TFY4215 Innføring i kvantefysikk Løsningsforslag til Eksamen 30. mai 2018

1) **B**: $\lambda = hc/E = 21$ pm

2) **E**: $\lambda = h/\sqrt{3mk_BT} = 0.11$ Å.

3) **C**: Midlere translasjonsenergi er $3k_BT/2$ (3 kvadratiske frihetsgrader), slik at $v_{\mathrm{rms}} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{3k_BT/m} \simeq 0.8$ km/s

4) **A**: $m = 180 \cdot 12u + 250 \cdot 19u = 6910u = 1.147 \cdot 10^{-23}$ kg, slik at $\lambda = h/p = 2\pi\hbar/mv \simeq 0.7$ pm

5) **E**: Total energi: $E = K + m_ec^2 = 1.3 \cdot 10^{-13}$ J. Impuls: $p = (1/c)\sqrt{E^2 - (m_ec^2)^2} = 3.36 \cdot 10^{-22}$ kg m/s $= 630$ keV/c

6) **E**: Coulombpotensialet er $V(r) = -e^2/4\pi\varepsilon_0 r$, og i Bohr-modellen er total energi $E = -e^2/8\pi\varepsilon_0 r$ (som med $r = a_0$ gir -13.6 eV). Dermed er $K = e^2/8\pi\varepsilon_0 r = -V/2$

7) **B**: $\lambda = hc/(E_4 - E_1) = 3.5\,\mu$m

8) **E**: Absoluttkvadratet av $\psi(x,t)$ blir på formen $f(x) + g(x)\cos\left(\frac{(E_4 - E_1)t}{\hbar}\right)$, som oscillerer med periode $T = 2\pi\hbar/(E_4 - E_1) = 12$ fs

9) **D**: Sannsynligheten for å måle E_1 er $|c_1|^2$, der

$$c_1 = \int_0^L \psi_1^*(x)\Psi(x,0)dx = \frac{\sqrt{10}}{\pi}\left(\cos\frac{2\pi}{5} - \cos\frac{3\pi}{5}\right) \simeq 0.6221.$$

Dermed er $|c_1|^2 = 0.3870 \simeq 39\%$.

10) **A**: Siden $\psi_2(x)$ er antisymmetrisk og $\Psi(x,0)$ er symmetrisk (om $L/2$), blir $c_2 = 0$.

11) **E**: De 20 elektronene vil okkupere de 10 laveste (romlige) tilstandene $\psi_1, \ldots, \psi_10$, to elektroner i hver, et med spinn opp og et med spinn ned. Systemets totale energi er dermed

$$E = 2 \cdot \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_eL^2}\,(1 + 4 + 9 + 16 + 25 + 36 + 49 + 64 + 81 + 100) = 18\,\mathrm{eV}.$$

12) **D**: Minste fotonenergi som kan gi eksitasjon av et elektron er $\Delta E = E_{11} - E_{10}$ slik at $\lambda_{\max} = hc/\Delta E = 2.5\,\mu$m.

13) **B**: $k = m\omega^2 = 957$ N/m $\simeq 9.6$ N/cm.

14) **C**: Klassisk tillatt område i 1. eksiterte tilstand er bestemt ved $E_1 > m\omega^2 x^2/2$, som med $E_1 = 3\hbar\omega/2$ gir $|x| < \sqrt{3\hbar/m\omega} = 16$ pm. Dvs, en total utstrekning på 32 pm.

15) **B**: Her er $\hbar\omega = 511$ meV og ved 300 K er $k_B T = 26$ meV, slik at Boltzmannfaktoren blir ca $3 \cdot 10^{-9}$. Det betyr at nesten alle molekylene befinner seg i grunntilstanden mhp vibrasjonsfrihetsgradene. En liten økning i temperaturen vil i liten grad påvirke dette, slik at vibrasjonsfrihetsgradene ikke bidrar til gassens varmekapasitet. (Det klassiske ekvipartisjonsprinsippet gjelder derfor ikke for vibrasjonsfrihetsgradene.)

16) **C**: Fjærkonstanten påvirkes ikke av at hydrogenkjernen får tilført et nøytron. Redusert masse øker, fra $38u/40$ til $38u/21$. Dermed reduseres frekvensen med faktoren $\sqrt{21/40} = 0.7246$, og blir i DF $8.98 \cdot 10^{13}$ Hz.

17) **C**: $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$

18) **A**: $[x, \hat{L}_x] \sim [x, y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}] = 0$

19) **E**: $[x, \hat{K}] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(x\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\,x\right) = \ldots = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x} = i\hbar\hat{p}_x/m$

20) **A**: $[\hat{p}_x, \hat{L}_x] = 0$

21) **D**: $[\hat{p}_x, V(x)] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x}$

22) **A**: $[\hat{p}_x, \hat{K}] = 0$

23) **E**: $E_{11} = (1 + 1/2 + 1 + 1/2)\hbar\omega = 3\hbar\omega$

24) **D**: $\psi_{11} \sim \sin 2\phi$ og her er $\hat{L}^2 = \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\partial^2/\partial\phi^2$, med egenverdi $L^2 = 4\hbar^2$. Dermed er $L = 2\hbar$

25) **C**: Like stor sannsynlighet for $L_z = -2\hbar$ som $+2\hbar$. ψ_{11} er ikke egenfunksjon til $\hat{L}_z$.

26) **A**: Vi trenger en egenfunksjon til $\hat{L}_z$ med egenverdi $-2\hbar$. Da må bølgefunksjonen være proporsjonal med $\exp(-2i\phi) = \cos 2\phi - i\sin 2\phi$. Bruker vi de oppgitte sammenhengene, samt at $x = r\cos\phi$ og $y = r\sin\phi$, kan vi skrive $\exp(-2i\phi) = (x^2 - y^2 - 2ixy)/r^2$, og da gjenstår bare en liten kontroll på normeringsfaktorene før vi kan konkludere med valget $\psi_{20} - \psi_{02} - \sqrt{2}i\psi_{11}$.

27) **A**: Innsetting av den gitte prøveløsningen gir

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2}\,(1 - \cos ka)\,.$$

Dette er grafen i figur A.

28) **C**: Siden $\cos ka$ kan variere mellom -1 og 1, blir båndbredden $2\hbar^2/ma^2$.

29) **A**: Ingen nullpunkter i A, dermed grunntilstanden.

30) **D**: Tre nullpunkter i B, dermed 3. eksiterte tilstand.

31) **C**: ψ_A har bølgelengde like i overkant av 8 nm. Det betyr at energien er omtrent $\hbar^2 k_A^2/2m_e = 4\pi^2\hbar^2/2m_e\lambda_A^2 = 0.02$ eV. (Her kunne det lønne seg å bruke $\hbar^2/2m_e = 0.0378$ eV nm^2, dvs $E_A = 0.0378 \cdot 4\pi^2/8^2 = 0.02$ eV.)

32) **B**: ψ_B har $\lambda_B \simeq 2.2$ nm, slik at $E_B \simeq 0.0378 \cdot 4\pi^2/2.2^2 = 0.3$ eV.

33) **A**: $\lambda \simeq 12$ nm utenfor brønnområdet, slik at $K = E - V_0 \simeq 0.0378 \cdot 4\pi^2/12^2 \simeq 0.01$ eV, som med $V_0 = 1.0$ eV gir $E \simeq 1.01$ eV.

34) **B**: Et rimelig estimat fra figuren er $\lambda/2 = 2.5$ nm i grunntilstanden, i brønnområdene, dvs $\lambda = 5$ nm. Da er energien omtrent $0.0378 \cdot 4\pi^2/5^2 = 0.06$ eV.

35) **A**: 4. eksiterte tilstand har omtrent samme bølgelengde som grunntilstanden, og derfor omtrent samme energi.

36) **E**: $\psi = A\exp(-\kappa x)$, der $\hbar^2\kappa^2/2m_e = V_0 - E$. Med oppgitte tallverdier: $\psi(7)/\psi(14) = \exp(7\kappa) = 23.56$, slik at $\kappa = 0.451$ nm^{-1}. Dermed: $E = V_0 - 0.0378 \cdot 0.451^2 = 0.50 - 0.008 = 0.492$ eV.

37) **C**: Disse tilstandene har paritet $(-1)^l$ som med $l = 2$ betyr like paritet.

38) **D**: Her er $L = \hbar\sqrt{2 \cdot 3} = \sqrt{6}\hbar$ og $L_z = \hbar$ siden $l = 2$ og $m = 1$. Dermed er vinkelen mellom L_z (dvs z-aksen) og $\boldsymbol{L}$ bestemt ved $\cos\alpha = 1/\sqrt{6}$, dvs $\alpha = 66°$.

39) **C**: $u_{32} = (R_{32}r)^2 \sim r^6 \exp(-2r/3a_0)$. Deriverer og setter den deriverte lik null og finner maxpunkt for $r = 9a_0$.

40) **A**: Utvalgsregelen for Δl tilsier overgang til en $2p$-tilstand, slik at fotonet har energi $13.6(1/4 - 1/9)$ eV $= 1.889$ eV. Bølgelengden er da

$hc/E = 1237/1.889 = 656$ nm.

41) **C**: Vi har $Y_{21} \sim \sin\theta\cos\theta\exp(i\phi) = \sin\theta\cos\theta(cos\phi + i\sin\phi)$. Siden $x/r = \sin\theta\cos\phi$, $y/r = \sin\theta\sin\phi$ og $z/r = \cos\theta$ blir $Y_{21} \sim xz + iyz \sim d_{xz} + id_{yz}$.

42) **E**: Innsetting i definisjonen for j og til slutt innsetting av $x = 0$ gir $j = \hbar k_0/\sqrt{2\pi}m\sigma$.

43) **A**: Av symmetrigrunner må vi her ha $j = 0$ i $x = 0$. Det følger også direkte av at den gitte $\Psi(x, 0)$ er en reell funksjon.

44) **C**: Her er $R = 1 - T = 0.04 = (2/10)^2$ slik at $(k - q)/(k + q) = 0.2$. Siden $E \sim k^2$ og $E - V_0 \sim q^2$, finner vi etter hvert $E = 1.8V_0 = 4.5$ eV.

45) **B**: 2 basisfunksjoner for hvert H-atom og 9 for hvert av de andre gir totalt $2 \cdot 11 + 9 \cdot 14 = 148$.

46) **C**: Vi har 7 C-atomer, 6 N-atomer, 1 O-atom og 11 H-atomer. I alt 102 elektroner som vil okkupere 51 molekylorbitaler.

47) **D**: Hvert atom har 3 frihetsgrader i 3 dimensjoner, slik at et molekyl med N atomer har totalt $3N$ frihetsgrader. 3 av disse tilsvarer ren translasjon av molekylet og 3 tilsvarer rotasjon av molekylet (med mindre det er et lineært molekyl, hvilket ikke er tilfelle her). Da gjenstår $3N - 6$ frihetsgrader knyttet til vibrasjonsbevegelsen, såkalte normale moder. Med 25 atomer blir dette 69 normale moder.

48) **D**: De to reaktantene har 3 translasjons- og 3 rotasjonsfrihetsgrader hver, i alt 12 frihetsgrader som ikke representerer vibrasjonsbevegelse. Produktet har bare 6 frihetsgrader som ikke tilsvarer vibrasjon. Følgelig har produktet 6 normale moder mer enn de to reaktantene til sammen. (Antall frihetsgrader totalt er selvsagt det samme på begge sider av reaksjonsligningen.)

49) **B**: Antall basisfunksjoner i den nevnte reaktanten er 39, i produktet 148. Forventet regnetid for produktet er da ca $18 \cdot (148/39)^4 = 3733$ sekunder, dvs omtrent 1 time.

50) **E**: Reaksjonen er eksoterm og avgitt energi (varme) pr reaksjon er fra figuren ca 28 kcal/mol. I enheten eV blir dette $28000 \cdot 4.184/6 \cdot 10^{23} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} = 1.2$.