

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

Tentamen

TFYA35 Molekylfysik, TEN1

21 augusti 2020 kl. 14.00-19.00

Skrivsalar: Distanstentamen

Tentamen omfattar 6 problem som vardera kan ge 4 poäng. För godkänt krävs totalt 10 poäng *samt* minst 2 poäng på vardera uppgifterna 1-5.

Tentamen består av 2 sidor (inklusive denna).

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

Tillåtna hjälpmedel: Alla hjälpmedel är tillåtna, men **allt samarbete med andra personer under tentamen är otillåtet!**

Kursansvarig: Thomas Ederth, som finns tillgänglig på telefon 013-281247 eller 0732-025566, samt via e-post thomas.ederth@liu.se under skrivtiden.

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!

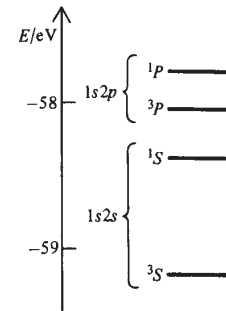
Tentamen TFYA35 Molekylfysik, TEN1, 21 augusti 2020.

1. a) Använd vågfunktioner från lösningarna till den endimensionella partikeln i lådan för att beskriva och illustrera begreppen *superposition av tillstånd* och *kollaps av vågfunktioner*. [2p]

b) Antag att väteatomen hålls samman enbart av gravitationskrafter. Vilken radie skulle väteatomen då ha i grundtillståndet? [2p]

2. Beräkna sannolikheten att hitta en H1s-elektron i det klassiskt förbjudna området.

3. a) Figuren till höger visar energierna för termerna i två exciterade konfigurationer hos heliumatomen. För vilka av dessa termer fås splittring av energinivåerna på grund av spinnban-koppling? Svaret måste motiveras! [2p]



b) Om spinnban-kopplingskonstanten är A , beräkna ändringarna i energier på grund av spinnbankopplingen för de splittrade nivåerna i a). [2p]

4. Du förbereder dig för att studera svaveldioxid med infrarödspektroskopi.

a) Rita figurer som visar utseendet hos normalmoderna hos SO_2 , och ange för var och en av dessa vilken vibrationstyp det är, samt degenerationen. [2p]

b) Skissa utseendet hos potentialerna för vibrationerna hos var och en av normalmoderna. Motivera potentialernas utseende, och rita *approximativt* några av de lägsta vibrationsnivåerna i varje potential. [2p]

5. a) En atom med totalt spinn $1/2$ har magnetiskt moment μ . En uppsättning sådana atomer placeras i ett magnetfält B . Vad är kvoten mellan antalet atomer som har spinn i samma riktning som magnetfältet, och de som har spinn motsatt riktat magnetfältet vid temperaturen T ? [2p]

b) Om $B = 10 \text{ T}$, vid vilka temperaturer kommer den högsta energinivån att ha hälften så många atomer som den lägsta, för fallen $\mu = \mu_B$ respektive $\mu = \mu_N$? [2p]

6. Ett system har Hamiltonianen

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{m}{2} (a^2 x^2 + b^2 y^2 + c^2 z^2)$$

där a, b, c är reella konstanter. Bestäm de möjliga energierna i detta system.

Lösningförslag, Tentamen TFYA35 Molekylfysik, 21 augusti 2020.

1. a) Se kurslitteraturen för exempel på detta.

b) Gravitationskraften mellan en elektron och en proton är $F = -Gm_em_p/r^2$. Om elektronen antas röra sig kring protonen ges centripetalkraften vid cirkulär rörelse av $F = -m_ev^2/r$. Vid periodisk rörelse är våglängden λ en heltalsfraktion av banans omkrets (randvillkor), så att $\lambda = 2\pi r/n$, där n är ett heltal. I grundtillståndet (lägst energi) är våglängden maximal, vilket ger $n = 1$, och med $\lambda = h/p = h/m_ev$ (de Broglie-våglängd) insatt fås

$$\frac{h}{m_ev} = 2\pi r \Rightarrow v = \frac{\hbar}{m_er} \Rightarrow v^2 = \frac{\hbar^2}{m_e^2 r^2}$$

Sätt nu krafterna ovan lika, och ersätt v^2 enligt ovan:

$$\frac{m_ev^2}{r} = G\frac{m_em_p}{r^2} \Rightarrow v^2 r = Gm_p \Rightarrow \frac{\hbar^2 r}{m_e^2 r^2} = Gm_p \Rightarrow r = \frac{\hbar^2}{Gm_e^2 m_p}$$

Med värden insatta fås $r = 1,2 \cdot 10^{29}$ m (eller t.ex. $1,3 \cdot 10^{13}$ ljusår).

2. Gränsen för det klassiskt förbjudna området fås där den potentiella energin E_p överstiger den totala energin. För H1s är E_p och energin för tillståndet, E_{H1s} kända, och genom att sätta dessa lika fås det avstånd r_c som avgränsar det klassiskt tillåtna området (större r ger potentiell energi som överstiger E_{H1s}):

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad E_{\text{H1s}} = -\frac{me^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = \left/ \begin{array}{l} n = 1 \\ Z = 1 \end{array} \right/ = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2}$$

$$E_p = E_{\text{H1s}} \Rightarrow -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c} = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \Rightarrow r_c = \frac{8\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 2a_0$$

Vågfunktionen för H1s-tillståndet är

$$\psi_{\text{H1s}} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} e^{-Zr/a_0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \quad \text{och} \quad P_{\text{H1s}} = 4\pi r^2 \psi_{\text{H1s}}^2(r)$$

Sannolikheten att hitta partikeln i det förbjudna området är

$$\begin{aligned} P &= \int_{2a_0}^{\infty} P_{\text{H1s}}(r) dr = \int_{2a_0}^{\infty} 4\pi r^2 \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} dr = \int_{2a_0}^{\infty} \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} dr = \\ & \left/ \int r^2 e^{br} dr = \frac{e^{br}}{b^3} \left[b^2 r^2 - 2br + 2 \right], \quad b = -\frac{2}{a_0} \right/ = \frac{4}{a_0^3} \frac{e^{-2r/a_0}}{(-8/a_0^3)} \left[\frac{4}{a_0^2} r^2 - 2\frac{-2}{a_0} r + 2 \right]_{2a_0}^{\infty} = \\ & = \frac{e^{-2(2a_0)/a_0}}{2} \left[\frac{4}{a_0^2} 4a_0^2 - 2\frac{-2}{a_0} 2a_0 + 2 \right] = \frac{e^{-4}}{2} [16 + 8 + 2] = 13e^{-4} = 0,238 \end{aligned}$$

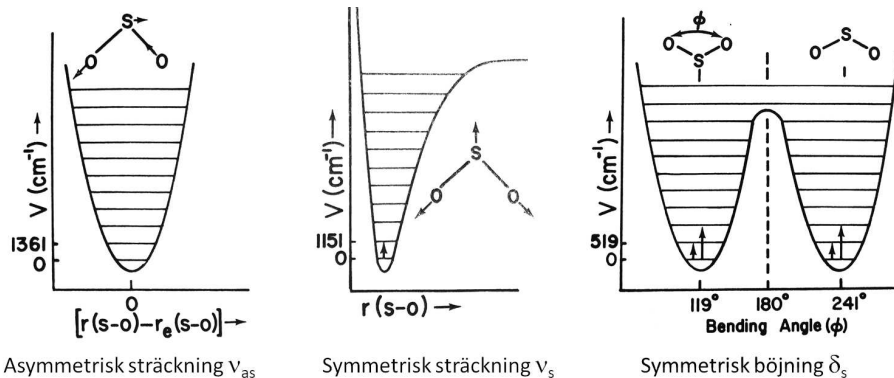
3. a) Endast ^3P -termen är splittrad. Om termerna skrivs på formen $^{2S+1}L_J$, med möjliga värden hos J : $L + S$, $L + S - 1$, ..., $|L - S|$, får vi $J = 0, 1, 2$ för ^3P , men för de övriga är antingen L eller S noll, och då kan J bara anta ett värde, och det uppstår ingen splittring av energinivåerna.

b) Spinn-bankopplingsenergin ges av

$$E_{L,S,J} = \frac{hcA}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]$$

Termen ^3P har $S = 1$ och $L = 1$, och de tre nivåerna för ^3P blir $E_{J=0} = -2hcA$, $E_{J=1} = -hcA$ och $E_{J=2} = hcA$.

4. a) Svaveldioxid är en icke-linjär molekyl, och har $3N-6 = 3$ normalmoder. Dessa är skissade i figuren nedan, där även vibrationstypen är angiven för var och en. Ingen av dem är degenererad.



b) Se potentialerna ovan. Ju lägre energi för vibrationsövergången, desto grundare potential. Böjningar har generellt lägre energi än sträckningar, och är då normalt plattare kring jämviktsläget. Observera att den asymmetriska sträckningen har en mer symmetrisk *potential* än den symmetriska sträckningen, på grund av normalmodens natur; när den asymmetriska sträckningen närmar sig jämviktsläget övergår den i en likadan sträckning åt andra hållet. För den symmetriska sträckningen finns inte samma symmetri i atomernas rörelser kring jämviktsläget. Eftersom SO_2 är en böjd molekyl (nära jämvikt) finns två identiska jämviktslägen i böjningens plan, och dubbla potentialgropar (men det är *inte* degenereration!).

5. a) Om spinnet är $1/2$ finns bara två energinivåer. Magnetisk energi $E = -\mu B$; det parallella fallet (lägre energin) ger $E_0 = -\mu B$, och det antiparallella $E_1 = +\mu B$. Det relativa antalet i ett givet tillstånd i är Boltzmannfördelat;

$$\frac{n_i}{N} = \frac{\exp(-E_i/kT)}{q}, \quad q = \sum_i \exp(-E_i/kT)$$

Kvoten mellan populationerna i tillstånden 0 och 1 blir då

$$\frac{n_0}{n_1} = \frac{\exp(-E_0/kT)}{\exp(-E_1/kT)} = \exp(-(E_0 - E_1)/kT) = \exp(2\mu B/kT)$$

(Det är givetvis tillåtet att göra en mer detaljerad beskrivning, med t.ex. $E = \pm\gamma\hbar B/2$ eller $E = \pm\mu_N g_I B/2$, varvid svaret ser lite annorlunda ut.)

b) $\mu_B =$ Bohrmagnetonen; $\mu_B = \mu_B B = 9,27 \cdot 10^{-24} \cdot 10 = 9,27 \cdot 10^{-23}$ J. Om den högre nivån skall ha hälften så många som den lägre, gäller

$$\frac{n_0}{n_1} = \frac{2}{1} = \exp\left(2 \cdot 9,27 \cdot 10^{-23}/kT\right) \Rightarrow T = 19,4\text{K}$$

För kärnmagnetonen $\mu_N = 5,05 \cdot 10^{-27}$ J/T blir resultatet 10,6 mK.

6. Hamiltonianen är separabel, och problemet kan separeras i tre oberoende lösningar i x, y och z . Potentialerna beskriver harmoniska svängningar i x, y och z , där konstanterna a, b, c är frekvenserna för svängningarna i respektive riktning, så $V(x, y, z)$ är alltså en tredimensionell harmonisk svängning. Energin för denna är summan av energierna för svängningarna i vardera riktningen:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar a \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar b \left(n_2 + \frac{1}{2}\right) + \hbar c \left(n_3 + \frac{1}{2}\right)$$

där kvanttalen $n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots$