LULEÅ TEKNISKA UNIVERSITET
Hans Weber, Avdelningen för fysik, 2004

Svar till Sammanställning av tentamensuppgifter Kvant–EEIGM (MTF057).

1. S.E. : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V(x)\psi = E\psi$ lösningen utanför V=0 är $\psi = 0$, i området med V=0 ges lösningen av (efter lite räknande) $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi x}{L})$ Normeringen $N = \sqrt{\frac{2}{L}}$ fås ur integralen $N^2\int_0^L \sin(\frac{n\pi x}{L})\sin(\frac{n\pi x}{L})dx = 1$ Energinivåerna ges av (insättning i S.E. av egenfunktionen) $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{L^2}$ vilket ger att om vidden på lådan halveras så ökar grundtillståndets energi med en faktor 4.

2. Visa $\psi = Ae^{ax^2+bx}$ är grundtillståndet. Skriv om S.E. till $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)\psi = \left[\frac{mk}{\hbar^2}x^2 - \frac{2mk}{\hbar^2}x_0 x + \frac{mk}{\hbar^2}x_0^2 - \frac{2mE}{\hbar^2}\right]Ae^{ax^2+bx}$
$\frac{\partial}{\partial x}\psi = (2ax+b)Ae^{ax^2+bx}$; $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = (4a^2x^2 + 4abx + b^2 + 2a)Ae^{ax^2+bx}$
vilket ger $4a^2 = \frac{mk}{\hbar^2}; a = -\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}$, a mindre än 0 ty annars ej normerbar vågfunktion. Vidare $-\frac{2mk}{\hbar^2}x_0 = 4ab$ vilket ger $b = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x_0$. Vidare $\frac{mk}{\hbar^2}x_0^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} = b^2 + 2a = \frac{mk}{\hbar^2}x_0^2 - \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$ och detta ger energin $E = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}$, dvs grundtillståndets energi och med konstanterna $a = -\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}$ och $b = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x_0$.

3. Systemet är preparerat i vågfunktionen $\frac{1}{6}[4\psi_{100}(r) + 3\psi_{211}(r) - \psi_{210}(r) + \sqrt{10}\psi_{21-1}(r)]$. Den är normerad och tex ψ_{210} är väte egenfunktionen med kvanttalen $n = 2$, $l = 1$ och $m_l = 0$.

   a) För väte $E_n = -\frac{13.56}{n^2}$eV ; $< E >= \frac{1}{36}[16 \cdot \frac{1}{1^2} + 9 \cdot \frac{1}{2^2} + 1 \cdot \frac{1}{2^2} + 10 \cdot \frac{1}{2^2}](-13.56)$eV = -7.91 eV
   b) $\mathbf{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$; $< L^2 >= \frac{1}{36}[16 \cdot 0 \cdot 1 + 9 \cdot 1 \cdot 2 + 1 \cdot 1 \cdot 2 + 10 \cdot 1 \cdot 2]\frac{40}{36}\hbar^2$
   c) $L_z = m_l\hbar$; $< L_z >= \frac{1}{36}[16 \cdot 0 + 9 \cdot 1 + 1 \cdot 0 - 10 \cdot 1] = -\frac{\hbar}{36}$

4. Se Atkins ed7 Problem 13.1. Den ena gränsen 3281.4 nm är övergång från oändligheten ner till lägsta nivån i serien. Detta ger övergångar ner mot $n_0 = 6$. Det går också att borja i andra ändan av serien 12368 nm. Denna motsvarar en övergång mellan två närliggande nivåer, $n_0 + 1$ ner till n_0. Detta ger också att 12368 nm är mellan n=7 och n=6 dvs $n_0 = 6$. Serien är 12368 nm, 7503 nm, 5908 nm, 5129 nm,... konvergerar mot 3282 nm

5. Energinivå för rotationstillstånd J ges av: $E = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)$, energiskillnad $\Delta E = E_{J+1} - E_J = \frac{\hbar^2}{I}(J+1)$ där $I = \mu d^2 = \frac{1}{2}md^2 = \frac{1}{2}14ud^2$. Strålningens våglängd fås ur $\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$, lös ut J: $J + 1 = \frac{2\pi\frac{1}{2}md^2c}{\hbar\lambda} =$

$\frac{\pi 14\ 1.66\ 10^{-27}(1.094\ 10^{-10})^2\ 3.0\ 10^8}{1.055\ 10^{-34}\ 125010^{-6}} \approx 1.98$ dvs J=1. Impulsmomentet ges av $\sqrt{J(J+1)}\hbar$ dvs $\hbar\sqrt{6}$ resp $\hbar\sqrt{2}$. Skillnaden blir $\hbar(\sqrt{6}-\sqrt{2}) = 1.04\hbar = 1.097\ 10^{-34}$ Nm.

6. S.E. : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V(x)\psi = E\psi$ lösningen utanför V=0 är $\psi = 0$, i området med V=0 ges lösningen av (efter lite räknande) $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi x}{L})$ Normeringen $N = \sqrt{\frac{2}{L}}$ fås ur integralen $N^2\int_0^L \sin(\frac{n\pi x}{L})\sin(\frac{n\pi x}{L})dx = 1$ Energinivåerna ges av (insättning i S.E. av egenfunktionen) $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{L^2}$ vilket ger att om vidden på lådan dubbleras så minskar grundtillståndets energi med en faktor 4.

7. Visa $\psi = Ae^{ax^2+bx}$ är en vågfunktion. Skriv om S.E. till $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\psi =$
$\left[\frac{mk}{\hbar^2}x^2 - \frac{2mk}{\hbar^2}x_0 x + \frac{mk}{\hbar^2}x_0^2 - \frac{2mE}{\hbar^2}\right]Ae^{ax^2+bx}$
   För derivatorna i vänsterledet gäller: $\frac{\partial}{\partial x}\psi = (2ax+b)Ae^{ax^2+bx}$ och $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = (4a^2x^2 + 4abx + b^2 + 2a)Ae^{ax^2+bx}$
   vilket ger $4a^2 = \frac{mk}{\hbar^2}; a = -\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}$, a mindre än 0 ty annars ej normerbar vågfunktion. Vidare $-\frac{2mk}{\hbar^2}x_0 = 4ab$ vilket ger $b = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x_0$. Vidare $\frac{mk}{\hbar^2}x_0^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} = b^2 + 2a = \frac{mk}{\hbar^2}x_0^2 - \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$ och detta ger energin $E = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}$, och konstanterna $a = -\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}$ och $b = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x_0$.

8. Fotonens energi $W_f = W_n - W_m$ där $W_n = -W_H/n^2$, W_H=13.6 eV. Våglängderna för synligt ljus 400 nm $< \lambda <$ 700 nm, vilket motsvarar 1.77 eV $< W_f <$ 3.1 eV. Prövning ger att synligt ljus kommer från (Balmer serien), m=2 och n=3,4,... vilket ger W_f= 1.89, 2.55, 2.86, 3.12 eV Motsvarande våglängder är λ = 656, 486, 434, 410 nm. (Om m=1 är fotonenergierna för stora och om m=3 är fotonenergierna för små.)

9. a) $E = \frac{3}{2}k_BT = \frac{1}{2}mv^2$; $v = \sqrt{\frac{3k_BT}{m}} = 134863.88$m/s, $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{3mk_BT}} = \frac{6.626\ 10^{-34}}{\sqrt{3\ \cdot\ 9.109\ 10^{-31}\ 1.38\ 10^{-23}\ 400}} = 5.39\ 10^{-9}$m
   b) Uppgiften utgår. Fotonens energi för väte lika system ges av $W_f = W_n - W_m$ där $W_n = -W_H Z^2/n^2$, W_H=13.56 eV. För övergång mellan innersta nivåer ger detta. $W_{f12} = Z^2 13.56(1-\frac{1}{4}) = Z^2\ 10.17 = \frac{hc}{\lambda}$ vilket ger $Z = \sqrt{\frac{6.626\ 10^{-34}2.998\ 10^8}{253\ 10^{-9}10.17\ 1.602\ 10^{-19}}} = 0.69$ dvs uppgiften felformulerad. Antagandet nm skall vara Å ger Z=2.2 vilket är långt ifrån ett heltal.

10. a) $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$ och randvillkor $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Lösningen till SE är på formen $\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$ med randvillkor ger A=0 och

$kL = n\pi$; $k = \frac{n\pi}{L}$ med n=1, 2, 3,.... Detta ger $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{L^2 2m}$ och $h\nu = E_f = E_2 - E_1 = (4-1)\frac{\hbar^2\pi^2}{L^2 2m}$; $L = \sqrt{\frac{3\pi\hbar}{4m\nu}} = \sqrt{\frac{3\pi 1.055\ 10^{-34}}{49.109\ 10^{-31}\ 2\ 10^{14}}} =$ 1.168 10^{-9}m= 1.17 nm.

b) Kinetiska energin i grundtillståndet ges av $E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2 1^2 \pi^2}{L^2 2m} = \frac{1.055^2\ 10^{-68}\pi^2}{1.168^2 10^{-18} 2\ 9.109\ 10^{-31} 1.602\ 10^{-19}} = 0.276$ eV.

11. Normering $\int_0^L \psi_n^*(x,t)\psi_n(x,t)dx = 1$ ger $C^2 \int_0^L \sin^2(\frac{n\pi x}{L})dx = 1$ vilket ger $C = \sqrt{\frac{2}{L}}$. Sannolikheten att finna partikeln i ett intervall $dx = 0.001L$ nära $x = L/3$ ges av: $\psi^*\psi dx = \frac{2}{L}\sin(\frac{n\pi\frac{L}{3}}{L})\sin(\frac{n\pi\frac{L}{3}}{L})\cdot 0.001L = 0.002\sin^2(n\frac{\pi}{3})$ Det blir två fall: $= 0.002(\frac{\sqrt{3}}{2}) = 0.0015$ om n=1+3k eller n=2+3k, k=0,1,2,. .. eller $= 0$ om n=3k, k=1,2,3,...

12. a) Lyman serien ges av övergången mellan högre nivåer ner till lägsta nivån_0 ($n_0 = 1$). Den ges $\nu = \frac{1}{\lambda} = R_{Li}(1 - \frac{1}{n^2})$ Serien som ges är för n_1 =2,3 resp 4. Vilket ger $R_{Li} = \frac{4}{3}\ 740747 = 987662.7\text{cm}^{-1}$, $R_{Li} = \frac{9}{8}\ 877924 = 987664.5\text{cm}^{-1}$, $R_{Li} = \frac{16}{15}\ 925933 = 987661.9\text{cm}^{-1}$. Medelvärdet blir $R_{Li} = 987663.0\text{cm}^{-1}$

b) Gränsvåglängden ges av $\lambda_\infty = \frac{1}{R_{Li}} = \frac{1}{987663.0\ 100} = 1.01249\ 10^{-8}$m = 101.249Å. Motsvarande energi (=jonisationeenergi) blir $E = \frac{hc}{\lambda_\infty} = \frac{6.626\ 10^{-34}\ 2.998\ 10^8}{1.6022\ 10^{-19}\ 1.01249\ 10^{-8}} = 122.45$eV

13. Energinivå för rotationstillstånd J ges av: $E = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)$, energiskillnad $\Delta E = E_{J+1} - E_J = \frac{\hbar^2}{I}(J+1)$ där $I = \mu d^2 = \frac{1}{2}md^2 = \frac{1}{2}14ud^2$. Strålningens våglängd fås ur $\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$, lös ut J: $J + 1 = \frac{2\pi\frac{1}{2}md^2c}{\hbar\lambda} = \frac{\pi 14\ 1.66\ 10^{-27}(1.094\ 10^{-10})^2\ 3.0\ 10^8}{1.055\ 10^{-34}\ 125010^{-6}} \approx 1.98$ dvs J=1. Impulsmomentet ges av $\sqrt{J(J+1)}\hbar$ dvs $\hbar\sqrt{6}$ resp $\hbar\sqrt{2}$. Skillnaden blir $\hbar(\sqrt{6} - \sqrt{2}) = 1.04\hbar =$ 1.097 10^{-34} Nm.

14. S.E. : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V(x)\psi = E\psi$ lösningen utanför V=0 är $\psi = 0$, i området med V=0 ges lösningen av (efter lite räknande) $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi x}{L})$ Normeringen $N = \sqrt{\frac{2}{L}}$ fås ur integralen $N^2\int_0^L \sin(\frac{n\pi x}{L})\sin(\frac{n\pi x}{L})dx = 1$ Energinivåerna ges av (insättning i S.E. av egenfunktionen) $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{L^2}$ vilket ger att om vidden på lådan halveras så ökar grundtillståndets energi med en faktor 4.

15. Relevant radieldel: $R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/2a_0}$ Sannolikheten att hitta den mellan r och $r + dr$ ges av $P(r)dr = R_{21}(r)^2 r^2 dr$ och därmed $P(r) = R_{21}(r)^2 r^2 =$ konstant $r^4 e^{-Zr/a_0}$. Extremvärden då derivatan = 0. $\frac{dP(r)}{dr} =$

$4r^3e^{-Zr/a_0} - r^4\frac{Z}{a_0}e^{-Zr/a_0} = r^3(4 - r\frac{Z}{a_0})e^{-Zr/a_0}$. Vilket ger ett maxima för $r = 4a_0$ ($P(0) = P(\infty) = 0$ och $P(r) \geq 0$ alltså ett max).

Utan yttre fält (elektriska eller magnetiska) beror väte atomens energi enbart på huvudkvanttalet n och inte på banrörelsemängdsmomentkvanttalet l, och ej heller på m_l kvanttalet. Så följande tillstånd har samma energi (se Atkins 6ed sid 353):
I) 3s med $m_l = 0$, 3p med $m_l = 1$, 3p med $m_l = -1$, 3p med $m_l = 0$.
II) 4d med $m_l = 1$, 4p med $m_l = 0$, 4p med $m_l = -1$.
III) 5d med $m_l = 1$, 5p med $m_l = -1$, 5s med $m_l = 0$.

16. Molekylens energinivåer, pga vibrationer och rotation ges av $E_{n,l} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$ Vid dipolövergång ändras l med en enhet $\Delta l = \pm 1$. **I)** Om vibrationstillståndet ej ändras ($\Delta n = 0$), ser man strålning med följande energier $\frac{\hbar^2}{2I}(l+1)(l+2) - \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) = \frac{\hbar^2}{2I}(l+1), l = 0, 1, 2, 3$, och detta ger $\frac{\hbar^2}{2I}, 2\frac{\hbar^2}{2I}, 3\frac{\hbar^2}{2I}, 4\frac{\hbar^2}{2I}, ...$ **II)** Om vibrationstillståndet ändras en enhet $\Delta n = -1$ (emission), ser man två serier, där avståndet mellan energinivåerna för varje serie är lika stort. En serien har $\Delta n = -1, \Delta l = -1$: $\hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2I}, \hbar\omega + 2\frac{\hbar^2}{2I}, \hbar\omega + 3\frac{\hbar^2}{2I}, \hbar\omega + 4\frac{\hbar^2}{2I}, ...$ Den andra serien har $\Delta n = -1, \Delta l = +1$: $\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{2I}, \hbar\omega - 2\frac{\hbar^2}{2I}, \hbar\omega - 3\frac{\hbar^2}{2I}, \hbar\omega - 4\frac{\hbar^2}{2I}, ...$ Det ser alltså ut som om det 'saknas' en topp med energin $\hbar\omega$.

Avståndet mellan maxima svarar mot $\Delta E = \frac{\hbar^2}{I} = hc\Delta\lambda^{-1}$ ur data fås $\Delta\lambda^{-1}\frac{2968.7-2824.0}{7} = 20.67\text{cm}^{-1}$ vidare är $I = \mu R^2 = \frac{m_H m_{Cl}}{m_H + m_{Cl}}$ och därmed $R = \sqrt{\frac{h}{4\pi^2 c\Delta\lambda^{-1}\mu}} = 1.30\text{Å}$.

17. Visa $\psi = Ae^{ax^2+bx}$ är grundtillståndet. Skriv om S.E. till $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\psi = \left[\frac{mk}{\hbar^2}x^2 - \frac{2mk}{\hbar^2}x_0 x + \frac{mk}{\hbar^2}x_0^2 - \frac{2mE}{\hbar^2}\right]Ae^{ax^2+bx}$
$\frac{\partial}{\partial x}\psi = (2ax + b)Ae^{ax^2+bx}$; $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = (4a^2x^2 + 4abx + b^2 + 2a)Ae^{ax^2+bx}$
vilket ger $4a^2 = \frac{mk}{\hbar^2}; a = -\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}$, a mindre än 0 ty annars ej normerbar vågfunktion. Vidare $-\frac{2mk}{\hbar^2}x_0 = 4ab$ vilket ger $b = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x_0$. Vidare $\frac{mk}{\hbar^2}x_0^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} = b^2 + 2a = \frac{mk}{\hbar^2}x_0^2 - \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$ och detta ger energin $E = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}$, dvs grundtillståndets energi och med konstanterna $a = -\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}$ och $b = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x_0$.

18. S.E. : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V(x)\psi = E\psi$ lösningen utanför V=0 är $\psi = 0$, i området med V=0 ges lösningen av (efter lite räknande) $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi x}{L})$ Ortogonaliteten $\int_0^L \sin(\frac{n\pi x}{L})\sin(\frac{m\pi x}{L})dx = \int_0^L \cos(\frac{\pi x}{L}(n - m)) - \cos(\frac{\pi x}{L}(n + m))dx =$ Integralen $\int_0^L \cos(\frac{\pi x}{L}(\text{heltal}))dx = 0$ utom då heltalet råkar vara lika med 0, dvs ψ_m och ψ_n är ortogonala om $m \neq n$.