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

Kontrollskrivning

TFYA35 Molekylfysik, KTR1

27 september 2021 kl. 8.00-10.00

Skrivsalar: E236, FE249

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 eller tel. 0732025566, som ca kl. 9 svarar på frågor i skrivsalarna.
Kursadministratör:	Siv Göthe, ankn. 6779, 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, 27 september 2021.

1. *a)* En neutron i en atomkärna begränsas av en potential som approximeras med en potentialgrop med längden 10 fm och oändligt höga barriärer. Vad är den lägsta möjliga kinetiska energin för neutronen? [1p]

   b) En verklig neutron är begränsad till en potential med ändligt höga barriärer. Visa med en skiss hur vågfunktionerna för de två lägsta tillstånden skiljer sig för potentialgropar med samma längd, men med oändliga respektive ändliga barriärhöjder, och ange viktiga skillnader. [2p]

   c) Visa att resultatet blir orimligt om en elektron begränsas till samma potential som neutronen i *a)* . [1p]

2. Ett system befinner sig i tillståndet

$$\psi(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{5}} Y_{1,-1}(\theta,\varphi) + \sqrt{\frac{3}{5}} Y_{1,0}(\theta,\varphi) + \frac{1}{\sqrt{5}} Y_{1,1}(\theta,\varphi)$$

   där $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ är klotytefunktionerna.

   a) Om L_z mäts i detta system, vilka är de möjliga utfallen, och med vilka sannolikheter? [1p]

   a) Om $|\bar{L}|^2$ mäts i detta system, vilka är de möjliga utfallen, och med vilka sannolikheter? [1p]

   c) Om $\psi(\theta,\varphi)$ beskriver en elektron, vilka är de möjliga värdena på det totala rörelsemängdsmomentet j? [1p]

   d) Om en mätning ger resultatet $L_z = 0$, vad är $\langle \hat{L}_x \rangle$ respektive $\langle \hat{L}_y \rangle$ (motivera svaret)? [1p]

6. För att konstruera molekylorbitaler utgår man ofta från en uppsättning ortogonala funktioner, för att sedan optimera en linjärkombination av dessa med hjälp av variationsprincipen. Bestäm de ortonormerade polynomen Φ_n av grad $n = 0$, 1 och 2 på intervallet [-1,1]. [4p]

Lösningsförslag, TFYA35 Molekylfysik, KTR1, 27 september 2021.

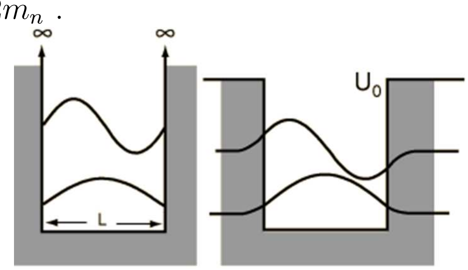
1. *a)* Om kärnan approximeras med en en-dimensionell låda med längden L är de möjliga energierna för neutronen

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_nL^2}n^2, \quad n = 1, 2, 3, ...$$

För en neutron med $m_n = 1{,}675 \times 10^{-27}$ kg ges den lägsta energin vid $n = 1$ till $E_n = 3{,}3 \times 10^{-13}$ J eller 2,0 MeV.

Alternativ: Utgå från Heisenbergs osäkerhetsrelation $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ och uppskatta Δp, och använd sedan t.ex. $E_{kin} = p^2/2m_n$.

b) Se skiss till höger. Viktiga skillnader: Ändligt höga barriärer ger vågfunktioner med *i)* lägre energi för samma kvanttal (om lådans längd är densamma i båda fallen), *ii)* penetration inuti barriärerna, och *iii)* ett ändligt antal bundna tillstånd.



c) Med elektronens massa insatt i E_n blir den kinetiska energin ca 3700 MeV, vilket motsvarar en hastighet $\gg c$ (och även en energi $E_n \gg$ elektronens viloenergi $m_ec^2 \approx 0{,}5$ MeV). Det är alltså inte möjligt att begränsa en elektron till en sådan potential.

2. *a)* $\psi(\theta, \varphi)$ är en linjärkombination av alla de tillstånd där $l = 1$, och alltså $m_l = -1, 0, 1$. Mätning av L_z ger storleken på de möjliga projektionerna på z-axeln, vilket då kan ge utfallen $L_z = m_l\hbar = -\hbar, 0, +\hbar$.

Bestämning av egenvärdena till operatorn $\hat{l}_z = -i\hbar(\partial/\partial\varphi)$ efter operation på de olika funktionerna $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ ger samma resultat.

Funktionerna $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ är normerade, men för att kunna beräkna sannolikheterna behöver vi kontrollera att även superpositionen $\psi = c_1Y_{1,-1} + c_2Y_{1,0} + c_3Y_{1,1}$ är normerad, d.v.s. att $\sum c_i^2 = 1$. Detta är uppfyllt eftersom

$$\left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right)^2 = 1$$

Mätning av L_z ger då utfallet 0 med sannolikheten $c_2^2 = \frac{3}{5}$, och utfallen -$\hbar$ respektive $+\hbar$ med sannolikheten $c_1^2 = c_3^2 = \frac{1}{5}$ för vart och ett av dessa utfall.

b) De tre tillstånden som bildar superpositionen har alla $l = 1$, så mätning av $|L|^2$ kan bara ge utfallet $\hbar^2 l(l + 1) = 2\hbar^2$ (med sannolikheten 1, förstås).

c) Med $l = 1$ och $s = \frac{1}{2}$ för en elektron, blir de möjliga utfallen
$j = |l - s|, |l - s| + 1, ..., l + s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$.

d) Om L_z är bestämd (oavsett vilket värde vi erhöll på L_z), så är L_x och L_y båda helt obestämda, eftersom L_z inte kommuterar med dessa komponenter. Om de är helt obestämda blir väntevärdet av projektionen av $\bar{L}$ på respektive axel lika med noll, så $\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0$.

6. Ansätt polynomet av grad 0 till $\Phi_0 = a_0$. Normering ger

$$1 = \int \Phi_0 \Phi_0 dx = \int_{-1}^{1} a_0^2 dx = \left[a_0^2 x\right]_{-1}^{1} = 2a_0^2 \Rightarrow a_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Polynomet av grad 1 ansätts till $\Phi_1 = b_1 x + b_0$. Vi kräver ortogonalitet:

$$0 = \int \Phi_0 \Phi_1 dx = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^{1} (b_1 x + b_0) dx = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{b_1 x^2}{2} + b_0 x\right]_{-1}^{1} = \frac{1}{\sqrt{2}} 2b_0 \Rightarrow b_0 = 0$$

Normering av kvarvarande $\Phi_1 = b_1 x$ ger

$$1 = \int \Phi_1 \Phi_1 dx = \int_{-1}^{1} b_1^2 x^2 dx = \left[\frac{b_1^2 x^3}{3}\right]_{-1}^{1} = \frac{2b_1^2}{3} \Rightarrow b_1 = \sqrt{\frac{3}{2}}$$

Vi har nu

$$\Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ och } \Phi_1 = \sqrt{\frac{3}{2}} x$$

Polynomet av grad 2 ansätts till $\Phi_2 = c_2 x^2 + c_1 x + c_0$. Vi kräver ortogonalitet:

$$0 = \int \Phi_0 \Phi_2 dx = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^{1} (c_2 x^2 + c_1 x + c_0) dx = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{c_2 x^3}{3} + \frac{c_1 x^2}{2} + c_0 x\right]_{-1}^{1} =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{2}} \left[\frac{c_2}{3} + c_0\right] = 0 \Rightarrow c_2 = -3c_0$$

Φ_2 och Φ_1 måste också vara ortogonala:

$$0 = \int \Phi_1 \Phi_2 dx = \sqrt{\frac{3}{2}} \int_{-1}^{1} x(c_2 x^2 + c_1 x + c_0) dx = \sqrt{\frac{3}{2}} \left[\frac{c_2 x^4}{4} + \frac{c_1 x^3}{3} + \frac{c_0 x^2}{2}\right]_{-1}^{1} =$$

$$= \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{2c_1}{3} = 0 \Rightarrow c_1 = 0$$

Normering av återstående $\Phi_2 = c_2 x^2 + c_0 = /c_2 = -3c_0/ = c_0(1 - 3x^2)$ ger

$$1 = \int \Phi_2 \Phi_2 dx = c_0^2 \int_{-1}^{1} (1 - 6x^2 + 9x^4) dx = c_0^2 \left[x - \frac{6x^3}{3} + \frac{9x^5}{5}\right]_{-1}^{1} =$$

$$= 2c_0^2 \left[1 - \frac{6}{3} + \frac{9}{5}\right] = 2c_0^2 \left[\frac{15}{15} - \frac{30}{5} + \frac{27}{15}\right] = 2c_0^2 \left[\frac{12}{15}\right] = \frac{8c_0^2}{3} = 1 \Rightarrow c_0 = \sqrt{\frac{3}{8}}$$

De tre ortonormerade polynomen är då

$$\Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \Phi_1 = \sqrt{\frac{3}{2}} x, \quad \Phi_2 = \sqrt{\frac{3}{8}} (1 - 3x^2)$$

(Om proceduren fortsätts så erhålls Legendrepolynomen, och om x substitueras med $\cos\theta$ blir resultatet de associerade Legendrefunktionerna.)