

Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Institutt for fysikk

Fagleg kontakt under eksamen:

Navn: Ola Hunderi

Tlf.: 93411

EKSAMEN I FAG SIF4065 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK

Fakultetet for fysikk, informatikk og matematikk

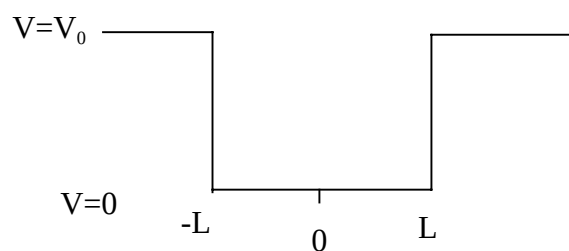
8 august 2001

Tid: 0900 – 1400

Tillatte hjelpemidler (B2): Rottmann: Matematisk formelsamling (alle utgaver)
Barnet & Cronin: Mathematical Formulae
O. Øgrim og B. Ebbe Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk
Typegodkjent kalkulator

Oppgave 1

I dette problemet skal vi se på de tillatte tilstander i en én-dimensjonal boks med endelig vegg-potensial slik som vist på figuren. En partikkel med masse m beveger seg i dette potensialet.



Figur 1

- a) Bundne tilstander i et slikt potensial må ha en bestemt paritet. Vis at for løsninger med like paritet må bølgefunksjonen ha formen

$$\psi = \begin{cases} A e^{\alpha x} & x \leq -L \\ B \cos kx & -L \leq x \leq L \\ A e^{-\alpha x} & x \geq L \end{cases}$$

Hva er α og k ?

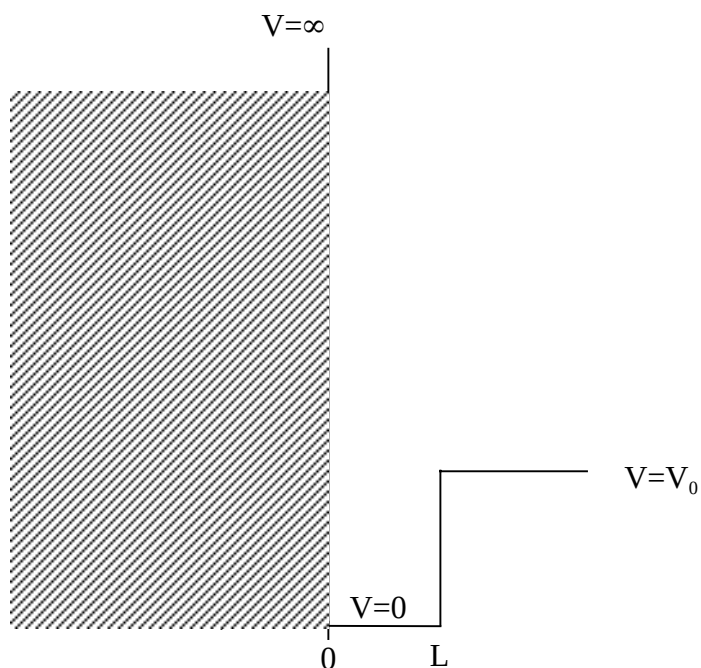
- b) Finn de tilsvarende formene på løsningene med odde paritet.
- c) Anti grensebetingelsene som må være oppfylt for $x = \pm L$. Bruk disse til å vise at for løsninger med like paritet er betingelsene for løsning og dermed energien gitt av

$$\operatorname{tg}(kL) = \frac{\alpha}{k}$$

og tilsvarende for odde paritet

$$\cot g(kL) = -\frac{\alpha}{k}$$

- d) Vi plasserer så en ugjennomtrengelig vegg ved $x = 0$; d.v.s. vi ser på en partikkel som beveger seg i området $0 \leq x \leq L$ i potensialet angitt i figur 2.



Figur 2

Vis at løsningsbetingelsen i dette potensialet er gitt av

$$\cot g(kL) = -\frac{\alpha}{k}.$$

Dette viser at sammenlignet med potensialet under a) får potensialet under d) de samme energitilstander som odde tilstander under a). Forklar dette med ord.

- e) Finn til slutt massen til den letteste partikkelen som kan bindes av potensialbrønnen i punkt d).

Oppgave 2.

I denne oppgaven skal vi anvende Landés g-faktor

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

til å se på splittingen et B-felt gir av linjen som følger av den elektriske dipolovergangen $3d_{5/2} \Rightarrow 2p_{3/2}$

- a) Gjør kort rede for utvalgsreglene for dipoloverganger.
- b) Tegn opp splittingen av de to nivåene $3d_{5/2}$ og $2p_{3/2}$ i et (svakt) magnetfelt, og beregn energiskiftet på grunn av feltet, i enheter av $\Delta E_B = e\hbar B / 2m_e = \mu_B B$ for alle tillatte elektriske dipoloverganger mellom nivåene. Angi resultatet i en tabell.

Hint: De to forskjellige g-faktorene fører til oppsplitting i hele 12 forskjellige spektrallinjer når $B \neq 0$.

Oppgave 3.

- a) For p-tilstandenes vinkeldel brukes ofte kulefunksjonene

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta ; Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

Disse er hensiktsmessige for atomer fordi de både er egenfunksjoner til L^2 og L_z . I kjemi sammenheng er det ofte mer hensiktsmessig å operere med orbitaler med enkle romlige symmetriegenskaper. Vis at følgende sett av funksjoner, p_x , p_y , p_z , på samme måte som $Y_{l,m}$, er ortogonale og normerte

$$p_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (-Y_{1,1} + Y_{1,-1})$$

$$p_y = \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_{1,1} + Y_{1,-1})$$

$$p_z = Y_{1,0}$$

- b) Vis at dette settet av funksjoner har samme symmetri som aksesystemet x, y, z.

- a) Bruk de to laveste én-elektron-tilstandene, ϕ_{10} og ϕ_{20} , (med notasjon ϕ_{nl}) av hydrogentypen, men med $Z = 2$ til å konstruere, korrekt antisymmetriserte, tilnærmede uttrykk for de 3 laveste egentilstandene, $\psi_i(1,2)$ ($i = 1,2,3$) i He-atomet. Gi en kvalitativ begrunnelse for rekkefølgen, når $\psi_i(1,2)$ ordnes etter stigende energi. Hvilke av tilstandene gir orto- og hvilke gir pare He?

Oppgave 4.

- a) Bruk følgende data til å beregne den energi som er nødvendig for å disosiere et KCl molekyl til et nøytralt K atom og et Cl atom: Det første jonisasjonspotensial for K er 4,34 eV; elektron affiniteten for Cl er 3,82 eV; likevektsavstanden i KCl er 0,279 nm.

Hint: Vis først at den potensielle energi av K^+ og Cl^- i avstand R fra hverandre er gitt av uttrykket: $V = -\frac{1.44}{R} [eV / nm]$

- b) Et Br^- jon har en energi som er 3,5 eV lavere enn et nøytralt Br atom. Bruk jonisasjonsenergien for K gitt i a) og beregn den største avstand mellom K^+ og Br^- som gir binding til et KBr molekyl.
- c) Den potensielle energi V av NaCl er empirisk gitt av uttrykket

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + A e^{-R/\rho}$$

Her er R avstanden mellom de to kjernene. Likevektsavstanden $R_0 = 0.24$ nm og dissosiasjonsenergien er 3,6 eV.

Beregn A og ρ/R_0 fra de oppgitte data. Se bort fra nullpunktsvibrasjoner.

Oppgitt: $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2$