Exempelsamling

Kvantfysik och Tillämpad Kvantfysik FUF040 + FUF075 + TIF100
HT2008

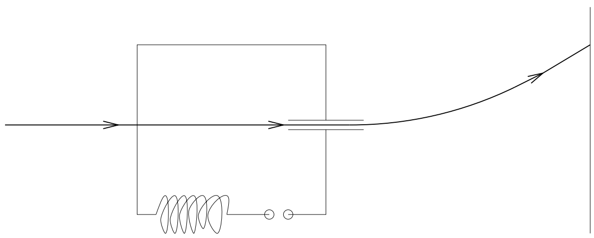
Institutionerna för teknisk fysik och fundamental fysik

Chalmers tekniska högskola

Senast redigerat av Elsebeth Schröder, Teknisk fysik, 2008.

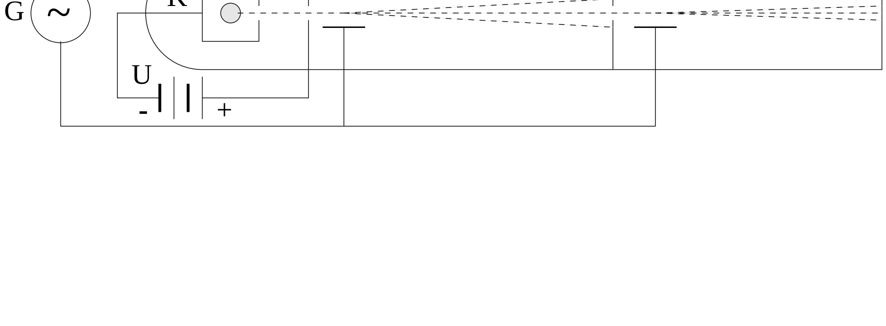
I KLASSISK FYSIK OCH KVANTFYSIK

I.1 I ett katodstrålerör accelereras elektronerna genom en spänning på 100 V och får därefter passera mellan två kvadratiska kondensatorplattor, som har kantlängden 20 mm och befinner sig på avståndet 10 mm från varandra. Elektronstrålen träffar slutligen en flourescerande skärm belägen 300 mm från kondensatorns mitt. Kondensatorn ansluts i serie med en spole till en växelströmsgenerator. Spolen har induktansen 1.0 H och resistansen 1.0 kΩ. Generatorn levererar växelspänning med frekvensen 0.50 MHz och den effektiva spänningen 10 V. Beräkna amplituden för elektronstrålens rörelse på skärmen.



I.2 För att bestämma förhållandet mellan massa och laddning för elektroner lät man en elektronstråle infalla vinkelrätt mot korsade (mot varandra vinkelräta) elektriska och magnetiska fält. Apparaturen hade följande dimensioner: Avståndet mellan kondensatorplattornas mittpunkt och skärm = 320 mm, plattornas längd = 80 mm, avståndet mellan plattorna = 25 mm. När spänningen mellan plattorna var 1100 V och magnetfältets styrka 12.50 10^{-4} Vs/m^2 passerade elektronerna apparaturen utan att avböjas. När magnetfältet togs bort träffade strålen skärmen 158 mm från föregående läge. Beräkna e/m.

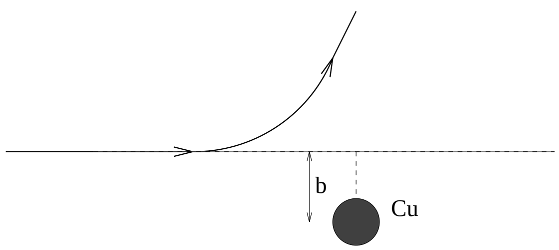
I.3 För mycket noggrann bestämning av elektronens specifika laddning (q/m) används en anordning enligt bilden. Elektroner accelereras genom potentialskillnaden U, och en avbländad stråle av elektroner får genomgå det transversella elektriska fältet i två små kondensatorer C_1 och C_2 på avståndet L från varandra, vilka matas med växelspänning av frekvensen ν. Vid vissa värden på ν kan strålen oavböjd nå fram till anordningens detektorända.
a/ Sök q/m uttryckt i kända storheter.
b/ Antag att U=1.00 kV, L=200 mm och använd tabellvärde för q/m; vilka värden på ν tillåter elektronstrålen att nå fram till detektorn?



I.4 Den elektriska laddningen hos en oljedroppe bestämdes på följande sätt (Millikans metod). Oljedroppen befann sig i det luftfyllda mellanrummet mellan två horisontella metallplattor, placerade på avståndet 6.33 mm från varandra. Oljedroppens hastighet bestämdes genom observationer med mikroskop. I frånvaro av elektriskt fält föll droppen med den konstanta hastigheten 0.103 mm/s. När en spänning på 450 V lades mellan plattorna steg samma droppe uppåt med en konstant hastighet på 0.107 mm/s. Droppens densitet var 876 kg/m^3. Under de aktuella förhållandena har luft densiteten 1.0 kg/m^3 och viskositeten 1.67 10^{-5} Ns/m^2. Beräkna droppens laddning.

I.5 År 1911 utförde Rutherford spridningsexperiment med α-partiklar mot tunna guldfolier. Han fann då att överraskande många α-partiklar spreds mycket kraftigt, en del till och med i bakåtriktningen. Härav drog Rutherford slutsatsen att huvuddelen av massan hos en atom är lokaliserad till en mycket liten, positivt laddad kärna. Antag att en α-partikel med den kinetiska energin 5.0 MeV infaller rakt mot en guldatoms kärna. Hur nära kommer α-partikeln innan den studsar tillbaka?

I.6 En α-partikel med den kinetiska energin 7.68 MeV sprids mot kärnan av en kopparatom. Vid spridningen ändras α-partikelns rörelseriktning med 90°. Beräkna stötparametern b, dvs det avstånd på vilket α-partikeln skulle passerat kärnan om den inte avböjts!
Ledning: Använd gärna formlerna för centralrörelse i mekanik!



I.7 År 1911 lade Rutherford fram en modell för atomen. Enligt denna modell roterar elektronerna kring kärnan på ett liknande sätt som planeterna roterar kring solen. Ett sådant system är emellertid inte stabilt eftersom elektronerna skulle ramla in mot kärnan under utsändandet av elektromagnetisk strålning.
Beräkna hur lång tid det skulle ta för elektronen i en väteatom i grundtillståndet att ramla i till protonen.
Ledning: En laddning q som accelereras med accelerationen a utsänder elektromagnetisk strålning med den totala effekten, $I = a^2q^2/(6\pi\epsilon_0 c^3)$.

II ENERGINS KVANTISERING

II.1 Plancks strålningslag säger att energitätheten per våglängdsintervall för den elektromagnetiska strålningen i ett hålrum anges av funktionen

$$u_\lambda(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\left[\exp\left(\frac{hc}{k_B T\lambda}\right) - 1\right]^{-1}$$

Vid vilken våglängd är energitätheten per våglängdsintervall maximal?

II.2 Solstrålningens energitäthet per våglängdsintervall är maximal vid våglängden 0.5 μm. Uppskatta solens yttemperatur!

II.3 Vid analys av ljusstrålningen från Sirius, som är den ljusstarkaste stjärnan på natthimlen, finner man att den utstrålade effekten per våglängdsenhet har maximum vid våglängden 0.26 μm. Hur hög är temperaturen på ytan av Sirius?

II.4 Man har funnit att universum är uppfyllt av elektromagnetisk strålning, som är spektralfördelad enligt Plancks strålningslag med en temperatur av ungefär 3 K. Denna kosmiska bakgrundsstrålning anses vara kvar från "the big bang". Vid vilken våglängd är bakgrundsstrålningens energitäthet maximal?

II.5 Den utstrålade effekten per våglängdsenhet från en svart kropp med temperaturen 1185°C är maximal vid våglängden 2.0 μm. Vid vilken våglängd blir strålningseffekten maximal om temperaturen höjs till 1900°C?

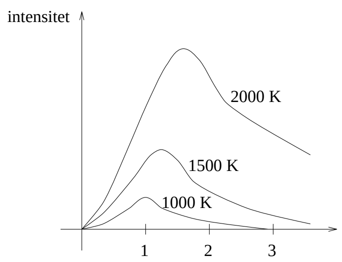
II.6 För att beskriva spektralfördelningen hos hålrumsstrålning kan man ange antingen energitätheten per våglängdsenhet $u_\lambda(\lambda, T)$ eller energitätheten per frekvensenhet $u_\nu(\nu, T)$. Härled sambandet mellan dess två funktioner!

II.7 Plancks strålningslag säger att energitätheten per frekvensintervall för den elektromagnetiska strålningen i ett hålrum anges av funktionen

$$u_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\left[\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1\right]^{-1}.$$

Vid vilken frekvens är energitätheten per frekvensintervall maximal?

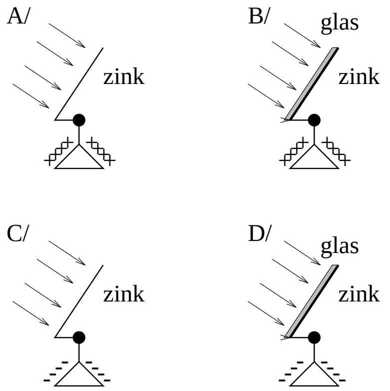
II.8 Vidstående figur visar strålningsintensiteten för en svartkropp eller från ett hålrum för några temperaturer. Vilken enhet har använts på den horisontella axeln?



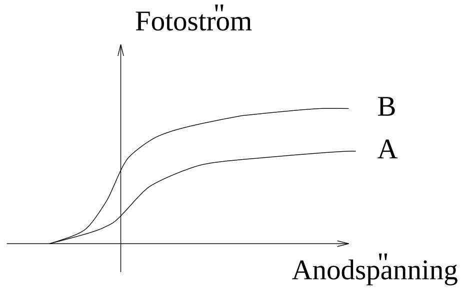
II.9 En glödlampa som tillförs effekten 25 W har glödtrådstemperaturen 2400 K. Vad blir denna temperatur om den tillförda effekten ökas till 40 W? Glödtrådens yta kan ur strålningssynpunkt betraktas som svart och den tillförda effekten kan i sin helhet anses omvandlad i strålning.

II.10 En nickeltråd med längden 1.302 m och diametern 0.326 mm svärtas och placeras längs axeln på ett evakuerat glasrör. Tråden ansluts till en likspänningskälla, ett variabelt motstånd, en amperemeter och en voltmeter. Strömmen genom nickeltråden ökas till dess att, i det ögonblick nickeltråden just börjar smälta, amperemeteravläsningen är 20.0 A och voltmeteravläsningen 33.9 V. Om man antar att all den tillförda effekten utstrålas och att utstrålningen från glasröret är försumbar kan nickelns smältpunkt beräknas. Utför denna beräkning.

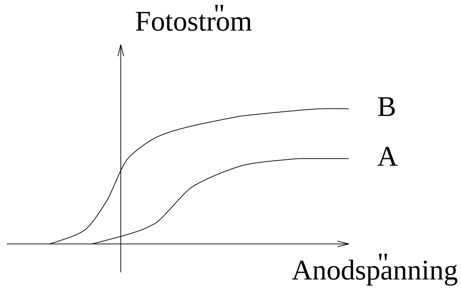
II.11 En zinkskiva är kopplad till ett elektroskop. I försök A och B är elektroskopet positivt laddat, i C och D negativt laddat. En kvicksilverlampa som utsänder ultraviolett strålning belyser zinkplattan. I försök B och D är en glasskiva placerad framför zinkplattan. Det visar sig att vid ett av försöken minskar elektroskopets utslag, i de tre övriga blir utslaget oförändrat. I vilket av de fyra försöken minskar utslaget?



II.12 Vidstående figur visar fototströmmen som funktion av anodspänningen för en fotocell. Vad är skillnaden i de experimentella förhållandena mellan kurva A och kurva B?



II.13 Vidstående figur visar fototströmmen som funktion av anodspänningen för en fotocell. Vad är skillnaden i de experimentella förhållandena mellan kurva A och kurva B?



II.14 Utträdesarbetet för ledningselektronerna i kalcium är 3.20 eV. Vilken är den största möjliga våglängden för ljus som ger upphov till fotoelektrisk effekt hos kalcium?

II.15 För vilka av ämnena i tabellen är det möjligt att erhålla fotoelektrisk effekt vid bestrålning med ljus i det synliga området (400 nm – 700 nm)?

Ämne	Utträdesarbete [eV]
Cs	1.91
K	2.24
Na	2.46
Al	2.81
Ca	3.20
Cd	4.00
W	4.50
Ag	4.61
Pt	6.30

II.16 Den maximala våglängd för vilken fotoelektrisk effekt är möjlig i volfram är 230 nm. Bestäm maximala energin och maximala hastigheten på de elektroner som utsändes från en volframyta vid bestrålning med ultraviolett ljus av våglängden 180 nm.

II.17 Fotoelektriska utträdesarbetet för natrium är 2.0 eV. Beräkna energin i J hos de emitterade fotoelektronerna, då en natriumyta belyses med ljus av våglängden 4000 Å. Vad är elektronernas hastighet?

II.18 En volframyta belyses i en fotocell. Vilken våglängd har ljuset om de utsända elektronerna har en maximal hastighet av

a/ 0.10 c, b/ 0.98 c?

Utträdesarbetet är 4.53 eV.

II.19 Vid ett fotoelektriskt experiment finner man att strypspänningen är 1.85 V för ljus med våglängden 300 nm och 0.82 V för ljus med våglängden 400 nm.
Bestäm a/ förhållandet mellan Plancks konstant och elektronens laddning,
b/ utträdesarbetet för den aktuella metallen!

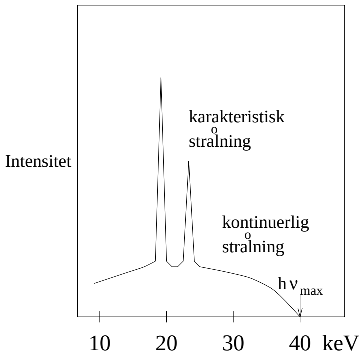
II.20 Vid ett fotoelektriskt experiment utgjordes fotokatoden av rent natrium. Denna belystes med monokromatiskt ljus och den bromsspänning, som måste påläggas för att inga elektroner skulle nå fram till anoden, uppmättes. Följande data erhölls:

Ljusets våglängd [Å]:	2536	2830	3039	3302	3663	4358
Bromsspänning [V]:	2.60	2.11	1.81	1.47	1.10	0.57

Bestäm a/ utträdesarbetet, b/ Plancks konstant!

II.21 I ett röntgenrör är accelerationsspänningen 50 kV. Vilken är den erhållna röntgenstrålningens högsta frekvens? Kortaste våglängd?

II.22 Hur skulle vidstående röntgenspektra tänkas kunna ändras om
a/ accelerationsspänningen ökades till 50 kV?
b/ accelerationsspänningen minskades till 15 kV?



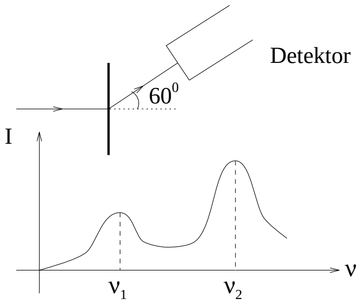
II.23 Ett röntgenrör med spänningen 59.9 kV ger kontinuerlig röntgenstrålning med 20.6 pm som minsta våglängd. Vilket värde på Plancks konstant kan beräknas ur dessa uppgifter? Ljushastigheten i vakuum och elektronens laddning förutsättes kända.

II.24 Härled formeln för våglängdsändringen vid comptonspridning av fotoner mot ledningselektroner,

$$\lambda - \lambda_0 = \lambda_e \left(1 - \cos\theta\right)$$

samt beräkna elektronens våglängd λ_e.

II.25 Röntgenstrålning med våglängden 12.6 pm infaller vinkelrätt mot en tunn metallfolie. Man analyserar den spridda strålningen i en riktning, som bildar 60° med infallsriktningen, och finner då att intensiteten varierar med frekvensen enligt vidstående figur. Förklara experimentet och bestäm frekvenserna ν_1 och ν_2!



II.26 En foton med energin 50 keV comptonsprids vinkeln 60° i förhållande till infallsriktningen. Bestäm våglängden för den utgående fotonen samt elektronens rekylenergi!

II.27 En experimentalist har en källa, som emitterar fotoner av energin 511 keV. Hon önskar för ett visst experiment ha tillgång till fotoner med energin 305 keV. Hur skall hon göra?

II.28 Beräkna våglängden för den mjukaste röntgenstrålning som genom comptonspridning han producera rekylelektroner med en energi 5 keV.

II.29 Ett gammakvantum med energin 300 keV comptonsprids av en fri elektron. Beräkna den maximala energi som rekylelektronen kan erhålla!

II.30 Comptonspridning har observerats mot protoner såväl som elektroner. Vilken energi måste den inkommande fotonen ha för att våglängdsändringen vid comptonspridning mot en proton skall vara experimentellt mätbar, om mätnoggrannheten antas vara 1%.

II.31 Comptonspridning innebär som bekant att en foton avger en del av sin energi till en elektron eller någon annan partikel. Det existerar också "invers comptonspridning" vid vilken en partikel avger sin energi till en foton. Bland annat spelar den inversa comptonspridningen en viss roll för uppbromsning av kosmiska partiklar i rymden. Antag att en elektron med energin 1 eV bromsas till vila genom invers comptonspridning. Vilken våglängd kan fotonen högst ha före spridningen för att denna process skall vara möjlig?

II.32 Om man sänder in elektromagnetisk strålning mot ett guldfolium kan såväl fotoelektrisk effekt som comptonspridning uppträda. För att fotoelektrisk effekt skall vara möjlig måste strålningens våglängd vara kortare än 258 nm. Comptonspridning kan i princip uppträda vid alla våglängder men ger märkbara effekter endast vid kortvågig strålning. Vilket villkor måste våglängden uppfylla för att rekylelektronen vid comptonspridning skall kunna frigöra sig från guldfolien? Det får förutsättas att spridningsvinkeln är 180°, så att elektronens rekylenergi blir maximal.

II.33 Beräkna väteatomens jonisationsenergi, då man känner våglängden för H_α-linjen i Balmerserien (6563 Å), elektronens laddning, Planks konstant samt ljusets hastighet.

II.34 Inom radioastronomin har man under de senaste åren bland annat intresserat sig för så kallade rydbergatomer, dvs atomer i mycket högt exciterade tillstånd. Man har t ex kunnat registrera signaler från väteatomer i tillstånd med n betydligt större än 100.
a/ Beräkna våglängden och frekvensen för den strålning som utsänds då en väteatom övergår från ett tillstånd med $n = 101$ till ett tillstånd med $n = 100$.
b/ Beräkna omloppsfrekvensen, dvs antalet varv per sekund, för en bohrbana med $n = 100$.

II.35 Det magnetiska momentet hos en rörlig laddning eller ström kan skrivas som $m = i \cdot A$, där i är strömmen och A den av strömkretsen omslutna arean. Beräkna det magnetiska momentet hos en elektron i n:te Bohr-banan för väte.

II.36 Vilka linjer i den blå delen av spektrumet kan man väntas finna hos enkelt joniserat helium? Balmerlinjen i väte som svarar mot övergången $n = 3$ till $n = 2$ har våglängden 6562.8 Å.

II.37 Beräkna med hjälp av Bohrs atommodell den energi i elektronvolt som måste tillföras en heliumjon (enkelt joniserat helium) i dess lägsta energitillstånd för att erhålla dubbelt joniserat helium (oändlig kärnmassa).

II.38 En av linjerna i vätets spektrum har våglängden 486.1320 nm. År 1932 upptäckte H. Urey att denna linje har en svag satellit med våglängden 485.9975 nm. En tänkbar förklaring är att naturligt väte innehåller små mängder av den tunga isotopen deuterium och att det är denna isotop som ger upphov till den ovannämnda svaga linjen. Stämmer den förklaringen?

II.39 Helium förekommer dels med masstalet 4 dels med masstalet 3. I enkelt joniserat tillstånd ger dessa heliumjoner spektralserier av samma typ som väteatomen. Beräkna våglängdsskillnaden mellan de två heliumlinjer som med avseende på elektronövergången svarar mot första linjen i Balmerserien för väte.

II.40 Ett väteliknande system av intresse för den moderna fysiken är positroniumatomen. Positronium består av en elektron och en positron bundna till varandra genom coulombkraften mellan dem. Positronen har en massa lika med elektronens och en laddning lika med protonens. Beräkna jonisationsenergin för positronium.

II.41 En elementarpartikel, den s k μ^--mesonen med samma spinn och laddning som elektronen men med en massa som är 207 gånger elektronens, kan infångas i en väteliknande Bohrbana runt en atomkärna. Då alla atomtillstånd för mesonen är oupptagna kan en infångad meson utföra övergångar till lägre energitillstånd. Dessa övergångar är åtföljda av emission av en karakteristisk strålning. Beräkna enligt Bohr energin för den utsända strålningen vid en övergång mellan ett tillstånd med $n = 2$ och ett tillstånd med $n = 1$ om den infångade kärnan är bly, $Z = 82$ och denna kärna antages punktformig.

II.42 När en fri atom eller atomkärna utsänder en foton uppstår en rekylrörelse som tar upp en del av den frigjorda energin. Den utsända fotonens frekvens ν blir därför i själva verket lägre än den frekvens ν_0 som erhålles ur Bohrs frekvensregel. Visa med hjälp av speciell relativitetsteori att

$$\nu = \nu_0 \left[1 - \frac{h\nu_0}{2m_0c^2}\right]$$

där m_0 är atomens respektive kärnans vilomassa innan fotonen utsänds. Uppskatta sedan storleken av den relativistiska frekvensändringen $(\nu - \nu_0)/\nu$, dels för en foton med energin 2.10 eV som utsänds av en Na-atom, dels för en foton med energin 113 keV som utsänds av kärnan Hf^{177}.

III MATERIEVÅGOR

III.1 Beräkna de Broglie-våglängden för en fotboll som väger 0.4 kg och rör sig med hastigheten 5.0 m/s! Förklara sedan varför denna beräkning är meningslös!

III.2 Beräkna de Broglie-våglängderna för elektroner med energierna 1 eV, 100 eV, 10 keV och 1 MeV!

III.3 En proton rör sig med en hastighet som är 5.0% av ljusets hastighet. Beräkna de Broglie-våglängden för protonen.

III.4 Man kan idag med acceleratorer erhålla protoner med en energi av 400 GeV, dvs $4 \cdot 10^{11}$ eV. Vilken våglängd representerar en sådan partikelstråle? Är det rimligt att utnyttja en sådan partikelstråle för att undersöka protonens inre struktur, om protonens radie är $1.4 \cdot 10^{-15}$ m?

III.5 Neutroner i termisk jämvikt med omgivningen har en medelenergi av storleksordningen $k_B T$. Beräkna de Broglie-våglängden för typiska neutroner vid temperaturen 300 K.

III.6 Visa att de Broglie-våglängden för en partikel kan skrivas som

$$\lambda = \lambda_c \sqrt{\left(\frac{c}{v}\right)^2 - 1}$$

där λ_c partikelns compton-våglängd.

III.7 Upplösningsförmågan hos ett optiskt instrument är proportionell mot a/λ, där a är objektivöppningens storlek. Jämför upplösningen hos ett mikroskop som arbetar med blått ljus och ett elektronmikroskop, i vilket elektronerna accelereras över en spänning på 10 kV, för instrument med lika stor objektivöppning.

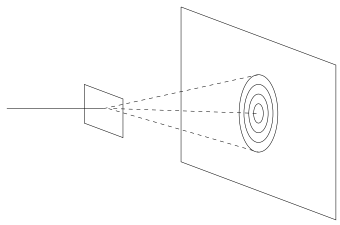
III.8 Ett röntgenrör arbetar med konstant spänning. Den hårdaste strålning som utgår från röret har våglängden 300 pm. Beräkna den minsta de Broglie-våglängden hos elektronerna i röret.

III.9 Mot ett kristallgitter infaller röntgenstrålning med våglängden 0.496 Å under Braggvinkeln (1:a ordningen). Man låter därefter neutroner infalla mot samma kristallgitter under samma vinkel. Vilken energi i elektronvolt måste dessa neutroner ha för att de skall undergå Braggspridning?

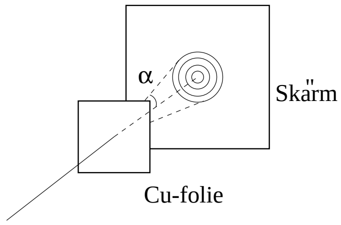
III.10 En smal stråle termiska neutroner träffar en enkristall med avståndet 1.80 Å mellan gitterplanen. Vilken vinkel måste planen bilda med den infallande strålen för att ge stark första ordningens diffraktion för neutroner med kinetisk energi 0.04 eV?

III.11 För att mäta energin hos långsamma neutroner används en kristallspektrometer. Beräkna gitterkonstanten för en sådan spektrometer om neutroner med energin 1.0 eV skall Bragg-reflekteras med glansvinkeln 3.31°. Endast reflexion av första ordningen behöver behandlas.

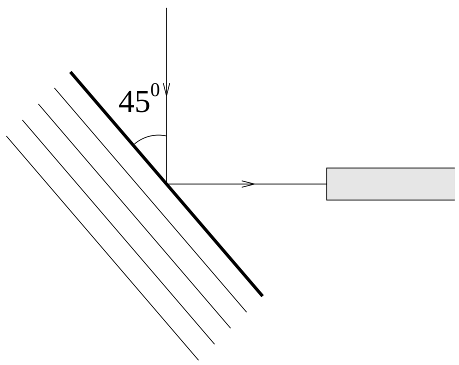
III.12 En stråle av elektroner med energin 410 eV infaller mot en tunn, polykristallin aluminiumfolie. På en skärm 10 cm bakom folien observeras ett antal ringar, och en av dessa har diametern 3 cm. Den kan antas uppkomma genom första ordningens reflexion mot vissa kristallplan. Beräkna gitteravståndet mellan dessa plan.

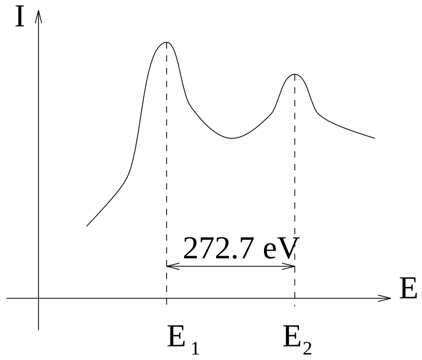


III.13 En stråle av snabba elektroner med rörelseenergin 51 keV får passera genom en tunn kopparfolie. På en skärm bakom folien uppträder ett mönster av diffraktionsringar.
a/ Bestäm avböjningsvinkeln α för de elektroner som formar diffraktionsringen för 4:de ordningens reflexion från kristallplan mellan vilka avståndet är 3.6 Å.
b/ Hur kan man enkelt experimentellt visa att diffraktionsmönstret bildas av elektroner, och inte av sekundär röntgenstrålning som bildas då elektronerna slår i folien.

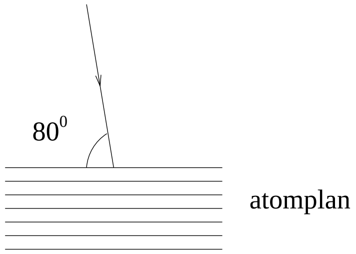


III.14 En monoenergetisk elektronstråle får infalla mot en nickelkristall. Med hjälp av en elektrondetektor uppmäts intensiteten av spridda elektroner i en riktning som bildar vinkeln 90° med infallsriktningen. Vid ökande elektronenergi erhålles vid en viss energi E_1 ett första maximum i spridningsintensiteten. Om energin ökas med ytterligare 272.7 eV erhålles ett andra maxima. Beräkna E_1 och avståndet mellan de spridande braggplanen.





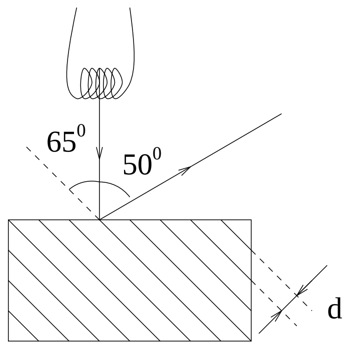
III.15 Mot en enkristall av nickel med gitterkonstanten 2.03 Å infaller under 80° glansvinkel en elektronstråle. På grund av elektronernas vågnatur uppträder här samma inteferensfenomen som när röntgenstrålning träffar en kristall. För vissa bestämda accelerationsspänningar för elektronerna uppträder skarpa maxima i den reflekterade elektronstrålens intensitet. Beräkna hur många dylika maxima som registreras om accelerationsspänningen ökas kontinuerligt från 225 V till 900 V!



III.16 Figuren är en principskiss av Davissons och Germers elektrondiffraktionsexperiment. En stråle av elektroner fick infalla vinkelrätt mot ytan av en nickelkristall, och man fann ett skarpt maximum hos intensiteten av de spridda elektronerna i en riktning som bildade 50° vinkel med den infallande strålen. Gitterplanen i kristallen var orienterade som figuren visar, och gitterkonstanten d var 0.09 nm.

a/ Beräkna våglängden för elektronerna om intensitetsmaximat antages svara mot första ordningens Braggspridning.

b/ Elektronernas kinetiska energi var 54 eV. Stämmer detta med de Broglies hypotes?



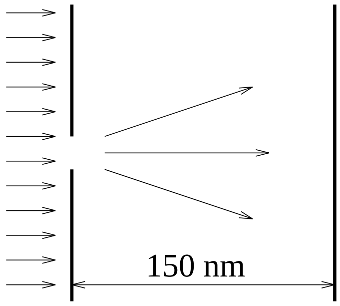
III.17 Hur stor är osäkerheten i hastigheten för elektronen i väteatomens grundtillstånd, om osäkerheten i lägesbestämningen sätts lika med bohrradien 0.53 Å.

III.18 Beräkna den minsta utsträckning i rummet som en foton måste ha om dess frekvensbredd är 10^7 Hz.

III.19 Uppskatta den minsta kinetiska energi en proton kan ha, om den är instängd i en sfär med diametern 10^{-14} m (storleken hos en atomkärna).

III.20 Atomkärnor, vars utsträckning är av storleksordningen 10^{-14} m, kan utsända elektroner med energier av storleksordningen 1 – 10 MeV. Använd osäkerhetsrelationen för att visa att elektroner med energin 1 MeV inte kan finnas i kärnan före sönderfallet.

III.21 Elektroner med energin 1.0 meV infaller vinkelrätt mot en skärm, i vilken det finns ett litet cirkulärt hål. De elektroner som passerar hålet träffar därefter en flourescerande yta, placerad på avståndet 150 mm från hålet. Bestäm ett ungefärligt värde på hålets diameter, så att den lysande fläcken på den flourescerande ytan blir så liten som möjligt!



III.22 Visa, utgående från Heisenbergs osäkerhetsrelation $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$, att för en foton gäller

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{1}{2}\hbar$$

där ΔE är osäkerheten i fotonens energi och Δt är osäkerheten i bestämningen av den tidpunkt då fotonen passerar en given punkt.

III.23 Livslängden för en atom i ett exciterat tillstånd är Δt. Beräkna den ungefärliga osäkerheten i våglängden för den foton som utsänds då atomen återvänder till grundtillståndet! Tillämpa resultatet för $\Delta t = 10^{-8}$ s och $\lambda = 600$ nm!

III.24 Den spektrallinje som svarar mot övergångar mellan 4p- och 4s-tillstånden i kalium har våglängden 7660 Å. Livstiden för 4p-tillståndet är $2 \cdot 10^{-8}$s. Bestäm spektrallinjens bredd uttryckt i Å.

III.25 Ett vågpaket utgöres av en superposition av plana vågor, vars fördelning på olika vågtal k bestäms av funktion

$$a(k) = \begin{cases} 0 & \text{om } k < -K \\ N & \text{om } -K < k < K \\ 0 & \text{om } k > K \end{cases}$$

a/ Bestäm vågfunktionen $\psi(x)$.
b/ Bestäm N så att $\int_{-\infty}^{\infty} dx \, |\psi(x)|^2 = 1$.
c/ Visa att Heisenbergs osäkerhetsrelation är uppfylld.

III.26 Ett vågpaket utgöres av en superposition av plana vågor, vars fördelning på olika vågtal k bestäms av funktion

$$a(k) = \frac{N}{k^2 + \alpha^2}$$

a/ Bestäm vågfunktionen $\psi(x)$.
b/ Bestäm N så att $\int_{-\infty}^{\infty} dx \, |\psi(x)|^2 = 1$.
c/ Visa att Heisenbergs osäkerhetsrelation är uppfylld oberoende av valet av α. (Ledning: Δp räknas i k-rummet)

III.27 Vilken form har vågpaketet $\psi(x)$ om de ingående plana vågornas fördelning bestäms av funktionen

$$a(k) = \left[(2\pi)^3 (\Delta k)^2\right]^{-\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{4(\Delta k)^2}\right].$$

III.28 Beräkna explicit den vågfunktion som består av följande superposition av plana vågor:

$$\psi(x,t) = (2\pi)^{-\frac{3}{4}} (\Delta k)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \, \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{4(\Delta k)^2} + i(kx - \omega t)\right].$$

Vinkelfrekvensen är $\omega = \hbar k^2/(2m)$. Visa att vågpaketets bredd ökar med tiden.

III.29 I metaller förekommer en typ av vågor som kallas för plasmasvängningar. Dessa svängningar kan kvantiseras på samma sätt som exempelvis ljusvågor, och motsvarande kvanta kallas plasmoner. Dispersionsrelationen för dessa är

$$\omega = \omega_0 + \alpha k^2$$

där ω_0 och α är konstanter. Ange fashastigheten och grupphastigheten för plasmonerna.

III.30 Sambandet mellan våglängden och frekvensen i en vågledare är

$$\lambda = \frac{c}{\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}}.$$

Vilken är grupphastigheten för sådana vågor?

III.31 För ytspänningsvågor i grunt vatten gäller att relationen mellan frekvensen ν och våglängden λ är

$$\nu = \left(\frac{2\pi T}{\varrho\lambda^3}\right)^{\frac{1}{2}},$$

där T är ytspänningen och ϱ är densiteten. För havsvågor på djupt vatten gäller istället

$$\nu = \left(\frac{g}{2\pi\lambda}\right)^{\frac{1}{2}},$$

där g är tyngdkraftsaccelerationen. Bestäm grupphastigheten och fashastigheten i båda fallen.

IV SCHRÖDINGEREKVATIONEN OCH VÅGFUNKTIONENS TOLKNING

IV.1 Visa att den tidsberoende Schrödingerekvationen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

satisfieras av vågfunktionen för en fri partikel $\psi\left(x,t\right)=e^{i(kx-\omega t)}$ då $V=$ konstant.

IV.2 Visa, att en lösning till S.E. för en fri partikel i tre dimensioner

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi\left(x,y,z\right)=E\,\psi\left(x,y,z\right)$$

kan skrivas $\psi\left(x,y,z\right)=A\,e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$. Hur är $\mathbf{K}$ relaterad till energin E? Hur ser motsvarande tidsberoende funktion ut?
Ledning: Antag $\psi\left(x,y,z\right)=\psi_x\left(x\right)\,\psi_y\left(y\right)\,\psi_z\left(z\right)$ och separera ekvationen.

IV.3 En partikel med massan m rör sig i potentialfältet $V\left(x\right)=\frac{1}{2}kx^2$, där k är en konstant. Ställ upp den tidsoberoende Schrödingerekvationen för partikeln och visa att vågfunktionen

$$\psi\left(x\right)=Ae^{-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar}x^2}$$

är en lösning till densamma. Bestäm energiegenvärdet.

IV.4 Visa att sannolikhetstätheten $\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2$ för en fri partikel med given rörelsemängd är oberoende av såväl x som t. Tolka resultatet fysikaliskt.

IV.5 Visa, att för en fri partikel med $\psi\left(x,t\right)=A\,e^{i(kx-\omega t)}$ är sannolikhetsströmmen

$$S=\frac{\hbar k}{m}\left|A\right|^2=v\left|A\right|^2\ ,$$

där v är partikelns hastighet. Sannolikhetsströmmen är således lika med partikelhastigheten gånger sannolikhetstätheten.

IV.6 Kontinuitetsekvationen $\frac{\partial\varrho}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{j}=0$ uppträder i bl.a. a/ hydrodynamik, b/ värmelära, c/ elektricitetslära, d/ reaktorfysik, och e/ kvantmekanik. Vilken är innebörden av ϱ och $\mathbf{j}$ i respektive teorier? Ekvationen innebär att en viss storhet konserveras. Vilken är denna storhet i respektive teorier?

IV.7 Visa att det allmänna vågfältet

$$\psi(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{k} \int d\omega \, A(\mathbf{k},\omega) \, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$$

uppfyller vågekvationen för elektromagnetisk strålning om $\omega = ck$.

IV.8 En elektron rör sig under inverkan av potentialen

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{för } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{för övriga } x \end{cases}$$

a/ Härled ett uttryck för elektronens möjliga energier.
b/ Antag att elektronen befinner sig i andra exciterade tilståndet. Beräkna de möjliga frekvenserna för den elektromagnetiska strålning, som emitteras då elektronen återgår till grundtillståndet. $a = 5.0$ Å.

IV.9 Beräkna energinivåerna för en elektron ($m = 9.1 \cdot 10^{-31}$ kg) i en endimensionell låda av längden 4 Å. Gör detsamma för en partikel med $m = 9.1$ g i en låda av längden 4 cm. Hur många tillstånd med energin mindre än 40 eV finns det i de båda fallen?

IV.10 Beräkna väntevärdena (för stationära tillstånd) av x, x^2, p_x, och p_x^2 för en partikel i en fyrkantspotential,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{för } -a \leq x \leq a \\ \infty & \text{för övriga } x\ . \end{cases}$$

Beräkna $\Delta x \cdot \Delta p_x$ och jämför med osäkerhetsrelationen.

IV.11 En partikel är bunden till en endimensionell potentialbox med oändligt höga väggar på avståndet L från varandra (potentialen $V = 0$ inuti boxen och $V = \infty$ utanför boxen). Beräkna sannolikheten att påträffa partikeln inom avståndet $L/3$ från den ena av väggarna (t ex vänster vägg)

a/ om partikeln befinner sig i grundtillståndet,

b/ om partikeln är i det första exciterade tillståndet,

c/ om partikeln är i ett mycket högt exciterat tillstånd,

d/ enligt klassisk fysik.

IV.12 En partikel är instängd i en låda med sidorna a, b och c. Beräkna de möjliga energinivåerna för partikeln.

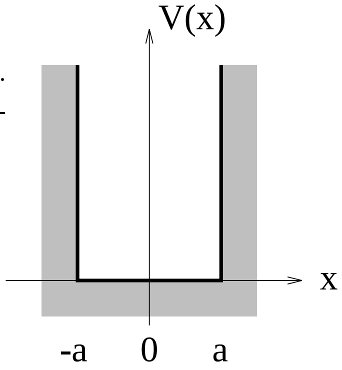
IV.13 En elektron med den kinetiska energin 1 eV är instängd i en kubisk låda med volymen 1 m^3 och med perfekt reflekterande väggar. Vad är sannolikheten att finna elektronen i ett volymselement om 1 cm^3 i ett av hörnen i kuben (räkna inte — tänk!!)?

IV.14 Ett endimensionellt kvantmekaniskt system beskrivs av vågfunktionen

$$\Phi(x) = \begin{cases} 0 & \text{om } x \le 0 \\ Nx(x-a) & \text{om } 0 \le x \le a \\ 0 & \text{om } x > a. \end{cases}$$

Bestäm normeringskonstanten N och beräkna väntevärdet av x^{-2}.

IV.15 En partikel är bunden i en lådpotential enligt figuren. I ett visst ögonblick befinner sig partikeln i ett icke-exciterat tillstånd, karakteriserat av vågfunktionen



$$\psi(x) = A\left[2\cos\frac{\pi x}{2a} - \sin\frac{\pi x}{a}\right]$$

Normera vågfunktionen och bestäm väntevärdet av x!

IV.16 En partikel rör sig längs en rät linje, x-axeln. I ett visst ögonblick beskrivs partikeln av vågfunktionen

$$\psi(x) = N\,\frac{e^{i\,ax}}{1+\frac{i\,x}{b}}, \qquad N \text{ reell.}$$

a/ Normera ψ.
b/ Beräkna väntevärdet av läget.
c/ Bestäm a så att väntevärdet av impulsen blir noll.

IV.17 Ett vågpaket av formen

$$\psi(x) = N\exp\left[-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2} + i\,k_0 x\right]$$

har vid tiden $t = 0$ en bredd $\Delta x = 10^{-10}$ m. Bestäm osäkerheten i rörelsemängd samt den tidpunkt då vågpaketets bredd ökats med en faktor 2.

V OPERATORER I KVANTFYSIKEN

V.1 Visa att den plana vågen $\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ är en egenfunktion till impulsoperatorn $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$, svarande mot egenvärdet $\hbar k$. Bestäm sedan väntevärdena $\langle p\rangle$ och $\langle p^2\rangle$ samt osäkerheten Δp.

V.2 Är vågfunktionen $\psi(x,t) = Ae^{-ax^2-i\omega t}$ en egenfunktion till impulsoperatorn $\hat{p}$? Bestäm väntevärdena $\langle p\rangle$ och $\langle p^2\rangle$ samt osäkerheten Δp.

V.3 Visa att vågfunktionen $\psi(x,t) = A\sin(kx-\omega t)$ är en egenfunktion till operatorn $\hat{p}^2$ men ej till operatorn $\hat{p}$! Bestäm osäkerheten Δp.

V.4 Visa allmänt att osäkerheten Δf i en storhet f är noll om mätningen görs i ett tillstånd som beskrivs av en egenfunktion ψ till den mot f svarande operatorn $\hat{f}$.

V.5 Stationära tillstånd beskrivs av vågfunktioner av formen $\psi(\mathbf{r},t) = u(\mathbf{r})\,e^{-i\omega t}$. Visa att osäkerheten i energi hos ett sådant tillstånd är noll.

V.6 Antag att en operator har två olika egenfunktioner ψ_1 och ψ_2, som båda svarar mot samma egenvärde. Visa att också varje linjärkombinationer av ψ_1 och ψ_2 är en egenfunktion, svarande mot samma egenvärde!

V.7 Heisenbergs osäkerhetsrelation säger att om A och B är två fysikaliska storheter (observabler) så gäller olikheten

$$\Delta A\cdot\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\,A\,,\,B\,]\rangle\right| .$$

Bevisa osäkerhetsrelationen med utgångspunkt från Schwarz' olikhet

$$\int d\tau\,|f|^2\cdot\int d\tau\,|g|^2 \geq \left|\int d\tau f^* g\right|^2$$

där f och g är godtyckliga funktioner.

V.8 Visa med utgångspunkt från resultatet i föregående exempel att $\Delta x\cdot\Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$.

V.9 Utgå från definitionen av kommutatorn $\left[\hat{A},\,\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, och visa följande relationer

a/ $\left[\hat{A}\,,\,\hat{B}\right] + \left[\hat{B}\,,\,\hat{A}\right] = 0$,

b/ $\left[\hat{A}\,,\,\hat{A}\right] = 0$,

c/ $\left[\hat{A},\,\hat{B}+\hat{C}\right] = \left[\hat{A},\,\hat{B}\right] + \left[\hat{A},\,\hat{C}\right]$,

d/ $\left[\hat{A}+\hat{B},\,\hat{C}\right] = \left[\hat{A},\,\hat{C}\right] + \left[\hat{B},\,\hat{C}\right]$,

e/ $\left[\hat{A},\,\hat{B}\hat{C}\right] = \left[\hat{A},\,\hat{B}\right]\hat{C} + \hat{B}\left[\hat{A},\,\hat{C}\right]$,

f/ $\left[\hat{A}\hat{B},\,\hat{C}\right] = \left[\hat{A},\,\hat{C}\right]\hat{B} + \hat{A}\left[\hat{B},\,\hat{C}\right]$.

V.10 Visa att följande kommuteringsregler:

a/ $[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta] = 0$,

b/ $[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0$,

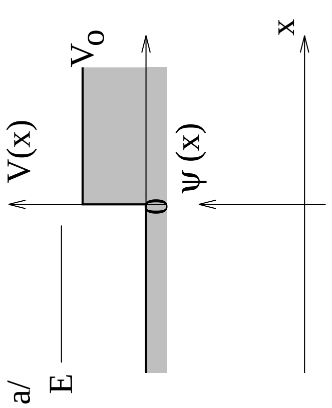
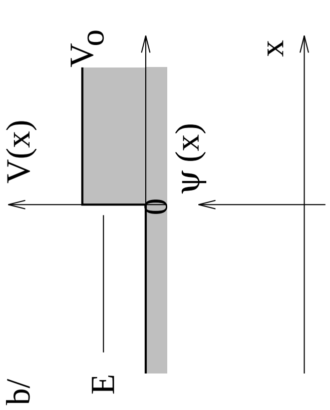
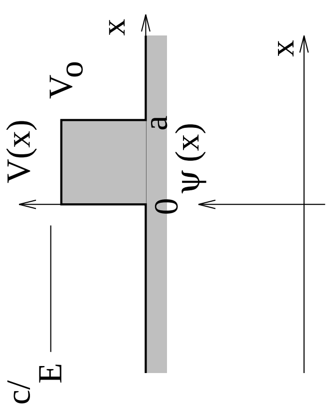
c/ $[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$,

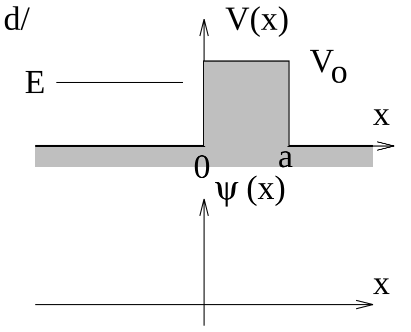
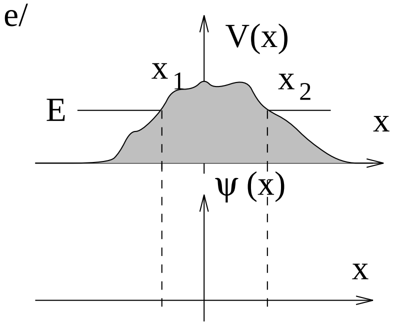
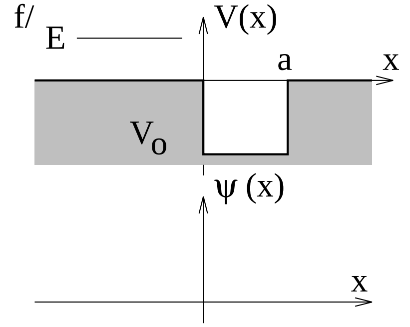
d/ $[\hat{p}_\alpha, F(\mathbf{r})] = -i\hbar\frac{\partial F(\mathbf{r})}{\partial \hat{x}_\alpha}$.

Index α, β och γ betecknar komponenter i ett rätvinkligt koordinatsystem.

VI ENDIMENSIONELLA BARRIÄRPROBLEM

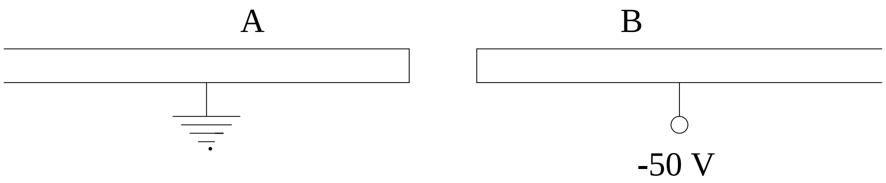
VI.1 Följande figurer visar olika potentialer. Skissera utseendet av vågfunktionen i de olika områdena samt ange transmissions- och reflexionskoefficienterna.

Potential Skiss av vagfunktionen	Vagfunktionens matematisk form	Reflexions- och transmissionskoefficienter Kvantmekaniskt	 Klassiskt
a/ 	x < 0 : x > 0 :	R = T =	R = T =
b/ 	x < 0 : x > 0 :	R = T =	R = T =
c/ 	x < 0 : 0 < x < a : x > a :	R = T =	R = T =

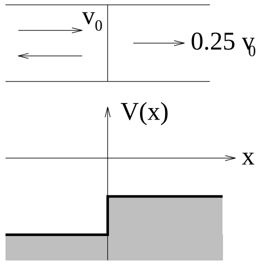
Potential Skiss av vagfunktionen	Vagfunktionens matematisk form	Reflexions- och transmissionskoefficienter	
		Kvantmekaniskt	Klassiskt
d/ 	$x < 0$: $x > 0$:	R = T =	R = T =
e/ 	$x < x_1$: $x_1 < x < x_2$: $x > x_2$:	R = T =	R = T =
f/ 	$x < 0$: $0 < x < a$: $x > a$:	R = T =	R = T =

VI.2 Partiklar med totala energin E reflekteras delvis när de möter en oändligt utsträckt potentialbarriär med höjden V_0 ($E > V_0$). Visa att reflexionskoefficienten är lika stor vid potentialsprånget om partiklarna rör sig i motsatt riktning.

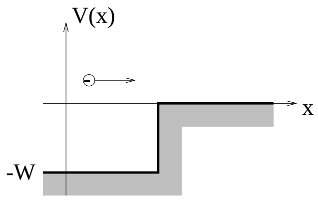
VI.3 Elektroner skjuts in i ett jordat metallrör, A, med den kinetiska energin 100 eV. Efter att ha gått igenom röret passerar de in i ett annat rör, B, på något avstånd från A. Röret B hålles på en potential av -50 V. Beräkna hur stor del av de infallande elektronerna som reflekteras tillbaka in i röret A. (Potentialsprånget anses ske diskontinuerligt.)



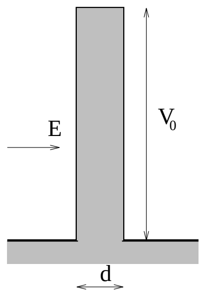
VI.4 Kontaktytan mellan två metaller fungerar som ett potentialsteg, sådant att hastigheten hos de elektroner som infaller från vänster och passerar kontaktytan minskar med 75% vid passagen. Antag att de infallande elektronerna motsvarar en ström på 1 μA. Hur stor blir då strömmen till höger om barriären?
Ledning: Härled först ett uttryck för transmissionskoefficienten som funktion av vågtalen k_1 och k_2, och relatera sedan dessa till hastigheterna.



VI.5 Vid ett fotoelektriskt experiment får ljus med våglängden 410 nm infalla mot en aluminiumyta. Ytan kan i en enkel modell representeras av ett potentialsteg enligt figuren, där utträdesarbetet W har värdet 2.80 eV. Beräkna sannolikheten för att en elektron, som absorberat en foton, skall kunna lämna metallen utan att reflekteras vid ytan! Det får förutsättas att elektronen rör sig vinkelrätt mot ytan och att den från början hade energin $-W$.



VI.6 En elektron med den kinetiska energin $E = 2.0$ eV infaller vinkelrätt mot ett oxidskikt mellan två metaller. Skiktet kan approximativt representeras av en potentialbarriär med höjden $V_0 = 5.0$ eV och tjockleken $d = 2.0$ nm. Hur stor är sannolikheten för att elektronen skall kunna tunnla genom barriären?
Ledning: Denna modell av oxidskiktet är mycket enkel och ger bara en uppfattning om storleksordningen av tunnelsannolikheten. Det är därför meningslöst att göra en noggrann beräkning. Rätt tiopotens är tillräckligt.



VI.7 För vissa värden på energin kan partiklar, som faller in mot ett skikt med lägre potential, passera detta under transmissionsresonans, vilket innebär att samtliga partiklar passerar genom skiktet och ingen partikel reflekteras eller absorberas av skiktet.
Bestäm de energivärden för vilken en ström av partiklar med massan m, som infaller vinkelrätt mot ett skikt med potentialen

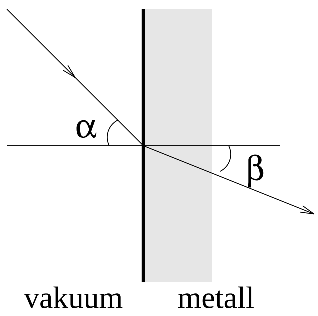
$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| > \mathrm{a}, \\ -V_0 & |x| \leq \mathrm{a} \ (V_0 > 0), \end{cases}$$

passerar skiktet under transmissionsresonans.

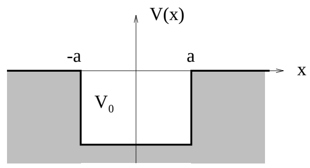
VI.8 När en ljusstråle från vakuum infaller mot ett medium sker en brytning av ljusstrålen enligt figuren. Brytningsindex n för mediet definieras av relationen

$$n = \frac{\lambda_0}{\lambda} = \frac{\sin\alpha}{\sin\beta}$$

där λ_0 och λ är ljusets våglängd i vakuum resp. i mediet. När elektroner infaller mot en metall sker på motsvarande sätt en brytning av de vågor som är associerade med elektronerna. Metallens yta kan approximativt representeras av ett språng i den potentiella energin V från $V = 0$ utanför metallen, till $V = -V_0$ inuti metallen. Antag att elektroner med energin 10 eV under infallsvinkeln $\alpha = 45°$ träffar en metallyta, för vilken gäller att $V_0 = 12$ eV. Beräkna vinkeln β!



VI.9 Härled den ekvation som bestämmer de möjliga energierna för bundna tillstånd i en lådpotential enligt figuren. Skissera också vågfunktionernas utseende.

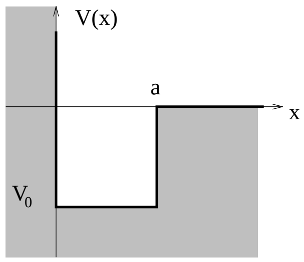


VI.10 En partikel med massan m befinner sig i en potential

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{om } x \leq 0 \\ 0 & \text{om } 0 \leq x \leq a \\ V_0 & \text{om } x \geq a\ . \end{cases}$$

Hur stor måste V_0 vara för att denna potential skall ge upphov till minst ett bundet tillstånd för partikeln?

VI.11 En partikel med massan m rör sig i under inverkan av potentialen



$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{om } x < 0 \\ -V_0 & \text{om } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{om } x > a\ . \end{cases}$$

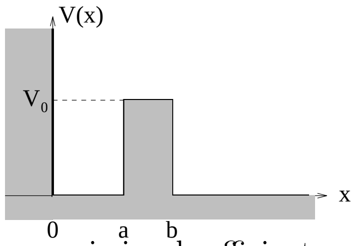
Potentialens styrka är sådan att $V_0 a^2 = 20\hbar^2/m$. Hur många bundna tillstånd finns det?

VI.12 En partikel rör sig i en potential $V(x)$ bestämd av

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{om } |x| > \text{a}, \\ 0 & \text{om } -a < x < 0 \\ -V_0 & \text{om } 0 < x < a\ . \end{cases}$$

Hur stort skall V_0 vara för att det minsta positiva egenvärdet E skall vara $V_0/3$?

VI.13 I en enkel modell för atomkärnors α-sönderfall kan α-partikeln antas röra sig under inflytande av en potential enligt figuren. Uppskatta sannolikheten per tidsenhet för att α-partikeln skall tunnla, om den befinner sig i grundtillståndet.



Ledning: Sannolikheten per tidsenhet = stöttalet · transmissionskoefficienten; stöttalet = antal stötar per tidsenhet mot barriären. Barriärens höjd V_0 kan antas vara mycket större än grundtillståndsenergin.

VII HARMONISKA OSCILLATORN

VII.1 En partikel med massan m är bunden till ett jämviktsläge med en mot avvikelsen x proportionell kraft, $F = -kx$. Visa att funktionerna

$$\psi_1(x) = A\, e^{-\alpha x^2}$$
$$\psi_2(x) = B\, x\, e^{-\beta x^2}$$

är egenfunktioner till systemets hamiltonoperator, om konstanterna α och β väljs på lämpligt sätt. Bestäm respektive egenvärde samt normera funktionerna!

VII.2 Visa att nollpunktsenergin hos en kvantmekanisk oscillator kan ses som en direkt följd av osäkerhetsrelationen.

VII.3 Visa att väntevärdena av den kinetiska energin och den potentiella energin är lika stora för en harmonisk oscillator i grundtillståndet.

VII.4 Bestäm väntevärdena $\langle p_x \rangle$ och $\langle p_x^2 \rangle$ för en harmonisk oscillator i grundtillståndet.

VII.5 Beräkna sannolikheten för att en harmonisk oscillator i grundtillståndet skall befinna sig utanför det klassiskt tillåtna området.

VII.6 Den så kallade einsteinmodellen för gittersvängningar i kristaller innebär att varje atom antas utföra en harmonisk svängningsrörelse kring sitt jämviktsläge. Man antar alltså att atomen påverkas av en kraft av formen

$$F(x) = -k\, x$$

där k är en konstant och där x anger avvikelsen från jämviktsläget (för enkelhets skull begränsar vi oss till endimensionell rörelse). Som exempel väljer vi zink, och ett representativt värde på k är då 3.3 N/m. Beräkna sannolikheten för att en zinkatom i grundtillståndet skall befinna sig mer än 0.2 Å från jämviktsläget!

VII.7 Krafterna mellan atomerna i en HCl-molekyl kan approximativt representeras av en fjäder med kraftkonstanten 516 N/m. Detta innebär att atomerna kommer att utföra en harmonisk svängningsrörelse i förhållande till varandra. Beräkna den lägsta och den näst lägsta energinivån för denna rörelse!

VII.8 Vibrationsrörelsen för en tvåatomig molekyl kan beskrivas med en enkel endimensionell modell enligt följande. En partikel med massan μ rör sig under inverkan av potentialen

$$V(x) = V_0 \left[e^{-2\,a\,(x-x_0)} - 2\, e^{-a\,(x-x_0)} \right]$$

där a, x_0, och V_0 är för molekylen karakteristiska konstanter. För de lägst liggande nivåerna är potentialen approximativt harmonisk kring jämviktsläget $x = x_0$, dvs om $V(x)$ serieutvecklas kan termer av 3:e potens och högre i $(x - x_0)$ försummas.
a/ Bestäm grundtillståndets energi i denna approximation.
b/ Beräkna grundtillståndets energi numeriskt för H_2-molekylen om
$a = 20\ \text{nm}^{-1}$, $V_0 = 7 \cdot 10^{-19}$ J, $x_0 = 0.074$ nm, $\mu = 0.84 \cdot 10^{-27}$ kg.

VII.9 En elektron påverkas dels av en harmonisk kraft med potentialen $\frac{1}{2} m\omega^2 x^2$, dels av ett konstant elektriskt fält med fältstyrkan $\mathbf{E}$ längs x-axeln. Bestäm elektronens energispektrum.

VII.10 Visa att hamiltonoperatorn för en harmonisk oscillator kan skrivas

$$H = \left(\frac{1}{2} + a^\dagger\, a \right) \hbar\omega$$

där operatorerna a och $a^\dagger$ definieras av uttrycken

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right) , \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) .$$

Dessa operatorer kallas för stegoperatorer av följande skäl. Om operatorn $a^\dagger$ får operera på en egenfunktion till H så erhålles en ny egenfunktion, nämligen den som svarar mot närmast högre egenvärde. Med hjälp av operatorn a erhålles på motsvarande sätt den egenfunktion som svarar mot närmaste lägre egenvärde (om a får operera på grundtillståndets vågfunktion blir resultatet noll). Visa dess egenskaper hos a och $a^\dagger$ genom att först härleda ett uttryck för kommutatorn $\left[a\, ,\, a^\dagger \right]$.

VIII PARTIKEL I CENTRALFÄLT

VIII.1 Visa utgående från definitionen $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ att banrörelsemängdsmomentets komponenter uppfyller kommuteringsrelationerna

$$\left[\hat{L}_\alpha \, , \, \hat{L}_\beta \right] = i\hbar \hat{L}_\gamma \, ,$$

där (α, β, γ) är en cyklisk permutation av (x, y, z).

VIII.2 Visa kommuteringsrelationen

$$\left[\hat{\mathbf{L}}^2 \, , \, \hat{L}_\alpha \right] = 0$$

där α står för x, y, eller z.

VIII.3 En partikel befinner sig i ett tillstånd sådant att rörelsemängdsmomentets belopp är $|\mathbf{L}| = \sqrt{l\,(l+1)}\,\hbar$ och dess z-komponent är $L_z = m\hbar$.
a/ Bestäm osäkerheterna ΔL_x och ΔL_y i rörelsemängdsmomentets x- och y-komponenter!
b/ Bestäm osäkerheten ΔL_{xy} i beloppet av rörelsemängdsmomentets projektion på xy-planet, definierad av

$$L_{xy} = \sqrt{L_x^2 + L_y^2} \, .$$

VIII.4 Vågfunktionen för en partikel som rör sig i en centralpotential är

$$\psi\,(x, y, z) = (x + y + z)\; e^{-\alpha r}$$

där $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Beräkna väntevärdet av rörelsemängdsmomentets kvadrat $\mathbf{L}^2$.

VIII.5 Bestäm energinivåerna och deras degenerationsgrader för en tredimensionell harmonisk oscillator, dvs en partikel som påverkas av en centralkraft med potentialen $\frac{1}{2} k\, r^2$.

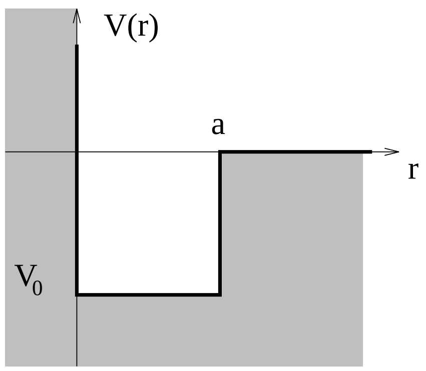
VIII.6 Vågfunktionen för den tredimensionella harmoniska oscillatorns grundtillstånd kan skrivas på formen

$$\psi\,(\mathbf{r}) = C\, e^{-\frac{1}{2}(r/r_0)^2}$$

där C och r_0 är konstanter, och där r är avståndet till origo. Beräkna
a/ det mest sannolika värdet på r,
b/ förväntansvärdet av r,
c/ förväntansvärdet av $1/r$.

VIII.7 En kub och en sfär har volymen V. I vardera volymen är en partikel med massan m innesluten. Angiv vågfunktionerna och energierna för de fyra tillstånden med de lägsta energierna i de båda fallen.

VIII.8 Potentialen mellan protonen och neutronen i en deutron kan approximeras med en lådpotential enligt figuren. Deutronen har endast ett mycket löst bundet tillstånd. Bestäm härur ett approximativt villkor på parametrarna a och V_0.
Obs att grundtillståndet är ett s-tillstånd.



IX VÄTEATOMEN OCH LIKNANDE SYSTEM

IX.1 Vågfunktionen för väteatomens grundtillstånd är av formen

$$\psi(\mathbf{r}) = A\, e^{-\alpha r}$$

Bestäm α och normeringskonstanten A.

IX.2 Vilket är det mest sannolika avståndet mellan elektronen och kärnan för en väteatom i a/ 1s-tillståndet, b/ 2s-tillståndet, c/ något av 2p-tillstånden?

IX.3 Beräkna sannolikheten för att elektronen i väteatomens grundtillstånd skall befinna sig på ett avstånd från kärnan som är större än bohrradien.

IX.4 Beräkna sannolikheten för att elektronen i en väteatom skall befinna sig inom avståndet $2a_0$ från kärnan, om atomen är i a/ 1s-tillståndet, b/ 2s-tillståndet.

IX.5 Beräkna väntevärdena av r och $1/r$ för väteatomens grundtillstånd.

IX.6 Bestäm väntevärdena av den kinetiska och den potentiella energin för en väteatom i grundtillståndet.

IX.7 Bestäm väntevärdena av den kinetiska och den potentiella energin för ett 2s-tillstånd hos en väteatom.

IX.8 En positron är en elementarpartikel, som har samma massa som en elektron men motsatt tecken på laddningen. Om man byter ut protonen i en väteatom mot en positron får man en så kallad positroniumatom, som kvantmekaniskt kan behandlas på likartat sätt som väteatomen. En väsentlig skillnad är dock att elektronen och positronen kan förinta varandra och omvandlas till elektromagnetisk strålning. Det är rimligt att anta att detta inträffar om de båda partiklarna kommer inom ett avstånd av några få fm (10^{-15} m) från varandra. Beräkna sannolikheten för att avståndet mellan elektronen och positronen skall vara mindre än 2 fm för en positroniumatom i grundtillståndet!

IX.9 En väteatom befinner sig i ett 2p-tillstånd sådant att det magnetiska kvanttalet m har värdet noll. Beräkna väntevärdena av beloppen av elektronens cartesiska koordinater, dvs $\langle |x| \rangle$, $\langle |y| \rangle$ och $\langle |z| \rangle$!

IX.10 Medelhastigheten $\overline{v}$ för elektronen i väteatomen definieras som $\overline{v} = \sqrt{\langle v^2 \rangle}$. Beräkna $\overline{v}$ för en elektron som befinner sig i grundtillståndet hos en väteatom.

IX.11 Beräkna sannolikheten för att elektronens hastighet i väteatomens grundtillstånd skall vara mindre än $\hbar/ma_0$!

X SUPERPOSITION AV STATIONÄRA TILLSTÅND OCH VÅGPAKETETS RÖRELSE

X.1 En partikel befinner sig i potentialfältet

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{om } |x| < a \\ \infty & \text{för övrigt.} \end{cases}$$

Partikeln beskrivs vid $t = 0$ av vågfunktionen

$$\psi(x) = N\left[\sin\frac{\pi x}{a} + 2\sin\frac{2\pi x}{a} + \sin\frac{3\pi x}{a}\right].$$

a/ Bestäm N så att $\psi(x)$ blir normerad.
b/ Bestäm förväntansvärdet av hamiltonoperatorn.
c/ Vilka energivärden kan erhållas vid en mätning och vilka är sannolikheterna för de olika värden?

X.2 En partikel befinner sig i ett potentialfält $V(x)$, sådant att

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{om } x < 0 \\ 0 & \text{om } 0 \le x \le a \\ \infty & \text{om } x > a\ . \end{cases}$$

Vid en viss tidpunkt beskrivs partikeln av vågfunktionen $\phi(x) = N\,x\,(a-x)$, där N är en normeringskonstant. Beräkna sannolikheten att finna partiklen i dess lägsta energitillstånd!

X.3 En partikel med massan m befinner sig i en potentialbox, definierad av

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{om } |x| \ge a \\ 0 & \text{om } |x| < a\ . \end{cases}$$

Vid en viss tidpunkt beskrivs partikeln av vågfunktionen

$$\psi(x) = A\left[1 + 4\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\right]\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right),$$

där A är en konstant. Vilka möjliga energivärden kan man finna vid en mätning, och vad är sannolikheterna för respektive värden?

X.4 En linjär harmonisk oscillator med massan m och vinkelfrekvensen ω befinner sig vid en viss tidpunkt i ett tillstånd med vågfunktionen

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\,a}} & \text{om } |x| \le a \\ 0 & \text{om } |x| > a \end{cases}$$

där $a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$. Beräkna sannolikheten för att man vid en energimätning skall finna oscillatorn i dess grundtillstånd.

X.5 En tredimensionell harmonisk oscillator har den klassiska vinkelfrekvensen ω. I ett visst ögonblick beskrivs den med vågfunktionen

$$\psi(\mathbf{r}) = N\, r^2\, e^{-a\, r^2}$$

där $a = m\omega/2\hbar$ och där N är en normeringskonstant. Bestäm sannolikheten för att oscillatorn befinner sig i sitt grundtillstånd.

X.6 En väteatom beskrivs vid en viss tidpunkt av vågfunktionen

$$\psi(\mathbf{r}) = A\, \sqrt{r}\, e^{-r/a_0}\,,$$

där a_0 = bohrradien. Beräkna den totala sannolikheten för att atomen är exciterad.

X.7 Vågfunktionen för en partikel har i ett visst ögonblick formen

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(r)\left[Y_{11}(\theta,\varphi) + 2\, Y_{10}(\theta,\varphi) + 3\, Y_{20}(\theta,\varphi)\right]\,,$$

där $\phi(r)$ är en okänd (ej nödvändigtvis normerad) funktion. Vad är sannolikheten att vid en mätning av rörelsemängdsmomentets kvadrat $\mathbf{L}^2$ finna värdet $2\hbar^2$?

X.8 Vågfunktionen för en elektron i en kolatom kan i vissa kemiska sammanhang antagas vara av formen

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)\left[1 + 3\sin\theta\sin\varphi\right]\,.$$

Bestäm sannolikheten för att man vid en mätning av rörelsemängdsmomentet skall finna elektronen i ett p-tillstånd!

X.9 En partikel befinner sig i ett tillstånd med vågfunktionen

$$u(r,\theta,\varphi) = A\,\left[1 + \cos\theta\right]\, e^{-r^2/a^2}$$

där (r,θ,φ) är sfäriska koordinater och A och a är konstanter. Normera vågfunktionen och bestäm sedan väntevärdena av r och $\mathbf{L}^2$, där $\mathbf{L}$ är rörelsemängdsmomentet m.a.p. origo.

X.10 En partikel beskrivs av vågfunktionen

$$\psi(\mathbf{r}) = F(r)\left[x + y\right]\,,$$

där $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$. Vilka värden kan erhållas vid en mätning av rörelsemängdsmomentets storlek $|\mathbf{L}|$ och dess z-komponent L_z? Ange sannolikheterna för respektive mätresultat!

X.11 För att förklara kolatomens kemiska egenskaper antar man att de yttersta elektronerna karakteriseras av så kallad sp^3-hybridisering. Med vissa förenklingar kan vågfunktionen för en av dessa elektroner skrivas på formen

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{2} R(r) \left[Y_{00}(\theta,\varphi) - i\frac{\sqrt{3}}{2} Y_{11}(\theta,\varphi) - i\frac{\sqrt{3}}{2} Y_{1-1}(\theta,\varphi) \right] ,$$

där $R(r)$ är den radiella vågfunktionen och $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ är klotytefunktioner. Beräkna väntevärdena $\langle x \rangle$, $\langle y \rangle$ och $\langle z \rangle$ för denna elektron, om den radiella vågfunktionen är sådan att $\langle r \rangle = r_0$!

X.12 En partikel med massan m rör sig i en endimensionell lådpotential

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{om } x \leq 0 \text{ eller } x \geq a \\ 0 & \text{om } 0 < x < a \, . \end{cases}$$

Vid tiden $t = 0$ har vågfunktionen formen

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{2}{3a}} \sin \frac{\pi x}{a} + \sqrt{\frac{4}{3a}} \sin \frac{3\pi x}{a}$$

Hur ser vågfunktionen ut vid en godtycklig tid t?

X.13 En partikel med massan m rör sig under inverkan av potentialen

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{om } |x| \geq a \\ 0 & \text{om } |x| < a \, . \end{cases}$$

Vid tiden $t = 0$ beskrivs den av en vågfunktion $\psi(x,0) = N \sin^3\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$, för $|x| < a$, där N är en normeringskonstant. Beräkna vågfunktionen $\psi(x,t)$!

X.14 En partikel befinner sig i en lådpotential av formen

$$V_0(x) = \begin{cases} 0 & \text{om } 0 < x < a \\ \infty & \text{för övrigt.} \end{cases}$$

Vid tiden $t = T$ ändras potentialen plötsligt till

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{om } 0 < x < 2a \\ \infty & \text{för övrigt.} \end{cases}$$

Antag att partikeln befinner sig i grundtillståndet för $t < T$. Beräkna sannolikheten för att man vid en mätning av energin för $t > T$ skall finna partikeln i grundtillståndet svarande mot den nya potentialen.

X.15 En endimensionell harmonisk oscillator befinner sig i sitt grundtillstånd. Plötsligt ändras dess massa med en faktor β på grund av radioaktivt sönderfall. Vad är sannolikheten att finna oscillatorn i dess nya grundtillstånd efter sönderfallet?

X.16 Tritium sönderfaller genom reaktionen

$$ {}^{3}\mathrm{H} \longrightarrow {}^{3}\mathrm{He}^{+} + \mathrm{e}^{-} + \text{energi} . $$

Beräkna under antagandet att tritiumatomen befinner sig i grundtillståndet före sönderfallet sannolikheten för att finna sluttillståndets heliumjon i ett 1s-, 2s- eller 2p-tillstånd. Störningen kan betraktas som plötslig.

X.17 Vid ett spridningsexperiment använder man som måltavla väteatomer i grundtillståndet. Före spridningsprocessen beskrivs alltså väteatomen av grundtillståndets vågfunktion

$$ \psi_0\left(r\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} $$

där a_0 är bohrradien. Efter spridningsprocessen utför atomkärnan en rekylrörelse, och atomen beskrivs då av vågfunktionen

$$ \psi\left(r,\theta,\varphi\right) = \psi_0\, e^{i\frac{\mu}{\hbar}vr\cos\theta} $$

där μ är den reducerade massan, v är kärnans hastighet och (r,θ,φ) är sfäriska koordinater för elektronen relativt kärnan. Bestäm sannolikheten för att man vid en mätning av energin skall finna atomen i ett exciterat tillstånd.

X.18 En elektron befinner sig i ett konstant elektriskt fält med fältstyrkan $\mathbf{E}$. Bestäm elektronens medelacceleration, d.v.s. tidsderivatan av hastighetens väntevärde.

X.19 Visa att för en harmonisk oscillator med $V\left(x\right) = kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ gäller att

$$ \frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} + \omega^2\langle x\rangle = 0 \,. $$

Jämför med motsvarande klassiska ekvation.

X.20 Använd Ehrenfests teorem för att visa det så kallade <u>virialteoremet</u>: Om en partikel rör sig i ett potentialfält $V(\mathbf{r})$, så gäller för en godtyckligt stationärt tillstånd

$$ 2\left\langle T\right\rangle = \left\langle \mathbf{r}\cdot\nabla V(\mathbf{r})\right\rangle $$

där T är den kinetiska energioperatorn. **Ledning**: Beräkna $\frac{d}{dt}\langle\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}\rangle$.

X.21 Använd virialteoremet för att visa att
a/ för en harmonisk oscillator i ett stationärt tillstånd är $\langle T\rangle = \langle V\rangle = \frac{1}{2}\,E$,
b/ för en väteatom i ett stationärt tillstånd är $\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\left\langle V\right\rangle = -E$.

XI APPROXIMATIONSMETODER

XI.1 Uppskatta grundtillståndets energi för väteatomen med hjälp av variationsmetoden. Använd därvid en vågfunktion av formen
a) $\psi = N\, e^{-\alpha\, r^2}$; b) $\psi = N\, e^{-\beta\, r}$.

XI.2 En partikel med massan m rör sig i ett centralfält med den potentiella energin

$$V(r) = \frac{1}{2}\, k\, r^2$$

Beräkna grundtillståndets energi mha variationsmetoden och utgå från ansatsen

$$\psi(r) = A\, e^{-\,\alpha\, r}\,.$$

Med hur många procent skiljer sig svaret från det exakta värdet ?

XI.3 En partikel med massan m rör sig i en potential

$$V\,(\mathbf{r}) = -\,V_0\, e^{-\,r/a}\,, \qquad V_0 = \frac{4\,\hbar^2}{3\,m\,a^2}\,.$$

Gör en uppskattning av grundtillståndets energi m.h.a. variationsmetoden, och använd en vågfunktion av formen

$$\psi(r) = N\, e^{-\,\alpha\, r}\,.$$

XI.4 En partikel med massan m kan röra sig längs x-axeln under inverkan av potentialfältet

$$V\,(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}\, m\, \omega^2\, x^2 & \text{om } |x| \le a \\ \infty & \text{om } |x| > a \end{cases}$$

där konstanterna ω och a är sådana att

$$\hbar\, \omega \ll \frac{\hbar^2}{m\, a^2}$$

Bestäm grundtillståndets energi m.h.a. första ordningens störningsräkning!

XI.5 En partikel med massan m är rörlig längs x-axeln. Den påverkas av ett potentialfält av formen

$$V\,(x) = \begin{cases} 0 & \text{om } 0 < x < a \text{ eller } 3a < x < 4a \\ V_1 & \text{om } a < x < 3a \\ \infty & \text{om } x < 0 \text{ eller } x > 4a \end{cases}$$

där V_1 är liten jämfört med grundtillståndets energi. Bestäm energierna för samtliga stationära tillstånd, m.h.a. första ordningens störningsräkning.

XI.6 Hamiltonoperatorn för en icke-relativistisk linjär harmonisk oscillator kan skrivas på formen

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2\,m} + \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,x^2\,,$$

där m är oscillatorns massa och ω är dess vinkelfrekvens. Lägsta ordningens relativistiska korrektion har formen

$$H_1 = -\frac{p_x^4}{8\,m^3\,c^2}\,,$$

där c är ljushastigheten. Bestäm den härav orsakade ändringen i grundtillståndets energi. Hur stor blir ändringen om m är en elektronmassa och $\hbar\omega$ har värdet 10 eV?

XI.7 En partikel med massan m rör sig i det endimensionella potentialfältet

$$V\,(x) = V_0 + V_1\,x + V_2\,x^2 + V_3\,x^3 + V_4\,x^4\,,$$

där V_1, V_3 och V_4 är små jämförda med V_2. Beräkna de tre lägsta energinivåerna m.h.a. första ordningens störningsräkning.

XI.8 För att studera vibrationsrörelserna hos tvåatomiga molekyler kan man använda följande endimensionella modell. En partikel med massa μ rör sig längs x-axeln under inverkan av en kraft med potentialen

$$V\,(x) = V_0\,\left[e^{-2\,a\,(x-x_0)} \; - \; 2\,e^{-a\,(x-x_0)}\right]\,,$$

där a, x_0 och V_0 är konstanter. För grundtillståndet och det lägsta exciterade tillstånden gäller att partikeln befinner sig nära jämviktsläget $x = x_0$, och potentialen kan därför approximeras med hjälp av taylorutvecklingen

$$V\,(x) = V\,(x_0) + \frac{1}{2}V''\,(x_0)\,(x-x_0)^2 + \frac{1}{6}V'''\,(x_0)\,(x-x_0)^3 + \frac{1}{24}V^{(4)}\,(x_0)\,(x-x_0)^4 + \ldots$$

där den linjära termen saknas på grund av att $V'\,(x_0) = 0$. Beräkna först grundtillståndets energi genom att försumma alla termer utom de två första, och bestäm sedan med lägsta ordningens störningsteori bidragen från tredje och fjärde termen! Sätt in siffervärden som är relevanta för H_2-molekylen, nämligen $a = 20\,\mathrm{nm}^{-1}$, $V_0 = 4.37\,\mathrm{eV}$, $x_0 = 0.074\,\mathrm{nm}$ och $\mu = 0.84 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{kg}$.
OBS! Trots att x står för avståndet mellan atomerna i molekylen kan man i denna endimensionella modell låta alla integraler över x gå från $-\infty$ till $+\infty$.

XI.9 För att studera relativistiska effekter i väteatomens grundtillstånd kan man använda hamiltonoperatorn

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\,m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,r} + \alpha^2\,\frac{\hbar^2}{2\,m_e}\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{2\,a_0}\right)^2 ,$$

där α är finstrukturkonstanten och a_0 är bohrradien. Beräkna grundtillståndets energi med hjälp av första ordningens störningsräkning!

XI.10 Om väteatomens kärna antages vara en sfär med radien R, vari laddningen är jämt fördelad, fås omkring kärnan en elektrostatisk potential $V(r)$, given av

$$V(r) = \begin{cases} \frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,R}\left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right) & \text{om } 0 \leq r \leq R \\ \frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,r} & \text{om } r \geq R\,. \end{cases}$$

Beräkna med första ordningens störningsräkning grundtillståndets energi för en elektron som rör sig under inverkan av denna potential. Utgå därvid från grundtillståndet för en elektron i potentialen från en punktladdning. Endast den lägsta från noll skilda termen i en utveckling i parametern R/a_0 behöver medtagas i svaret (a_0 är bohrradien).

XI.11 Litiumatomen har som bekant tre elektroner, men den kan i många sammanhang behandlas som en enelektronatom, eftersom de två innersta elektronerna huvudsakligen uppträder som ett skärmande laddningsmoln kring kärnan. En enkel modell baseras på antagandet att den yttre elektronen på grund av skärmningen rör sig i ett effektivt potentialfält av formen

$$V_{\text{eff}} = -\frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,r}\left(1 + 2\,e^{-\frac{3\,r}{a_0}}\right) ,$$

där a_0 är bohrradien. Beräkna valenselektronens energi i grundtillståndet, om den andra termen i parentesen kan behandlas som en liten störning. Grundtillståndet är ett 2s-tillstånd, och motsvarande vågfunktion för väte har formen

$$\psi_{2\text{s}}(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{8\,\pi\,a_0^3}}\left[1 - \frac{r}{2\,a_0}\right] e^{-\frac{r}{2\,a_0}} .$$

XI.12 Vid en approximativ behandling av flerelektronatomer använder man ofta den så kallade centralfältsmodellen. Den baseras på antagandet att varje elektron i atomen rör sig i ett centralfält, som tar hänsyn till att coulombfältet från kärnan skärmas av de övriga elektronerna. Ett enkelt på en sådan skärmad potential är

$$V(r) = -\frac{Z_{\text{eff}}\,e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,(r + r_0)} ,$$

där Z_{eff} och r_0 är positiva konstanter. Bestäm med störningsteori egenenergin för en 2s-elektron som rör sig i detta fält under förutsättning att $r_0 \ll a_0/Z_{\text{eff}}$, där a_0 är bohrradien.

XI.13 En partikel rör sig under inverkan av en skärmad Coulomb potential av formen

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} e^{-\mu r} .$$

Beräkna grundtillståndets energi m.h.a. första ordningens störningsräkning. Låt den ostörda hamiltonoperatorn vara densamma som för väteatomen med tillhörande egenfunktion för grundtillståndet, a_0 är bohrradien,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad , \quad \text{och} \qquad \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} .$$

XI.14 Två partiklar med samma massa m påverkar varandra med en kraft svarande mot potentialen

$$V(r) = -\frac{a}{r} + b\,r ,$$

där a och b är positiva konstanter. Bestäm grundtillståndets energi under antagandet att termen $b\,r$ kan betraktas som en liten störning.
Ledning: Grundtillståndets vågfunktion för en väteatom är av formen $A\,e^{-\alpha r}$ där A och α är vissa konstanter. (Anmärkning: Denna och liknande potentialer har föreslagits för att approximativt beskriva växelverkan mellan "kvarkar", d.v.s. de hypotetiska partiklar som antas vara byggstenar för bl.a. nukleoner och mesoner.)

XII ELEKTRONENS SPINN

XII.1 En stråle av silveratomer med hastigheten 700 m/s passerar mellan två magnetpoler, som utformats så att de ger upphov till ett inhomogent magnetfält. Varje silveratom påverkas därvid av kraften $\nabla(\mathbf{m}\cdot\mathbf{B})$, där $\mathbf{B}$ är den magnetiska flödestätheten och $\mathbf{m}$ är silveratomens magnetiska moment, vilken kan anses vara detsamma som för en fri elektron. Flödestätheten i det aktuella området anges av det approximativa uttrycket $\mathbf{B} = (B_0 + \alpha\, z)\,\hat{z}$, där z är koordinaten vinkelrätt mot strålens infallsriktning, α är en konstant med värdet 300 T/m och B_0 är en konstant vars värde är oväsentligt i detta sammanhang. Man finner att strålen uppsplittras i två komponenter. Hur stor är seperationen δ mellan de båda komponenterna på avståndet 0,10 m från den punkt där strålen kommer in i fältet?

XII.2 Hur stort är det magnetiska moment som alstras av elektronens banrörelse i väteatomens grundtillstånd enligt Bohrs modell och enligt den kvantmekaniska modellen?

XII.3 Vad är vinkeln mellan det totala rörelsemängdsmomentet och banrörelsemängdsmomentet för tillståndet $^2\mathrm{P}_{3/2}$?

XII.4 En atomär 3d-nivå uppspaltas på grund av spinnbankopplingen i två finstrukturkomponenter. Ange de spektroskopiska beteckningarna för dessa.

XII.5 Atomer med en valenselektron i s-tillståndet utanför ett slutet elektronskal befinner sig i ett homogent magnetfält med flödestätheten 0,4 T. Om atomerna utsätts för elektromagnetisk strålning av en viss energi inträffar resonansabsorption (elektronspinnresonans), d.v.s. spinnriktningen omorienteras i fältet. Beräkna den fotonvåglängd för vilken detta sker.

XII.6 Hamiltonoperatorn för en elektron, som rör sig i ett centralfält med den potentiella energin $V(r)$ innehåller på grund av spinnbankoppling en term av formen

$$\hat{H}_{SB} = \frac{1}{2\,m^2\,c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}\,.$$

Bestäm härur finstrukturuppsplittringen av väteatomens 2p-nivå.

XII.7 Natriumatomen kan i många sammanhang behandlas som en enelektronatom. Dess hamiltonoperator skrivs då på formen

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{\xi(r)}{\hbar^2}\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}\,,$$

där $\hat{H}_0$ är hamiltonoperatorn för en partikel i ett centralfält. Den sista termen kommer av spinnbankopplingen, och den ger upphov till finstruktur i spektret. Bland annat uppspaltas den spektrallinje som svarar mot övergången 3p $\rightarrow$ 3s i två komponenter. Detta är den gula så kallade D-dubletten i natriums spektrum, och enligt TEFYMA har dess komponenter våglängderna 5889,953 Å respektive 5895,923 Å. Beräkna härur väntevärdet av spinn-bankopplingsfunktionen $\xi(r)$ i 3p-tillståndet. Svaret skall anges i eV.

XII.8 Den gula dubletten i natriums spektrum uppstår vid övergångarna $p_{3/2} \rightarrow s_{1/2}$. Skillnaden i våglängd mellan de båda linjerna i dubletten är 0,597 nm. a) Ange hur dessa linjer uppsplittras i närvaro av ett yttre magnetfält! b) Vid en viss styrka hos magnetfältet kommer en av komponenterna i nivån $p_{3/2}$ att sammanfalla med en av komponenterna i nivån $p_{1/2}$. Beräkna den magnetiska flödestätheten för vilken detta inträffar!

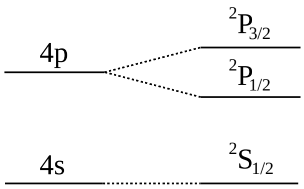
XII.9 Man observerar en spektrallinje i kaliums P-serie, $7^2P_{3/2}$ - $4^2S_{1/2}$, med våglängden 3217 Å. Landés g-faktor är 4/3 för $P_{3/2}$ och 2 för $S_{1/2}$. Beräkna uppspaltningen i våglängd av linjen i ett yttre magnetfält 2,14 T.

XII.10 Positronium består av en elektron och en positron, som är bundna till varandra. Hamiltonoperatorn för systemet kan approximativt skrivas som

$$H = H_0 + \frac{A}{\hbar^2}\,\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \;,$$

där H_0 är spinn-oberoende och där den andra termen representerar energibidraget på grund av kopplingen mellan elektronens spinn $\mathbf{S}_1$ och positronens spinn $\mathbf{S}_2$. Denna koppling ger upphov till en uppsplittring av grundtillståndet i två termer med de spektroskopiska beteckningarna ^{1}S och ^{3}S, svarande mot värdena 0 resp. 1 på det totala spinnet. Övergångsfrekvensen mellan dessa termer är $2 \cdot 10^5$ MHz. Beräkna konstanten A uttryckt i eV.

XII.11 Som bekant orsakas finstrukturen i atomära spektra av kopplingen mellan elektronernas spinn och deras banrörelse. En likartad koppling finns mellan elektronhöljet och atomkärnan, och den ger upphov till ytterligare en uppsplittring av finstrukturnivåerna (hyperfinstruktur). Om atomkärnan har ett rörelsemängdsmoment $\mathbf{I}$ ($|\mathbf{I}| = \hbar\sqrt{I(I+1)}$), så kopplas detta till det elektroniska rörelsemängdsmomentet $\mathbf{J}$ ($|\mathbf{J}| = \hbar\sqrt{J(J+1)}$) genom en term i hamiltonoperatorn,



$$H_{\text{hfs}} = \frac{2\,\pi}{\hbar}\,A\,\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} \,,$$

där A är hyperfinstrukturkonstanten (i frekvensenheter) för ifrågavarande finstrukturnivå. Figuren visar ett schematiskt energinivådiagram för kalium med hänsyn tagen till spinnbankopplingen .

a) Ange i hur många hyperfinstrukturnivåer var och en av de tre angivna finstrukturnivåerna uppsplittras. Kärnspinnet är $I = 3/2$.

b) Beräkna storleken av uppsplittringen mellan de olika hyperfinstrukturnivåerna om $A(^2S_{1/2}) = 230{,}0$ MHz, $A(^2P_{1/2}) = 29{,}0$ MHz, $A(^2P_{3/2}) = 6{,}1$ MHz.

Ledning: Inför det totala banrörelsemängdsmomentet $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$, och använd att $|\mathbf{F}| = \hbar\sqrt{F(F+1)}$, där F kan anta värdena $|I - J|, |I - J| + 1, \ldots, I + J$.

XII.12 Hamiltonoperatorn för en elektron i ett magnetfält med flödestätheten B längs z-axeln är

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\,m} + \frac{2\,\mu_{\mathrm{B}}\,B}{\hbar}\hat{S}_z \ ,$$

där $\hat{S}_z$ är z-komponenten av spinnoperatorn. Vid tiden $t = 0$ gäller att väntevärdet av spinnet är $\langle \mathbf{S}\,(0) \rangle = \frac{\hbar}{2}\hat{x}$ där $\hat{x}$ är en enhetsvektor längs x-axeln. Beräkna $\langle \mathbf{S}\,(t) \rangle$, d.v.s. väntevärdet av spinnet vid en godtycklig tid t!

XIII VÄXELVERKAN MELLAN ATOMER OCH STRÅLNING

XIII.1 En linjär harmonisk oscillator med vinkelfrekvensen ω, massan m och laddningen q påverkas av ett homogent elektriskt fält, vars fältstyrka varierar i tiden enligt formeln

$$E\,(t) = \frac{A}{\tau}\exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right),$$

där A och τ är konstanter. Antag att oscillatorn vid tiden $t = -\infty$ befinner sig i sitt grundtillstånd och beräkna sannolikheten för att den vid tiden $t = +\infty$ skall befinna sig i det första exciterade tillståndet! Diskutera särskilt gränsfallet $\tau \to 0$ och $\tau \to \infty$. Lägsta ordningens störningsräkning får användas.

XIII.2 En väteatom i grundtillståndet befinner sig mellan plattorna till en plankondensator. Över plattorna läggs en tidsberoende spänning, så att mellan plattorna alstras ett homogent elektriskt fält av formen

$$E = \begin{cases} 0 & \text{för} \quad t < 0 \\ E_0\,\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}} & \text{för} \quad t \geq 0\,. \end{cases}$$

Beräkna sannolikheten för att man efter lång tid skall finna väteatomen i 2s-tillståndet genom tillämpning av första ordningens störningsräkning. Lägsta ordningens störningsräkning får användas.

XIII.3 En väteatom befinner sig för $t \leq 0$ i sitt grundtillstånd. För $t > 0$ pålägges en yttre störning vilken ger upphov till en potentiell energi av formen

$$V\,(\mathbf{r}, t) = V_0\, z\, \mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\, \sin\omega\, t\,.$$

Vad är sannolikheten att atomen efter lång tid befinner sig i ett 2p-tillstånd? Lägsta ordningens störningsteori kan användas.

XIII.4 Enligt gyllene regeln bestäms sannolikheten för dipolövergångar i enelektronatomer av matriselementet $\langle k|\, e\hat{\mathbf{p}}\,|s\rangle$. Visa att detta kan skrivas på formen

$$\langle k|\, e\hat{\mathbf{p}}\,|s\rangle = i\,\mu\,\omega_{ks}\langle k|\, e\mathbf{r}\,|s\rangle\,,$$

där $\langle k|\, e\mathbf{r}\,|s\rangle$ är matriselementet av atomens elektriska dipolmoment.

XIII.5 Härled urvalsreglerna för dipolövergångar i enelektronmodellen genom att utföra vinkelintegrationerna i dipolmatriselementet. Spinnbankopplingen antas försumbar, så att l, m_l och m_s är goda kvanttal.

XIII.6 Beräkna förhållandet mellan totala övergångssannolikheterna för övergångarna $\psi_{210} \to \psi_{100}$ (π-övergång) och $\psi_{211} \to \psi_{100}$ (σ-övergång) i ett väteliknande system.

XIII.7 En linjär harmonisk oscillator med vinkelfrekvensen ω, massan m och laddningen q påverkas av ett homogent elektriskt fält som oscillerar i tiden enligt formeln

$$E = E_0 \cos \nu t\,.$$

Beräkna övergångssannolikheten per tidsenhet mellan a) grundtillståndet och det första exciterade tillståndet, b) det första och det andra exciterade tillståndet, c) grundtillståndet och det andra exciterade tillståndet.

XIV ENKEL TEORI FÖR FLERELEKTRONATOMER

XIV.1 Skriv ner uttrycket för hartreepotentialen för en 1s- respektive 2s-elektron i litiums grundtillståndskonfiguration.

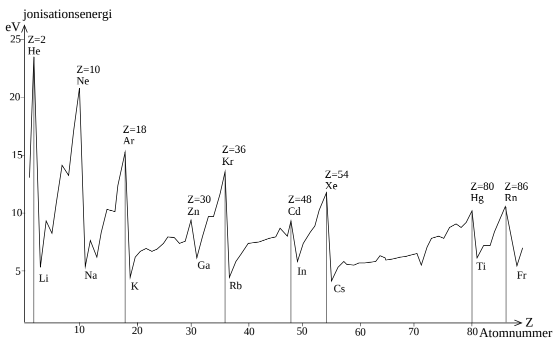
XIV.2 Beräkna hartreepotentialen från ett fyllt p-skal, t.ex. $2p^6$, för att visa att potentialen i det fallet är central.

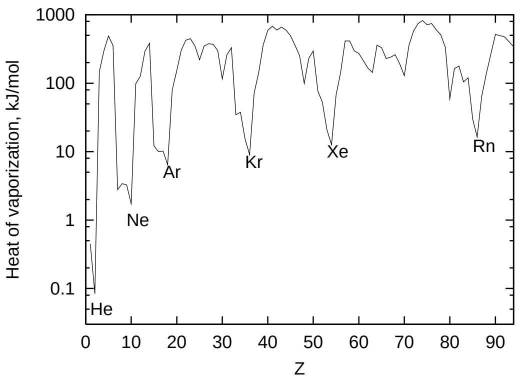
XIV.3 Vilka av nedanstående egenskaper ändras periodiskt med atomnumret:

a) valens,	d) karakteristiskt röntgenspektrum,
b) atomvolym,	e) jonisationspotential,
c) smältpunkt,	f) elektronaffinitet.

Vad är orsaken till skillnaderna i beroendet av atomnumret hos dessa egenskaper?

XIV.4 Vidstående figur anger första jonisationspotentialen och ångbildningsvärmet för en rad element som funktion av Z. Hur kan det komma sig att samma slags av periodicitet kan förekomma hos två så olika fysikaliska egenskaper?





XIV.5 Vilket är viktigast för att bestämma det kemiska uppförandet hos en atom, antalet neutroner eller antalet protoner? Varför?

XIV.6 Varför är första jonisationsenergin större för första-skals-elementen H och He än för andra-skals-elementen Li-Ne?

XIV.7 Varför ökar första jonisationspotentialen i allmänhet från Li till Ne?

XIV.8 Varför skulle du vänta dig en plötslig och dramatisk ökning mellan 4:e och 5:e jonisationsenergierna hos kol?

XV SPEKTROSKOPI

XV.1 Tabellen nedan ger värdena för spektraltermerna (i cm^{-1}) för litiumatomen.

n	s	p	d	f
2	43 486	28 582	-	-
3	16 280	12 560	12 203	-
4	8 475	7 018	6 864	6 856
5	-	-	4 390	4 382

a) Beräkna kvantdefekterna för dessa termer, och visa att korrektionerna är konstanta inom varje termserie.
b) Ange vilka termer som är mest vätelika m.a.p. spektraltermernas värde och ge en förklaring av detta.

XV.2 Den fundamentala termen för litiumatomen är $T_{2s} = 43\ 486\ cm^{-1}$. Vilka spektrallinjer uppkommer när en exciterad atom återgår från tillståndet 3p till tillståndet 2s, om den direkta övergången 3p $\rightarrow$ 2s svarar mot linjen 3233 Å.

XV.3 Beräkna och konstruera ett skalenligt termdiagram för natriumatomen, vars grundtillstånd är 3s. Våglängden för resonanslinjen (589 nm), principallinjen i den diffusa serien (819 nm), principallinjen i den fundamentala serien (1846 nm) samt gränsen av principalserien (241 nm) är givna. Begränsa diagrammet till termer med huvudkvanttalen 3 och 4. (Resonanslinjen är den linje som svarar mot övergången mellan grundtillståndet och det lägsta exciterade tillståndet.)

XV.4 Våglängden för resonanslinjen från kalium, vilken svarar mot övergången 4p $\rightarrow$ 4s, är 7665 Å, och våglängden för principalseriegränsen är 2558 Å. Beräkna därur Rydbergkorrektionerna för s- och p-termerna i kaliumatomen.

XV.5 Kvantdefekterna för s-, p- och d-termerna i natriumatomen är 1.37, 0.90, 0.01 respektive. Låt termerna representeras av uttrycket

$$T_{nl} = \frac{R\ (Z - \sigma)^2}{n^2},$$

där Z är kärnans atomnummer. Beräkna korrektionen σ för termerna 3s, 3p och 3d. Vad är den fysikaliska innebörden av korrektionen σ?

XV.6 Som framgår av nedanstående tabell så avtar jonisationspotentialen för alkaliatomer och negativa alkalijoner, när man går ner genom första kolumnen i det periodiska systemet.
a) Hur stämmer tabellens värden för alkaliatomer med vad en väteliknande modell förutsäger utan kvantdefekter?

forts.

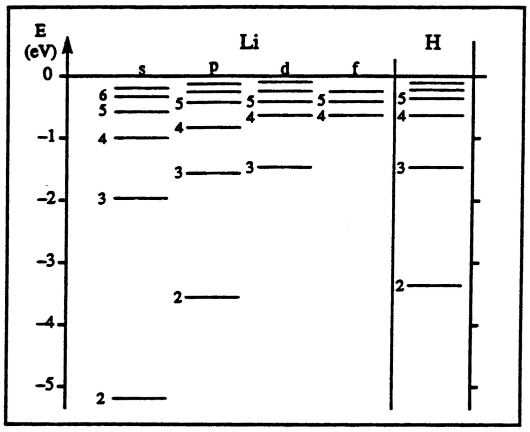
	Configuration	Ionization potential (in units of 13.6 eV)	Dipole polarizability (in units of a_0^3)
Li	$1s^2 2s$	0.40	165
Li^-	$1s^2 2s^2$	0.0452	
Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$	0.38	166
Na^-	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	0.0396	
K	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$	0.32	281
K^-	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$	0.0344	
Rb	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s$	0.31	296
Rb^-	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 5s^2$		
Cs	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 6s$	0.29	363
Cs^-	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 6s^2$	0.0287	

b) Vilka kvantdefekter krävs för att få tabellens resultat?

c) Förklara kvalitativt varför jonisationspotentialen avtar så långsamt när man går neråt i tabellen!

d) Varför skiljer sig värdena för en atom och motsvarande jon åt?

XV.7 Vidstående figur ger litiums atomära nivåschema.



a) Kan en grov beskrivning av elektrostatiska potentialens variation inuti atomen ge en förklaring varför 2s-nivån avviker mera från motsvarande väteliknande nivå än 2p-nivån?

b) En spektrallinje uppstår vid övergången

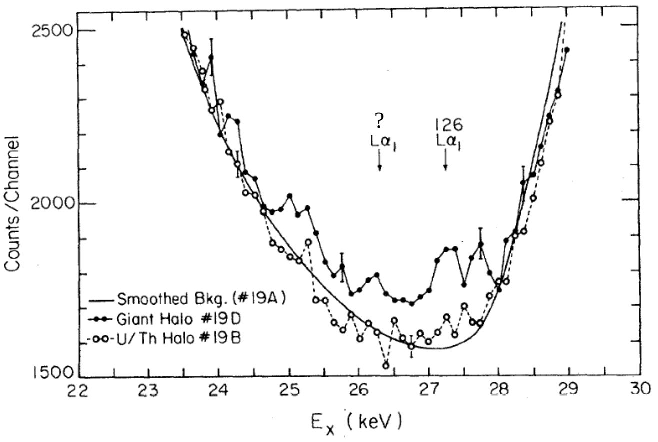
$$^2P_{3/2} \longrightarrow {}^2S_{1/2}$$

I hur många komponenter splittras linjen upp i ett svagt magnetfält?

XV.8 Våglängden för L_α-linjen från koppar är 1.332 nm. Vilken skärmningskonstant måste man använda för att erhålla detta värde, om man utgår från en ansats med väteliknande orbitaler? (Väteatomens energinivåer hittar du i Physics Handbook.)

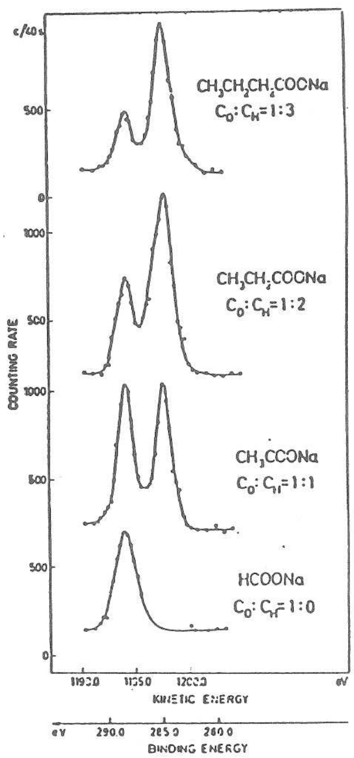
XV.9 I röntgenspektret för ett mineralprov finner man bland annat tre linjer med våglängderna 40.029 pm, 29.845 pm och 23.666 pm. Den förstnämnda identifieras som $K_{\alpha 1}$-linjen från grundämnet 55 Cs och den sistnämnda identifieras som $K_{\alpha 1}$-linjen från grundämnet 70 Yb. Från vilket grundämne härrör den mellanliggande linjen, om också den antas vara en K_α-linje?

XV.10 Enligt läroböckerna i fysik är uran med atomnummer 92 det tyngsta i naturen förekommande grundämnet. Bland kärnfysiker har man emellertid sedan länge spekulerat i att det kan finnas relativt stabila kärnor med betydligt högre atomnummer. Sådana "supertunga element" trodde man sig år 1976 ha upptäckt i vissa mineraler (glimmer) från Madagaskar.



Figuren visar experimentellt bestämda röntgenspektra för två prover av vilka det som bär beteckningen "Giant Halo 19D" ansågs innehålla supertunga element. Speciellt har i figuren markerats ett maximum som identifierades med en L_α-linje från grundämne nr 126. Ett annat maximum, som markerats med ett frågetecken, skulle kunna vara motsvarande L_α-linje från ett annat supertungt element. Vilket atomnummer har i så fall detta?
(Figuren är en lätt modifierad version av figur från Gentry et al., Phys. Rev. Lett. **37**, 11 (1976); Copyright American Physical Society.)

XV.11 En metod, som kallas ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis), används allt mer till att bestämma bindningsenergierna för elektroner i atomer, molekyler och fasta ämnen. I metoden låter man röntgenstrålning slå ut en elektron, varefter man mäter denna elektrons kinetiska energi. Vidstående figur illustrerar hur bindningsenergin för en innerelektron i C beror på omgivningen (huruvida en O- eller H-atom är närmast).
Diskutera huruvida metoden gör skäl för sitt namn d.v.s. kan användas för kemisk analys.
Motivera huruvida skift i bindningsenergierna av den typ, som figuren illustrerar, kan hänga ihop med valenselektronerna, d.v.s. vara "kemiska skift".
Ledning: Motiveringarna kan få vara kvalitativa, d.v.s. beskrivande.



XVI TERMUPPSPALTNING

XVI.1 Skriv ner alla möjliga LS-termer för en konfiguration med en p-elektron och en d-elektron utanför slutna skal. Ange spektralbeteckningarna!

XVI.2 Mangan har i grundtillståndet ett precis halvfyllt subskal innehållande 5 elektroner. Ange elektronkonfigurationen för subskalet och grundtillståndstermen för atomen.

XVI.3 Visa för ett tvåelektronsystem med $l_1 = 2$ och $l_2 = 3$ att både LS-koppling och jj-koppling ger samma antal möjliga tillstånd. Hur kan man experimentellt avgöra vilken typ av koppling som bäst beskriver systemet?

XVI.4 En foton absorberas av en Ca-atom i grundtillståndet, varvid en 3p-elektron exciteras till 3d (begynnelsekonfigurationen är alltså ...$3p^6 4s^2$ och slutkonfigurationen är $3p^5 3d 4s^2$). Ange vilka av termerna (LS-koppling) i slutkonfigurationen som kan exciteras av fotonen samt ange deras inbördes ordning m a p energin.

XVI.5 En exciterad elektronkonfiguration för neon är $1s^2 2s^2 2p^5 3p$. Ange vilka LS-termer som erhålls ur denna konfiguration och ordna dem efter ökande energi. Ange också för var och en av termerna huruvida atomen kan återgå till grundtillståndet genom att utsända dipolstrålning.

XVI.6 En boratom befinner sig i ett exciterat tillstånd med konfigurationen $1s^2 2s 2p 3p$. Genom att utsända dipolstrålning återgår atomen till grundtillståndskonfigurationen $1s^2 2s^2 2p$. a) Hur många olika spektrallinjer kan denna övergång ge upphov till, om man bortser från finstrukturen orsakad av spinnbankoppling? b) Hur många finstrukturkomponenter innehåller var och en av dessa spektrallinjer?

XVI.7 Bestäm de möjliga värdena på kvanttalet J för ett elektronsystem med $L = 3$, om S antar värdena 3/2, 2, 5/2 och 4.

XVI.8 Bestäm med hjälp av urvalsreglerna för kvanttalen l och j antalet spektrallinjer svarande mot övergångar mellan följande röntgentermer:
K $\longrightarrow$ L, K $\longrightarrow$ M, L $\longrightarrow$ M.

XVI.9 Nedanstående tabell anger finstruktursplittringen för några av termerna i kalciumatomens spektrum. Fyll i de värden som fattas, utgående från antagandet att LS-koppling gäller!

Konfiguration	Termer	Energiskillnad (eV)
3d3d	$^3P_1$,$^3P_0$	$16.7 \cdot 10^{-4}$
3d3d	$^3P_2$,$^3P_1$	?
4s4p	$^3P_1$,$^3P_0$	$64.9 \cdot 10^{-4}$
4s4p	$^3P_2$,$^3P_1$	?
3d4s	$^3D_2$,$^3D_1$	$16.9 \cdot 10^{-4}$
3d4s	$^3D_3$,$^3D_2$	?

XVII TILLÄMPNING PÅ HELIUM

XVII.1 Beräkna grundtillståndets energi för heliumatomen med hjälp av första ordningens störningsteori. Utgå därvid från väteliknande vågfunktioner och betrakta hela elektron-elektronväxelverkan som en störning.

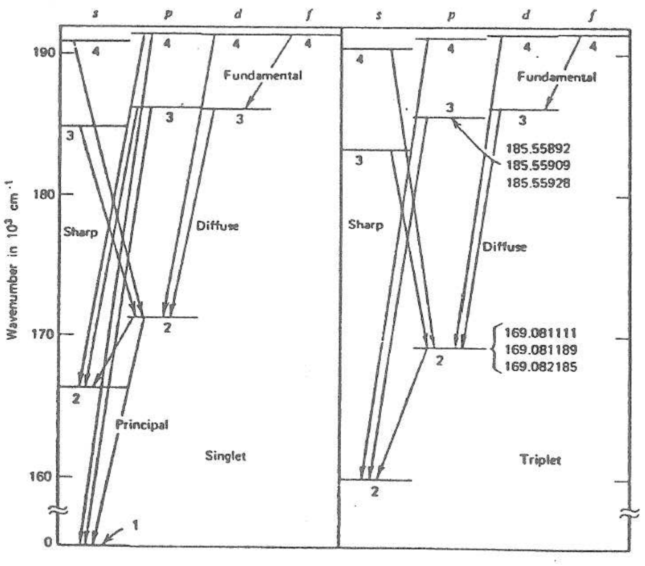
XVII.2 Beräkna grundtillståndets energi för heliumatomen med hjälp av variationsmetoden. Utgå därvid från väteliknande vågfunktioner men ersätt kärnladdningen Z med en skärmad laddning $Z - \sigma$, där σ behandlas som en variationsparameter.

XVII.3 Beräkna grundtillståndets energi för H^- -jonen med samma metod som i uppgift 2. Stämmer resultatet av beräkningen med det experimentellt funna faktum att jonen i fråga är stabil?

XVII.4 Visa att en foton i dipolapproximationen inte kan åstakomma övergångar mellan tillstånd med olika utbytessymmetri med avseende på rumskoordinater.

XVII.5 Beräkna den energi som åtgår för att helt jonisera en neutral heliumatom i grundtillståndet genom att plocka bort båda elektronerna. I den spektralserie som svarar mot övergångarna $1s^2\ {}^1S \rightarrow 1s\ np\ {}^1P$ går våglängden mot 50.34 nm om n (= 2, 3, ...) blir mycket stort. Vidare vet man att jonisationsenergin för väte är 13.60 eV.

XVII.6 Figuren visar några av energinivåerna för helium, svarande mot konfigurationen av formen 1s nl.
a) Varför finns det ingen triplett med $n = 1$?
b) Varför har tripletterna genomgående lägre energi än motsvarande singletter? Det är inte tillräckligt att hänvisa till Hunds regler utan en fysikalisk förklaring krävs.
c) Energierna för finstrukturkomponenterna av tripletten ^{3}P med $n = 3$ är angivna i figuren. Stämmer förhållandet mellan energiskillnaderna inom tripletten med vad man väntar sig teoretiskt med utgångspunkt från LS-kopplingen?



XVIII MOLEKYLFYSIK

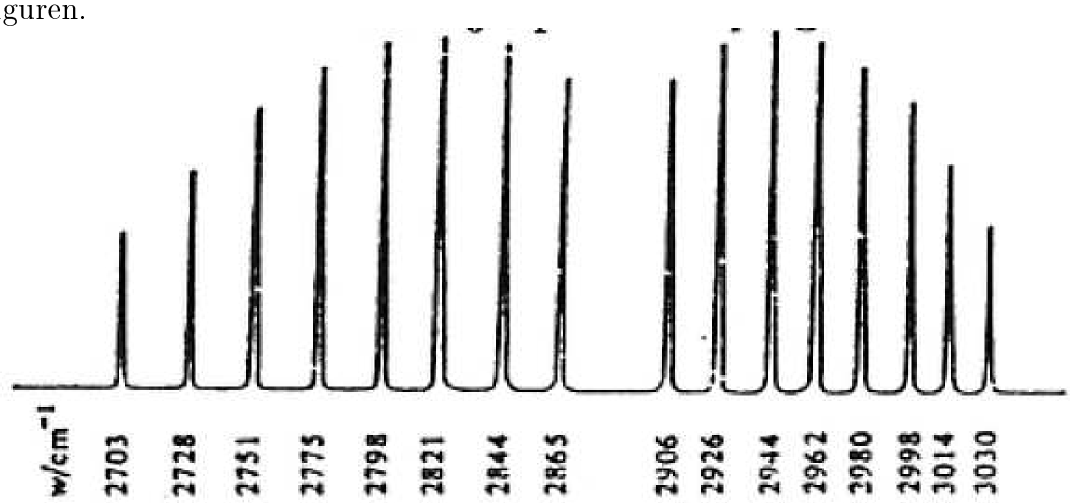
XVIII.1 Övergången mellan rotationstillstånden svarande mot kvanttalen $L = 2$ och $L = 3$ svarar för CO-molekylen mot våglängden 864 μm. Beräkna avståndet mellan atomerna i molekylen.

XVIII.2 Tröghetsmomentet för NH-radikalen är $1{,}68 \cdot 10^{-47}$ kgm^2. Vid vilken frekvens sker övergången mellan rotationstillstånden svarande mot $L = 2$ och $L = 3$?

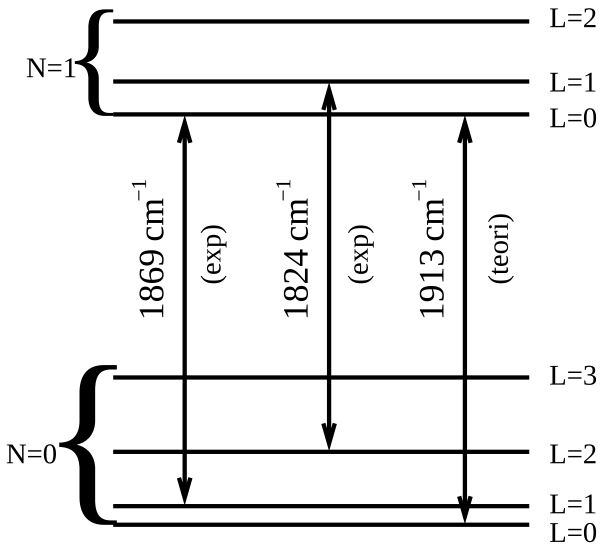
XVIII.3 Bestäm tröghetsmomentet och avståndet mellan kärnorna för $^1H^{35}Cl$-molekylen. Frekvensskillnaden mellan två närliggande linjer inom det infraröda rotationsbandet för molekylen är $\Delta\nu = 20{,}9\,\text{cm}^{-1}$. Beräkna även motsvarande frekvensskillnad för DCl-spektret.

XVIII.4 Vid studium av radiokällan Orion A fann L. E. Snyder och D. Buhl år 1974 en signal med frekvensen 86243 MHz, som de associerade med övergångar mellan två rotationsnivåer i molekylen $^{28}Si^{16}O$. Denna tolkning av signalen har senare bekräftats genom laboratorieexperiment. Jämviktsavståndet mellan kärnorna i molekylen är 0,15097 nm. Vilka är de två aktuella rotationsnivåerna (dvs vilka J-kvanttal svarar de mot)?

XVIII.5 Nedanstående figur visar rotations-vibrationsspektrum för isotropiskt rent $H^{35}Cl$. Enligt den enklaste teorin borde avståndet mellan två på varandra följande spektrallinjer vara konstant (så när som på att en linje i mitten saknas), men av figuren framgår att så inte är fallet. Vad kan det bero på? Beräkna molekylens vibrationsfrekvens samt avståndet mellan kärnorna med hjälp av valda data ur figuren.



XVIII.6 Den enklaste av alla molekyler är vätemolekyljonen H_2^+, och den har därför varit föremål för stort intresse från teoretiska fysikers sida. Tyvärr är det svårt att göra spektroskopiska undersökningar, därför att molekylen av symmetriska skäl växelverkar mycket svagt med ett yttre magnetfält. Man har funnit det lättare att bestämma spektra för joner av typen HD^+ eller HT^+, där ena väteatomen ersatts med en tyngre isotop (deuterium eller tritium).



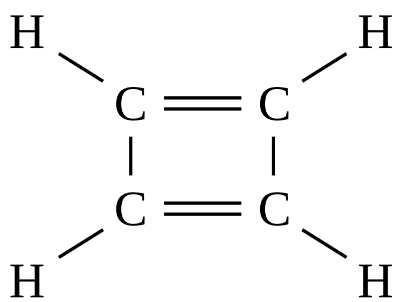
Figuren som visar de lägsta rotations- och vibrationsnivåerna för HD^+-jonen, är baserad på experiment av Wing m. fl. (Phys. Rev. Lett. **36**, 1488 (1976)) och teoretiska beräkningar av Bishop (Phys. Rev. Lett. **37**, 484 (1976)). Vilka siffror skulle stått i figuren om det gällt H_2^+ istället för HD^+?

XVIII.7 Oktatetraen, C_8H_{10}, har formen av en sicksackkedja med kolatomerna i ett plan. Längden hos kedjan är ungefär 9,6 Å. Uppskatta den lägsta excitationsenergin i eV för elektronerna under det enkla antagandet att π-elektronerna rör sig i en linjär endimensionell box med längden 9,5 Å.

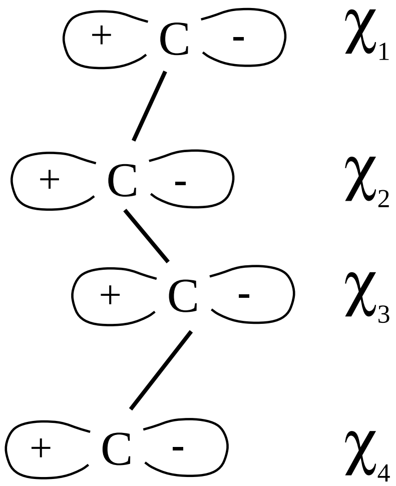
XVIII.8 Betrakta den hypotetiska cykliska molekylen C_4H_4: Ange π-elektronsystemets energinivåer om H-matrisen antas vara

$$H_{kl} = \begin{cases} E_0 & \text{för } k = 1. \\ K & \text{för } k \text{ och } l \text{ närmaste grannar.} \\ 0 & \text{för övrigt,} \end{cases}$$

och överlappsintegralen $S_{kl} = \delta_{kl}$.



XVIII.9 I butandienmolykylen C_4H_6 finns molekylorbitaler som sträcker sig längs hela molekylen. Dessa kan enligt LCAO-metoden skrivas som linjärkombinationer av atomära orbitaler, i detta fall kolatomernas p-orbitaler. Med hjälp av symmetriargument sluter man sig till att vågfunktionen för den av dessa molekylorbitaler som ger den starkaste bindningen bör kunna skrivas på formen



$$\Psi = C_1\left(\chi_1 + \chi_4\right) + C_2\left(\chi_2 + \chi_3\right)$$

där χ_1, χ_2, χ_3 och χ_4 är vågfunktionerna för de atomära p-orbitalerna (se figuren).
Konstanterna C_1 och C_2 kan beräknas med hjälp av variationsmetoden under bivillkoret $C_1^2 + C_2^2 = 1/2$. Bestäm energin för denna molekylorbital uttryckt i följande givna storheter:

$$\langle\chi_i|\chi_j\rangle = \delta_{ij}.$$

$$\left\langle\chi_i\middle|\hat{H}\middle|\chi_j\right\rangle = \begin{cases} \alpha & \text{om } i = j \\ \beta & \text{om } |i-j| = 1 \\ 0 & \text{för övrigt} \end{cases}$$

Det får antas, att vågfunktionernas faser är valda så att konstanten β är reell (α är ju med nödvändighet reell). Dessutom gäller i detta fall att β är negativ, vilket i sin tur leder till att C_2 måste ha samma tecken som C_1 för att orbitalen skall vara bindande.

XVIII.10 H_2^+ har i grundtillståndet en energi som är 2,65 eV lägre än energin för systemet bestående av en väteatom i grundtillståndet och en proton på oändligt stort avstånd från varandra. För att överföra H_2 i grundtillståndet till två väteatomer (på oändligt stort avstånd från varandra) i grundtillståndet måste 4,48 eV tillföras. Beräkna
a) energin för H_2^+ i förhållande till $H^+ + H^+ + e^-$, då partiklarna är på oändligt avstånd från varandra.
b) energin för $H_2^+ + e^-$ (oändligt avstånd) i förhållande till energin för två oändligt separerade väteatomer i grundtillståndet.
c) jonisationsenergin för H_2.

XVIII.11 Varför är bindningsavståndet kortare i H_2 (0,74 Å) än i H_2^+ (1,06 Å)?
Varför är dissociationsenergin för H_2 (4,48 eV) mindre än dubbelt så stor som för H_2^+ (2,65 eV)?

XVIII.12 Förklara varför H_2^- bör vara mindre stabil än He_2^+, om de har samma elektronkonfiguration.

XVIII.13 Om överlappsintegralen S uppritas som funktion av kärnavståndet R framgår att för överlapp mellan 2p-atomorbitaler i en π-bindning ökar S hela tiden då R minskar och är 1 för $R = 0$. För två 2p-atomorbitaler i en σ-bindning däremot ökar S till en början då R minskar för att sedan ha ett maximum. S växlar sedan tecken vid R ~0,7 Å. Förklara!

XVIII.14 Vilken elektronkonfiguration har C_2^+, N_2^+ och O_2^+?

XVIII.15 Härled grundtillståndstermen för C_2^+ och O_2^+.

XVIII.16 Avgör med hjälp av MOLCAO-schemat vilka av följande molekyler som är stabila: H_2, Be_2 och O_2^+.

XVIII.17 Förklara med MOLCAO-schemat följande resultat:
Dissociationsenergin för N_2^+ är 6,35 eV och för N_2 7,38 eV.
Dissociationsenergin för O_2^+ är 6,48 eV och för O_2 5,08 eV.

SVAR

========= Kapitel I =================

I. 1: 17 mm.

I. 2: $1.74 \cdot 10^{11}$ As/kg.

I. 3: a) $\dfrac{q}{m} = \dfrac{2\nu^2 L^2}{U\,(2n+1)^2}$ $(n = 0, 1, 2, ...)$, b) $\nu = (2n+1) \cdot 46.9$ MHz.

I. 4: $1.005 \cdot 10^{-18}$ As = 6 e.

I. 5: $4.6 \cdot 10^{-14}$ m.

I. 6: —

I. 7: 0.3 s.

========= Kapitel II ================

II. 1: $\lambda = a/T$ där $a = 2.8978 \cdot 10^{-3}$ K m.

II. 2: 5800 K.

II. 3: $11 \cdot 10^3$ K.

II. 4: 0.97 mm.

II. 5: 1.3 μm.

II. 6: $u_\nu\,(\nu, T) = \dfrac{c}{\nu^2}\, u_\lambda \left(\dfrac{c}{\nu}, T\right)$

II. 7: $\nu = bT$, där $b = 5.8787 \cdot 10^{10}$ Hz/K.

II. 8: 10^{14} Hz.

II. 9: 2700 K.

II. 10: 1730 K.

II. 11: C.

II. 12: Ljusets intensitet är större i fall B.

II. 13: Ljusets våglängd är mindre i fall B.

II. 14: 387 mm.

II. 15: Cs, K, Na, Al.

II. 16: 1.5 eV ; $\nu_{\text{max}} = 7.3 \cdot 10^5$ m/s.

II. 17: $1.8 \cdot 10^{-19}$ J ; $0.62 \cdot 10^6$ m/s .

II. 18: a) 4.9 Å ; b) 0.006 Å .

II. 19: a) 4.1 fVs ; b) 2.3 eV .

II. 20: a) 2.2 eV ; b) $6.4 \cdot 10^{-34}$ Js .

II. 21: $\nu_{\text{max}} = 1.21 \cdot 10^{19}$ Hz ; $\lambda_{\text{min}} = 0.248$ Å .

II. 22: a) $h\,\nu_{\text{max}}$ ökar till 50 keV, eventuellt uppträder nya karakteristiska linjer i intervallet 40-50 keV.
b) $h\,\nu_{\text{max}}$ minskar till 15 keV, de karakteristiska linjerna i figuren försvinner.

II. 23: $6.59 \cdot 10^{-34}$ J s.

II. 24: $\lambda_e = \dfrac{h}{mc} = 2.426 \cdot 10^{-12}$ m.

II. 25: Comptonspridning ; $\nu_1 = 2.17 \cdot 10^{19}$ Hz , $\nu_2 = 2.38 \cdot 10^{19}$ Hz.

II. 26: 25 pm ; 647 eV.

II. 27: Comptonspridning genom vinkeln 71.2°.

II. 28: 0.325 Å.

II. 29: 160 keV.

II. 30: ca 1 MeV.

II. 31: 24.3 Å.

II. 32: $\lambda < 1.12$ nm.
II. 33: 13.6 eV.
II. 34: a) 46.3 mm , $6.48 \cdot 10^9$ Hz ; b) $6.58 \cdot 10^9$ Hz.
II. 35: $ne\hbar/2m$
II. 36: Fyra linjer: $\lambda = 4687.7$ Å, 4861.3 Å, 4543.4 Å, och 4340.5 Å.
II. 37: 54.3 eV.
II. 38: Ja.
II. 39: 0.075 Å.
II. 40: 6.7 eV.
II. 41: 14.2 MeV.
II. 42: Relativa frekvensändringen är $5.0 \cdot 10^{-11}$ respektive $3.4 \cdot 10^{-7}$.

========= Kapitel III ==============
III. 1: $3.3 \cdot 10^{-24}$ Å.
III. 2: 12.3 Å ; 1.23 Å ; 0.12 Å ; 0.009 Å .
III. 3: $2.6 \cdot 10^{-14}$ m .
III. 4: $3.1 \cdot 10^{-18}$ m ; ja .
III. 5: 1.8 Å .
III. 6: —
III. 7: Elektronmikroskopets upplösningsförmåga är ca 40 000 ggr större.
III. 8: 0.191 Å .
III. 9: $0.332\, n^2$ eV, där $n = 1, 2, \ldots$.
III. 10: 23.4 ° .
III. 11: 2.48 Å .
III. 12: 4 Å .
III. 13: a) 3.39 ° ; b) Placera en magnet bakom folien.
III. 14: $E_1 = 90.9$ eV ; $d = 0.91$ Å .
III. 15: 5 .
III. 16: a) 0.2 nm ; b) stämmer.
III. 17: $1.09 \cdot 10^6$ m/s .
III. 18: 2.4 m .
III. 19: 10 MeV .
III. 20: —
III. 21: $6 \cdot 10^{-5}$ m .
III. 22: —
III. 23: 10^{-14} m .
III. 24: $8 \cdot 10^{-15}$ m .
III. 25:

$$\text{a) } \psi(x) = 2N \frac{\sin K x}{x} \quad ; \quad \text{b) } N = \frac{1}{2\sqrt{\pi K}} .$$

III. 26:

$$\text{a) } \psi(x) = \frac{N \pi}{\alpha} e^{-\alpha |x|} \quad ; \quad \text{b) } N = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi} .$$

III. 27:

$$\psi(x) = \frac{1}{4 \left[2\pi \, (\Delta x)^2\right]^{1/4}} \exp\left[-\frac{x^2}{4\,(\Delta x)^2} + i\, k_0\, x\right] \quad ; \quad \Delta x = \frac{1}{2\,\Delta k} .$$

III. 28:

$$\psi(x) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi\,[\Delta x(t)]^2}} \exp\left\{-\frac{[x-x_0(t)]^2}{4\,[\Delta x(t)]^2} + i\,k_0\,x + i\,\varphi\right\} \;;$$

$$x_0(t) = \frac{\hbar\,k_0}{m}\,t \quad;\quad \Delta x(t) = \frac{1}{2\,\Delta k}\sqrt{1+\frac{\hbar^2\,t^2}{m^2}\,(\Delta k)^4}\;.$$

III. 29:

$$v_f = \frac{\omega_0}{k} + \alpha\,k \quad;\quad v_g = 2\,\alpha\,k\;.$$

III. 30:

$$\frac{c}{\nu}\sqrt{\nu^2-\nu_0^2}\;.$$

III. 31:

$$v_f = \sqrt{\frac{2\pi T}{\varrho\,\lambda}} \quad;\quad v_g = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{2\pi T}{\varrho\,\lambda}} \qquad \text{(grunt vatten)}\;,$$

$$v_f = \sqrt{\frac{g\,\lambda}{2\pi}} \quad;\quad v_g = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{g\,\lambda}{2\pi}} \qquad \text{(djupt vatten)}\;.$$

========= Kapitel 4 ================

IV. 1: —

IV. 2:

$$|\mathbf{K}| = \sqrt{\frac{2\,m\,E}{\hbar^2}} \quad;\quad \psi(\mathbf{x},t) = A\,\exp i\left(\mathbf{K}\cdot\mathbf{r} - \frac{E}{\hbar}\,t\right)\;.$$

IV. 3:

$$E = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}\;.$$

IV. 4–7: —

IV. 8:

$$\text{a)}\;\; E_n = n^2\,\frac{\pi^2\,\hbar^2}{2\,m\,a^2} \quad;\; n = 1,2,3,\ldots \qquad b)\;\; \frac{2\pi\hbar}{m\,a^2}\;,\quad \frac{5\pi\hbar}{4\,m\,a^2}\;,\quad \frac{3\pi\hbar}{4\,m\,a^2}\;.$$

IV. 9: 4 respektive $4\cdot 10^{22}$.

IV. 10:

$$\langle x\rangle = 0 \quad;\quad \langle x^2\rangle = a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\,\pi^2}\right)$$

IV. 11: a) 0.195 ; b) 0.402 ; c) 1/3 ; d) 1/3 .

IV. 12:

$$E = \frac{\hbar^2\,\pi^2}{2\,m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right) \quad;\quad n_x, n_y, n_z = \text{heltal} > 0.$$

IV. 13: 10^{-6} .

IV. 14:

$$N = \sqrt{\frac{30}{a^5}} \quad;\quad \langle\frac{1}{x^2}\rangle = \frac{10}{a^2}\;.$$

IV. 15:

$$-\frac{128}{45\,\pi^2}\,a\;.$$

IV. 16:

$$a)\;\; N = \frac{1}{\sqrt{\pi\,b}} \quad;\quad b)\;\; \langle x\rangle = 0 \quad;\quad c)\;\; a = \frac{1}{2\,b}\;.$$

IV. 17:

$$\Delta p = 5 \cdot 10^{-25} \text{ kg m/s} \quad ; \quad t^2 = \frac{48\, m^2\, (\Delta x)^4}{\hbar^2} \; .$$

========= Kapitel V =================

V. 1: $\langle p \rangle = \hbar\, k$; $\langle p^2 \rangle = \hbar^2\, k^2$; $\Delta p = 0$.

V. 2: Nej.

V. 3: $\Delta p = \hbar k$.

========= Kapitel VI ================

VI. 1 - 2: —

VI. 3: 3% .

VI. 4: 0.64 μA .

VI. 5: 0.67 .

VI. 6: 10^{-16} .

VI. 7:

$$E = -V_0 + \frac{n^2\, \pi^2\, \hbar^2}{8\, m\, a^2} \quad , \text{ där } n \text{ är ett heltal} \quad \left(n > \sqrt{\frac{8\, m\, a^2\, V_0}{\pi^2\, \hbar^2}} \right) \; .$$

VI. 8: 28 ° .

VI. 9:

$$E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2\, \xi^2}{2\, m\, a^2} \quad , \text{ där } \begin{cases} \tan \xi = \sqrt{\left(\frac{\xi_0}{\xi}\right)^2 - 1} \\ \text{eller} \\ \cot \xi = -\sqrt{\left(\frac{\xi_0}{\xi}\right)^2 - 1} \end{cases} \quad \text{, med} \quad \xi_0 = a \sqrt{\frac{2\, m\, V_0}{\hbar^2}} \; .$$

VI. 10:

$$V_0 \; > \; \frac{\hbar^2\, \pi^2}{8\, m\, a^2} \; .$$

VI. 11: 2 .

VI. 12:

$$V_0 = \frac{3\, \hbar^2}{2\, m\, a^2} \left(\arctan \sqrt{2} \right)^2 \; .$$

VI. 13:

$$\frac{16\, E_0^2}{\pi\, \hbar\, V_0} \exp \left[-2\, \pi \sqrt{\frac{V_0}{E_0}} \left(\frac{b}{a} - 1 \right) \right] \quad , \text{ där } \quad E_0 = \frac{\pi^2\, \hbar^2}{2\, m\, a^2} \; .$$

========= Kapitel VII ===============

VII. 1:

$$E_1 = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} \; ; \; E_2 = \frac{3\, \hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} \; ; \; \alpha = \beta = \frac{\sqrt{k\, m}}{2\, \hbar} \; ; \; A = \left(\frac{k\, m}{\pi^2\, \hbar^2} \right)^{\frac{1}{8}} \; , \; B = \left(\frac{4}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{k\, m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{8}} \; .$$

VII.2–3: —

VII. 4:

$$\langle p_x \rangle = 0 \quad ; \quad \langle p_x^2 \rangle = \frac{m\, \hbar\, \omega}{2} \; .$$

VII. 5: 16% .

VII. 6: 3% .

VII. 7: 186 meV , 559 meV .

VII. 8:

$$a) \quad -V_0 + a\,\hbar\sqrt{\frac{V_0}{2\,\mu}} \quad , \quad b) \quad -4.1 \text{ eV} \ .$$

VII. 9:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\,\hbar\,\omega - \frac{e^2 E^2}{2\,m\,\omega^2} \ .$$

========= Kapitel VIII =============

VIII.1–2: ——

VIII. 3: a) $\Delta L_x = \Delta L_y = \hbar\,\sqrt{\frac{1}{2}\,[l\,(l+1) - m^2]}$; b) $\Delta L_{xy} = 0$.

VIII. 4: $2\,\hbar^2$.

VIII. 5:

$$E_n = \left(\frac{3}{2} + n\right)\,\hbar\,\sqrt{\frac{k}{m}} \quad , \quad (n = 0, 1, 2, \ldots) \quad ; \quad D_n = \frac{1}{2}\,(n+1)\,(n+2) \ .$$

VIII. 6:

$$a)\ r_0 \ ; \quad b)\ \frac{2}{\sqrt{\pi}}\,r_0 \ ; \quad c)\ \frac{2}{\sqrt{\pi}\,r_0} \ .$$

VIII. 7:

$$\begin{aligned} \text{Kuben:} \quad E_1 &= 29.61\,\frac{\hbar^2}{2\,m\,V^{2/3}} \quad ; \quad E_{2,3,4} = 59.22\,\frac{\hbar^2}{2\,m\,V^{2/3}} \\ \text{Sfären:} \quad E_1 &= 25.65\,\frac{\hbar^2}{2\,m\,V^{2/3}} \quad ; \quad E_{2,3,4} = 52.47\,\frac{\hbar^2}{2\,m\,V^{2/3}} \ . \end{aligned}$$

VIII. 8:

$$a^2\,|V_0| = \frac{\pi^2\,\hbar^2}{8\,\mu} \ .$$

========= Kapitel IX ==============

IX. 1: $\alpha = a_0^{-1}$; $A = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$ (a_0 = bohrradien).

IX. 2: a) a_0 ; b) 5.24 a_0 ; c) 4 a_0 .

IX. 3: 68% .

IX. 4: a) 76% ; b) 5.3% .

IX. 5:

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2}\,a_0 \quad ; \quad \langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{a_0} \ .$$

IX. 6:

$$\langle E_{kin} \rangle = \frac{\hbar^2}{2\,m\,a_0^2} \quad ; \quad \langle E_{pot} \rangle = -\frac{\hbar^2}{m\,a_0^2} \ .$$

IX. 7:

$$\langle E_{kin} \rangle = \frac{\hbar^2}{8\,m\,a_0^2} \quad ; \quad \langle E_{pot} \rangle = -\frac{\hbar^2}{4\,m\,a_0^2} \ .$$

IX. 8: 10^{-14} .

IX. 9:

$$\langle |x| \rangle = \langle |y| \rangle = \frac{15\,a_0}{8} \quad ; \quad \langle |z| \rangle = \frac{15\,a_0}{4} \ .$$

IX. 10:

$$\frac{\hbar}{m\,a_0} \ .$$

IX. 11: ——

========= Kapitel X ================

X. 1:

$$a)\ \ N = \frac{1}{\sqrt{6\,a}} \quad ; \quad b)\ \ \langle H \rangle = \frac{13\,\hbar^2\,\pi^2}{6\,m\,a^2}$$

c)

Energier:	$\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$	$\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$	$\frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$
Sannolikheter:	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$

X. 2: 0.9986 .

X. 3:

Energier:	$\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$	$\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$	$\frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$
Sannolikheter:	$\frac{4}{9}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{4}{9}$

X. 4: 88% .

X. 5: ——

X. 6: ——

X. 7: 5/14 .

X. 8: 75% .

X. 9:

$$A = \sqrt[4]{\frac{9}{2\,\pi^3\,a^6}} \ ; \quad \langle r \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\,a \ ; \quad \langle \mathbf{L}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \ .$$

X. 10:

$$\begin{aligned} |\mathbf{L}| &= \sqrt{2}\,\hbar \quad , \quad L_z = \hbar \qquad \text{(sannolikhet 50\%)} \ , \\ |\mathbf{L}| &= \sqrt{2}\,\hbar \quad , \quad L_z = -\hbar \qquad \text{(sannolikhet 50\%)} \ . \end{aligned}$$

X. 11:

$$\langle x \rangle = \langle z \rangle = 0 \quad ; \quad \langle y \rangle = -\frac{2\sqrt{2}}{5}\,r_0 \ .$$

X. 12:

$$\psi\,(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\left[\sqrt{\frac{1}{3}}\sin\frac{\pi\,x}{a}\exp\left(-i\frac{\pi^2\,\hbar}{2\,m\,a^2}\,t\right) + \sqrt{\frac{2}{3}}\sin\frac{3\,\pi\,x}{a}\exp\left(-i\frac{9\,\pi^2\,\hbar}{2\,m\,a^2}\,t\right)\right] \ .$$

X. 13: ——

X. 14: 0.36 .

X. 15: $2\beta^{1/4}/\left(1+\sqrt{\beta}\right)$.

X. 16: P(1s) = 0.65 ; P(2s) = 0.25 ; P(2p) = 0 .

X. 17:

$$1 - \left[1 + \left(\frac{\mu\,v\,a_0}{2\,\hbar}\right)^2\right]^{-4} \ .$$

X. 18: $-\frac{e}{m}\,\mathbf{E}$

X. 19–21: ——

========= Kapitel XI ================

XI. 1: a) −11.6 eV ; b) −13.6 eV .

XI. 2:
$$E_0 = \hbar \sqrt{\frac{3\,k}{m}}\,, \qquad \text{felet} = 15\%\ .$$
XI. 3:
$$-\frac{V_0}{32}\ .$$
XI. 4:
$$\frac{h^2}{32\,m\,a^2} + m\,\omega^2\,a^2 \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{\pi^2}\right)\ .$$
XI. 5:
$$\frac{h^2\,n^2}{128\,m\,a^2} + \frac{V_1}{2} + \frac{V_1}{n\,\pi}\sin\frac{n\,\pi}{2}\ .$$
XI. 6:
$$\Delta E = -\frac{3\,(\hbar\,\omega)^2}{32\,m\,c^2} = 1.8\cdot 10^{-5}\ \text{eV}\ .$$
XI. 7:
$$\begin{aligned} E_0 &= V_0 + \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{2\,V_2}{m}} + \frac{3}{8}\frac{\hbar^2}{m}\frac{V_4}{V_2}\,, \\ E_1 &= V_0 + \frac{3}{2}\hbar\sqrt{\frac{2\,V_2}{m}} + \frac{15}{8}\frac{\hbar^2}{m}\frac{V_4}{V_2}\,, \\ E_2 &= V_0 + \frac{5}{2}\hbar\sqrt{\frac{2\,V_2}{m}} + \frac{39}{8}\frac{\hbar^2}{m}\frac{V_4}{V_2}\ . \end{aligned}$$
XI. 8: $E_0 = -4.1$ eV ; $\Delta E = 0.007$ eV .
XI. 9:
$$E = -\frac{\hbar^2}{2\,m_e\,a_0^2}\left(1 - \frac{5}{4}\alpha^2\right)\ .$$
XI. 10:
$$E = -\frac{e^2}{8\,\pi\,\varepsilon_0\,a_0}\left(1 - \frac{4}{5}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right)\ .$$
XI. 11:
$$E_{2s} = -\frac{e^2}{32\,\pi\,\varepsilon_0\,a_0}\left(1 + \frac{19}{64}\right) = -4.41\,\text{eV}\ .$$
XI. 12:
$$E_0 = -\frac{Z_{\text{eff}}^2\,e^2}{32\,\pi\,\varepsilon_0\,a_0}\left(1 - 4\,Z_{\text{eff}}\,\frac{r_0}{a_0}\right)\ .$$
XI. 13:
$$E = -\frac{\hbar^2}{2\,m\,a_0^2} + \frac{\mu\,e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0}\,\frac{\mu\,a_0 + 4}{(2 + \mu\,a_0)^2}\,, \quad \text{där } a_0 = \frac{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\hbar^2}{m\,e^2}\ .$$
XI. 14:
$$E_0 = -\frac{m\,a^2}{2\,\hbar^2} + \frac{3\,b\,\hbar^2}{2\,m\,a^2}\,.$$

========= Kapitel XII ==============

XII. 1: 0.3 mm .
XII. 2: $\mu_B = \frac{e\,\hbar}{2\,m}$ enligt Bohr; Noll enligt kvantmekaniken.
XII. 3: 24° .
XII. 4: 3 $d_{3/2}$ och 3 $d_{5/2}$.
XII. 5: 2.7 cm .
XII. 6: 45 μeV .
XII. 7: $\langle\xi\rangle = 1.4\cdot 10^{-3}$ eV .

XII. 8: a) 6 respektive 4 linjer; b) 15.5 T .

XII. 9:

Sex komponenter med våglängder av formen $\lambda = \lambda_0 + \Delta\lambda$,
där $\lambda_0 = 3217$ Å och $\Delta\lambda = \pm 0.172$Å , ± 0.103Å , ± 0.034Å .

XII. 10: $8.3 \cdot 10^{-4}$ eV .

XII. 11:

XII. 12:

$$\langle S(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\left(\frac{2\,\mu_B}{\hbar}\,B\,t\right)\hat{x} + \frac{\hbar}{2}\sin\left(\frac{2\,\mu_B}{\hbar}\,B\,t\right)\hat{y}\,.$$

========= Kapitel XIII =============

XIII. 1:

$$\frac{\pi\,A^2\,q^2}{2\,m\,\hbar\,\omega}\,\exp\left(-\frac{\omega^2\tau^2}{2}\right)\,.$$

XIII. 2: 0 .

XIII. 3:

$$\frac{2^{15}a_0^2V_0^2\omega^2}{3^{10}\hbar^2\left[\frac{1}{\tau^2}+\omega_{ks}^2+\omega^2\right]^2}\,,\ \text{där}\ \omega_{ks} = \frac{3\hbar}{8ma_0^2}\,.$$

XIII. 4: —

XIII. 5: —

XIII. 6: $P_{210\to 100}/P_{211\to 100} = 1$.

XIII. 7: —

========= Kapitel XIV ==============

XIV. 1:

$$\begin{aligned} V_H^{(1s)}(\mathbf{r}) &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[-\frac{3}{r} + \int_0^\infty dr'\,\frac{r'^2}{r^>}\left(|R_{1s}(r')|^2 + |R_{2s}(r')|^2\right)\right]\,, \\ V_H^{(2s)}(\mathbf{r}) &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[-\frac{3}{r} + 2\int_0^\infty dr'\,\frac{r'^2}{r^>}\,|R_{1s}(r')|^2\right]\,, \\ \text{där}\ r^> &= \max(r, r')\,. \end{aligned}$$

XIV. 2:

$$V_H = \frac{6e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_0^\infty dr'\,\frac{r'^2}{r^>}\,R_{2p}^2(r')\ ,\ \text{där}\ r^> = \max(r,\,r')\,.$$

========= Kapitel XV ===============

XV. 1: $\delta_{\rm s} = 0.40$; $\delta_{\rm p} = 0.04$; $\delta_{\rm d} = 0.001$; $\delta_{\rm f} = 0$.

XV. 2: 26164 Å , 8134 Å , 6750 Å .

XV. 3:

$T_{3s} = 4.144 \cdot 10^6\ \mathrm{m}^{-1}$; $T_{3p} = 2.446 \cdot 10^6\ \mathrm{m}^{-1}$;
$T_{3d} = 1.225 \cdot 10^6\ \mathrm{m}^{-1}$; $T_{3f} = 0.683 \cdot 10^6\ \mathrm{m}^{-1}$.

XV. 4: $\delta_{\rm s} = 2.325$; $\delta_{\rm p} = 1.947$.

XV. 5: $\sigma_{\rm 3s} = 9.16$; $\sigma_{\rm 3p} = 9.57$; $\sigma_{\rm 3d} = 9.997$.

XV. 6: $\delta_{\rm Li} = 0.42$; $\delta_{\rm Na} = 1.38$; $\delta_{\rm K} = 2.23$; $\delta_{\rm Rb} = 3.20$; $\delta_{\rm Cs} = 4.14$.

XV. 7: a) Ja ; b) 6 .

XV. 8: —

XV. 9: 63 Eu .

XV. 10: 124 .

========= Kapitel XVI ==============

XVI. 1: $^1P_1$, $^1D_2$, $^1F_3$, $^3P_{0,1,2}$, $^3D_{1,2,3}$, $^3F_{2,3,4}$.
XVI. 2: $^6S_{5/2}$.
XVI. 3: —
XVI. 4: $^3P_1$ och $^1P_1$. Tripletten har lägst energi.
XVI. 5: ^3D, ^3P, ^3S, ^1D, ^{1} P, ^1S, dipolövergång endast från ^1P.
XVI. 6: a) Tre linjer. ; b) En dublett, en triplett och en kvartett.
XVI. 7: $L = 3,\ S = \frac{3}{2} \Longrightarrow J = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$.
$L = 3,\ S = 2 \Longrightarrow J = 1, 2, 3, 4, 5$.
$L = 3,\ S = \frac{5}{2} \Longrightarrow J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}$.
$L = 3,\ S = 4 \Longrightarrow J = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$.
XVI. 8: $K \to L$ ger 2 linjer ; $K \to M$ ger 2 linjer ; $L \to M$ ger 7 linjer .
XVI. 9: $33.4 \cdot 10^{-4}$ eV ; $129.8 \cdot 10^{-4}$ eV ; $25.4 \cdot 10^{-4}$ eV .

========= Kapitel XVII =============
XVII. 1: -74.8 eV .
XVII. 2: -77.5 eV .
XVII. 3: -12.9 eV ; stämmer ej .
XVII. 4: —
XVII. 5: 79.0 eV .
XVII. 6: c) stämmer ej .

========= Kapitel XVIII ============
XVIII. 1: 1.12 Å.
XVIII. 2: 3.0 THz .
XVIII. 3: $I = 2.67 \cdot 10^{-47}$ kgm^2 ; R = 1.28 Å ; För DCl fås $\Delta\nu = 10.7$ cm^{-1} .
XVIII. 4: J = 1 och J = 2 .
XVIII. 5: $8.7 \cdot 10^{13}$ Hz ; 1.3 Å .
XVIII. 6:

HD^+ : 1869 cm^{-1} , 1824 cm^{-1} , 1913 cm^{-1} .
H_2^+ : 2150 cm^{-1} , 2090 cm^{-1} , 2209 cm^{-1} .

XVIII. 7: 3.76 eV .
XVIII. 8: $E_0 - 2$ K , E_0 , $E_0 + 2$ K .
XVIII. 9:
$$E = \alpha + \frac{\sqrt{5}+1}{2}\beta \ .$$
XVIII. 10: a) -16.25 eV ; b) 10.95 eV ; c) 15.43 eV .
XVIII. 11:
Två elektroner ger mer fullständig skärmning, och kärnorna kommer därför närmare varandra. Repulsionen mellan elektronerna gör att dissociationsenergin inte blir dubbelt så stor i tvåelektron-systemet som i enelektronsystemet.
XVIII. 12: —
XVIII. 13:
XVIII. 14:

C_2^+ $(\sigma_g 1s)^2 (\sigma_u^* 1s)^2 (\sigma_g 2s)^2 (\sigma_u^* 2s)^2 (\pi_u 2p)^3$
N_2^+ $(\sigma_g 1s)^2 (\sigma_u^* 1s)^2 (\sigma_g 2s)^2 (\sigma_u^* 2s)^2 (\pi_u 2p)^4 (\sigma_g 2p)^1$
O_2^{2-} $(\sigma_g 1s)^2 (\sigma_u^* 1s)^2 (\sigma_g 2s)^2 (\sigma_u^* 2s)^2 (\pi_u 2p)^4 (\sigma_g 2p)^2 \left(\pi_g^* 2p\right)^4$

XVIII. 15: C_2^+ : $^2\Pi_u$; O_2^+ : $^2\Pi_g$.
XVIII. 16: H_2^- och O_2^+ .

XVIII. 17:

N_2^+ har 5 bindande elektroner, N_2 har 6.
O_2^+ har 5 bindande elektroner, O_2 har 4.