

Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet  
Institutt for fysikk

Fagleg kontakt under eksamen:

Navn: Ola Hunderi

Tlf.: 93411

## EKSAMEN I FAG SIF4065 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK

Fakultetet for fysikk, informatikk og matematikk

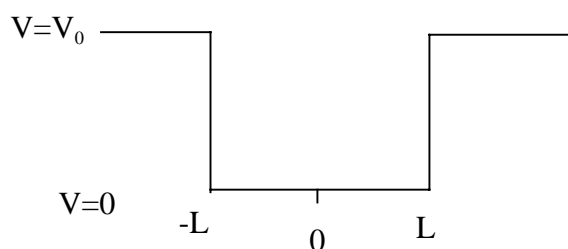
8 august 2001

Tid: 0900 – 1400

Tillatte hjelpemidler (B2): Rottmann: Matematisk formelsamling (alle utgaver)  
Barnet & Cronin: Mathematical Formulae  
O. Øgrim og B. Ebbe Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk  
Typegodkjent kalkulator

### Oppgave 1

I dette problemet skal vi se på de tillatte tilstander i en én-dimensjonal boks med endelig vegg-potensial slik som vist på figuren. En partikkel med masse  $m$  beveger seg i dette potensialet.



Figur 1

- a) Bundne tilstander i et slikt potensial må ha en bestemt paritet. Vis at for løsninger med like paritet må bølgefunksjonen ha formen

$$\psi = \begin{cases} Ae^{\alpha x} & x \leq -L \\ B \cos kx & -L \leq x \leq L \\ Ae^{-\alpha x} & x \geq L \end{cases}$$

Hva er  $\alpha$  og  $k$ ?

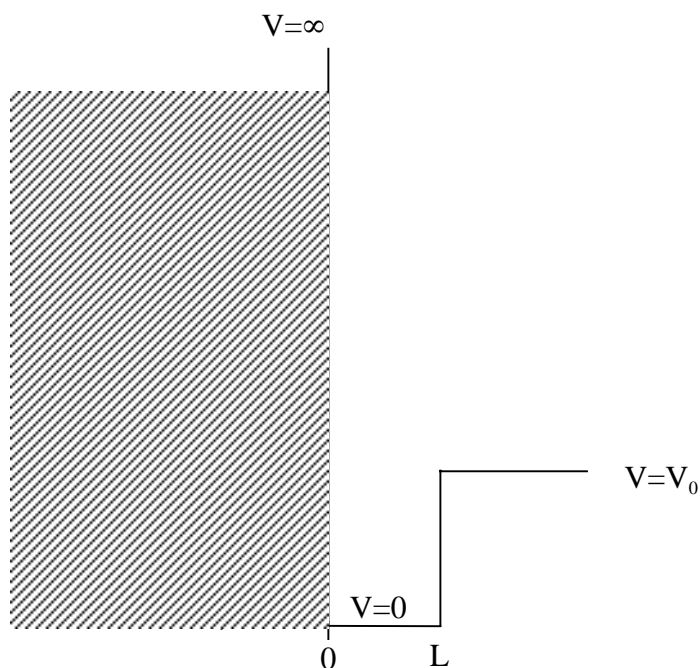
- b) Finn de tilsvarende formene på løsningene med odde paritet.
- c) Anti grensebetingelsene som må være oppfylt for  $x = \pm L$ . Bruk disse til å vise at for løsninger med like paritet er betingelsene for løsning og dermed energien gitt av

$$\operatorname{tg}(kL) = \frac{\alpha}{k}$$

og tilsvarende for odde paritet

$$\cot g(kL) = -\frac{\alpha}{k}$$

- d) Vi plasserer så en ugjennomtrengelig vegg ved  $x = 0$ ; d.v.s. vi ser på en partikkel som beveger seg i området  $0 \leq x \leq L$  i potensialet angitt i figur 2.



Figur 2

Vis at løsningsbetingelsen i dette potensialet er gitt av

$$\cot g(kL) = -\frac{\alpha}{k}.$$

Dette viser at sammenlignet med potensialet under a) får potensialet under d) de samme energitilstander som odde tilstander under a). Forklar dette med ord.

- e) Finn til slutt massen til den letteste partikkelen som kan bindes av potensialbrønnen i punkt d).

### Oppgave 2.

I denne oppgaven skal vi anvende Landés g-faktor

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

til å se på splittingen et B-felt gir av linjen som følger av den elektriske dipolovergangen  $3d_{5/2} \Rightarrow 2p_{3/2}$

- a) Gjør kort rede for utvalgsreglene for dipoloverganger.
- b) Tegn opp splittingen av de to nivåene  $3d_{5/2}$  og  $2p_{3/2}$  i et (svakt) magnetfelt, og beregn energiskiftet på grunn av feltet, i enheter av  $\Delta E_B = e\hbar B / 2m_e = \mu_B B$  for alle tillatte elektriske dipoloverganger mellom nivåene. Angi resultatet i en tabell.

Hint: De to forskjellige g-faktorene fører til oppsplitting i hele 12 forskjellige spektrallinjer når  $B \neq 0$ .

### Oppgave 3.

- a) For p-tilstandenes vinkeldel brukes ofte kulefunksjonene

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta ; Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

Disse er hensiktsmessige for atomer fordi de både er egenfunksjoner til  $L^2$  og  $L_z$ . I kjemi sammenheng er det ofte mer hensiktsmessig å operere med orbitaler med enkle romlige symmetriegenskaper. Vis at følgende sett av funksjoner,  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$ , på samme måte som  $Y_{1,m}$ , er ortogonale og normerte

$$p_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (-Y_{1,1} + Y_{1,-1})$$

$$p_y = \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_{1,1} + Y_{1,-1})$$

$$p_z = Y_{1,0}$$

- b) Vis at dette settet av funksjoner har samme symmetri som aksesystemet x, y, z.

- a) Bruk de to laveste én-elektron-tilstandene,  $\phi_{10}$  og  $\phi_{20}$ , (med notasjon  $\phi_{nl}$ ) av hydrogentypen, men med  $Z = 2$  til å konstruere, korrekt antisymmetriserte, tilnærmede uttrykk for de 3 laveste egentilstandene,  $\psi_i(1,2)$  ( $i = 1,2,3$ ) i He-atomet. Gi en kvalitativ begrunnelse for rekkefølgen, når  $\psi_i(1,2)$  ordnes etter stigende energi. Hvilke av tilstandene gir orto- og hvilke gir pare He?

#### Oppgave 4.

- a) Bruk følgende data til å beregne den energi som er nødvendig for å disosiere et KCl molekyl til et nøytralt K atom og et Cl atom: Det første jonasjonspotensial for K er 4,34 eV; elektron affiniteten for Cl er 3,82 eV; likevektsavstanden i KCl er 0,279 nm.

Hint: Vis først at den potensielle energi av  $K^+$  og  $Cl^-$  i avstand  $R$  fra hverandre er gitt av uttrykket:  $V = -\frac{1.44}{R} [eV/nm]$

- b) Et  $Br^-$  jon har en energi som er 3,5 eV lavere enn et nøytralt Br atom. Bruk jonasjonsenergien for K gitt i a) og beregn den største avstand mellom  $K^+$  og  $Br^-$  som gir binding til et KBr molekyl.
- c) Den potensielle energi  $V$  av NaCl er empirisk gitt av uttrykket

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + A e^{-R/\rho}$$

Her er  $R$  avstanden mellom de to kjernene. Likevektsavstanden  $R_0 = 0.24$  nm og dissosiasjonsenergien er 3,6 eV.

Beregn  $A$  og  $\rho/R_0$  fra de oppgitte data. Se bort fra nullpunktsvibrasjoner.

Oppgitt:  $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2$