TFY4215 Innføring i kvantefysikk Løsningsforslag til Eksamen 8. august 2019

1) **E**
Med energinivåer $E_n = -13.6\,\text{eV}/n^2$ har fotoner som er emittert ved overgang fra $n = 11$ til $n = 6$ energien

$$E_{11} - E_6 = 13.6/6^2 - 13.6/11^2 = 0.265 \text{ eV} = 265 \text{ meV}.$$

2) **B**
Vi prøver en ikke-relativistisk beregning (som vil være OK dersom vi finner $v \ll c$):

$$v = p/m = h/\lambda m = 6.626 \cdot 10^{-34}/(4.4 \cdot 10^{-15} \cdot 80.4 \cdot 10^9 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}/9 \cdot 10^{16}) \text{ m/s} = 1.05 \cdot 10^6 \text{ m/s}.$$

Dette er ca 0.35% av c; dvs en ikke-relativistisk beregning er i orden. Alternativt:

$$v/c = p/mc = pc/mc^2 = (hc/\lambda)/mc^2 = (1237 \cdot 10^{-9}/4.4 \cdot 10^{-15})/80.4 \cdot 10^9 = 0.0035.$$

3) **B**
Midlere kinetiske translasjonsenergi er $3k_BT/2$, og samtidig $p^2/2m$. Med $\lambda = h/p$ har vi da $\lambda = h/\sqrt{3mk_BT}$ som med $m = 514u$ og $T = 750$ K blir ca 4.1 pm.

4) **D**

$$v = \sqrt{2E_1/m_e} = \pi\hbar/m_eL = 65.8 \cdot 10^3 \text{ m/s} \simeq 66 \text{ km/s}.$$

5) **E**

$$h\nu = hc/\lambda = E_2 - E_1 = 3\pi^2\hbar^2/2m_eL^2$$
$$\Rightarrow \quad \lambda = hc \cdot 2m_eL^2/3\pi^2\hbar^2 = 8m_ecL^2/3h \simeq 33\,\mu\text{m}.$$

6) **D**

$$P_1 = |c_1|^2 = 1 - |c_2|^2 - |c_3|^2 = 1 - 4/7 - 1/7 = 2/7 = 29\%.$$

7) **C**

$$c_4 = \int_0^L \psi_4^*(x)\Psi(x,0)dx = 0,$$

siden $\psi_4^*(x)$ er antisymmetrisk mens $\Psi(x,0)$ er symmetrisk på intervallet $(0, L)$. Dermed blir $P_4 = |c_4|^2 = 0\%$.

8) **B**
Potensialet har ingen bestemt symmetri; dermed har bølgefunksjonene heller ingen bestemt symmetri. Laveste energiegentilstand har ingen nullpunkter (enten potensialet er symmetrisk eller ei). Denne tilstanden er klassisk tillatt der (modell-)atom B befinner seg og klassisk forbudt der atom A befinner seg. Og dermed i all hovedsak lokalisert på atom B.

9) **D**
Fotonets energi er 5.17 eV, dvs $hc/\lambda = 5.17$ eV, slik at $\lambda = 1237/5.17$ nm $= 239$ nm.

10) **A**
I det klassisk forbudte området, med konstant potensial, avtar $\psi(x)$ eksponentielt med x: $\psi(x) = C\exp(-\kappa x)$. Dermed er $\ln\psi = \ln C - \kappa x$, dvs en rett linje med stigningstall $-\kappa$. Fra figuren anslår vi på øyemål

$$\kappa = -\frac{\Delta \ln\psi}{\Delta x} \simeq \frac{7.3}{1000 \text{ pm}} = 7.3 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}.$$

Videre er $V_0 - E = \hbar^2\kappa^2/2m_e$, som med tallverdier innsatt gir $E \simeq 8$ eV. Da må dette være en illustrasjon av 6. eksiterte tilstand, med energi 7.91 eV (i følge oppgave 8).

11) **E**
10 elektroner trenger 5 "orbitaler". Med 2 elektroner i hver av de 5 laveste blir totalenergien $2 \cdot (3.73 + 0.96 - 0.55 - 5.72 - 8.92)$ eV $= -21$ eV.

12) **E**
Fra figuren ser vi at en halv bølgelengde av sinus-funksjonen tilsvarer omtrent krystallens utstrekning på 25 nm. Da blir $k = 2\pi/\lambda = 0.13$ nm^{-1}.

13) **A**
Med 50 nullpunkter er dette 50. eksiterte tilstand. Med 10 molekyler i krystallen inneholder hvert bånd 10 (romlige) tilstander. Følgelig tilhører den aktuelle tilstanden det 6. båndet av bundne tilstander, målt nedenfra. De ulike båndene har omtrent samme energier som oppgitt i oppgave 8 for det ene molekylet, og den 6. laveste av disse er 6.1 eV.

14) **C**
100 elektroner får plass i 50 "orbitaler". Hvert energibånd inneholder 10 orbitaler. Dermed er alle tilstander i de 5 laveste energibåndene fylt mens alle med høyere energi er tomme. Båndgapet blir differansen mellom bunnen av 6. bånd og toppen av 5. bånd, ca 2.4 eV.

15) **C**
Null, siden L_x ikke inneholder noe som har med koordinaten x å gjøre.

16) **C**
$\omega^2 = k/\mu$ slik at $k = 4\pi^2\nu^2\mu = 126$ N/m.

17) **C**
$T_{\text{vib}} \sim h\nu/k_B = 6.626 \cdot 10^{-34} \cdot 6.0 \cdot 10^{12}/1.38 \cdot 10^{-23} = 288$ K.

18) **E**
$N_1/N_0 = \exp(-h\nu/k_BT)$. Her er $h\nu \simeq 4 \cdot 10^{-21}$ J og $k_BT \simeq 4 \cdot 10^{-21}$ J (ved 300 K), slik at $N_1/N_0 \simeq 0.4$.

19) **D**
$\Delta K = K_1 - K_0 = \hbar^2/I_0$ med $I_0 = 2 \cdot m_{\text{Ag}} \cdot (d/2)^2 (= \mu d^2) = 6.1 \cdot 10^{-45}$ kgm^2. Dermed blir $\Delta K = 1.8 \cdot 10^{-24}$ J $= 11$ μeV.

20) **E**
$E = (n_x + 1/2 + n_y + 1/2)\hbar\omega$, og de mulige verdiene for n_x og n_y er $0, 1, \ldots$. Minste mulige energi er derfor $\hbar\omega$.

21) **A**
ψ_{11} er proporsjonal med xy, dvs med $\cos\phi \cdot \sin\phi$ (ellers bare konstanter og r-avhengige funksjoner), og dermed proporsjonal med $\sin 2\phi \sim \exp(2i\phi) - \exp(-2i\phi)$. Da innser vi at en måling av L_z vil gi resultatet $2\hbar$ eller $-2\hbar$, med like stor sannsynlighet, slik at $\langle L_z \rangle = 0$.

22) **B**
ψ_{00} er uavhengig av vinkelen ϕ, slik at $L_z = 0$.

23) **E**
$E = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega$ og $n_x + n_y = 6$ kan oppnås på 7 måter: $(0,6), (1,5), (2,4), (3,3), (4,2), (5,1), (6,0)$.

24) **B**
Her kan vi like gjerne maksimere $|\psi_{10}|$ som $|\psi_{10}|^2$. Det er innlysende at $y = 0$ der $|\psi_{10}|$ er maksimal. Den x-avhengige delen er funksjonen $x\exp(-m\omega x^2/2\hbar)$. Vi deriverer denne mhp x, setter lik null og finner $\pm\sqrt{\hbar/m\omega}$.

25) **E**
2 elektroner i hver av de 10 orbitalene ψ_{00}, ψ_{10}, ψ_{01}, ψ_{11}, ψ_{20}, ψ_{02} ψ_{30}, ψ_{21}, ψ_{12} og ψ_{03} gir en totalenergi $E = 2\cdot\hbar\omega + 4\cdot 2\hbar\omega + 6\cdot 3\hbar\omega + 8\cdot 4\hbar\omega = 60\hbar\omega$.

26) **C**
Enklest å regne ut j for $x > 0$, der $j = j_t = \mathrm{Re}\,[\psi_t^*(\hbar/im)(d/dx)\psi_t] = |t|^2\hbar k/m$. Med oppgitt uttrykk for t, samt at $\hbar k/m = p/m = v = \sqrt{2E/m}$, har vi

$$j = \frac{\sqrt{2E/m}}{1 + m\beta^2/2E\hbar^2}.$$

27) **A**
Potensialet V har enhet J. Deltafunksjonen har enhet 1/m. Følgelig har β enhet Jm.

28) **B**
$(rR_{21})^2 \sim r^4\exp(-r/a_0)$, som er maksimal i $r = 4a_0$. Med $a_0 = 0.529$ Å $= 0.0529$ nm blir $r = 0.21$ nm.

29) **A**
ψ_{211} er egentilstand til $\hat{L}_z$, med egenverdi $\hbar$. Da kan vi uten videre slå fast at dette ikke er en egentilstand til $\hat{L}_y$, slik at L_y er uskarp.

30) **E**
Av samme grunn som i forrige oppgave er L_x nå uskarp.

31) **D**
Vi betrakter funksjonen $f(x,y) = E(x,y)/E_0 = x^4 + x^2y^2 - x^2 + y^2$. Siden $\partial f/\partial y = 2x^2y + 2y = 2y(x^2+1)$, er det klart at $y = 0$ i alle stasjonære punkter. (Dette er også innlysende uten å regne, siden begge ledd som avhenger av y er minst mulige for $y = 0$.)

32) **E**
Vi har $\partial f/\partial x = 4x^3 + 2xy^2 - 2x = 2x(2x^2 + y^2 - 1)$. To energiminima med lik energi for $2x^2 - 1 = 0$, dvs $x = \pm 1/\sqrt{2}$.

33) **E**
Vi ser av uttrykket $\partial f/\partial x = 2x(2x^2+y^2-1)$ at $x=0$ er et stasjonært punkt. Av uttrykket for $E(x,y)$ ser vi at $x=0$ tilsvarer en høyere energi enn $x=\pm 1/\sqrt{2}$. Dermed må $x=0$ representere en transisjonstilstand for inversjonsreaksjonen. Energien i de tre stasjonære punktene er

$$\begin{aligned} E(1/\sqrt{2},0) = E(-1/\sqrt{2},0) &= -E_0/4 \\ E(0,0) &= 0 \end{aligned}$$

Energibarrieren for inversjon av molekylet er følgelig lik $E_0/4$, dvs 0.25 eV.

34) **B**
Vi regner ut:

$$\begin{aligned} \frac{d^2f}{dx^2} &= 12x^2+2y^2-2 \\ \frac{d^2f}{dy^2} &= 2x^2+2 \\ \frac{d^2f}{dxdy} &= 4xy \\ \frac{d^2f}{dydx} &= 4xy \end{aligned}$$

Dermed blir matrisen i alternativ B korrekt.

35) **C**
Tilstanden χ er ikke en egentilstand til $\hat{S}_x$. Da er både $\hbar/2$ og $-\hbar/2$ mulige resultater av en måling av S_x.

36) **D**

$$\langle S_x\rangle = \chi^\dagger \hat{S}_x \chi = \frac{\hbar}{5}(1+i/2, -i-1/2)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1-i/2\\ i-1/2\end{pmatrix} = \cdots = -\frac{2\hbar}{5}$$

37) **B**

$$\langle S_y\rangle = \chi^\dagger \hat{S}_y \chi = \frac{\hbar}{5}(1+i/2, -i-1/2)\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1-i/2\\ i-1/2\end{pmatrix} = \cdots = \frac{3\hbar}{10}$$

38) **D**

$$\langle S_z\rangle = \chi^\dagger \hat{S}_z \chi = \frac{\hbar}{5}(1+i/2, -i-1/2)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1-i/2\\ i-1/2\end{pmatrix} = \cdots = 0$$

39) **E**

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} - \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}2i & 0\\ 0 & -2i\end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{4}\cdot 2i \cdot \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \\ &= i\hbar \hat{S}_z. \end{aligned}$$

40) **A**
Niels Bohr kom fra Danmark.