Teknillinen korkeakoulu
Teknillisen fysiikan laitos

Tfy-0.2011 Fysiikka IIIA **Tentti, 29.10.2009**

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. Alla on esitetty joukko kvanttimekaniikkaan liittyviä väitteitä. Kerro, ovatko ne oikein vai väärin. Perustele kussakin kohdassa kantasi lyhyesti mutta täsmällisesti!

   a) Mitä pienempää energiaa käytät kvanttimekaanista systeemiä tarkastellessasi, sitä pienempiä yksityiskohtia pystyt siitä erottamaan. (1p)

   b) Kvanttimekaniikassa voidaan laskea periaatteessa mielivaltaisen tarkasti todennäköisyys löytää hiukkanen jostain avaruuden osa-alueesta. (1p)

   c) Ollakseen stabiili kvanttimekaanisen systeemin on oltava energian ominaistilassa. (1p)

   d) Kvanttimekaniikan antama ennuste mitattavan fysikaalisen suureen odotusarvolle on yksi ko. suuretta vastaavan operaattorin ominaisarvoista. (1p)

   e) Ulkoinen magneettikenttä hajottaa vedyn spektriviivat aina parilliseen määrään lähekkäisiä viivoja. (1p)

   f) Spin on kvanttimekaaninen suure, joka kuvaa hiukkasen pyörimistä oman akselinsa ympäri. (1p)

   g) Elektronien käyttäytymistä auringon koronassa (lämpötila 10^6 K, hiukkastiheys 10^{15} m^{-3}) voidaan käsitellä klassisen fysiikan avulla. Lämpötilaa vastaavan kineettisen energian saat relaatiosta $E \sim k_{\mathrm{B}}T$. (2p)

2. a) Tarkastellaan yksiulotteiseen, äärettömään potentiaalikuoppaan joutunutta hiukkasparkaa, jonka massa on m. Potentiaali on $V(x) = 0$, kun $-b \leq x \leq b$, muulloin $V(x) = \infty$. Kirjoita ja ratkaise ajasta riippumaton Schrödingerin yhtälö kaikissa fysikaalisesti erilaisissa alueissa ja selvitä systeemin normitetut ominaistilat sekä niiden energiat. (4p)

   b) Yhtäkkiä kuoppaan ilmestyy V_0:n korkuinen nökö välille $-b/2 \leq x \leq b/2$. Hahmottele näkyviin kolmen alimman energiatilan aaltofunktion sekä todennäköisyystiheyden kuvaajat sekä nökön kanssa että ilman sitä. Perustele lyhyesti, miksi kuvaajasi ovat sen näköisiä kuin ovat. Nökötapauksessa käsittele erikseen tapauksia $E < V_0$ ja $E > V_0$, missä E on hiukkasen kokonaisenergia. (4p)

3. Tässä tehtävässä tarvittavat aaltofunktiot löytyvät koepaperin lopusta.

   a) Tarkastellaan vetyatomin elektronia tilassa ψ_{200}. Laske odotusarvo $\langle r \rangle$ sekä elektronin todennäköisin etäisyys ytimestä eli r_{tod}. Vertaile saamiasi lukuarvoja keskenään ja selitä havaintosi. (5p)

   b) Yhtäkkiä elektroni joutuu superpositiotilaan, jossa aaltofunktio hetkellä $t = 0$ on

   $$\Psi(r,\theta,\phi,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{200} - \frac{1}{2}\psi_{211} + A\psi_{320},$$

   missä A on vakio. Vetyatomin ominaisenergiat ovat $E_n = -E_0/n^2$, missä $E_0 \approx 13{,}6$ eV. Määritä nyt vakio A siten, että aaltofunktio on oikein normitettu ja laske kokonaisenergian odotusarvo. Miten aaltofunktio muuttuu, kun aika lähtee kulkemaan eli mikä on $\Psi(r,\theta,\phi,t)$? (3p)

4. Hyvä ystäväsi tohtori Sykerö on tehnyt tutkimusta spektroskopian parissa viimeiset 50 vuotta, ja hänelle onkin kehittynyt laaja näkemys koko alasta — mutta on hänellä myös vahvoja mielipiteitä lähes aiheesta kuin aiheesta. Sykerö on täysin vakuuttunut siitä, että vedyn spektriviivojen hienorakenne on täyttä huuhaata: ei hienorakennetta oikeasti ole olemassa, kaikki on pelkkää mittauskohinaa, ja vaikka hienorakenne olisikin totta, niin ei sitä tarvita yhtään mihinkään.

   Kerro nyt Sykerölle rautalangasta vääntäen, kurssilla oppimiasi tietoja hyväksi käyttäen, että hienorakenne tulee suoraan kvanttimekaniikasta ja että sitä tarvitaan välttämättä selittämään atomin spektriviivojen hajoaminen osiin magneettikentässä. Pyri olemaan niin täsmällinen ja kvantitatiivinen kuin suinkin mahdollista! Käsittele vastauksessasi ainakin spin–rata-vuorovaikutusta, relativistisia korjauksia, kokonaiskulmaliikemäärää $\mathbf{J}$, energiatilojen riippumista eri kvanttiluvuista sekä transitioita tilojen välillä magneettikentässä.

   Lopuksi sinun täytyy vakuuttaa Sykerö siitä, että hienorakenne ei ole pelkästään vedyllä vastaan tuleva ilmiö, vaan kyllä se havaitaan joka ikisellä atomilla. Esimerkkinä voit tarkastella vaikkapa heliumia ($Z = 2$) tai hiiltä ($Z = 6$) ja näyttää, miten hienorakenne näkyy niiden energiatiloissa. (8p)

5. Monielektroniatomeja ja molekyylejä tarkasteltaessa pyrimme yleensä käyttämään sellaisia malleja, että systeemin aaltofunktion pystyy kirjoittamaan yksittäisten elektronien aaltofunktioiden avulla.

   a) Lähtien keskeiskenttämallin mukaisista yksittäisten elektronien aaltofunktioista $\psi_{n_i l_i m_{l_i} m_{s_i}}$ kirjoita heliumatomin ($Z = 2$) perustilan aaltofunktio. Apuna voit käyttää kuvan 1 geometriaa. Kannattaa hajottaa aaltofunktio rataosuuteen sekä spinosuuteen ja kiinnittää huomiota niiden symmetriaominaisuuksiin. (3p)

   b) Kirjoita sitten litiumatomin ($Z = 3$) perustilan aaltofunktio, jälleen yksittäisten elektronien aaltofunktioiden avulla. Voit olettaa, että kaksi hiukkasista on spin–ylös-tilassa ja kolmas spin–alas-tilassa. Nyt kannattaa kirjoittaa kokonaisaaltofunktio suoraan determinanttimuodossa. (2p)

   c) Ja lopuksi sinun pitäisi kirjoittaa vetymolekyylin H_2 perustilan aaltofunktio vetyatomin perustilan aaltofunktioiden avulla. Jälleen kuvassa 1 olevan geometrian avulla konstruoiminen saattaa helpottua oleellisesti. Kiinnitä taas huomiota aaltofunktion symmetriaominaisuuksiin sekä spiniin. (3p)

Aputietoja:
$h \approx 7 \cdot 10^{-34}$ Js, $k_\mathrm{B} \approx 1 \cdot 10^{-23}$ J/K, $m_\mathrm{e} \approx 9 \cdot 10^{-31}$ kg, $a_0 \approx 0{,}5$ Å

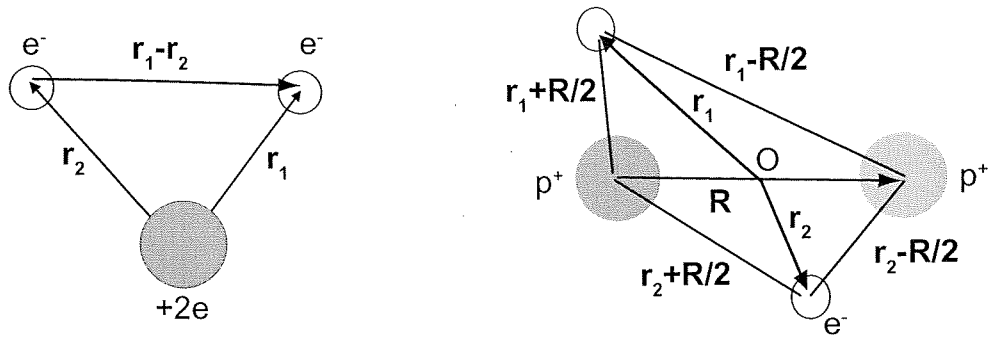
$$\int_a^b f(x)g'(x)\,dx = \Big/_a^b f(x)g(x) - \int_a^b f'(x)g(x)\,dx.$$

Tarpeellisia radiaalifunktioita sekä palloharmonisia funktioita $\left[\psi_{nlm_l}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_l^{m_l}(\theta,\phi)\right]$:

$$R_{20}(r) = 2\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\left[1-\left(\frac{r}{2a_0}\right)\right]e^{-r/(2a_0)}, \quad R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-r/(2a_0)}$$

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}}\left(\frac{1}{3a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$$

$$Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\phi}, \quad Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right)$$



Kuva 1: Heliumatomin ja vetymolekyylin geometriat.