$\boxed{4.1}$ Skal her vise at bølgefunksjonen $\psi = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ hvor A, B og k er konstanter er en løsning av den én-dimensjonale Schrödinger likningen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\psi}{dx^2}\right) = (E-V)\psi$$

Bestemmer først de deriverte av ψ

$$\frac{d\psi}{dx} = A\,k\cos(kx) - Bk\sin(kx)$$

og

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2 A\sin(kx) - k^2 B\cos(kx) = -k^2\psi$$

Mao får vi ved innsetting

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-k^2\psi\right) = (E-V)\psi$$

eller

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi = (E-V)\psi$$

Her er $\hbar, k, m$ og E konstanter, så dette kan kun gjelde for V konstant (eller $\psi = 0$). Vi har mao. vist at

$$\psi = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

er en løsning av ~~Sch~~ Schrödingers likning (såfremt V er konstant?), og der energien $\underline{\underline{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V}}$ ▨

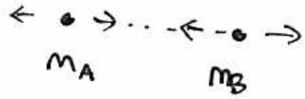
4.2

Skal beregne de vibrasjonelle nullpunktsenergiene til $^{1}H^{35}Cl$ og til $^{2}D^{35}Cl$ under antagelsen om at molekylene oscillerer harmonisk, med en kraftkonstant $k = 516\ N m^{-1}$. I henhold til likning (4.21) og (4.22) er nullpunktsenergien

$$E_0 = \frac{1}{2} h \omega_0 = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

der den reduserte massen er gitt som

$$\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$$



For $^{1}H^{35}Cl$ er $\mu = \frac{1 u \cdot 35 u}{1u + 35u} = \frac{35}{36} u = \frac{35}{36} \cdot 1{,}674 \cdot 10^{-27} kg$ og

for $^{2}D^{35}Cl$ er $\mu = \frac{2u \cdot 35u}{2u + 35u} = \frac{70}{37} u = \frac{70}{37} \cdot 1{,}674 \cdot 10^{-27} kg$.

Med $\hbar = h/2\pi = 6{,}626 \cdot 10^{-34}\ Js/2\pi$ får vi ved innsetting

$$E_0^{HCl} = 2{,}969 \cdot 10^{-20}\ J = \underline{\underline{17{,}9\ kJ/mol}}$$

$$E_0^{DCl} = 2{,}128 \cdot 10^{-20}\ J = \underline{\underline{12{,}8\ kJ/mol}}$$

der vi også har brukt $1 J = 6{,}022 \cdot 10^{20}\ kJ/mol$

4.3 I det infrarøde spekteret til NO er overgangen fra $v=0$ til $v=1$ observert som lys med bølgelengde $\lambda = 5{,}330 \cdot 10^{-6}\,m$. I henhold til likning (4.23) i boka vil denne overgangen gi en energi

$$\Delta E_{1\to 0} = E_1 - E_0 = (1+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_0 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0 = \hbar\omega_0$$

Ved sammenlikning av (4.21) og (4.22) finner vi ω_0

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{h}{4\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} \Leftrightarrow \omega_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Videre har et foton med bølgelengde λ en energi

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

og vi må kreve $E \overset{!}{=} \Delta E_{1\to 0}$. Dette gir

$$\hbar\omega_0 = \frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} \overset{!}{=} \frac{hc}{\lambda}$$

Som gir

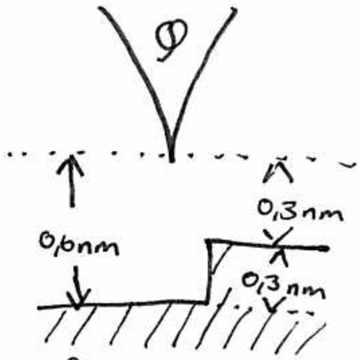
$$k = \mu\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^2$$

Lar for enkelhetsskyld $m_N = 14\,u$ og $m_O = 16\,u$, og setter inn $c = 2{,}998 \cdot 10^8\,m/s$. Dette gir

$$\underline{\underline{k = 1561\,N/m}}$$

Den beregnede kraftkonstanten stemmer godt overens med den nøyaktig beregnede verdi $k = 1595\,N/m$, mao. er den harmoniske approksimasjonen ganske god i dette tilfellet.

4.4 En ellers flat og ledende overflate har en 0,3 nm høy forhøyning, og en metall-tupp med en arbeidsfunksjon $\phi = 4{,}0\,eV$ blir ført i en avstand 0,6 nm over den opprinnelige flaten.



$\phi = 4{,}0\,eV = 4{,}0 \cdot 1{,}602 \cdot 10^{-19}\,J$.

Vi skal her beregne med hvor mye strømmen, som skyldes tunneling, øker når metalltuppen passerer over forhøyningen. Benytter sannsynligheten for tunneling gitt ved likning 4.39 i boka

$$P = \exp\left\{ \frac{-2L\sqrt{2m_e(V_0 - E)}}{\hbar} \right\}$$

der $\phi = V_0 - E = 4{,}0\,eV$ er barrieren elektronene må tunnelere gjennom, $m_e = 9{,}109 \cdot 10^{-31}\,kg$ er elektronmassen, L er hhv. 0,6 nm og 0,3 nm og $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 6{,}626 \cdot 10^{-34}\,J\cancel{s}s/2\pi$. Dette gir

$$P_{0,3nm}/P_{0,6nm} = \exp\left(-\frac{2 \cdot 0{,}3nm\sqrt{2m_e\phi}}{\hbar}\right) \Big/ \exp\left(-\frac{2 \cdot 0{,}6nm\sqrt{2m_e\phi}}{\hbar}\right)$$

$$= \exp\left(-\frac{2 \cdot 0{,}3nm\sqrt{2m_e\phi}}{\hbar} + \frac{2 \cdot 0{,}6nm\sqrt{2m_e\phi}}{\hbar}\right)$$

$$= \exp\left(\frac{2 \cdot 0{,}3nm\sqrt{2m_e\phi}}{h} 2\pi\right)$$

$$\simeq \underline{467}$$

Mao. øker strømmen som skyldes tunneling med en faktor på omtrent <u>467</u> når tuppen går fra den regulære til den forhøyede delen av flaten.

$\boxed{5.1}$ Bølgefunksjonen til en partikkel som beveger seg på en sirkel kan skrives på formen

$$\psi = N \sin \alpha\varphi$$

der N og α er konstanter, og der φ er rotasjonsvinkelen.

Kontinuitet krever at (bølgefunksjonen må "bite seg selv i halen")

$$\psi(\varphi) \stackrel{!}{=} \psi(\varphi + 2\pi)$$

Som gir

$$N \sin(\alpha\varphi) = N \sin(\alpha\varphi + \alpha \cdot 2\pi)$$

Da dette må gjelde for vilkårlig φ må $\alpha \cdot 2\pi$ være et multiplum av 2π, mao. $\underline{\underline{\alpha = \pm 1, \pm 2, \ldots}}$ ($\alpha = 0$ ikke mulig her da dette gir $\psi = 0$; ikke normaliserbar).

Finner normaliseringskonstanten N ved å integrere og sette lik en

$$\int_0^{2\pi} \psi^* \psi \, d\varphi = N^2 \int_0^{2\pi} \sin^2(\alpha\varphi) = N^2 \int_0^{2\pi} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(2\alpha\varphi)\right] d\varphi$$

$$= N^2 \left[\frac{1}{2}\varphi - \frac{1}{4\alpha}\sin(2\alpha\varphi)\right]_0^{2\pi}$$

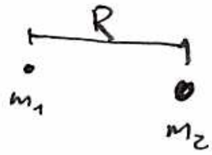
$$= N^2 \pi \stackrel{!}{=} 1$$

Dette gir $\underline{\underline{N = \sqrt{\pi}}}$ (kunne også valgt $N = -\sqrt{\pi}$)

5.2 Skal beregne energidifferansen mellom rotasjonsnivåene $J=0$ og $J=1$ for $^1H^{35}Cl$. Likevektsbindingslengden er oppgitt til $R = 0,1275\,nm$ og massene er oppgitt til $m_H = 1,008\,u$ og $m_{Cl} = 34,97\,u$, $u = 1,674 \cdot 10^{-27}\,kg$.

Treghetsmomentet til et diatom (om en rotasjonsakse gjennom massesenteret) er gitt som

$$I = \mu R^2$$



med den reduserte massen

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Benytter likning 5.36 i boka

$$\Delta E_{0\to1} = \Delta E(J=0 \to J=1) = \frac{\hbar^2}{I} = \frac{\hbar^2}{R^2} \frac{m_H + m_{Cl}}{m_H \cdot m_{Cl}}$$

Som gir $\underline{\underline{\Delta E_{0\to1} = 4,17 \cdot 10^{-22}\,J}}$.

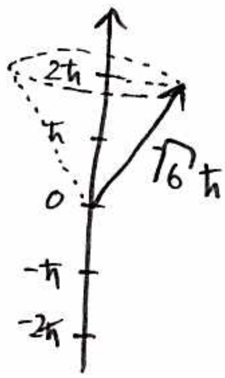
Vi finner bølgelengden ved å sette ($c = 2,998 \cdot 10^8\,m/s$)

$$\Delta E_{0\to1} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \iff \lambda = \frac{hc}{\Delta E_{0\to1}} = \underline{\underline{0,48\,mm}}$$

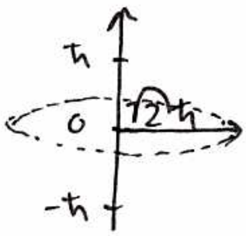
5.3

Skal her tegne vektordiagrammer som representerer angulærmomentet til noen gitte tilstander

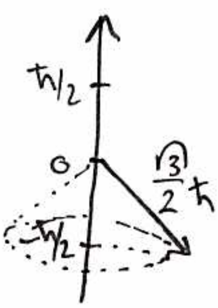
a) $\ell = 2, m_\ell = 2 \Rightarrow L = \sqrt{2 \cdot 3}\,\hbar = \sqrt{6}\,\hbar, \; L_z = 2\hbar$



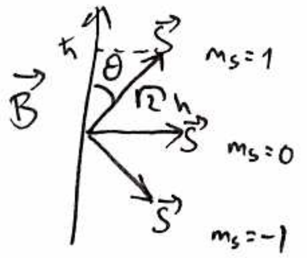
b) $\ell = 1, m_\ell = 0 \Rightarrow L = \hbar\sqrt{2}, \; L_z = 0$



c) $s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \Longrightarrow S = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)}\,\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar, \; S_z = -\frac{\hbar}{2}$



5.4 En prøve deuterium (spinnkvantetall $s=1$) plasseres i et magnetisk felt $\vec{B}$. Skal her beregne den minste mulige vinkelen mellom det eksterne feltet $\vec{B}$ og spinnvektoren $\vec{S}$



$S = \sqrt{2}\,\hbar \quad , \quad S_z = m_s \hbar \quad , m_s = 0, \pm 1$

Ser av figuren at den minste vinkelen får vi når $m_s = 1$
Har da

$$\cos\theta = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \underline{\underline{\theta = \frac{\pi}{4}}} \quad (=45^\circ)$$