

Hakola, Kurki-Suonio

Kurssin voi suorittaa vaihtoehdon A tai B mukaisesti.

**Vaihtoehto A:** vastaan **jokaiseen** tehtävään; kurssiarvosanani määräytyy tämän tentin perusteella eikä laskuharjoituspisteitä oteta huomioon.

**Vaihtoehto B:** vastaan valintani mukaan korkeintaan **neljään** tehtävään; kurssiarvosanani määräytyy sekä tämän tentin että laskuharjoituspisteitteni perusteella.

Kirjoita jokaiseen palauttamaasi paperiin, kumman vaihtoehdon olet valinnut! Mikäli tämä ei käy selvästi ilmi tai vaihtoehdosta B huolimatta vastaat viiteen tehtävään, koe arvostellaan vaihtoehdon A mukaisesti. Kokeessa ei saa käyttää laskinta eikä mitään apumateriaalia.

1. Modernia fysiikkaa käsittelevät kurssit alkavat tyypillisesti ns. klassisten kokeiden esittelyllä, joloin palataan ajassa taaksepäin 1800- ja 1900-lukujen vaihteeseen ja ihmetellään käsittämättömiä mittaustuloksia, joita ei silloin tunnetun fysiikan avulla pystytty selittämään lainkaan. Näin tehtiin myös Fysiikka IIIA:n aivan ensimmäisellä luennolla! Sinun tehtävänäsi on nyt esitellä **kaksi** näistä klassisista kokeista ja kertoa, mitä kummassakin kokeessa tehtiin, minkälaisia tuloksia saatiin, missä kohtaa klassisen fysiikan selitysyrietykset menivät aivan metsään ja — mikä tärkeintä — millä tavalla kvanttimekaniikan huomioonottaminen poisti kaikki ongelmat. Vastauksen ohjeitus on 1–2 sivua ja tyylilaji essee. (8p)
2. Tarkastellaan hiukkasta (massa  $m$ ), joka liikkuu yksiulotteisen harmonisen oskillaattorin potentiaalissa  $V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ , missä  $K$  on jousivakio ja  $\omega$  oskillaattorin värähtelyn (kulma)taajuus.
  - a) Osoita, että funktiot  $u_0(x) = A_0e^{-\alpha^2x^2/2}$  ja  $u_1(x) = A_1(\alpha x)e^{-\alpha^2x^2/2}$ , missä  $A_0$  ja  $A_1$  ovat vakioita ja  $\alpha^2 = \sqrt{mK}/\hbar$ , toteuttavat ko. oskillaattoria kuvaavan, ajasta riippumattoman Schrödingerin yhtälön. Mitkä ovat kyseisiä tiloja vastaavat energian ominaisarvot? (2,5p)
  - b) Määritä vakio  $A_0$  siten, että  $u_0$  on oikein normitettu. Piirrä huolellisesti kummankin tilan ( $u_0$  ja  $u_1$ ) todennäköisyystiheys  $x$ :n funktiona ja vertaa kuvaajia klassisen harmonisen oskillaattorin (esimerkiksi heilurin) todennäköisyystiheysiksi. Mitä huomaat? (3p)
  - c) Laske lopuksi odotusarvo  $\langle x \rangle$  sekä tilalle  $u_0$  että tilalle  $u_1$ . Miten tuloksesi suhtautuvat b)-kohdassa tekemiisi johtopäätöksiin? Osittaisintegrointi sekä kokeen lopussa oleva vihjeet auttavat sinua alkuun. (2,5p)
3. Tämän tehtävän kaikki kysymykset liittyvät vetyatomiin. Vastaa niihin lyhyesti ja ytimekkäästi!
  - a) Vetyatomin Schrödingerin yhtälön ratkaisuna saat elektronin ominaistiloja kuvaavat aaltofunktio  $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$ . Mitä kaikkea tietoa nuo funktiot  $\psi_{nlm_l}$  pitävät sisällään vetyatomista? Käsittele vastauksessasi erityisesti kvanttilukuja sekä erilaisia todennäköisyystiheysiksiä. (2p)
  - b) Mitä tarkoitetaan vetyatomin energiatilojen degeneraatiolla? Kuinka suurta tämä degeneraatio oikein on? Entä miten degeneraatiosta pääsee hankkiutumaan eroon osittain tai kokonaan? (2p)
  - c) Entä mitä sitten tarkoitetaan energiatilojen stationaarisuudella? Miten elektroni voi tämän perusteella siirtyä tilalta toiselle ja millä edellytyksillä siirtyminen voi tapahtua? Ovatko siirtymiset  $1s \rightarrow 2p$ ,  $2s \rightarrow 1s$ ,  $2s \rightarrow 2p$  ja  $1s \rightarrow 3d$  mahdollisia vetyatomissa? (2p)
  - d) Ja vielä: mikä se spin on ja mihin kaikkeen sitä oikein tarvitaan? Miten spinin huomioonottaminen muuttaa edellisten kohtien vastauksiasi? (2p)

4. a) Kirjoita heliumatomin Schrödingerin yhtälö alla olevaa kuvaa apunasi käyttäen. Mitä pystyt sanomaan heliumin aaltofunktioista sekä energiatiloista ilman, että ratkaisit yhtälöä vielä lainkaan? Vihjeeksi riittävät sanat "Paulin periaate" sekä "orto- ja parahelium". (2p)
- b) Näytä sitten, että jos heliumin Schrödingerin yhtälöön tehdään keskeiskenttäapproksimaatio ts. potentiaalia approksimoidaan lausekkeella  $V_1(r_1) + V_2(r_2)$ , niin yhtälö separoituu kahdeksi vetyatomien kaltaisen atomin Schrödingerin yhtälöksi. (3p)
- c) Millaisen arvion saat heliumin perustilan energiaksi, jos elektronien välinen vuorovaikutus jätetään kokonaan huomiotta? Entä jos käytät ns. varjostettua potentiaalia  $V_i(r_i) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} Z_{\text{eff}}(r_i)$  ja  $Z_{\text{eff}} = Z - \frac{5}{16}$ ? Vertaa tuloksiasi kokeelliseen arvoon perustilan energialle (noin  $-79$  eV). Mikä juu tuossa varjostuksessa oikein on? (3p)

5. Ionisidos on yksi kurssilla käsitellyistä kolmesta "pääsidosyyppistä", joilla kaksi (tai monta) atomia pystyy muodostamaan molekyylin. Miten ionisidoksellinen molekyyli, esimerkiksi KBr, pysyy kasassa ja mitä voit sanoa sen energiatiloista vaikkapa  $\text{Br}_2$ -molekyyliin verrattuna?

KBr-molekyyli on niin energinen, että se ei malta olla hetkeäkään paikallaan, vaan ytimet värähtelevät jatkuvasti toistensa suhteen. Olettaen, että ydinrepulsio molekyylissä on muotoa  $A/r^n$ , arvioi KBr:n värähtelytaajuuden suuruutta kehittämällä kokonaispotentiaalienergia Taylorin sarjaksi tasapainoetäisyyden lähetyvillä. Kaliumin ionisaatioenergia on  $E_{\text{ion}}(K) \approx 4,3$  eV, bromin elektroniaffiniteetti on  $E_{\text{aff}}(\text{Br}) \approx 3,4$  eV, molekyylin dissosiaatioenergia on  $E_{\text{diss}} \approx 3,9$  eV ja tasapainoetäisyys  $r_0 \approx 0,28$  nm. Lauseke ja suuruusluokka-arvio riittävät vastaukseksi. Kannattaa myös konsultoida tehtävää 2. (8p)

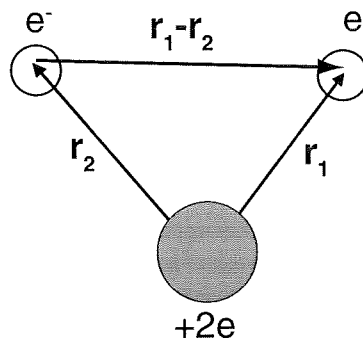
Aputietoja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

$$\int_a^b f(x)g'(x) dx = \int_a^b f(x)g(x) - \int_a^b f'(x)g(x) dx.$$

Vetyatomien energiatilat:  $E_n = -E_0/n^2$ , missä  $E_0 \approx 13,6$  eV.

$e \approx 2 \cdot 10^{-19}$  C,  $1/(4\pi\epsilon_0) \approx 9 \cdot 10^9$  JmC<sup>-2</sup>,  $m(K) \approx 39$  u,  $m(\text{Br}) \approx 80$  u,  $1 \text{ u} \approx 2 \cdot 10^{-27}$  kg



Kuva 1: Heliumatomin geometria.