

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

## Tentamen

**TFYA35 Molekylfysik, TEN1**

**5 januari 2023 kl. 8.00-13.00**

**Skrivsalar: E236, FE249, U6**

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: Physics Handbook (utan egna anteckningar)  
Räknedosa (med tömda minnen)

Kursansvarig: Thomas Ederth, som ca kl. 10.00 svarar på frågor i skrivsalarna, och i övrigt finns tillgänglig på ankn. 1247 eller telefon 0732-025566 under skrivtiden.

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!

## Tentamen TFYA35 Molekylfysik, TEN1, 5 januari 2023.

1. a) Om en atom har en diameter på ungefär  $2a_0$ , där  $a_0$  är Bohrradien, uppskatta osäkerheten i hastighet hos elektroner i atomen. [2p]

b) Atomer är ofta så tunga att translation hos dessa kan beskrivas klassiskt, men det beror också på utrymmet som begränsar translationen. He-atomer kan inneslutas i fulleren (s.k. "buckyballs"), med en diameter från 7 Å och uppåt; kan de då fortfarande behandlas klassiskt? För att göra en uppskattning, antag att en He-atom rör sig i en låda med längden 7 Å, betrakta energierna för He vid låga kvanttal i rumstemperatur, och ange om en klassisk beskrivning är lämplig. [2p]

2. Betrakta elektronen i väteatomens grundtillstånd, H1s.

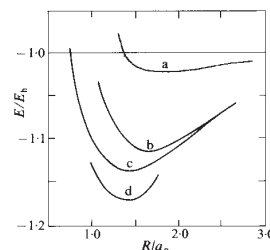
a) Använd vågfunktionen för att beräkna den mest sannolika radien. [1p]

b) Beräkna radien för det klassiska vändläget, d.v.s. den radie där hela elektronens energi har övergått i potentiell energi. [1p]

c) Beräkna sannolikheten att hitta elektronen bortom det klassiska vändläget. [2p]

3. a) En väteatom har kvanttalen  $n = 3, l = 2$ . Vilka är de möjliga värdena för det totala rörelsemängdsmomentet  $j$ , och hur stort är  $|j|$ ? [2p]

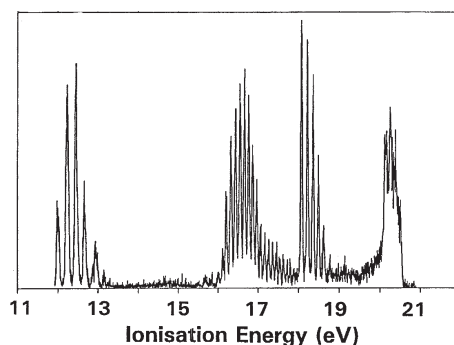
b) Figuren visar potentialkurvor för  $H_2$ . Energin är given relativt energin hos två fria väteatomer, och avståndet i Bohrradier. Tre av kurvorna visar beräknade potentialer, utgående från olika vågfunktioner. En av kurvorna visar det experimentellt observerade resultatet, förklara hur man kan se i figuren vilken av kurvorna det är. [2p]



4. a) Elektronkonfigurationen hos  $O_2$  i grundtillståndet är  $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 1\pi_u^4 1\pi_g^2$ . Bilden visar hela det fotoelektron-spektrum som fås med HeI (21.2 eV) som excitationsskälla.

Rita ett energinivådiagram för syres molekyl-orbitaler, ange vilka jonisationer respektive band i spektrumet motsvarar, och förklara de multipla topparna i varje band. [3p]

b) Vad har  $O_2$  för bindningsordning? [1p]



5.  $^{13}C$  har spinn  $I = \frac{1}{2}$ , och  $^{79}Br$  har  $I = \frac{3}{2}$ , men de har lika stora gyromagnetiska kvoter, ca  $6,7 \cdot 10^7$  (Ts) $^{-1}$ . De befinner sig i ett 10 T magnetfält vid 300 K.

a) Beräkna kvoten mellan populationerna i de två tillstånden hos  $^{13}C$ . [1p]

b) Vid vilken temperatur är antalet exciterade spinn hälften av antalet i grundtillståndet för  $^{13}C$ ? [1p]

c) Hur stor andel befinner sig i det första exciterade tillståndet för  $^{79}Br$ ? [2p]

6. Visa att varje par av degenererade exponentiella vågfunktioner för en partikel på en ring med konstant radie är ortogonala.

## Lösningförslag, Tentamen TFYA35 Molekylfysik, 5 januari 2023.

1. a) Enligt Heisenbergs osäkerhetsrelation är  $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$ , och om  $\Delta x \approx 2a_0$  betyder det att  $\Delta p \geq (\hbar/4a_0) = 5 \cdot 10^{-25}$  kgm/s. Detta ger en osäkerhet i hastighet  $\Delta v = \Delta p/m = 550\,000$  m/s.

b) För en partikel i en låda (med  $M_{\text{He}} = 6,64 \cdot 10^{-27}$  kg och  $l = 7 \text{ \AA}$ ) är energin

$$E = \frac{\hbar^2 n^2}{8ml^2} = n^2 \cdot 1,7 \cdot 10^{-23} \text{ J}$$

Enligt ekvipartitionsprincipen har heliumatomen i medeltal en termisk translationsenergi om  $kT/2$ . Vid rumstemperatur är  $kT \approx 4 \cdot 10^{-21}$  J. I detta fall är  $kT/2 \gg E$ , eller ca  $120 \times E$ , vilket vida överstiger den kvantmekaniska translationsenergin, varför det är rimligt att använda en klassisk beskrivning.

2. a) Vi söker den radie där det är störst sannolikhet att hitta elektronen (vilket *inte* är detsamma som väntevärdet av radien,  $\langle r \rangle$ ), och då skall vi bestämma vid vilken radie den radiella fördelningsfunktionen  $P(r) = r^2 R^2(r)$  har sitt maximum, d.v.s. där  $dP(r)/dr = 0$ .  $R_{10}(r)$  fås ur P.H., och

$$P(r) = r^2 R^2(r) = r^2 4 \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 e^{-2r/a_0} \Rightarrow \frac{dP(r)}{dr} = \\ = \frac{4}{a_0^3} \left[ 2r e^{-2r/a_0} - r^2 \frac{2}{a_0} e^{-2r/a_0} \right] = \frac{4}{a_0^3} 2r e^{-2r/a_0} \left[ 1 - \frac{r}{a_0} \right] = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} (r = 0) \\ r = a_0 \end{cases}$$

b) Den potentiella energin är Coulombenergi, så i det klassiska vändläget är den totala energin hos elektronen lika med Coulombenergin, så att

$$E = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon r} \Rightarrow r = \frac{e^2 8\varepsilon_0^2 \hbar^2}{4\pi\varepsilon_0 m e^2} = \frac{2\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m e^2} = 2a_0$$

c)

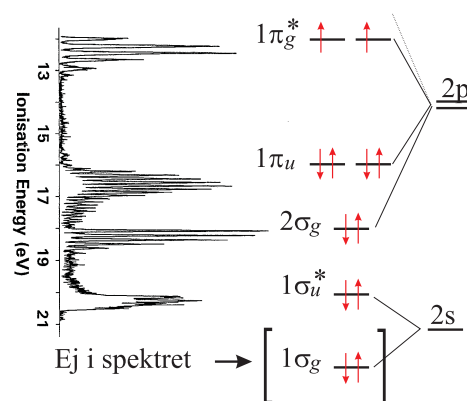
$$P(r > 2a_0) = \int_{2a_0}^{\infty} r^2 R^2(r) dr = \frac{4}{a_0^3} \int_{2a_0}^{\infty} r^2 e^{-2r/a_0} dr = - \left[ \frac{e^{-2r/a_0}}{2} \left( \frac{4r^2}{a_0^2} + \frac{4r}{a_0} + 2 \right) \right]_{2a_0}^{\infty} = 0,238$$

3. a) Huvudkvanttalet  $n$  påverkar inte  $j$ , och för den enda elektronen i en väteatom är  $j = l \pm s = 2 \pm 1/2$  vilket ger antingen  $j = 3/2$  eller  $j = 5/2$ .

$|j| = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ , vilket ger  $\sqrt{15}\hbar/2$  eller  $\sqrt{35}\hbar/2$ .

b) Variationsprincipen säger att varje approximativ vågfunktion som används (i stället för den korrekta egenfunktionen) för att beräkna energin kommer att ge ett värde på energin som är större än eller lika med det sanna värdet. Den kurva som motsvarar det experimentellt observerade resultatet måste då vara kurva "d" i figuren.

4. a) Toppar med hög jonisationsenergi svarar mot jonisation i lågt liggande molekylorbitaler. Konfigurationen anger fem MO, men bara fyra band finns i figuren, och eftersom figuren visar hela spektrumet så måste  $1\sigma_g$  ligga under 21.2 eV, och bandet längst till höger i figuren är då  $1\sigma_u$ . Identifieras kvarvarande band får man resultatet till höger.



Varje band är "taggigt" på grund av att molekylen exciteras till olika vibrations-tillstånd, och inom respektive band svarar toppen med lägst jonisationsenergi mot en övergång till vibrationsgrundtillståndet i  $O_2^+$ , och ökande jonisationsenergi innebär sedan övergångar till allt högre vibrationstillstånd.

b) Bindningsordningen  $n$  är  $\frac{1}{2}[\text{antal } e^- \text{ i bindande orbitaler} - \text{antal } e^- \text{ i antibindande orbitaler}]$ , vilket ger  $n = 2$  för  $O_2$ .

5. a) Energiskillnaden mellan två närliggande nivåer är  $\Delta E = \gamma \hbar B_0$ , där  $\gamma$  är den gyromagnetiska kvoten. Kvoten mellan populationerna i de två tillstånden är

$$\frac{n_1}{n_0} = \frac{e^{-\varepsilon_1/kT}}{e^{-\varepsilon_0/kT}} = \frac{e^{-\varepsilon_1/kT}}{e^{-\varepsilon_0/kT}} = e^{-\varepsilon_1/kT} = e^{-\gamma \hbar B_0/kT} = 0,999983$$

b) Vi söker en temperatur  $T$  sådan att  $n_1 = n_0/2$ ;

$$\frac{(n_0/2)}{n_0} = e^{-\varepsilon_1/kT} \Rightarrow \ln \frac{1}{2} = -\frac{\gamma \hbar B_0}{kT} \Rightarrow T = 7,4 \text{ mK}$$

c)  $^{79}\text{Br}$  med  $I = \frac{3}{2}$  har fyra möjliga tillstånd, med möjliga värden på  $M_I = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ . Partitionsfunktionen ges av

$$q = \sum_{i=0}^3 e^{-\varepsilon_i/kT} = 1 + e^{-\gamma \hbar B_0/kT} + e^{-2\gamma \hbar B_0/kT} + e^{-3\gamma \hbar B_0/kT} = 1 + 0,999983 + 0,999966 + 0,999949 = 3,99989$$

Andelen i det första exciterade tillståndet ges av

$$p_1 = \frac{e^{-\varepsilon_1/kT}}{q} = \frac{e^{-\gamma \hbar B_0/kT}}{q} = 0,2500021$$

D.v.s. i detta tillstånd finns (lite, lite mer än) en fjärdedel av partiklarna.

6. Ett par av sådana vågfunktioner är t.ex.  $\psi_+ = Ne^{im_l\phi}$  och  $\psi_- = Ne^{-im_l\phi}$ , där  $m_l$  är något heltal. Om de är ortogonala gäller att  $\int \psi_+^* \psi_- d\tau = 0$ :

$$\int_0^{2\pi} \psi_+^* \psi_- d\phi = \int_0^{2\pi} N^2 e^{-2im_l\phi} d\phi = -\frac{N^2}{2im_l} [e^{-2im_l\phi}]_0^{2\pi} = -\frac{N^2}{2im_l} [e^{-4\pi im_l} - 1] = 0$$

eftersom  $e^{-4\pi im_l} = 1$  för varje heltal  $m_l$ .