TFY4215 Innføring i kvantefysikk Eksamen 9. august 2017

LØSNINGSFORSLAG

1) **A**: $\lambda = c/\nu = hc/E = 31\,\mu\text{m}$

2) **D**: $p = E/c = h\nu/c = h/\lambda = 1.48 \cdot 10^{-27}$ kg m/s

3) **D**: $\lambda = h/p = h/\sqrt{2mK} = 6.4$ fm

4) **B**: $v = \sqrt{2K/m} = 0.05c$

5) **D**: $E = hc/\lambda = 17.4$ keV

6) **E**: $T = m\langle v^2\rangle/3k_B = 1.0$ mK

7) **C**: $E = hc/\lambda > W \quad \Rightarrow \quad \lambda < hc/W = 634$ nm

8) **A**: $p = h/\lambda = 4.4 \cdot 10^{-23}$ kg m/s

9) **A**: $m = p^2/2K = h^2/2K\lambda^2 = 1.9 \cdot 10^{-28}$ kg (et myon)

10) **B**: $k = 2\pi/\lambda = 4.2 \cdot 10^{11}$ m^{-1}

11) **D**: $E_1 = \pi^2\hbar^2/2m_eL^2 = 5.8$ meV

12) **E**: $\psi_3(x) = \sqrt{2/L}\sin(3\pi(x + L/2)/L) = -\sqrt{2/L}\cos(3\pi x/L)$. (Fortegnet på $\psi_3(x)$ er uten fysisk betydning.)

13) **D**: $\lambda = hc/(E_4 - E_1) = hc/(15\pi^2\hbar^2/2m_eL^2) = 14\,\mu\text{m}$

14) **D**: $\langle x\rangle_0 = \int \Psi^*(x,0)x\Psi(x,0)dx = 2\cdot(1/L)\int_{-L/2}^{L/2} x\cos(\pi x/L)\sin(2\pi x/L)dx$. Substituerer $z = \pi x/L$, som gir $x = Lz/\pi$, $dx = Ldz/\pi$ og integrasjonsgrenser $\pm\pi/2$: $\langle x\rangle_0 = 2\cdot(1/L)\cdot(L/\pi)^2 \cdot \int_{-\pi/2}^{\pi/2} z\cos(z)\sin(2z)dz = (2L/\pi^2)\cdot(8/9) = 16L/9\pi^2 \simeq 0.18L$, der vi har brukt integralet som er oppgitt i formelvedlegget.

15) **D**: $\langle E\rangle = E_1/2 + E_2/2 = 5\pi^2\hbar^2/4m_eL^2 = 15$ meV

16) **D**: $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ slik at $E_3 = 3.5\hbar\omega$.

17) **B**: $5\hbar\omega/2 \geq m\omega^2x^2/2 \Rightarrow |x| \leq \sqrt{5\hbar/m\omega}$

18) **C**: $|\psi_n(x)|^2 \sim \exp(-x^2/(\sqrt{\hbar/m\omega})^2)$ slik at $\xi = \sqrt{\hbar/m\omega}$, for enhver stasjonær tilstand for en slik endimensjonal harmonisk oscillator.

19) **A**: Må ha kvantetall 1, 2 og 3 for å få kvadratsum lik 14. Dette gir orbital degenerasjon 6, som kombinert med spinndegenerasjon 2 gir total degenerasjon 12.

20) **E**: Pauliprinsippet gir 2 elektroner i tilstand (111), 6 i tilstandene (112), (121), (211) og 2 i (122) (evt (212) eller (221)). Gir total energi $2\cdot 3 + 6\cdot 6 + 2\cdot 9 = 60$, i enheten $\hbar^2\pi^2/2m_eL^2$.

21) **D**: 1 (evt 2 pga spinndegenerasjon) tilstand pr positive heltallskombinasjon (n_x, n_y, n_z) kombinert med at $E \sim n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ innebærer at antall tilstander $N(E)$ med energi mindre enn en gitt E (dvs, mellom 0 og E) øker som $E^{3/2}$. Antall tilstander pr energienhet avhenger dermed av energien som $g(E) = dN/dE \sim E^{1/2}$.

22) **A**: 0. Derivasjonsrekkefølgen har her ingen betydning.

23) **A**: 0. Ordinær multiplikasjon med x og y; rekkefølgen uten betydning.

24) **C**: $[\widehat{L}_x, \widehat{p}_y] = [y\widehat{p}_z - z\widehat{p}_y, \widehat{p}_y] = i\hbar\widehat{p}_z$

25) **E**: Dette er en todimensjonal potensialboks, mhp x- og z-retningen, kombinert med et harmonisk-oscillator-potensial mhp y-retningen. Den gitte funksjonen tilsvarer grunntilstanden mhp y-retningen, samt $n_x = 3$ og $n_z = 1$ mhp bokspotensialet. Energien er derfor $E = \hbar\omega/2 + (3^2 + 1^2)\pi^2\hbar^2/2mL^2 = \hbar\omega/2 + 5\pi^2\hbar^2/mL^2$

26) **E**: E øker med antall nullpunkter: $E_A < E_B < E_C$

27) **E**: Bare A krummer bort fra x-aksen der $V = V_0 = 0.3$ eV, slik at bare A har $E < 0.3$ eV.

28) **C**: Siden $\psi \simeq$ konstant der $V = 0.60$ eV, er energien i denne tilstanden ca 0.6 eV.

29) **E**: Bølgelengden er ca 3.5 nm der $V = 0$. Dermed er $E = \hbar^2k^2/2m = \hbar^2(2\pi)^2/2m\lambda^2 \simeq 0.8$ eV.

30) **E**: 11 nullpunkter betyr 11. eksiterte tilstand og dermed 11 med lavere energi.

31) **A**: Her er $l = 0$ og dermed alle komponenter av $\boldsymbol{L}$ lik null.

32) **E**: Her er $l = 0$ og dermed alle komponenter av $\boldsymbol{L}$ lik null.

33) **B**: Vi ser uten videre at $P_{20} = 0$ i $r = 0$ og i $r = 2a_0$. Regner ut dP_{20}/dr, setter lik null, og finner de to røttene $(3 \pm \sqrt{5})a_0$, der positivt fortegn gir maksimal verdi.

34) **C**: $\lambda = hc/(E_4 - E_2)$, der $E_2 = -13.6/4$ eV og $E_3 = -13.6/16$ eV. Dermed er $\lambda = 485$ nm.

35) **D**: 9 basisfunksjoner pr C-atom og 2 basisfunksjoner pr H-atom gir 48 i alt.

36) **C**: 6 elektroner pr C-atom og 1 elektron pr H-atom gir 30 elektroner i alt. Pauliprinsippet tillater inntil 2 elektroner pr MO. I grunntilstanden vil følgelig de 15 MO med lavest energi være okkupert av elektroner.

37) **A**: Like paritet betyr at $\Psi(\boldsymbol{r}) = \Psi(-\boldsymbol{r})$ mens odde paritet betyr at $\Psi(\boldsymbol{r}) = -\Psi(-\boldsymbol{r})$. Fra figuren ser vi at Ψ_A og Ψ_B har like paritet mens Ψ_C og Ψ_D har odde paritet.

38) **A**: Det er p_y-funksjoner på C-atomene som bidrar til disse MOene.

39) **E**: Ettersom disse fire MO er satt sammen av nøyaktig de samme basisfunksjonene, må vi ha økende energi med økende antall nullpunkter (nodalplan) i Ψ. Bortsett fra et felles nodalplan i xz-planet har Ψ_D, Ψ_B, Ψ_C og Ψ_A henholdsvis 0, 1, 2 og 3 nodalplan. Rangeringen blir derfor

$$E_D < E_B < E_C < E_A$$

40) **D**: Minima og maksima finnes ved å se på den 1. og 2. deriverte. Vi ser på

$$f(x) = \frac{5}{2}x^2 - 3x^3 + x^4$$

siden E_0 er en konstant. Vi deriverer og finner

$$f'(x) = 5x - 9x^2 + 4x^3 = x\left(5 - 9x + 4x^2\right)$$

Stasjonære punkter der $f'(x) = 0$; gir løsningene $x = 0$, samt

$$x = \frac{9 \pm \sqrt{81-80}}{8} = \frac{9 \pm 1}{8}$$

Vi ser at startgeometrien tilsvarer

$$x_i = \frac{9+1}{8} = \frac{5}{4}$$

Reaksjonen skal gå mot lavere verdier av x via en transisjonstilstand og ende opp i et energiminimum. Det betyr at vi må ha

$$x_{\mathrm{TS}} = \frac{9-1}{8} = 1 \quad , \quad x_f = 0$$

Vi ser at $E_f = E(0) = 0$. Innsetting av $x_{\mathrm{TS}} = 1$ gir

$$E_{\mathrm{TS}} = E_0\left(\frac{5}{2} - 3 + 1\right) = 0.5E_0 = 800 \text{ meV}$$

Innsetting av $x_i = 5/4$ gir

$$E_i = E_0\left(\frac{5\cdot 5^2}{2\cdot 4^2} - \frac{3\cdot 5^3}{4^3} + \frac{5^4}{4^4}\right) = \frac{125}{256}E_0 \simeq 781 \text{ meV}$$

Aktiveringsenergien for polymeriseringsreaksjonen er dermed

$$E_a = E_{\mathrm{TS}} - E_i = \frac{128-125}{256}E_0 = \frac{3}{256}E_0 \simeq 19 \text{ meV}$$

41) **E**: Polymeriseringsenergien blir

$$\Delta E = E_f - E_i = -781 \text{ meV}$$

42) **A**: Her er $3N - 6 = 30 - 6 = 24$, dvs 24 vibrasjonsmoder.

43) **C**: r og t er amplitudene for hhv refleksjon og transmisjon, generelt komplekse størrelser. Det er $R = |r|^2$ og $T = |t|^2$ som gir sannsynligheten for hhv refleksjon og transmisjon.

44) **D**: Med fravær av uendelige sprang i $V(x)$ har vi alltid kontinuerlige $\psi(x)$ og $d\psi/dx$ overalt.

45) **B**: $T(E = V_0) = (1 + k^2L^2/4)^{-1}$ med $k^2 = 2m_eE/\hbar^2 = 5.2883\cdot 10^{18}$ m^{-2}. Dette gir $T = (1 + 16.196)^{-1} = 0.058$

46) **A**: $T = 1$ for $\sin qL = 0 \Rightarrow qL = n\pi$, med $n \geq 1$. ($n = 0$ og dermed $q = 0$ gir ikke $T = 1$.) Minste verdi for E har vi med $n = 1$, dvs $E = V_0 + \pi^2\hbar^2/2m_eL^2 = 0.20 + 0.03 = 0.23$ eV.

47) **D**: Med $\kappa L \gg 1$ er $\sinh^2 qL \sim \exp(2\kappa L) \gg 1$, slik at $T \sim \exp(-2\kappa L)$. Dermed er $\xi = 1/2\kappa = (2\sqrt{2m_e(V_0 - E)}/\hbar)^{-1} = 0.22$ nm

48) **B**: Laveste resonans innebærer *nesten* en halv bølgelengde på brønnens utstrekning ($\lambda/2$ er litt større enn brønnbredden, siden det ikke er helt ugjennomtrengelige barrierer). Dermed *ingen* nullpunkter.

49) **A**: Situasjonen er nesten den samme som for en partikkel i boks, slik at resonansenergiene øker kvadratisk med n, dvs $E_n \sim n^2$. Det betyr at $E_2 \simeq 4E_1 = 76$ meV.

50) **B**: Siden resonansenergiene øker kvadratisk med n, blir kriteriet $n^2 \cdot 19 < 200$, dvs $n < \sqrt{200/19} = 3.24$; følgelig 3 resonanser under 200 meV.