TFY4215 Innføring i kvantefysikk Løsningsforslag til Eksamen 30. mai 2018

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

2) **ABCDE**: $\lambda = h/\sqrt{3mk_BT} = 0.11$ Å. (Trykkfeil i svaralternativene. Alle svar godkjennes.)

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

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

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) **ABCDE**: 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.) (En gammel versjon av vibrasjonsfrekvensen fra litteraturen førte til feil verdi på Boltzmannfaktoren, derfor poeng for alle svar på denne oppgaven.)

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

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) **ABCDE**: Innsetting i definisjonen for j og til slutt innsetting av $x = 0$ gir $j = \hbar k_0/\sqrt{2\pi}m\sigma$. (Trykkfeil i oppgaven: Normeringskonstanten skulle ha inneholdt sigma kvadrert. Alle svar godkjennes.)

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.