2} \frac{1}{3^3} \end{aligned}$$

$$P(100) = |a_{100}|^2 = 0.7023$$

b)

$$P_{200} = \int (\psi_{200}^*) \psi_{100} dV =$$

$$= \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \left(\frac{2^3}{8\pi a_0^3} \right)^{1/2} 4\pi \int_0^\infty \left(1 - \frac{2r}{a_0} \right) e^{-2r/a_0} e^{-r/a_0} r^2 dr$$

$$= \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty e^{-2r/a_0} \left(r^2 - \frac{r^3}{a_0} \right) dr = \frac{1}{4}$$

$$P_{200} = \frac{1}{4} = 0.25$$

c) ψ_{10} är ortogonal mot ψ_{00} varför
 denna integral är noll.

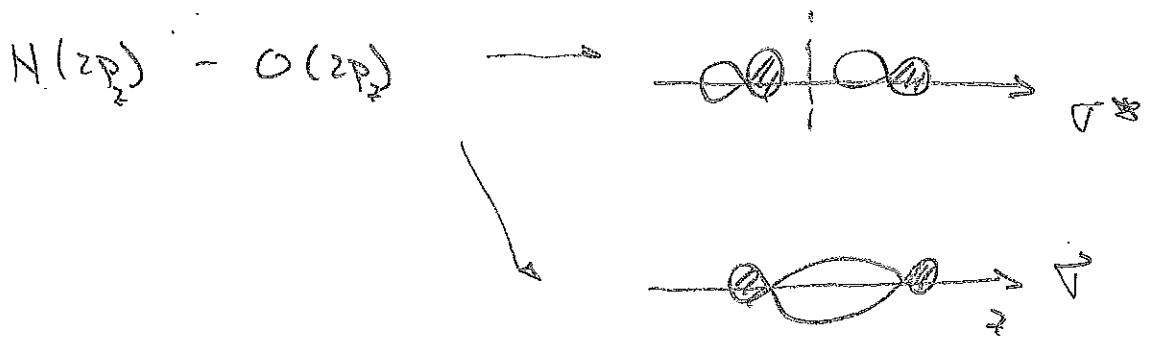
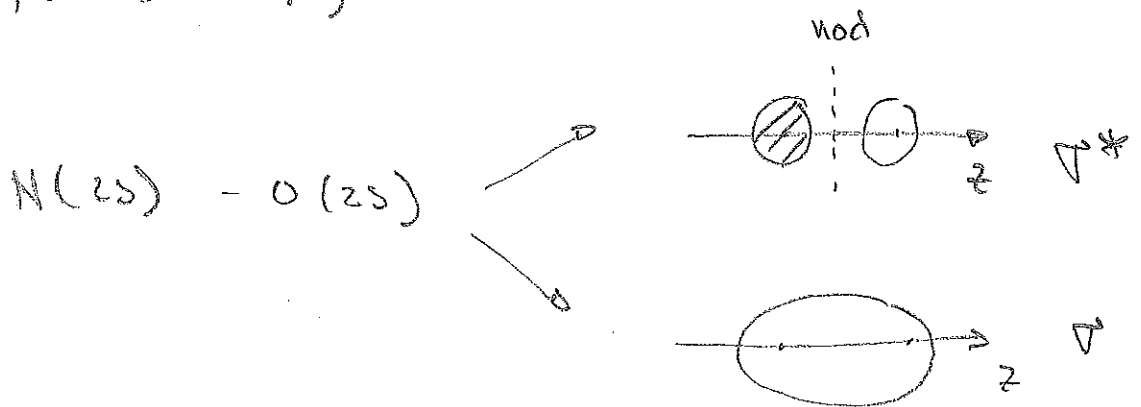
$$P_{210} = 0$$

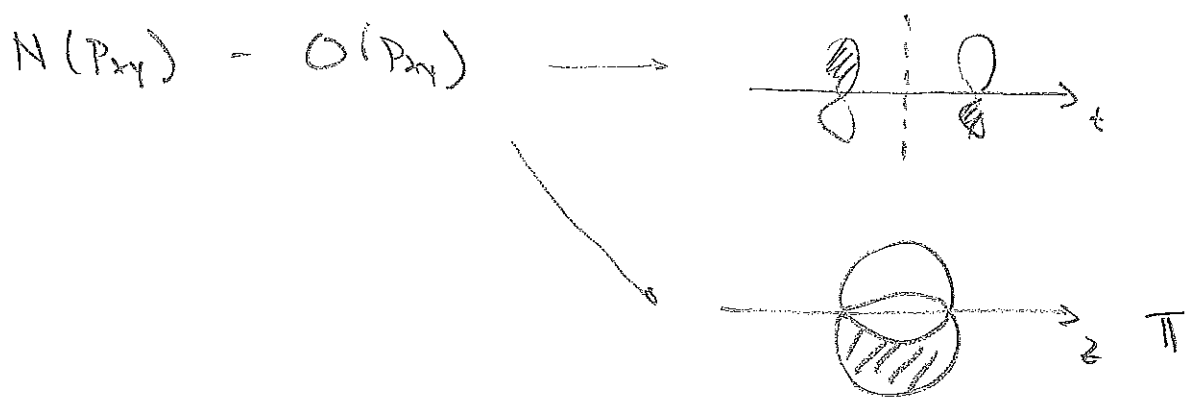
UPPGIFT 4

a) N har valenskonfiguration $1s^2 2s^2 2p^3$

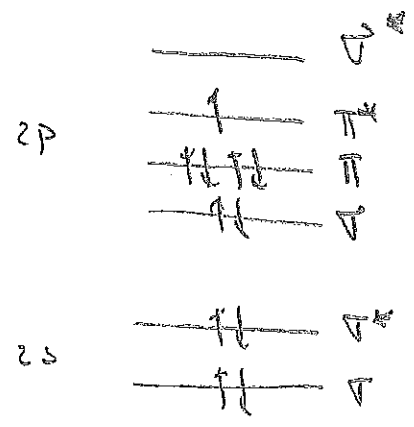
O har valenskonfiguration $1s^2 2s^2 2p^4$

Vi antar att orbitalerna ser ut som för de kombinerade fallen. (Vilket stämmer bra med skillnaden att de i verkligheten är lite polariserade.)





b)



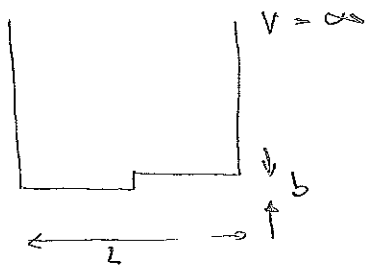
Molekylen har 11 valenselektroner.

c)

$$(2s\sigma)^2 (2s\sigma^*)^2 (2p\sigma)^2 (2p\pi)^4 (2p\pi^*)^1$$

Molekylen är en dublett $\rightarrow 2S+1 = 2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = 2$

UPPGIFT 5



utan störning

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad \text{För}$$

grundtillståndet

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$$

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

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Första ordningens störning är $\langle \psi | H' | \psi \rangle$

$$H' = -b \quad 0 < x < L/2$$

$$\Delta E^{(1)} = \int_0^{L/2} \psi_1^* (-b) \psi_1 dx = -\frac{2b}{L} \int_0^{L/2} \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx = -\frac{2b}{L} \left(\frac{L}{4} \right) = -\frac{b}{2}$$

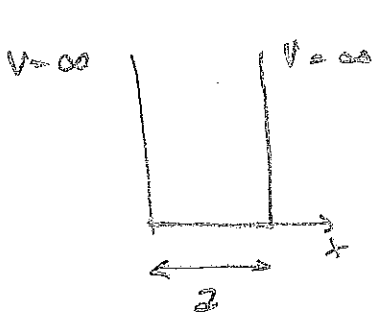
Grundtillståndets energi är $E_1 + \Delta E^{(1)}$ till första ordning

$$E_1 + \Delta E^{(1)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} - \frac{b}{2}$$

=

UPPGIFT 6

=



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

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

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

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

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 \uparrow spin-del
 rumdel

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 skiktat 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.

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