

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
 Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:

Jon Andreas Støvneng, tel. 73 59 36 63, eller 45 45 55 33

EKSAMEN I
FY1006 INNFORING I KVANTEFYSIKK/
TFY4215 INNFORING I KVANTEFYSIKK

Fredag 27. mai 2011

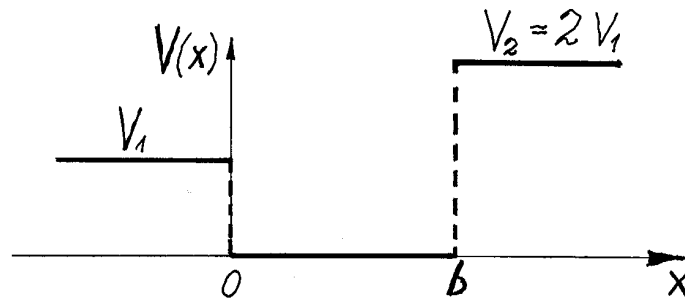
kl. 9.00 - 13.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator;
 Rottmann: Matematisk formelsamling;
 Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk, eller
 Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter;
 Aylward & Findlay: SI Chemical Data.

Et ark med uttrykk og formler er heftet ved.

Sensuren faller 24. juni.

Oppgave 1 (Teller 26 %)



En partikkel med masse m beveger seg i det endimensjonale brønnpotensialet

$$V(x) = \begin{cases} V_1 = \hbar^2/(2ma_0^2) & \text{for } x < 0, \\ 0 & \text{for } 0 < x < b, \\ V_2 = 2V_1 & \text{for } x > b. \end{cases}$$

a. For visse verdier av brønnvidden b vil dette systemet ha en energieigenfunksjon ψ_E med energieigenverdien $E = V_1$. ♠Forklar ved hjelp av den tidsuavhengige Schrödingerligningen hvorfor en slik energieigenfunksjon (med $E = V_1$) må ha formen $\psi_E = B$ (en konstant) for $x < 0$. Det opplyses at konstanten B ikke kan være lik null (da ψ ellers måtte være lik null over alt). ♠Avgjør ut fra dette om energieigenfunksjonen ψ_E beskriver en bunden eller ubunden tilstand. ♠Vis at en slik energieigenfunksjon (med $E = V_1$) må ha formen $\psi_E = C \exp(-\kappa x)$ for $x > b$, og finn κ .

b. ♠Løs den tidsuavhengige Schrödingerligningen også for området $0 < x < b$ (fortsett for $E = V_1$), og bruk kontinuitetsbetingelsene i $x = 0$ til å vise at energieigenfunksjonen ψ_E i dette området må være proporsjonal med $\cos kx$, hvor bølgetallet k skal bestemmes. ♠Vis deretter at en slik energieigenfunksjon (med energi $E = V_1$) bare eksisterer for et diskret utvalg av brønnvidder,

$$b = (n + 1/4)\pi a_0, \quad \text{der } n = 0, 1, 2, \text{ osv.}$$

c. For $b = \pi a_0/4$ er tilstanden ψ_E med energien $E = V_1$ grunntilstanden for dette systemet. ♠Angi uten bevis hva som skjer med grunntilstandsenergien når brønnvidden gjøres større enn $\pi a_0/4$.

Anta i resten av oppgaven at brønnvidden er $b = 5\pi a_0/4$. Systemet har da (som fastslått i pkt. **b**) en egenfunksjon med energien $E = V_1$. ♠Skissér denne egenfunksjonen. ♠Lag en prinsippskisse av *grunntilstanden* for $b = 5\pi a_0/4$. ♠Forklar hvordan en kan gå fram for å finne grunntilstandsenergien i dette tilfellet (dvs skriv ned de ligningene som trengs, uten å fullføre beregningen).

Oppgave 2 (Teller 20 %)

I denne oppgaven betrakter vi et molekyl som består av to atomer, begge med masse $m = 30000 m_e = 2.733 \cdot 10^{-26}$ kg. (m_e er elektron-massen.) Nedenfor skal vi se nærmere på rotasjons- og vibrasjonsfrihetsgradene (hver for seg).

a. Dersom atomene betraktes som to punktmasser, og avstanden $r = |\mathbf{r}| = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ mellom disse antas å være konstant, $|\mathbf{r}| = r_0$, beskrives rotasjonsfrihetsgraden til dette systemet av Hamilton-operatoren $\widehat{H} = \widehat{\mathbf{L}}^2/2I$, der $I = \mu r_0^2$, og μ er den reduserte massen.

♠Angi hva som er egenfunksjonene til denne Hamilton-operatoren, og finn egenverdiene (for rotasjonsenergien), uttrykt bl.a ved atom-massen m og avstanden r_0 . ♠Finn energiforskjellen mellom 1. eksiterte rotasjonsnivå og grunntilstanden i elektronvolt, når det oppgis at r_0 er fire Bohr-radier, $r_0 = 4a_0$. Det oppgis også at

$$\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = 1 \text{ Rydberg} = 13.6 \text{ eV.}$$

♠Hva er den fysiske tolkningen av egenfunksjonene funnet ovenfor? Avstandsvektoren $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ (fra kjerne 2 til kjerne 1) kan angis ved kulekoordinater: $r (= r_0)$, θ og ϕ . ♠Hva er sannsynligheten for å observere θ i intervallet $0 < \theta < \pi/2$ når systemet er i grunntilstanden? ♠Hvorfor er denne sannsynligheten like stor for alle energiegentilstandene?

b. Vi forlater nå rotasjonsfrihetsgraden, og betrakter i stedet vibrasjonsfrihetsgraden. Anta at molekylet motsetter seg endringer av avstanden mellom de to atomkjernene med en kraft som er tilnærmet proporsjonal med utsvinget fra likevekt, $F \approx -k(r - r_0) \equiv F_h$, der “fjærkonstanten” er $k = 10^3$ N/m. ♠Innfør $x = r - r_0$, og skriv ned et uttrykk for den potensielle energien $V_h(x)$ som svarer til kraften F_h , dvs svarer til hva vi kan kalle den harmoniske tilnærmelsen og en endimensjonal problemstilling. ♠Skriv ned den tidsuavhengige Schrödingerligningen for relativbevegelsen av de to atomene og finn energiforskjellen mellom 1. eksiterte vibrasjonsnivå og grunntilstanden i elektronvolt, i den harmoniske tilnærmelsen. ♠Beregn usikkerheten $\Delta r = \Delta x$ i grunntilstanden i den samme tilnærmelsen, og finn forholdet $\Delta r/r_0$.

Oppgave 3 (Teller 14%)

En partikkel med masse m som beveger seg i et endimensjonalt potensial $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, prepareres ved $t = 0$ i tilstanden

$$\Psi(x, 0) = f(x)e^{ip_0x/\hbar}, \quad \text{der} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = 1.$$

Det forutsettes at funksjonen $f(x)$ er symmetrisk med hensyn på origo.

a. ♠ Vis at forventningsverdien av posisjonen ved $t = 0$ er $\langle x \rangle_0 = 0$. [Hint: Når $f(x)$ er symmetrisk, gjelder det samme for $f^*(x)$.] ♠ Finn forventningsverdien $\langle p_x \rangle_0$ av impulsen ved $t = 0$. [Hint: Den deriverte av en symmetrisk funksjon er antisymmetrisk.]

b. Bruk Ehrenfests teorem,

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle \quad \text{og} \quad \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \langle -\partial V / \partial x \rangle,$$

til å finne forventningsverdiene av x og p_x ved tiden $t (> 0)$. [Hint: Vis først at $d^2 \langle x \rangle / dt^2 = -\omega^2 \langle x \rangle$. Uttrykk svaret ved $\langle p_x \rangle_0$, dersom du mangler verdien av denne.]

Oppgave 4 (Teller 15%)

Et elektron beveger seg i Coulomb-potensialet

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z\hbar^2}{m_e a_0 r}.$$

Ved en måling av energien E og kvadratet \mathbf{L}^2 av dreieimpulsen prepareres dette hydrogenlignende systemet i en tilstand beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r} Y(\theta, \phi),$$

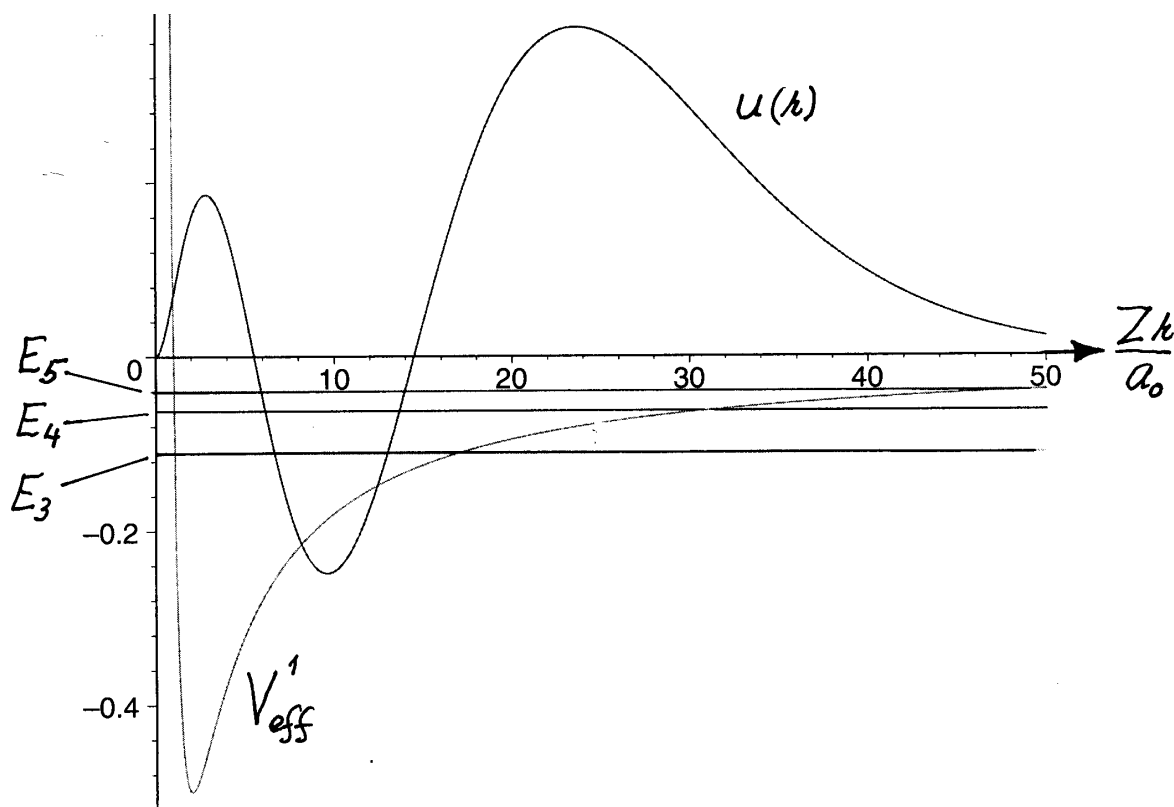
der den normerte vinkelfunksjonen er en superposisjon av to sfæriske harmoniske:

$$Y(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4}} Y_{11} + \frac{1}{2} Y_{1,-1}.$$

(Radialfunksjonen og måleresultatet for energien skal vi komme tilbake til senere.)

a. ♠ Forklar hvorfor måleresultatet for \mathbf{L}^2 ved den nevnte målingen var $2\hbar^2$. ♠ Hva mener vi med å si at observablene E , \mathbf{L}^2 og L_z er kompatible? Anta at L_z måles etter at systemet er preparert i den oppgitte tilstanden. ♠ Hva er de mulige måleresultatene og sannsynlighetene for disse?

b. ♠ Vil en slik måling av L_z endre tilstanden som systemet ble preparert i ved den første målingen? (Begrunn svaret.) ♠ Vil målingen av L_z endre E og/eller \mathbf{L}^2 ? ♠ Finn forventningsverdien av L_z og usikkerheten ΔL_z for tilstanden $\psi(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r} Y(\theta, \phi)$.



c. Figuren viser radialfunksjonen $u(r)$ samt det effektive potensialet

$$V_{\text{eff}}^l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2}$$

for $l = 1$, som funksjoner av Zr/a_0 . I samme enheter som V_{eff}^1 har vi avsatt energiene E_3 , E_4 og E_5 (for hovedkvantetallene $n = 3, 4$ og 5). Energien E og hovedkvantetallet n for den aktuelle tilstanden kan nå finnes på *to* måter. ♠ Bruk helst begge metodene, for å få en kontroll. ♠ Hvor mange lineært uavhengige (romlige) energieigenfunksjoner har dette systemet for det aktuelle hovedkvantetallet? (Dersom du ikke har funnet n : Finn antallet uavhengige energieigenfunksjoner for $n = 5$.)

Oppgave 5 (Teller 8%)

♠ I kvantemekaniske beregninger på molekyler er det, som utgangspunkt for å lage molekylorbitaler, vanlig å bruke såkalte *gaussorbitaler* som basisfunksjoner:

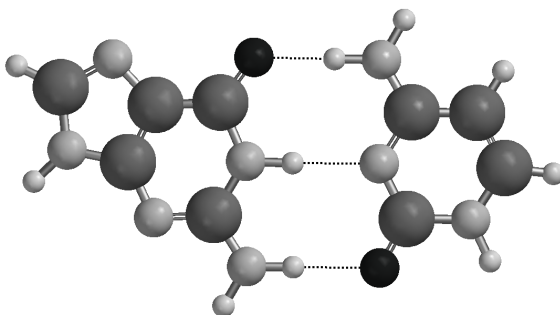
$$\phi(\mathbf{r}) = \phi(x, y, z) \sim x^a y^b z^c e^{-ar^2}$$

Her er a , b og c heltall. Hvilke verdier for a , b og c resulterer hhvis i såkalte s -, p - og d -orbitaler? Angi pariteten til hhvis s -, p - og d -orbitaler.

♠ Skisser en energikurve $E(R)$ som representerer en kjemisk reaksjon, med reaksjonskoordinat R , mellom to like stabile tilstander A og B , representert ved hhvis $R = R_A$ og $R = R_B > R_A$. Med utgangspunkt i energikurven, angi reaksjonens transisjonstilstand, dens aktiveringsenergi, og dessuten hvordan reaksjonens hastighet avhenger (matematisk) av aktiveringsenergien og systemets temperatur.

Oppgave 6 (Teller 7%)

Figuren nedenfor viser et hydrogenbundet guanin - cytosin basepar (tre hydrogenbindinger). Kvantemekaniske mangepartikkelberegninger gir som resultat at guanin ($C_5N_5OH_5$) har total energi -542.5488026 au, cytosin ($C_4N_3OH_5$) har total energi -394.9278455 au, mens baseparet vist i figuren har total energi -937.5260565 au. (1 au = 2 Rydberg = $\hbar^2/m_e a_0^2 = 27.2$ eV, jf oppgave 2.)



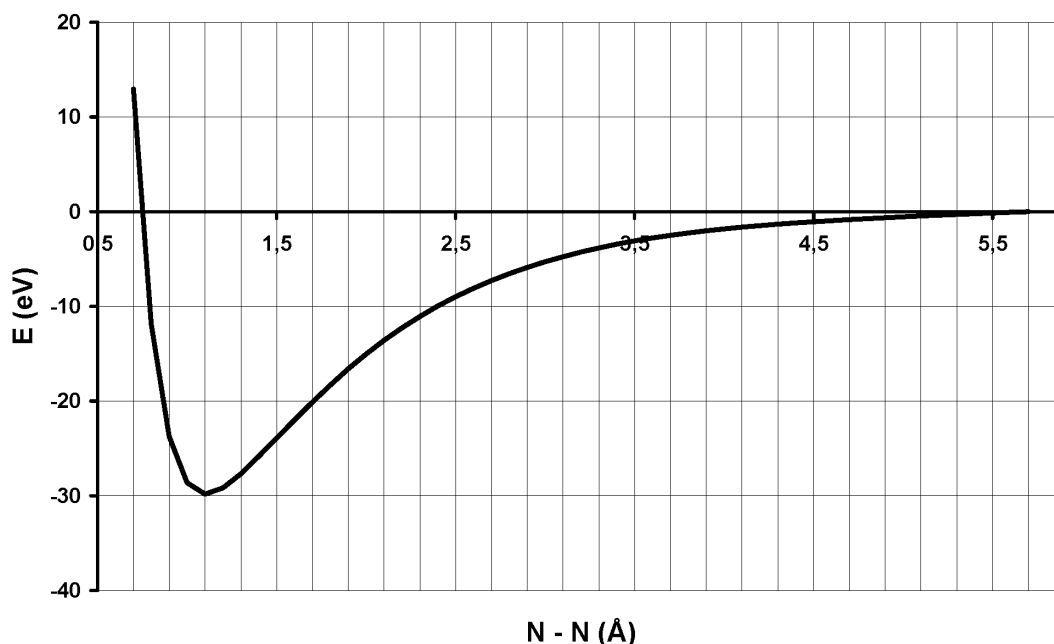
C: stor, grå; N: medium, lys grå; O: medium, svart; H: liten, lys grå

♠ Hva blir midlere bindingsenergi pr hydrogenbinding? Oppgi svaret i et helt antall meV (millielektronvolt).

♠ Skriv ned antall translasjonsfrihetsgrader, antall rotasjonsfrihetsgrader, og antall vibrasjonsfrihetsgrader for hhvis guanin, cytosin, og baseparet guanin - cytosin.

Oppgave 7 (Teller 10%)

Figuren nedenfor viser den beregnede Hartree–Fock–energien til N_2 som funksjon av N–N bindingslengden, mellom 0.7 og 5.7 Å. Massen til et nitrogenatom er ca $14 m_p$.



En slik energikurve beskrives godt med Morse–potensialet

$$V_M(x) = V_0 \left(1 - e^{-\kappa(x-d)}\right)^2 - V_0.$$

Her angir x avstanden mellom de to atomene, mens V_0 , κ og d er tre (positive) parametre som kan tilpasses eksperimentelle målinger eller nøyaktige kvantemekaniske beregninger (som i figuren ovenfor).

♠ Bruk figuren til å bestemme bindingslengden i likevekt, d , og potensialdybden, V_0 .

For vibrasjoner med små utsving fra likevekt kan Morse–potensialet tilnærmet beskrives som en harmonisk oscillator, $V_M(x) \simeq V_h(x)$, jf oppgave 2.

♠ Finn et uttrykk for ”fjærkonstanten” k i den harmoniske tilnærmelsen av Morse–potensialet. (Tips: Rekkeutvikle $V_M(x)$ omkring $x = d$.) God overensstemmelse mellom Morse–potensialet og Hartree–Fock–beregningene oppnås med $\kappa = 1.35 \text{ \AA}^{-1}$. Bruk denne verdien og regn ut talverdi for k , i enheten N/m. Bestem også, i enheten meV, laveste vibrasjonsenergi (”nullpunktseenergi”) $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ i N_2 .

Vedlegg: Formler og uttrykk (Noe av dette kan du få bruk for.)

Relativbevegelse for to-partikkel-system

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r^2} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r});$$
$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{reduisert masse}); \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Endimensjonal harmonisk oscillator, $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2 \right) \psi_n(x) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \psi_n(x); \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}; \quad (\psi_n, \psi_k) = \delta_{nk};$$
$$\psi_0(x) = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \quad C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4};$$
$$\psi_1(x) = C_0 \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \quad \psi_2(x) = \frac{C_0}{2} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \dots;$$
$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x).$$

Laplace-operatoren og dreieimpulsoperatorer i kulekoordinater

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2};$$
$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right), \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi};$$
$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right);$$
$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad \text{osv.}$$

Hydrogenlignende system

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z\hbar^2}{ma_0 r} \equiv -\frac{\hbar^2}{mar}; \quad E_n = -\frac{1}{2}(\alpha Z)^2 \frac{mc^2}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{1}{(l+1+n_r)^2}.$$

Vinkelfunksjoner

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathbf{L}}^2 \\ \hat{L}_z \end{array} \right\} Y_{lm} = \left\{ \begin{array}{l} \hbar^2 l(l+1) \\ \hbar m \end{array} \right\} Y_{lm}, \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_{l'm'}^* Y_{lm} = \delta_{l'l} \delta_{m'm};$$
$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \equiv Y_{p_z}, \quad Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi};$$
$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}.$$
$$\hat{\mathcal{P}} Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}.$$

Energiegenfunksjoner og radialligning, kulesymmetrisk potensial $V(r)$

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi);$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}^l(r) \right] u(r) = E u(r), \quad V_{\text{eff}}^l(r) \equiv V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}, \quad u(0) = 0.$$

Tidsutvikling av forventningsverdier

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\widehat{H}, \widehat{F}] \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \widehat{F} \right\rangle.$$

Noen konstanter

$$\hbar = 1.05457168(18) \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 6.58211915(56) \cdot 10^{-16} \text{ eVs};$$

$$1 \text{ eV} = 1.60217653(14) \cdot 10^{-19} \text{ J};$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529177 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (\text{Bohr-radien});$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137.0360} \quad (\text{finstrukturkonstanten});$$

$$\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6057 \text{ eV} \quad (\text{Rydberg-energien})$$

$$m_p \approx 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad (\text{protonmassen}).$$

Noen integraler

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \alpha^{-3/2}; \quad \int_0^{\infty} x^n e^{-\beta x} dx = \frac{n!}{\beta^{n+1}}.$$