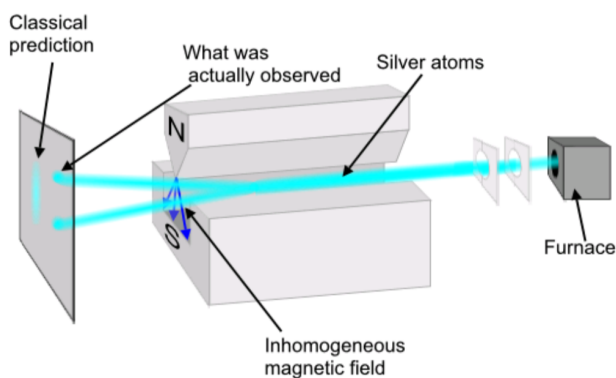


### Oppgave 1: Stern-Gerlach-eksperimentet og atomet

Stern-Gerlach-eksperimentet fra 1922 var ment å teste Bohrs atommodell om at angulærmomentet  $L$  er kvantisert. Det ble benyttet sølv-atomer hvor det siste bundne elektronet var i en  $l = 0$  tilstand (kalles også  $s$ -orbital).

- a) Lag en skisse av eksperimentet og forklar hvorfor magnetfeltet som ble brukt, måtte være inhomogent.

**Svar:** En skisse av eksperimentet er vist i Fig. 1. Det brukes et inhomogent magnetfelt langs  $z$ -aksen slik at det utøves en kraft på atomet i  $z$ -retning. Kraften er proporsjonal med projeksjonen av det angulære moment langs  $z$ -aksen og  $\partial B_z / \partial z$ .



Figur 1: Skisse av Stern-Gerlach-eksperimentet.

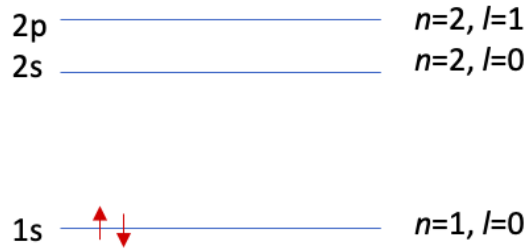
- b) Eksperimentet mislyktes i å fortelle noe om at  $L$  var kvantisert. Hvilken grunnleggende egenskap ved elektronet ble i stedet avslørt ved eksperimentet?

**Svar:** Det ble funnet at elektronet har egenspinn med kvantetall  $s = 1/2$ .

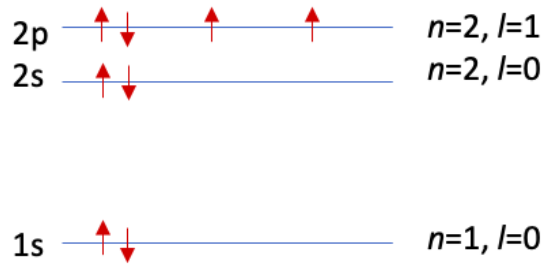
- c) Forklar hva som menes med fermioner og bosoner, og gi et par eksempler på hver av dem.

**Svar:** Fermioner er partikler med halvtallig spinn og bosoner er partikler med heltallig spinn. For eksempel er elektronet og protonet fermioner, mens helium-4 og Higgs-bosonet er bosoner.

- d) Beskriv elektronkonfigurasjonen for oksygen med  $Z = 8$  ved å lage en tegning som Fig. 2, men med ekstra elektroner fylt inn. Hva er hovedregelen for rekkefølgen av enkeltpartikkelnivåer og hvilke regler/prinsipper brukes for å fylle opp nivåene?



Figur 2: Enkeltpartikkel-nivåskjema for atomer. Vi har her fylt opp elektroner for grunntilstanden i helium med  $Z = 2$ . Pilene symboliserer spinn opp og ned for elektronene i de forskjellige nivåene. De spektroskopiske symbolene  $s$  og  $p$  tilsvarer  $l = 0$  og  $l = 1$ .



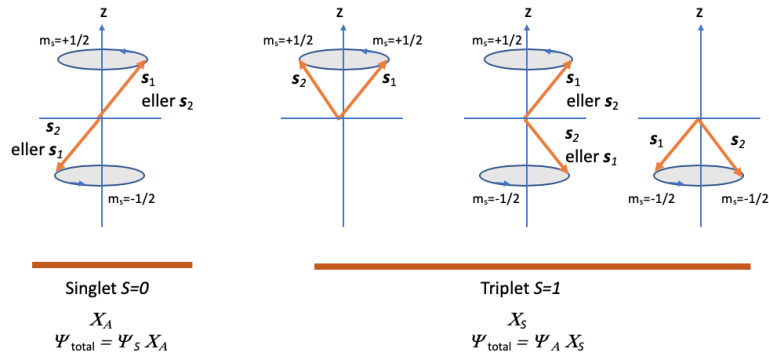
Figur 3: Oksygen med sine elektroner plassert i  $1s$ ,  $2s$  og  $2p$  orbitalene.

**Svar:** Oksygen-elektronkonfigurasjonen er vist i Fig. 3. Enkeltpartikkelnivåene ordnes først og fremst etter hovedkvantetallet  $n$ . Derneft kommer orbitaler med lavest  $l$  først fordi disse er nærmere kjernen enn høyere  $l$ -orbitaler (desto nærmere kjernen, desto mer binding). Når elektroner (som er fermioner) skal fylles inn i nivåene, må det tas hensyn til Paulis eksklusjonsprinsipp som sier at ingen fermioner kan ha samme sett med kvantetall. Når det gjelder spinn retning, fylles elektronene med samme spinnretning i en å samme orbital (Hund's regel) hvis Paulis eksklusjonsprinsipp tillater det.

- e) For to-elektron-systemer (slik som helium) snakker man om singlett- og triplettilstander for spinnene. Beskriv hvordan elektronspinnene er arrangert i disse tilstandene.

**Svar:** Figur 4 viser hvordan egenspinnene til de to elektronene er arrangert i singlett- og triplettilstandene. Her er det tilstrekkelig å svare (uten figur) at singletttilstanden er gitt ved  $S = 0$  og  $S_z = 0$  (antisymmetrisk), og at triplettilstanden består av  $S = 1$  med  $S_z = -1, 0$  eller  $1$  (symmetrisk).

- f) Den første eksiterte tilstanden i helium består av ett elektron i det laveste nivået med  $n = 1$  og  $l = 0$  ( $1s$ -orbitalen) og det andre elektronet i nivået  $n = 2$  og  $l = 0$  ( $2s$ -orbitalen), jammfør nivåene i Fig. 2. Hvordan arrangerer elektronspinnene seg i første eksiterte tilstand? Forklar med egne ord hvorfor dette er energetisk fordelaktig.

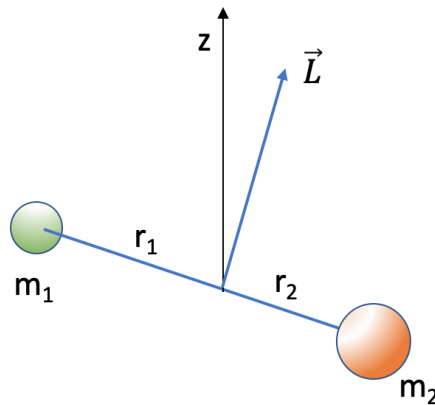


Figur 4: Singlett- og triplettilstandene for to-elektron systemet.

**Svar:** Elektronspinnene arrangerer seg i symmetrisk tilstand, en såkalt triplettilstand. Dette kan forklare ved at elektroner (som er fermioner) har en totalbølgefunksjonen som er antisymmetrisk. Derfor vil en symmetrisk spinnbølgefunksjon medføre at romfunksjonen er antisymmetrisk. Dette betyr at elektronene er mest mulig fra hverandre i heliumatomet, og dermed reduseres elektron-elektron-frastøtningen, som er energetisk fordelaktig.

## Oppgave 2: Diatomisk molekyl

Figur 5 viser en skisse av et molekyl bestående av to atomer bundet sammen. Treghetsmomentet om massesenteret (CM) kan skrives som  $I_{CM} = r_1^2 m_1 + r_2^2 m_2$ . I denne oppgaven skal vi ikke ta hensyn til vibrasjonstilstander for det diatomiske molekylet.



Figur 5: Rotasjon av et diatomisk molekyl.

- a) Vis at treghetsmomentet også kan uttrykkes som  $I_{CM} = \mu R^2$ , hvor  $\mu$  er den reduserte masse og  $R$  er avstanden mellom atomene.

**Svar:** Vi setter  $R = r_1 + r_2$ . Videre vet vi at CM er definert ved at  $m_1 r_1 = m_2 r_2$ . Dermed kan  $R$  defineres vha.  $r_1$  eller  $r_2$  som gir

$$R = \left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right)r_1 = \left(1 + \frac{m_2}{m_1}\right)r_2, \quad (1)$$

som gir

$$\begin{aligned} I_{CM} &= r_1^2 m_1 + r_2^2 m_2 \\ &= m_1 \left(1 + \frac{m_1}{m_2}\right)^{-2} R^2 + m_2 \left(1 + \frac{m_2}{m_1}\right)^{-2} R^2 \\ &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} R^2 \\ &= \mu R^2. \end{aligned} \quad (2)$$

- b) Vi ser bare på rotasjonsenergi i denne oppgaven, som klassisk er gitt ved  $\frac{L^2}{2\mu R^2}$ . Sett opp den tidsuavhengige energieigenverdikningen for systemet og dets energiegenverdier.

**Svar:** Den tidsuavhengige energieigenverdikningen blir

$$\frac{\hat{L}^2}{2\mu R^2} Y_l^m = E_l Y_l^m, \quad (3)$$

hvor  $Y_l^m$  er de sfæriske harmoniske og egenverdiene er gitt ved  $E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R^2}$ .

- c) Vis at avstanden mellom to rotasjonsnivåer er  $\Delta E(l \rightarrow l-1) = \frac{\hbar^2}{\mu R^2} l$ .

**Svar:** Vi får

$$\Delta E(l \rightarrow l-1) = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} [l(l+1) - (l-1)l] = \frac{\hbar^2}{\mu R^2} l. \quad (4)$$

Vi skal nå studere CO-molekylet. Oksygen og karbon har masser tilnærmet gitt ved hhv.  $16u$  og  $12u$ , hvor den atomære masseenheden er gitt ved  $1u = 1.6605 \times 10^{-27} \text{ kg}$ . Frekvensavstanden mellom to nabo-spektrallinjer er målt til å være  $\Delta\nu_l = 1.151 \times 10^{11} \text{ Hz}$ . Planck's konstant er  $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$ .

- d) Finn molekylets treghetsmoment i enheter av  $\text{kg m}^2$  og avstanden  $R$  i enheter av nm.

**Svar:** Treghetsmomentet er forbundet med frekvensforskjellen  $\Delta\nu_l$  ved  $I_{CM} = \frac{\hbar^2}{h\Delta\nu_l} = 1.46 \times 10^{-46} \text{ kg m}^2$ . Den reduserte masse er gitt ved  $\mu = 16u12u/(16u + 12u) = 6.857u = 1.139 \times 10^{-26} \text{ kg}$  som gir  $R = \sqrt{\frac{I_{CM}}{\mu}} = 0.113 \text{ nm}$ .

### Oppgave 3: Hydrogenatomet

Elektronet i hydrogenatomet kan beskrives ved tilstandsfunksjonene  $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$  som oppfyller

$$\hat{H}_0\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = E_n\psi_{nlm_l}(\vec{r}), \quad (5)$$

$$\hat{L}^2\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm_l}(\vec{r}), \quad (6)$$

$$\hat{L}_z\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = \hbar m_l\psi_{nlm_l}(\vec{r}), \quad (7)$$

hvor  $E_n = -\frac{E_0}{n^2}$  og  $E_0 = 13.6$  eV. Det lønner seg *ikke* i denne oppgaven å beskrive bølgefunksjoner eller operatører eksplisitt for eksempel vha. polar  $(r, \theta, \phi)$  eller kartesiske  $(x, y, z)$  koordinater. Vi ser bort fra elektronets egenspinnt i hele denne oppgaven.

- a) Hva er fellesbetegnelsen på likningene over og hvilke fysiske størrelser representerer  $\hat{H}_0$ ,  $\hat{L}^2$  og  $\hat{L}_z$ ?

**Svar:** De kalles egenverdilikninger (likning (5) kalles også den tids-uavhengige Schrödingerlikningen (TUSL)). De fysiske observable er totalenergien  $E$  (kinetisk + potensiell energi), kvadratet av det angulære moment  $L^2$  og det angulære moments projeksjon inn på  $z$ -aksen gitt ved  $L_z$ .

- b) Hvilke verdier kan kvantetallene  $n$ ,  $l$  og  $m_l$  anta?

**Svar:** Hovedkvantetallet kan være  $n = 1, 2, 3, \dots$ , kvantetallet for angulært moment følger  $l = 0, 1, \dots, n-1$  og kvantetallet for projeksjonen er gitt ved  $-l, -l+1, \dots, l-1, l$ .

- c) Fortell kort hvorfor det første eksiterte energinivået er degenerert. Hvilke kvantetall har de degenererte tilstandene i dette nivået?

**Svar:** Energien avhenger bare av  $n$ . For første eksiterte tilstand med  $n = 2$  finnes det  $l = 0$  med  $m_l = 0$  og tre tilstander for  $l = 1$  med  $m_l = -1, 0, 1$ . Altså er det fire degenererte tilstander for  $n = 2$ , alle med samme energi  $E_2$ .

- d) Hva menes med at funksjonene  $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$  er ortonormerte?

**Svar:** Det betyr to ting: bølgefunksjonene er normerte hver for seg og de er ortogonale med hverandre. Matematisk kan dette skrives på en kompakt måte som:

$$\int \psi_{nlm_l}^*(\vec{r})\psi_{n'l'm'_l}(\vec{r}) d^3\vec{r} = \delta_{n,n'}\delta_{l,l'}\delta_{m_l,m'_l}, \quad (8)$$

hvor

$$\delta_{k,k'} = \begin{cases} 1 & \text{for } k = k' \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases} \quad (9)$$

Ved et bestemt tidspunkt antar vi at hydrogenatomets bølgefunksjon  $\psi$  er en superposisjon av tre funksjoner

$$\psi = \frac{1}{3}(2\psi_{310} + 1i\psi_{211} + 2\psi_{21-1}). \quad (10)$$

e) Vis at  $\psi$  er normert.

**Svar:** Normeringsintegralet blir

$$\begin{aligned} N &= \int (\psi^* \psi) d^3 \vec{r} \\ &= \frac{1}{9} \int (2\psi_{310}^* - 1i\psi_{211}^* + 2\psi_{21-1}^*)(2\psi_{310} + 1i\psi_{211} + 2\psi_{21-1}) d^3 \vec{r} \\ &= \frac{1}{9} \int (4|\psi_{310}|^2 + |\psi_{211}|^2 + 4|\psi_{21-1}|^2) d^3 \vec{r} \\ &= \frac{1}{9}(4 + 1 + 4) = 1, \end{aligned} \quad (11)$$

(12)

som skulle vises. Vi har her utnyttet at bølgefunksjonene  $\psi_{nlm_l}$  er normerte og at kryssleddene blir null fordi bølgefunksjonene er ortogonale (se oppgave 3d)).

f) Finn forventningsverdien av den fysiske størrelsen  $L_z$  og det tilhørende standardavvik ( $\sigma_{L_z}$ ). Er minimum- og maksimumverdiene for  $L_z$  forenlig med lengden av  $\vec{L}$ ?

**Svar:** Benytter ortonormeringen av  $\psi_{nlm_l}$  og får

$$\begin{aligned} \langle L_z \rangle &= \int (\psi^* \hat{L}_z \psi) d^3 \vec{r} \\ &= \frac{\hbar}{9} \int (0|2\psi_{310}|^2 + 1|1i\psi_{211}|^2 - 1|2\psi_{21-1}|^2) d^3 \vec{r} \\ &= \frac{\hbar}{9} [(0)4 + (1)1 + (-1)4] = -\frac{\hbar}{3}. \end{aligned} \quad (13)$$

For å finne standardavviket, må vi også finne

$$\begin{aligned} \langle L_z^2 \rangle &= \int (\psi^* \hat{L}_z^2 \psi) d^3 \vec{r} \\ &= \frac{\hbar^2}{9} \int (0^2|2\psi_{310}|^2 + 1^2|1i\psi_{211}|^2 + (-1)^2|2\psi_{21-1}|^2) d^3 \vec{r} \\ &= \frac{\hbar^2}{9} [(0)4 + (1)1 + (1)4] = \frac{5\hbar^2}{9}, \end{aligned} \quad (14)$$

som gir  $\sigma_{L_z} = \sqrt{\langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2} = \frac{\hbar}{3} \sqrt{5 - 1} = \frac{2\hbar}{3}$ .

Hvis man antar at  $L_z$  antar verdier mellom grensene  $|L_z \pm \sigma_{L_z}| = |-\frac{\hbar}{3} \pm \frac{2\hbar}{3}|$  dvs. innenfor  $\frac{1}{3}\hbar - 1\hbar$ , så er dette alltid mindre enn  $\hbar\sqrt{1(1+1)} \approx 1.4\hbar$  og dermed forenlig med lengden av  $\vec{L}$ .

Hamiltonoperatoren  $\hat{H}_0$  blir nå modifisert med et svakt tilleggsledd  $\alpha\hat{L}^2$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \alpha\hat{L}^2, \quad (15)$$

der  $\alpha$  er en positiv, reell konstant som representerer leddets styrke. Vi antar at bølgefunksjonen ved tiden  $t = 0$  er gitt ved  $\Psi(\vec{r}, 0) = \psi$  fra Likn. (10).

g) Finn forventningsverdien  $\langle E \rangle$  til energien til systemet ved tiden  $t = 0$ .

**Svar:** Vi ser at  $\hat{L}^2$  operatoren har egenverdier  $l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$  for alle tre funksjonene  $\psi_{310}$ ,  $\psi_{211}$  og  $\psi_{21-1}$ . Forventningsverdien er gitt ved

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_{t=0} &= \int \Psi^*(\vec{r}, 0)(\hat{H}_0 + \alpha\hat{L}^2)\Psi(\vec{r}, 0)d^3\vec{r} \\ &= \int \Psi^*(\vec{r}, 0)(\hat{H}_0 + \alpha\hat{L}^2)\frac{1}{3}(2\psi_{310} + i\psi_{211} + 2\psi_{21-1})d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{3} \int \Psi^*(\vec{r}, 0)[2(\frac{-E_0}{9} + 2\hbar^2\alpha)\psi_{310} \\ &\quad + 1i(\frac{-E_0}{4} + 2\hbar^2\alpha)\psi_{211} + 2(\frac{-E_0}{4} + 2\hbar^2\alpha)\psi_{21-1}]d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{9} \int [(\frac{-E_0}{9} + 2\hbar^2\alpha)|2\psi_{310}|^2 \\ &\quad + (\frac{-E_0}{4} + 2\hbar^2\alpha)|i\psi_{211}|^2 + (\frac{-E_0}{4} + 2\hbar^2\alpha)|2\psi_{21-1}|^2]d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{9}[\frac{-4E_0}{9} + 8\hbar^2\alpha] + (\frac{-E_0}{4} + 2\hbar^2\alpha) + (\frac{-4E_0}{4} + 8\hbar^2\alpha) \\ &= 2\hbar^2\alpha - \frac{61}{324}E_0. \end{aligned} \quad (16)$$

h) Skriv opp bølgefunksjonen  $\Psi(\vec{r}, t)$  ved tiden  $t$ . Hvis du foretar en måling ved tiden  $t$ , hvilken energi måler du?

**Svar:** Hamiltonoperatoren anvendt på bølgefunksjonene  $\psi_{310}$ ,  $\psi_{211}$  og  $\psi_{21-1}$  gir hhv. energieigenverdiene  $2\hbar^2\alpha - \frac{E_0}{9}$ ,  $2\hbar^2\alpha - \frac{E_0}{4}$  og  $2\hbar^2\alpha - \frac{E_0}{4}$ . Det er derfor to energier som kontrollerer tidsutviklingen. Vi definerer vinkelfrekvensene  $\omega_1 = (2\hbar^2\alpha - \frac{E_0}{9})/\hbar$  og  $\omega_2 = (2\hbar^2\alpha - \frac{E_0}{4})/\hbar$  og får tidsutviklingen

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{3}[2\psi_{310} \exp(-i\omega_1 t) + (i\psi_{211} + 2\psi_{21-1}) \exp(-i\omega_2 t)]. \quad (17)$$

Vi måler enten energien  $2\hbar^2\alpha - \frac{E_0}{9}$  eller energien  $2\hbar^2\alpha - \frac{E_0}{4}$ .