Thomas Ederth
IFM / Biofysik och Bioteknik
thomas.ederth@liu.se

Kontrollskrivning

TFYA35 Molekylfysik, KTR1

26 september 2022 kl. 8.00-10.00

Skrivsalar: T1, FE245

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, 26 september 2022.

1. *a)* Vad är *komplementära variabler*, och hur avgör man om två variabler är komplementära? [2p]

   b) Vilket värde måste konstanten a ha för att funktionen e^{-ax^2} ska vara en egenfunktion till operatorn $(\frac{d^2}{dx^2} - 4x^2)$? [2p]

2. *a)* Vid beräkning av energierna hos väteliknande atomer placeras vanligen koordinatsystemet i kärnan, som betraktas som stationär. En mer exakt lösning fås om koordinatsystemet i stället placeras i masscentrum. Energierna för en väteliknande atom med laddning Z blir då

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2}$$

   där μ är den reducerade massan. Hur mycket större (i %) blir energin för övergången $n = 1 \rightarrow n = 4$ i en väteatom om koordinatsystemet placeras i kärnan, jämfört med om det ligger i masscentrum? [2p]

   b) Storleken hos en proton är ännu inte med säkerhet bestämd, men så sent som i år publicerades en studie som fann att dess radie är 0,840 fm. Hur stor är sannolikheten att hitta en H2s-elektron innanför denna radie? [2p]

   Beräkningen i *b)* kan förenklas genom approximationer, men dessa ska i så fall beskrivas och motiveras!

6. Om dipolmomentet för en molekyl som roterar i tre dimensioner är $\bar{\mu}$, beräkna övergångsdipolmomentet för övergången $(l, m_l) = (0, 0) \rightarrow (l, m_l) = (1, 0)$ i ett elektromagnetiskt fält som är orienterat i z-riktningen. [4p]

Lösningsförslag, TFYA35 Molekylfysik, KTR1, 26 september 2022.

1. *a)* Komplementära variabler är variabler som motsvarar mätbara storheter, men som inte båda samtidigt kan bestämmas med godtycklig noggrannhet (utan bara till den grad som bestäms av Heisenbergs osäkerhetsrelation). Sådana par av variabler har kommutatorer som inte är noll.

   b) e^{-ax^2} är en egenfuktion till operatorn om operation på e^{-ax^2} resulterar i någon konstant $\times$ e^{-ax^2}, vilket är uppfyllt om $a = \pm 1$, ty då försvinner alla x-termer från parentesen längst till höger:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - 4x^2\right) e^{-ax^2} = \frac{d}{dx}(-2ax)e^{-ax^2} - 4x^2 e^{-ax^2} = \left[-2a + 4a^2x^2 - 4x^2\right] e^{-ax^2}$$

2. *a)* De två fallen, med koordinatsystemet placerat i masscentrum respektive protonkärnan, ger samma uttryck för energin, med undantaget att den reducerade massan används i det första fallet, och elektronmassan i det andra. Eftersom alla energier $E_n \propto$ massan, är förhållandet mellan de beräknade energierna detsamma för varje energi E_n, och i procent blir skillnaden (med m_e elektronmassan och m_p protonmassan):

$$\Delta E_n = \frac{m_e - \mu}{m_e} \times 100 = \left(1 - \frac{m_p}{m_e + m_p}\right) \times 100 = 0{,}0544\ \%$$

   b) Använd den radiella fördelningsfunktionen för en H2s-orbital, $P(r) = r^2 R_{20}^2(r)$.

$$P(r < r_p) = \int_0^{r_p} r^2 R_{20}^2(r)dr = \int_0^{r_p} r^2 \frac{1}{8}\left(\frac{1}{a_0}\right)^3 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/a_0} dr$$

   [Korrekt uppställd integral ger 1 p.] Denna integral kan lösas t.ex. med hjälp av tabellerade integraler från P.H., men protonradien $r_p \ll a_0$ i hela intervallet, och där kan vi approximera $(2 - r/a_0) \approx 2$, samt $e^{-r/2a_0} \approx 1$. Detta ger

$$P(r < r_p) \approx \frac{1}{2a_0^3}\int_0^{r_p} r^2 dr = \frac{1}{2a_0^3}\left[\frac{r^3}{3}\right]_0^{r_p} = \frac{1}{6}\left(\frac{r_p}{a_0}\right)^3 = \frac{1}{6}\left(\frac{0{,}840 \times 10^{-15}}{0{,}529 \times 10^{-12}}\right)^3 = 6{,}7 \times 10^{-10}$$

   (Studien med protonradien finns här: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.128.052002)

6. Om fältet ligger i z-riktningen kan vi betrakta enbart dipolmomentets z-komponent, som med $|\bar{\mu}| = \mu$ blir $\mu_z = |\bar{\mu}| \cos\theta = \mu \cos\theta$. Övergångsdipolmomentet blir då

$$\mu_z^{fi} = \mu_z^{10} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} Y_{1,0}(\theta,\varphi)(\mu\cos\theta)Y_{0,0}(\theta,\varphi) sin\theta\ d\theta =$$

$$= \mu \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta\ (\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{4\pi}} sin\theta\ d\theta = \mu\frac{\sqrt{3}}{2}\int_0^{\pi} \cos^2\theta\ \sin\theta d\theta =$$

$$= \mu\frac{\sqrt{3}}{2}\left[-\frac{\cos^3\theta}{3}\right]_0^{\pi} = \mu\frac{\sqrt{3}}{2}(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}) = \frac{\mu}{\sqrt{3}}\ (\neq 0)$$