LINKÖPINGS UNIVERSITET

Thomas Ederth
IFM / Molekylär Fysik
thomas.ederth@liu.se

# Kontrollskrivning

## TFYA35 Molekylfysik, KTR1

## 28 september 2020 kl. 8.00-10.00

## Skrivsalar: TER1, TERE

**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<br>Räknedosa (med tömda minnen) |
| Kursansvarig: | Thomas Ederth, ankn. 1247 eller tel. 0732025566, som ca kl. 9 svarar på frågor i skrivsalarna. |
| Kursadministratör: | Siv Göthe, ankn. 6779,<br>siv.gothe@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, 28 september 2020.**

1. *a)* Vad innebär det att två egenfunktioner $\psi_m$ och $\psi_n$ till en kvantmekanisk operator är *ortogonala*? [1p]

   *b)* Situationen där flera olika egenfunktioner till Hamiltonoperatorn har samma egenvärden brukar betecknas med ett visst begrepp, vilket? [1p]

   Avgör om det är möjligt att oberoende av varandra bestämma

   *c)* Rörelsemängd och kinetisk energi. [1p]

   *d)* Rörelsemängd och potentiell energi. [1p]

2. *a)* En partikel i en endimensionell låda befinner sig i grundtillståndet. Vad är sannolikheten att hitta partikeln i mittersta tredjedelen av lådan? [2p]

   *b)* Under vilka förutsättningar är följande funktion en acceptabel vågfunktion för en partikel i en endimensionell låda: [2p]

$$\psi(x) = b \sin \frac{\pi x}{a} + c \sin \frac{2\pi x}{a} + d \cos \frac{4\pi x}{a}$$

6. Spinntillståndet hos en spinn-1/2-partikel kan beskrivas med en vektor (en *spinor*) $\chi$ på formen:

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\alpha + b\beta, \qquad \alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \ \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

   där $\alpha$ representerar ”spinn upp” och $\beta$ representerar ”spinn ner”. Med basvektorerna $\alpha$ och $\beta$ representeras spinnoperatorerna $\hat{S}_z$ och $\hat{S}^2$ av $(2 \times 2)$-matriser (*Paulis spinnmatriser*):

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

   *a)* Visa att $\alpha$ och $\beta$ är egenvektorer till $S_z$ och $S^2$, och ange egenvärdena. [2p]

   *c)* Antag att en spinn-1/2-partikel är i tillståndet

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1+i \\ 2 \end{pmatrix}$$

   Vad är sannolikheten att hitta partikeln i tillstånden $+\hbar/2$ respektive $-\hbar/2$ vid en mätning av $S_z$? [2p]

---

En användbar integral:

$$\int \sin^2 ax \; dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin 2ax}{4a}$$

**Lösningsförslag, TFYA35 Molekylfysik, KTR1, 28 september 2020.**

1. *a)* Att $\psi_m$ och $\psi_n$ är ortogonala egenfunktioner innebär att $\int \psi_m^* \psi_n d\tau = 0$ när $n \neq m$ (och $\neq 0$ om $n = m$).

   *b)* Begreppet är *degeneration.*

   *c)* Eftersom den kinetiska energin beror av rörelsemängden ($E_k = p^2/2m$) är de i matematisk mening inte oberoende, men ur fysikalisk synpunkt kan dessa bestämmas oberoende av varandra, d.v.s. rörelsemängd och kinetisk energi kommuterar:

$$\left[\hat{p}_x, \hat{T}\right] = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{i\hbar^3}{2m}\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\partial}{\partial x}\right) = 0$$

   *d)*

$$\left[\hat{p}_x, \hat{V}\right] = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)V(x) - V(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\left(\frac{\partial V(x)}{\partial x} - V(x)\frac{\partial}{\partial x}\right) \neq 0 \;\; \forall \;\; V(x) \neq 0$$

   D.v.s. rörelsemängd och potentiell energi kommuterar då $V(x) \equiv 0$, alltså för en fri partikel, men annars kan de *ej* bestämmas oberoende av varandra.

2. *a)* Vågfunktionen för en partikel i en låda med längden $a$ i grundtillståndet ($n = 1$) är $\psi_1(x) = \sqrt{2/a}\sin\frac{\pi x}{a}$ (ur P.H.), och den sökta sannolikheten är

$$P = \int_{a/3}^{2a/3} |\psi_1(x)|^2 dx = \frac{2}{a}\int_{a/3}^{2a/3} \sin^2\frac{\pi x}{a}dx = \frac{2}{a}\left[\frac{x}{2} - \frac{\sin\frac{2\pi x}{a}}{\frac{4\pi}{a}}\right]_{a/3}^{2a/3} =$$

$$= \frac{2}{a}\left[\frac{2a}{6} - \frac{a}{4\pi}\sin\frac{4\pi}{3} - \frac{a}{6} + \frac{a}{4\pi}\sin\frac{2\pi}{3}\right] = \frac{2}{a}\left[\frac{a}{6} - \frac{a}{4\pi}\left(\sin\frac{4\pi}{3} - \sin\frac{2\pi}{3}\right)\right] = 0{,}61$$

   *b)* För att vara acceptabel måste vågfunktionen vara begränsad, envärd, två gånger kontinuerligt deriverbar, och uppfylla randvillkoren $\psi(0) = 0$ och $\psi(L) = 0$, om $L$ är lådans längd. De tre första villkoren är uppfyllda för varje linjärkombination av sin- och cos-funktioner. Randvillkoret $\psi(0) = b\sin 0 + c\sin 0 + d\cos 0 = 0$ är uppfyllt enbart om $d = 0$. Randvillkoret $\psi(L) = b\sin(\pi L/a) + c\sin(2\pi L/a) = 0$ är uppfyllt om $L$ är en heltalsmultipel av $a$, eftersom argumentet till sin-funktionen måste vara en heltalsmultipel av $\pi$ för att sin-funktionen ska bli noll. Alltså:

   $\psi(x)$ är acceptabel om $d = 0$ och lådans längd är $n \cdot a$, där $n$ är ett heltal. Normering ger slutligen begränsningar för $b$ och $c$, men normering är inte nödvändigt för att vågfunktioner skall vara acceptabla.

6. *a)*

$$S_z\alpha = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\alpha, \quad \text{p.s.s. ger } S_z\beta = -\frac{\hbar}{2}\beta$$

$$S^2\alpha = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\alpha, \quad \text{p.s.s. ger } S^2\beta = \frac{3\hbar^2}{4}\beta$$

D.v.s. $\alpha$ är egenvektor till $S_z$ och $S^2$ med egenvärden $\hbar/2$ och $3\hbar^2/4$, och $\beta$ är egenvektor till $S_z$ och $S^2$ med egenvärden $-\hbar/2$ och $3\hbar^2/4$.

*b)* Enligt *a)* svarar $+\hbar/2$ mot $\alpha$-tillståndet, och $-\hbar/2$ mot $\beta$-tillståndet. $\chi$ uttryckt i basvektorerna $\alpha$ och $\beta$ blir

$$\chi = \frac{1+i}{\sqrt{6}}\alpha + \frac{2}{\sqrt{6}}\beta = a\alpha + b\beta$$

Om denna vågfunktion är normerad måste $|a|^2 + |b|^2 = 1$, och då ges respektive sannolikhet direkt av $|a|^2$ respektive $|b|^2$.

$$|a|^2 = \left|\frac{1+i}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{2}{6} = \frac{1}{3}, \quad |b|^2 = \left|\frac{2}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{4}{6} = \frac{2}{3}$$

Detta ger $|a|^2 + |b|^2 = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} = 1$; $\chi$ är alltså normerad och de sökta sannolikheterna är $1/3$ respektive $2/3$ för tillstånden $+\hbar/2$ respektive $-\hbar/2$.