LINKÖPINGS UNIVERSITET

Thomas Ederth
IFM / Molekylär Fysik
ted@ifm.liu.se

Kontrollskrivning

TFYA35 Molekylfysik, KTR1

30 september 2019 kl. 8.00-10.00

Skrivsal: T1

Kontrollskrivningen omfattar tre problem (nr. 1, 2 och 6) som vardera kan ge 4 poäng. Poängen på respektive uppgift får ersätta motsvarande uppgift på ordinarie tentamen.

Tentamen består av 2 sidor (inklusive denna).

Lösningar läggs ut på kurshemsidan efter skrivtidens slut. Skrivningsresultat meddelas senast 12 arbetsdagar efter tentamenstillfället.

Tillåtna hjälpmedel:	Physics Handbook Räknedosa (med tömda minnen)
Kursansvarig:	Thomas Ederth, ankn. 1247. Joel Davidsson svarar ca kl. 9 på frågor i skrivsalarna.
Kursadministratör:	Lise-Lotte Lönndahl Ragnar, ankn. 1219, lise-lotte.ragnar@liu.se.

Lösningar skall om möjligt åtföljas av figur, införda beteckningar skall definieras, ekvationer motiveras och numeriskt svar alltid skrivas ut med enhet. Orimligt svar medför noll poäng på uppgiften.

Lycka till!

Kontrollskrivning TFYA35 Molekylfysik, KTR1, 30 september 2019.

1. *a)* Vissa operatorer är *icke-kommuterande*, vad är den matematiska, respektive fysikaliska innebörden av detta? [2p]

   b) En partikel beskrivs av vågfunktionen $\psi = \sin 3x$. Bestäm rörelsemängden och den kinetiska energin för denna partikel. [2p]

2. Betrakta en partikel vars normerade vågfunktion är

$$\psi(x) = \begin{cases} 2\alpha^{3/2} x e^{-\alpha x} & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

   a) Beräkna $\langle x \rangle$. [2p]

   b) Beräkna sannolikheten att hitta partikeln mellan $x = 0$ och $x = 1/\alpha$ [2p]

6. Vid kvantkemiska beräkningar använder man ofta approximativa vågfunktioner där enkelhet är ett viktigt kriterium för att göra beräkningarna snabbare. Grundtillståndet för en partikel i en låda med längden L kan till exempel approximeras med vågfunktionerna $\phi_a = e^x(L - x)$ eller $\phi_b = x^2(L - x)$.

   Välj den av vågfunktionerna ϕ_a och ϕ_b som är bäst lämpad att approximera grundtillståndet, och beräkna det relativa felet i energi. [4p]

Möjligen kan dessa integraler vara till nytta:

$$\int_0^\infty e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad \int x e^{ax^2} dx = \frac{1}{2a} e^{ax^2}$$

$$\int x^n e^{ax} dx = \frac{e^{ax}}{a^{n+1}} \left[(ax)^n - n(ax)^{n-1} + n(n-1)(ax)^{n-2} - ... + (-1)^n n! \right], \; n \text{ heltal } > 0$$

Lösningsförslag, TFYA35 Molekylfysik, KTR1, 30 september 2019.

1. *a)* Att operatorerna $\hat{A}$ och $\hat{B}$ inte kommuterar innebär att $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0$. Den fysikaliska innebörden av detta är att Heisenbergs osäkerhetsrelation gäller för det par av observabler som $\hat{A}$ och $\hat{B}$ representerar.

   b) Storheterna bestäms genom att operera på vågfunktionen med motsvarande operator, och bestämma egenvärdena:

$$\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{d}{dx}\psi = -i\hbar\frac{d}{dx}\sin 3x = -i\hbar 3\cos 3x$$

   saknar egenvärde, och rörelsemängden är alltså inte entydigt definierad för denna vågfunktion (däremot är $\langle$. Kinetiska energin ges av egenvärdet till:

$$\hat{E}_k\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\sin 3x = -\frac{\hbar^2}{2m}(-9)\sin 3x = \frac{9\hbar^2}{2m}\sin 3x$$

   så att $E_k = 9\hbar^2/2m$.

2. *a)* $\langle x\rangle = \int \psi^* x\psi d\tau$, men ψ är reell, så $\langle x\rangle = \int x\psi^2 d\tau$

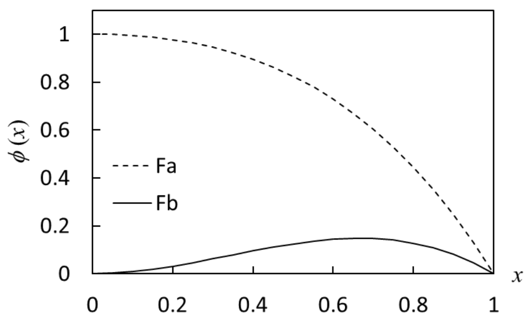
$$\langle x\rangle = \int_0^\infty (4\alpha^3)x^3 e^{-2\alpha x}dx = \Bigg/ \begin{matrix} t = 2\alpha x \\ dt = 2\alpha dx \end{matrix} \Bigg/ = \int_0^\infty \frac{t^3}{2}e^{-t}\frac{dt}{2\alpha} = \frac{1}{4\alpha}\int_0^\infty t^3 e^{-t}dt = \frac{3}{2\alpha}$$

   b)

$$P(0 < x < \frac{1}{\alpha}) = \int_0^{1/\alpha} (4\alpha^3)x^2 e^{-2\alpha x}dx = \Bigg/ \begin{matrix} s = 2\alpha x \\ ds = 2\alpha dx \end{matrix} \Bigg/ = \frac{1}{2}\int_0^2 s^2 e^{-s}ds =$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{e^{-s}}{(-1)^3}\Big((-1)^2 s^2 - 2(-1)s + 2\Big)\right]_0^2 = \frac{1}{2}\Big(-e^{-2}(4+4+2) + 2\Big) = 0{,}32$$

6. Vågfunktionerna är skissade till höger för fallet $L = 1$, och $\phi_a = e^x(L-x)$ uppfyller inte randvillkoret $\phi_a(0) = 0$, och är således inte särdeles användbar för att approximera grundtillståndet; betrakta därför ϕ_b vid lösningen.



Energin ges av

$$E_b = \frac{\int \phi_b^* \hat{H} \phi_b d\tau}{\int \phi_b^* \phi_b d\tau} \tag{1}$$

(Nämnaren behövs eftersom vi inte vet om vågfunktionen är normerad). För partikeln i lådan gäller att $V(x) = 0$ i intervallet $0 < x < L$, så att $\hat{H}\phi_b$ blir:

$$\hat{H}\phi_b = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}(x^2L - x^3) = -\frac{\hbar^2}{2m}(2L - 6x)$$

Insatt i täljaren i (1) ger detta

$$\int_0^L (x^2L - x^3)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)(2L-6x)dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{x^3}{3}2L^2 - \frac{8Lx^4}{4} + \frac{6x^5}{5}\right]_0^L = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2L^5}{15}$$

Nämnaren i (1) blir

$$\int_0^L (x^2L - x^3)^2 dx = \left[\frac{L^2x^5}{5} + \frac{x^7}{7} - \frac{2Lx^6}{6}\right]_0^L = \frac{2L^7}{210}$$

och

$$E_b = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2L^5}{15}\Bigg/\frac{2L^7}{210} = \frac{7h^2}{4\pi^2 mL^2}$$

Energin för grundtillståndet är $E_1 = h^2/8mL^2$, och det relativa felet blir

$$\frac{E_b - E_1}{E_b} = 1 - \frac{E_1}{E_b} = 1 - \frac{h^2}{8mL^2}\frac{4\pi^2 mL^2}{7h^2} = 1 - \frac{\pi^2}{14} \approx 29\%$$