

TFY4215 Innføring i kvantefysikk Løsningsforslag til Eksamen 6. august 2018

1) **C:** $E = hc/\lambda = 2.71 \cdot 10^{-15} \text{ J} = 17 \text{ keV}$

2) **E:** Molekylets masse er $(12 \cdot 60 + 19 \cdot 48) \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} = 2.71 \cdot 10^{-24} \text{ kg}$
slik at $\lambda = h/\sqrt{3mk_B T} = 2.6 \text{ pm}$

3) **A:** Midlere translasjonsenergi er $3k_B T/2$ (3 kvadratiske frihetsgrader),
slik at $v_{\text{rms}} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{3k_B T/m} = 92 \text{ m/s} \simeq 0.1 \text{ km/s}$

4) **E:** Molekylet er ikke lineært og har dermed 3 kvadratiske rotasjonsfrihetsgrader, slik at midlere rotasjonsenergi pr molekyl er $3k_B T/2$, det samme som midlere translasjonsenergi. Ved 560 K er dette 72 meV

5) **C:** Total energi: $E = K + m_p c^2 = 1189 \text{ MeV}$. Fra $E^2 = (pc)^2 + (m_p c^2)^2$ følger det at impulsen er $p = (1/c)\sqrt{E^2 - (m_p c^2)^2} = 729 \text{ MeV}/c$

6) **D:** Masse 32u gir hvileenergi ca 30 GeV, og dermed total energi ca 55 GeV. Impulsen kvadrert blir da $p^2 = 2125 \text{ GeV}^2/c^2$. Omskriving av uttrykket for relativistisk impuls gir $v^2/c^2 = 1/(1 + (mc/p)^2)$ hvoretter innsetting av tallverdiene $mc = 30 \text{ GeV}/c$ og utregnet verdi for p^2 til slutt gir $v/c \simeq 0.838$, dvs $v \simeq 2.5 \cdot 10^8 \text{ m/s}$

7) **E:** Dette er partikkel i boks, med boksbredde $L = 6.5 \text{ nm}$. Kvantiserte energinivåer er $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$. Dermed: $\lambda = hc/(E_2 - E_1) = 47 \mu\text{m}$

8) **B:** Absoluttkvadratet av $\psi(x, t)$ blir på formen $f(x) + g(x) \cos\left(\frac{(E_3 - E_1)t}{\hbar}\right)$, som oscillerer med frekvens $f = 1/T = (E_3 - E_1)/2\pi\hbar = 17 \text{ THz}$

9) **A:** Siden $\psi_1(x)$ er symmetrisk mens $\Psi(x, 0)$ er antisymmetrisk (om $L/2$), blir $c_1 = 0$

10) **B:** Sannsynligheten for å måle E_2 er $|c_2|^2$, der

$$c_2 = \int_0^L \psi_2^*(x) \Psi(x, 0) dx.$$

Med $\psi_2^*(x) = \psi_2(x) = \sqrt{2/L} \sin(2\pi x/L)$ og $\Psi(x, 0)$ som oppgitt i oppgave 9 har vi

$$c_2 = (\sqrt{32}/L) \cdot \int_{3L/8}^{4L/8} \sin(2\pi x/L) dx = (\sqrt{8}/\pi) \cdot (1 - 1/\sqrt{2}) = 0.2637.$$

Dermed er $|c_2|^2 = 0.0695 \simeq 7\%$

11) **C:** $k = m\omega^2 = 4\pi^2 m f^2 = 13.4 \text{ N/m}$

12) **A:** $E = hf = 23 \text{ meV}$

13) **E:** $\exp(-\hbar\omega/k_B T) = \exp(-hf/k_B T) \simeq \exp(-23/26) \simeq 0.4$

14) **A:** Det gitte potensialet $E(R)$ er tilnærmet harmonisk (dvs kvadratisk) omkring minimumspunktet R_0 , med $E(R_0) = 0$. Med R i nærheten av R_0 kan vi skrive

$$E(R) \simeq E_0 [1 - 1 + \alpha(R - R_0)]^2 = E_0 \alpha^2 (R - R_0)^2,$$

og sammenligner vi med den generelle formen $(m\omega^2/2)(R - R_0)^2$ for en harmonisk oscillator, ser vi at vi må velge

$$\alpha = \sqrt{m/2E_0} \cdot 2\pi f = 6.2 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1},$$

dvs $\alpha = 6.2$ pr nm

15) **B:** Siden Cs har mye større masse enn Li, ligger massesenteret (CM) temmelig nær Cs-kjernen. Molekylets treghetsmoment (mhp en akse gjennom CM) er derfor med god tilnærming $I_0 \simeq m_{\text{Li}} R_0^2 = 7u R_0^2$. Kinetisk rotasjonsenergi er kvantisert, siden $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ ($l = 0, 1, 2 \dots$). Energiforskjellen mellom de to laveste rotasjonsnivåene er derfor med god tilnærming

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{I_0} \simeq \frac{\hbar^2}{7u R_0^2} = 46 \mu\text{eV}.$$

En mer nøyaktig beregning av I_0 gir $48 \mu\text{eV}$

16) **B:** I alt 58 elektroner og 2 elektroner i hver molekylorbital (et med spinn opp og et med spinn ned) gir 29 molekylorbitaler okkupert av elektroner

17) **A:** $[x, x] = 0$

18) **C:** $[\hat{p}_x, x^2]f(x) = (\hbar/i)(\partial/\partial x)x^2 f - (\hbar/i)x^2(\partial/\partial x)f = (\hbar/i)2xf$

19) **E:** $[\hat{p}_x, \hat{L}_z]f(x, y) = [\hat{p}_x, x\hat{p}_y - y\hat{p}_x]f = (\hbar/i)^2[(\partial/\partial x)(x\partial f/\partial y) - x(\partial/\partial y)\partial f/\partial x] = (\hbar/i)^2\partial f/\partial y = (\hbar/i)\hat{p}_y f = -i\hbar\hat{p}_y f$

20) **D:** $[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = -i\hbar\hat{L}_y$

21) **D:** Her er $E = (n_x + n_y + n_z + 3/2)\hbar\omega$ slik at vi må finne hvor mange muligheter vi har for å ha $n_x + n_y + n_z = 3$: (300), (030), (003),

(210), (201), (120), (021), (012), (102) og (111), dvs 10 stk

22) A: ψ_{000} er kulesymmetrisk, med $L = 0$

23) C: Siden tilstanden (001) ikke avhenger av vinkelen ϕ (bare av r og vinkelen θ), og $\hat{L}_z = (\hbar/i)\partial/\partial\phi$, blir $L_z = 0$ i denne tilstanden

24) E: 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 $x = r \sin \theta \cos \phi$ og $y = r \sin \theta \sin \phi$, kan vi skrive $r^2 \sin^2 \theta \exp(2i\phi) = (x^2 - y^2 + 2ixy)$, og da gjenstår bare en liten kontroll på normeringsfaktorene før vi kan konkludere med valget $(200) - (020) + \sqrt{2}i(110)$.

25) B: Innsetting av den gitte prøveløsningen gir

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

Det betyr at $\hbar^2/ma^2 = E_0$, dvs $m = \hbar^2/E_0a^2$, som med oppgitte verdier for E_0 og a gir $m = 0.47m_e$

26) C: Siden $\cos ka$ kan variere mellom -1 og 1 , blir båndbredden $2E_0 = 2.0$ eV

27) C: To nullpunkter i c, dermed 2. eksiterte tilstand

28) B: Et nullpunkt i d, dermed 1. eksiterte tilstand

29) A: Alle fire har krumning bort fra x -aksen der $V = 0$. Dermed har alle fire tilstander $E < V = 0$

30) A: Figuren antyder at ψ_a har bølgelengde omtrent lik 5 nm i området der $V = -1.0$ eV. Det betyr at den kinetiske energien her er omtrent $\hbar^2 k_a^2 / 2m_e = 4\pi^2 \hbar^2 / 2m_e \lambda_a^2 = 0.06$ eV. Dermed er $E_a = V + K_a = -0.94$ eV

31) D: $\lambda \simeq 9$ nm der $V = 1.0$ eV, slik at kinetisk energi her er omtrent $\hbar^2 k^2 / 2m_e = 4\pi^2 \hbar^2 / 2m_e \lambda^2 = 0.018$ eV. Med $V = 1.0$ eV gir dette $E \simeq 1.018$ eV

32) C: Tilstandene a, b, c og d har hhv 0, 1, 2 og 3 nullpunkter, som tilsvarer økende energi. Tilstand a og b har nesten lik energi, men E_b er litt større enn E_a . Tilsvarende for c og d

33) A: 1. eksiterte tilstand (b) har omtrent samme bølgelengde som grunntilstanden (a), og derfor omtrent samme energi, dog litt større

34) B: $\lambda \simeq 7$ nm der $V = 1.0$ eV, slik at kinetisk energi her er omtrent $\hbar^2 k^2 / 2m_e = 4\pi^2 \hbar^2 / 2m_e \lambda^2 = 0.03$ eV. Med $V = 1.0$ eV gir dette $E \simeq 1.03$ eV

35) B: Disse tilstandene har paritet $(-1)^l$ som med $l = 1$ betyr odde paritet

36) E: Her er $L = \hbar\sqrt{1 \cdot 2} = \sqrt{2}\hbar$ og $L_z = 0$ siden $l = 1$ og $m = 0$. Dermed er vinkelen mellom L_z (dvs z -aksen) og \mathbf{L} bestemt ved $\cos \alpha = 0$, dvs $\alpha = 90^\circ$

37) D: $u_{21} = (r R_{21})^2 \sim r^4 \exp(-r/a_0)$. Deriverer og setter den deriverte lik null og finner maxpunkt for $r = 4a_0$

38) C: Utvalgsregelen for Δl tilsier at eneste mulighet er overgang til en $1s$ -tilstand, slik at fotonet har energi $13.6(1/1 - 1/4)$ eV = 10.2 eV. Bølgelengden er da $hc/E = 1237/10.2 = 121$ nm

39) C: Vi har $p_x = (Y_{1-1} - Y_{11})/\sqrt{2}$ og $p_y = i(Y_{1-1} + Y_{11})/\sqrt{2}$, slik at $Y_{11} = -(p_x + ip_y)/\sqrt{2}$

40) B: Vi bruker definisjonen av $\langle p \rangle$ (der integralene over x går fra $-\infty$ til ∞):

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int \Psi^*(x, 0) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi(x, 0) dx \\ &= \int \Psi^*(x, 0) (-2\alpha \hbar x / i + \hbar \beta) \Psi(x, 0) dx \\ &= \hbar \beta \end{aligned}$$

siden $\int x |\Psi(x, 0)|^2 dx = 0$ av symmetrigrunner og $\int |\Psi(x, 0)|^2 dx = 1$ da $\Psi(x, 0)$ er normert

41) A: Her er integranden antisymmetrisk og $\langle p \rangle = 0$. En alternativ måte å argumentere på er at $\Psi(x, 0)$ må være kompleks og ikke reell for å gi en midlere impuls ulik null

42) D: $T = |t|^2 = 1/(1 + (m\beta/k\hbar^2)^2) = 1/(1 + m\beta^2/2E\hbar^2)$ slik at $E = m\beta^2/2\hbar^2(1/T - 1) = 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot (1.6 \cdot 10^{-28})^2 / (2 \cdot (1.05 \cdot 10^{-34})^2 \cdot (2 - 1)) \simeq 6.6$ eV

43) E: Total bindingsenergi er

$$\Delta E = E(G - C) - E(G) - E(C) = -0.0494084 \text{ au,}$$

dvs -1.34391 eV, som fordelt på 3 hydrogenbindinger blir 448 meV pr hydrogenbinding

- 44) C:** Ikke-lineære molekyler har 3 translasjons- og 3 rotasjonsfrihetsgrader
- 45) E:** Hvert atom har 3 frihetsgrader i 3 dimensjoner, slik at et system med N atomer har totalt $3N$ frihetsgrader. I et system der alle atomene er bundet til hverandre, og dermed danner et slags molekyl, vil 3 av disse tilsvare ren translasjon av molekylet og 3 vil tilsvare ren 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 29 atomer blir dette 81 normale moder
- 46) A:** I likevekt er V_M minimal, noe som inntreffer når $x = d$. Følgelig er $d = 1.1 \text{ \AA}$
- 47) B:** I likevekt er $V_M = -V_0$. Følgelig er $V_0 = 30 \text{ eV}$
- 48) D:** Rekkeutvikling av eksponentialfunksjonen til 1. orden gir $V_M(x) \simeq V_0 \kappa^2 (x - d)^2 - V_0$, slik at $k = 2\kappa^2 V_0$
- 49) A:** $\omega = \sqrt{k/m}$ med $k = 1750 \text{ N/m}$ og (reduisert) masse $m = 7m_p$ gir $E_0 = \hbar\omega/2 = 127 \text{ meV}$
- 50) C:** Når $x \gg d$, ser vi at $V_M \rightarrow 0$. Dette tilsvarer at N_2 har dissosiert til to nitrogenatomer. Potensialet er med andre ord valgt lik null når bindingen er brutt