Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Ola Hunderi
Tlf.: 93411

BOKMÅL
EKSAMEN I FAG SIF4065 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK
Fakultet for fysikk, informatikk og matematikk
Fredag 14. Desember 2001
Tid: 0900 - 1400

Tillatte hjelpemidler (C): Rottmann: Matematisk formelsamling (alle utgaver)
Barnet & Cronin: Matematical Formulae
O. Øgrim og B. Ebbe Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk
Ailword and Findlay: SI Chemical Data
Bestemt enkel kalkulator

Sensuren faller i uke 1 - 2002
Ikke alle deloppgavene skal løses. Kun to av deloppgavene 1f eller 2c eller 3d skal løses. Du skal altså selv velge bort en deloppgave. Si klart fra hvilken deloppgave du sløyfer.

Oppgave 1

a) Den tidsavhengige Schrödingerligningen i tredimensjonalt rom er

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r},t) \tag{1}$$

der $\hat{H}$ er Hamiltonoperatoren og $\Psi(\vec{r},t)$ er en bølgefunksjon.

Vis at dersom $\hat{H}$ ikke er eksplisitt tidsavhengig, så kan denne ligningen for løsninger av formen $\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})f(t)$ separeres til:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{2}$$

og

$$\frac{\partial f(t)}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar} f(t) \tag{3}$$

Vis også (eventuelt argumenter for) at den tidsavhengige Schrödingerligningen oppfylles av:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_i c_i \Psi_i(\vec{r},t) \tag{4}$$

der c_i er vilkårlige tidsuavhengige konstanter og:

$$\Psi_i(\vec{r},t) = \psi_i(\vec{r})\, e^{-iE_i t/\hbar} \tag{5}$$

der $\psi_i(\vec{r})$ altså oppfyller $\hat{H}\psi(\vec{r}) = E_i\psi_i(\vec{r})$.

Det opplyses, og kan brukes som kjent nedenfor, at (4) er en generell løsning av (1), men det kreves ikke bevist her.

b) Vi skal nå se på tidsavhengigheten av bølgefunksjonen for en partikkel i en endimensjonal potensialbrønn. Potensialet er gitt som:

$$V = 0 \quad \text{for} \quad 0 \le x \le a$$
$$V = \infty \quad \text{for} \quad x < 0 \quad \text{og} \quad x > a$$

Finn de stasjonære egenfunksjonene $\psi_i(x)$ for dette potensialet og de tilsvarende energinivåene.

En partikkel som befinner seg i denne brønnen har ved tiden t = 0 bølgefunksjonen

$$\Psi(x,0) = A\sin^3(\pi x/a) \quad \text{for} \quad 0 \le \ x \le a$$

$$\Psi(x,0) = 0 \quad \text{for} \quad x < 0 \quad \text{og} \quad x > a$$

Beregn normaliseringskonstanten A.

c) Uttrykk bølgefunksjonen ved t = 0 som en sum av stasjonære egenfunksjoner

$$\Psi(x,0) = \sum_i c_i \Psi_i(x,0)$$

Dvs. finn konstantene c_i for den oppgitte bølgefunksjonen ved t = 0. Benytt ligning (5) ovenfor og de beregnede konstantene c_i til å finne $\Psi(x,t)$. Beregn deretter sannsynlighetstettheten $|\Psi(x,t)|^2$. Kommenter resultatet. Angi sannsynlighetene for å finne partikkelen i hver av de tre laveste energi egentilstandene.

d) Beregn så $\Delta E^2 = \langle E^2 \rangle - |\langle E \rangle|^2$ der

$$\langle E \rangle = \int \Psi^*(x,t)\hat{H}\Psi(x,t)dx$$

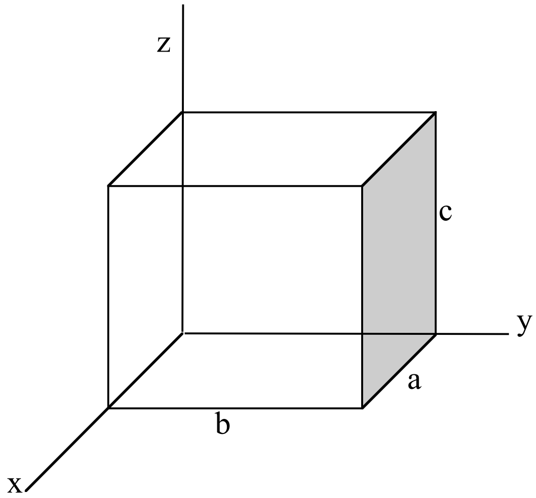
og

$$\langle E^2 \rangle = \int \Psi^*(x,t)\hat{H}^2\Psi(x,t)dx$$

Hva er den fysiske betydning av at $\Delta E^2 \neq 0$.

e)

Vi skal så se på en partikkel i en rektangulær boks; en rektangulær potensial brønn, slik som vist på figuren. Potensialet V(x,y,z) er null inne i boksen og uendelig utenfor.



Løs Schrödingerligningen for en partikkel inne i boksen og finn de stasjonære bølgefunksjonene og de tilsvarende energinivåene. Diskuter degenerasjonsgraden for

i) $a \neq b \neq c$
ii) $a = b = c$

f) Vi skal så bruke modellen i e) til å studere energinivåene i en såkalt kvantetråd. En kvantetråd er en struktur, en tråd, der tverrsnittet er av størrelsesorden nanometer x nanometer mens lengden er i området > mikrometer. Som en forenklet modell for en kvantetråd tar vi et elektron i en rektangulær boks der a = b og $c \rightarrow \infty$. I en virkelig kvantetråd vil elektronene ha en såkalt effektiv masse som er forskjellig fra den fri elektronmassen, men vi ser bort fra dette i denne oppgaven. Vis at energinivåene i dette tilfelle er gitt av

$$E(n_1, n_2, k) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2}{a^2}(n_1^2 + n_2^2) + k^2\right)$$

Hvilke verdier kan n_1 og n_2 ha? Lag en skisse som illustrerer energinivåene.

Hva er den maksimale temperatur vi kan ha for at et elektron i kvantetråden skal være i grunntilstanden for kvantiseringen i x- og y-retningen dersom a=b = 50nm?

Oppgave 2

a) Vi skal i denne oppgaven ta for oss vibrasjons- og rotasjonsenergiene for to-atomige molekyler. Argumenter for, eller utled direkte, at rotasjonsenergiene til et slikt molekyl er gitt av

$$E_j = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1)$$

Hva er I? Diskuter hvordan degenerasjonsgraden avhenger av kvantetallet j.

b) Anta Boltzmann statistikk og vis at forholdet mellom antall molekyler i en rotasjonstilstand med kvantetall j og antall molekyler i grunntilstanden er gitt av

$$\frac{n_j}{n_0} = \frac{N_j}{N_0} e^{-(E_j - E_0)/kT}$$

Der N_i er degenerasjonsgraden til nivå i. Bruk dette til å vise at

$$n_j = n_0(2j+1)e^{-(E_j - E_0)/kT}$$

Vis at ved en gitt temperatur T er det flest molekyler i nivået med rotasjonskvantetall j gitt av

$$j = \left(\frac{kTI}{\hbar^2}\right)^{1/2} - 1/2$$

c) Hva beskriver det såkalte Morse-potensialet? I Brehm og Mullin er det gitt på formen

$$V(R) = A(e^{-2a(R-R_0)} - 2e^{-a(R-R_0)})$$

Vis at sirkelfrekvensen ω for vibrasjon i molekylet er gitt av

$$\omega = \sqrt{\frac{2Aa^2}{\mu}}$$

For $^{23}Na^{35}Cl$ er R_o = 0.251 nm, dissosiasjonsenergien er 3,58 eV og sirkelfrekvensen $\omega = 7{,}16 \cdot 10^{13}$ s^{-1}. Beregn verdien av a i Morse potensialet for NaCl. Skisser potensialet.

Finn rotasjonsenergien for j = 2 for NaCl. Beregn også hvilket rotasjonsnivå som har den høyeste populasjon for NaCl ved romtemperatur.

Oppgave 3

a) Vis at Slater-determinanten for Z = 2 (bølgefunksjon for He)

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\beta(1) \\ \psi_\alpha(2) & \psi_\beta(2) \end{vmatrix}$$

er korrekt normert dersom de individuelle bølgefunksjonene er normert.

b) Vis eksplisitt at Slater-determinanten for Z = 3

$$\Psi(1,2,3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(1) & \psi_\beta(1) & \psi_\gamma(1) \\ \psi_\alpha(2) & \psi_\beta(2) & \psi_\gamma(2) \\ \psi_\alpha(3) & \psi_\beta(3) & \psi_\gamma(3) \end{vmatrix}$$

tilfredsstiller

- antisymmetri ved ombytting av to frihetsgrader (eks. $1 \leftrightarrow 2$ eller $2 \leftrightarrow 3$)
- eksklusjonsprinsippet (Paulipinsippet).

c) Den totale Hamilton-operatoren for He kan skrives

$$H = H_1 + H_2 + H_{12}$$

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1}$$

Skriv ned uttrykk for H_2 og H_{12}

La ψ være egenfunksjoner slik at

$$(H_1 + H_2)\,\psi = (E_a + E_b)\,\psi$$

der ψ representerer den romlige del av total bølgefunksjon, dvs. ψ_A eller ψ_S.

Vis at for

$$E = \int \psi^* \hat{H} \psi \, d\tau$$

Får vi to muligheter:

$$E = E_a + E_b + C \pm K$$

der

$$C = \iint \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} |\psi_a(1)|^2 |\psi_b(2)|^2 d\tau_1 d\tau_2$$

$$K = \iint \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} \psi_a^*(1)\psi_b(1)\psi_b^*(2)\psi_a(2) d\tau_1 d\tau_2$$

d) For He i grunntilstanden vil begge elektronene være i en 1 s romlig tilstand

$$\psi_{100}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{\sqrt{4\pi a_0^{3/2}}} e^{-Zr/a_0}$$

a_o er Bohr-radien. Hvilke spin bølgefunksjoner er mulig for grunntilstanden? Z er i virkeligheten 2 for He, men vi skal i denne oppgaven se på den som en parameter som kan variere. Hvorfor er det en nyttig modell? For grunntilstanden kan vi se bort fra K, slik at energien er gitt av

$$E = E_a + E_b + C$$

Utled, ut fra data gitt nedenfor et uttrykk for E som en funksjon av Z i den oppgitte bølgefunksjonen. Betrakt så Z som en variasjonsparameter og minimaliser E. Hvilken verdi av Z gir minimum. Kommenter resultatet. Beregn tallverdi for energien basert på at grunntilstanden i H har energien $-\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0} = -13.6 \text{ eV}$.

<u>Oppgitt:</u>

$$\int \psi_{100}^*(r)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi_{100}(r)d\tau = \frac{Z^2e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}$$

$$\int \psi_{100}^*(r)\left(-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi_{100}(r)d\tau = -\frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}$$

$$\iint \left|\psi_{100}(r_1)\right|^2 \left|\psi_{100}(r_2)\right|^2 \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}\right) d\tau_1 d\tau_2 = \frac{5Ze^2}{32\pi\varepsilon_0 a_0}$$

$$\sin^2 z = \frac{1}{2}(1 - \cos 2z)$$

$$\sin^3 z = \frac{1}{4}(3\sin z - \sin 3z)$$

$$\sin^6 z = \frac{1}{32}(10 - 15\cos 2z + 6\cos 4z - \cos 6z)$$

$$\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot w}$$

Elektronets masse: m_e=9.109 10^{-31} kg

Protonets masse: 1.673 10^{-27} kg

Boltzmanns konstant: k_B=1.381 10^{-23} J/K