Chalmers tekniska högskola
Fysik
Henrik Grönbeck

Tenta Tillämpad kvantfysik (TIF101)

Tid: 19 december 2019, 8.30-12.30
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 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 rörelsemängdsoperatorn $\mathbf{L}^2$? (1p)

   (e) Vilka är de möjliga resultaten av en mätning av projektionen av rörelsemängdsoperatorn, dvs $\mathbf{L}_z$? (1p)

2. Betrakta en atom med en valenselektron. Spinnban-hamiltonianen ges av:

$$H_{SO} = \frac{\beta}{2}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$$

   (a) Beräkna skillnaden i energi (uttryckt i β) mellan energinivåerna som ges av $j = l+1/2$ och $j = l - /2$ där l är en-elektronsystemets kvanttal för banrörelsemängdsmoment. (2p)

   (b) Betrakta fallen med $l = 0$ och $l = 1$. Hur förändras energinivåerna om atomen sätts i ett svagt magnetfält? (2p)

3. Det första exciterade tillståndet för magnesium (Mg) är 3s3p. Man kan för detta system antaga att LS-koppling gäller.

   (a) Vilka värden på L och S är möjliga? Ange tillståndens LS-termer. (1p)

   (b) Skriv upp tillståndens vågfunktionener om rumsdelen av enpartikelvågfunktionerna ges av $\psi_{3s}(\mathbf{r})$ och $\psi_{3p}(\mathbf{r})$? (2p)

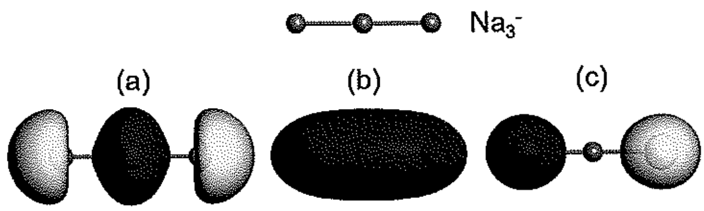
   (c) Vilken tillstånd har lägst energi och varför? Ge ett fysikaliskt argument. (1p)

4. Na_3 med en extra elektron (Na_3^-) är en lineär molekyl. Molekylen med tre valansorbitaler visas i figuren. Valensorbitalerna är olika lineärkombinationer av 3s-tillstånd.

(a) Rangordna de tre orbitalerna med avseende på deras stabilitet. Vilken orbital motsvarar det mest och det minst stabila tillståndet? Svaret skall motiveras med fysikaliskt argument. (1p)

(b) Ange multipliciteten för Na_3^-. (1p)

(c) Ange och motivera multipliciteten för den första exciterade nivån för Na_3^-. (1p)



5. Betrakta HD molekylen där H är väte och D deuterium.

(a) Rita schematiska potentialenergikurvor och rita in elektroniska, vibrations- och rotationsövergångar. (Med potentialenergikurva menas systemets totala energi som funktion av avståndet mellan H och D.) (2p)

(b) Antag att bindingsavståndet i HD är 0.75 Å. Vad är energidifferensen mellan de två lägst liggande rotationsnivåerna? (2p)

6. En tredimensionell harmonisk oscillator har hamiltonoperatorn.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m\omega^2}{2}r^2$$

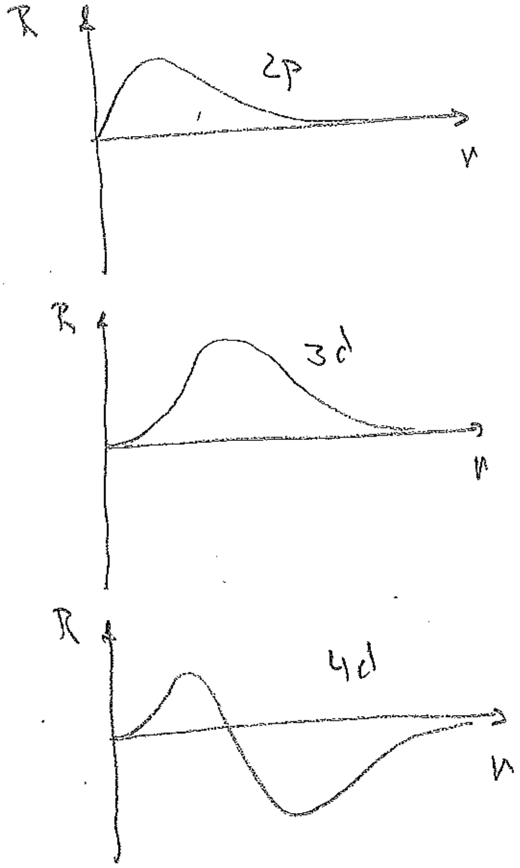
Använd variationsmetoden för att uppskatta grundtillståndsenergin med en radiell vågfunktion av typen:

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

N är en normeringskonstant. (4p)

UPPGIFT 1

a)



$R \propto r^l$ vid små r

b)

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{1}{n^2} \quad H_a$$

$$P(E_2) = |\langle 211 | \psi \rangle|^2 =$$

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

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

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

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

(Vi ser att ψ är normaliserad.)

Vid mätning kan man erhålla $E_2 = -\frac{1}{2}\frac{1}{4}\,H_a$, $E_3 = -\frac{1}{2}\frac{1}{9}\,H_a$ eller $E_4 = -\frac{1}{2}\frac{1}{16}\,H_a$ med sannolikheterna $\frac{1}{14}$, $\frac{4}{14}$ och $\frac{9}{14}$.

c)

Väntevärdet av energin är:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{14}\cdot\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{4}\right) + \frac{4}{14}\cdot\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{9}\right) + \frac{9}{14}\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{16}\right) =$$

$$= -0.0449\ H_a = \underline{\underline{-1.22\ eV}}$$

d)

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

e) Möjliga värden för L_z är $m_l\hbar$ vilket ger $\hbar$, $-\hbar$ eller $2\hbar$.

UPPGIFT 2

Atomens tillstånd beskrivs av l, j och s-kvanttalen. Hamiltonianen ges av:

$$H = H_0 + H_{SO}$$

$$H_{SO} = \frac{\beta}{2} \mathbb{L} \cdot \mathbb{S}$$

$$\mathbb{J} = \mathbb{L} + \mathbb{S}$$

$$\mathbb{J}^2 = \mathbb{L}^2 + \mathbb{S}^2 + 2\mathbb{L} \cdot \mathbb{S}$$

$$\mathbb{L} \cdot \mathbb{S} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{J}^2 - \mathbb{L}^2 - \mathbb{S}^2\right)$$

$$\langle \psi_{j,l,s} | H_{SO} | \psi_{j,l,s} \rangle = \frac{\beta}{4}\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)\hbar^2$$

ΔE för tillstånd med $j = l + \frac{1}{2}$ och $j = l - \frac{1}{2}$ ges av

$$\Delta E = \left(\left(l+\tfrac{1}{2}\right)\left(l+\tfrac{3}{2}\right) - \left(l-\tfrac{1}{2}\right)\left(l+\tfrac{1}{2}\right)\right)\frac{\beta}{4}\hbar^2 =$$

$$= \frac{\beta}{4}\hbar^2 \,(2l+1)$$

($s = \frac{1}{2}$ för båda fallen och l är samma).

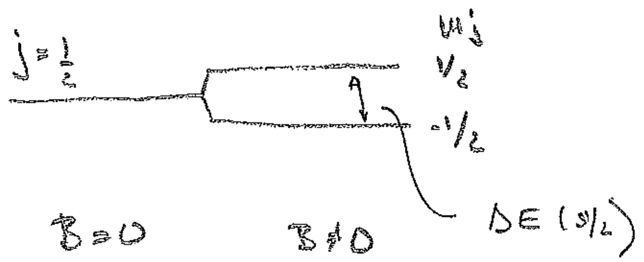
b) $l = 0$

$j = |l - s| \ldots |l + s|$

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

$m_j = -j \ldots +j$

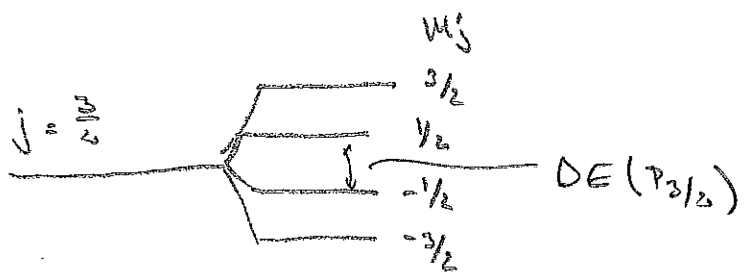
Nivån splittras upp i två nivåer.

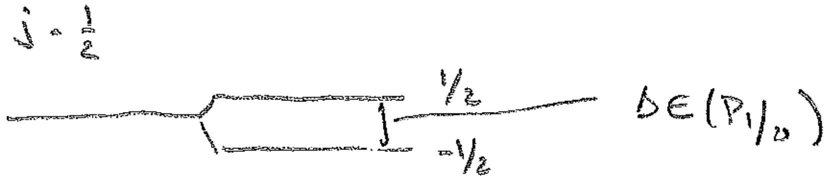


$l = 1$

$j = |l - s| \ldots |l + s|$

$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$





Uppsplittningen för en nivå ges av

$$\Delta E_{mj} = \mu_B B m_j g_j$$

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

$g_j(S_{1/2}) = 2$

$g_j(P_{1/2}) = \frac{2}{3}$

$g_j(P_{3/2}) = \frac{4}{3}$

$\Delta E(S_{1/2}) = 2\mu_B B$

$\Delta E(P_{3/2}) = \frac{2}{3}\mu_B B$

$\Delta E(P_{1/2}) = \frac{4}{3}\mu_B B$

UPPGIFT 3

a) Det första exciterade tillståndet är $3s^1 3p^1$.

$$L = |l_1 - l_2| \ldots |l_1 + l_2| = |0-1| \ldots |0+1| = \underline{\underline{1}}$$

$$S = |s_1 - s_2| \ldots |s_1 + s_2| = \underline{\underline{0}}, 1$$

b) Vågfunktionens rumsdel kan vara symmetrisk eller antisymmetrisk map utbyte av koordinater.

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{3s}(r_1)\psi_{3p}(r_2) + \psi_{3s}(r_2)\psi_{3p}(r_1)\right)$$

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{3s}(r_1)\psi_{3p}(r_2) - \psi_{3s}(r_2)\psi_{3p}(r_1)\right)$$

c) Eftersom totala Ψ skall vara antisymmetrisk skall ψ_S kombineras med antisym. spinnvågf

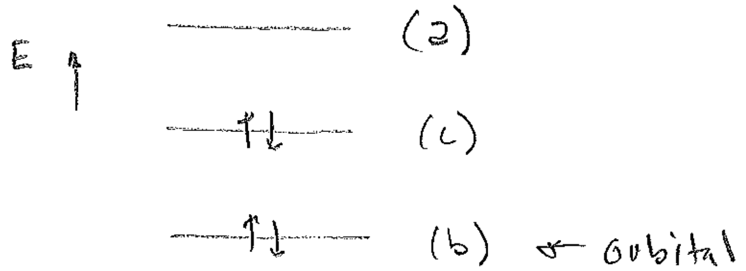
ψ_A kombineras med sym. spinnvågf

Triplett systemet (symm. spinnvågf.) har lägst energi eftersom Coulomb repulsionen mellan elektronerna är lägst i detta fallet.

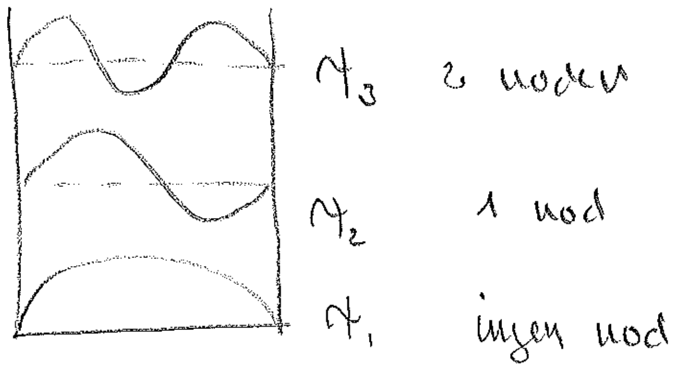
UPPGIFT 4

a) Valensorbitalerna för Na_3^- är linjärkombinationer av φ_{3s} för de tre atomerna.

Energinivåerna:

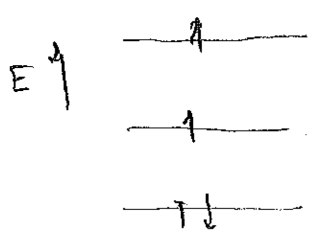


Ordningen följer antalet noder. (b) har lägst kinetisk energi (a) har högst. Jämför tillstånden i den endimensionella potentialbrunnen:



b) Multipliciteten är singlett $S = 0$

c)

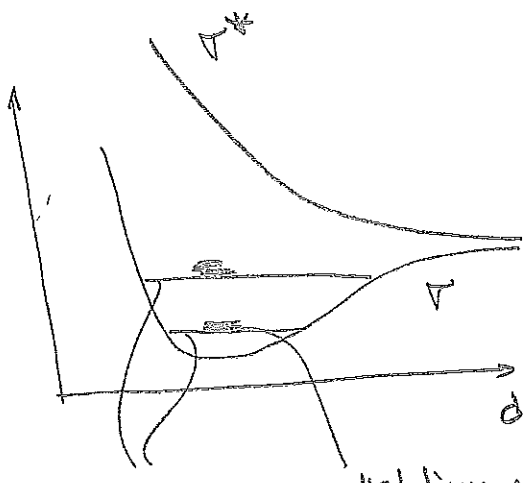


Multipliciteten är triplett $S = 1$.

Detta är Hunds regel, Vi skall maximera S.

UPPGIFT 5

a)



b) Rotationsenergi

$$E_{ROT} = \frac{\hbar^2}{2I} K(K+1) \qquad K = 0, 1 \ldots$$

$$\Delta E_{10} = \frac{\hbar^2}{2I}(1 \cdot 2 - 0) = \frac{\hbar^2}{I}$$

$$I = \mu d^2 \quad ; \quad \mu = \frac{1 \cdot 2}{1+2} \underset{\text{protonmassa}}{m_p} = \frac{2}{3} m_p$$

$$I = \frac{2}{3} m_p d^2$$

$$\Delta E_{10} = \frac{\hbar^2}{\frac{2}{3} m_p d^2} = 1.1 \cdot 10^{-2}\ eV$$

$d = 0.75$ Å

UPPGIFT 6

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

$$H = T + V \; ; \; T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \; , \; V = \frac{m\omega^2}{2} r^2$$

Systemet är sfäriskt symmetriskt. Vinkeldelen av vågfunktionen är $Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ (konstant)

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int \psi^* \psi \, dV \qquad \psi(r, \theta, \varphi) = \frac{N}{\sqrt{4\pi}} e^{-ar}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \frac{N^2}{4\pi} 4\pi \int_0^\infty r^2 e^{-2ar} dr = N^2 \frac{1}{4a^3}$$

$$\langle \psi | V | \psi \rangle = \frac{N^2}{4\pi} 4\pi \frac{m\omega^2}{2} \int_0^\infty r^4 e^{-2ar} dr = \frac{N^2}{2} m\omega^2 \frac{3 \cdot 2^3}{2^5 a^5} =$$

$$= N^2 m\omega^2 \frac{3}{2^3 a^5}$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \qquad \text{(sfäriska koordinater)}$$

$$\nabla^2 e^{-ar} = \left(a^2 - \frac{2a}{r}\right) e^{-ar}$$

$$\langle \psi | T | \psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{N^2}{4\pi} 4\pi \int_0^\infty (a^2 r^2 - 2ar) e^{-ar} dr$$

$$\langle\psi|T|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2 N^2}{2m}\left(a^2\frac{2}{8a^3} - \frac{2a}{(2a)^2}\right) =$$

$$= \frac{\hbar^2 N^2}{8ma}$$

$$E = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{a^2\hbar^2}{2m} + \frac{3m\omega^2}{2a^2}$$

$$\frac{dE}{da} = \frac{\hbar^2}{m}a - \frac{3m\omega^2}{a^3} = 0$$

$$a^4 = 3\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$$

$$a^2 = \sqrt{3}\,\frac{m\omega}{\hbar}$$

$$\underline{\underline{E = \sqrt{3}\,\hbar\omega}}$$

(Jämför med exakt värde som är $\frac{3}{2}\hbar\omega$)