Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Ola Hunderi
Tlf.: 93411

EKSAMEN I FAG SIF4065 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK
Fakultet for naturvitenskap og teknologi
3. desember 2002
Tid: 0900 – 1400
Bokmål

Tillatte hjelpemidler : C - Typegodkjent kalkulator, med tomt minne
Rottmann: Matematisk formelsamling (alle utgaver)
Barnet & Cronin: Mathematical Formulae
O. Øgrim og B. Ebbe Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk

Sensuren faller i uke 1

Oppgave 1

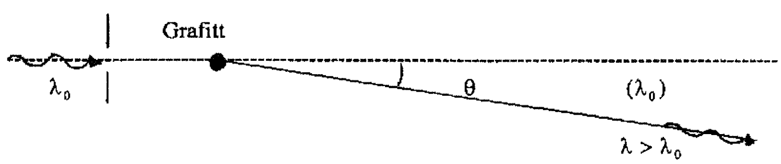


Fig. 1. Comptonspredning.

Fig. 1 illustrerer spredning av røntgenstråling på elektroner: Monokromatisk stråling med bølgelengde λ_0 sendes inn mot eksempelvis et stykke grafitt. Den spredte strålingen som observeres i en bestemt retning gitt ved vinkelen θ viser seg å inneholde, *i tillegg til bølgelengden* λ_0 som i primærstrålen, en bølgelengde $\lambda > \lambda_0$ som avhenger av spredningsvinkelen θ (og som utgjøre den såkalte Comptonspredningen).

Compton forklarte denne observerbare bølgelengdeforskyvningen,

$$\Delta\lambda \equiv \lambda - \lambda_0, \qquad (1.$$

ved å anta at

(i) røntgenstrålingen med bølgelengde λ_0 var en strøm av fotoner med impuls

$$p_0 = h/\lambda_0 \quad (1.2)$$

og energi

$$E_0 = cp_0 = hc/\lambda_0 \tag{1.3}$$

(ii) spredningen skyldes *elastiske* støt/kollisjoner mellom fotoner og *fri* elektroner (i ro i grafitt-prøven før støtet).

Oppgitt: Et elektron med hvilemasse m_e og impuls $\vec{p}_e$ har totalenergi E_e gitt ved relasjonen

$$E_e^2 = c^2 p_e^2 + m_e^2 c^4, \tag{1.4}$$

der c er lysfarten.

a) Lag tegninger som illustrerer den aktuelle støtprosessen (*før* og *etter*), og angi her videre på en tydelig måte hvilke betegnelser du bruker for partiklenes impuls og energi (i tillegg til det som allerede er angitt ovenfor).

Sett opp relasjonene som uttrykker bevaring (konservering) av *relativistisk* impuls og energi.

b) Comptonforskyvningen $\Delta\lambda$ er gitt ved formelen

$$\Delta\lambda = \lambda_c\,(1 - \cos\theta), \tag{1.5}$$

der λ_c kalles Comptonbølgelengden for elektronet. Utled denne formelen for $\Delta\lambda$ og angi eksplisitt uttrykket for λ_c. Beregn λ_c numerisk ut fra kjennskap til følgende data:

$$m_e c^2 = 0.511\,MeV, \quad hc = 1.24 \cdot 10^4 (eV)\text{Å}. \tag{1.6}$$

Oppgave 2

En partikkel med masse *m* befinner seg i et éndimensjonalt potensialfelt *U*(*x*). Potensial funksjonen *U*(*x*) er *symmetrisk i x*, og det gjelder videre at

$$U(x=0) = -U_0\,; \quad U_0 = \frac{2\hbar^2}{ma^2}, \tag{2.1}$$

der *a* er en fast og reell parameter. Den tidsuavhengige Schrödingerligningen for systemet har formen

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \tag{2.2}$$

der

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x) \tag{2.3}$$

er Hamiltonoperatoren og E står for energiegenverdien hørende til egenfunksjonen $\psi(x)$. I en bestemt stasjonær tilstand er bølgefunksjonen gitt på følgende måte:

$$\psi(x) = \frac{N}{(x^2 + a^2)^2}\ , \tag{2.4}$$

der N er en normeringskonstant.

a) Bestem potensialfunksjonen $U(x)$ og den tilhørende energiegenverdien E.

b) Lag en skisse av $U(x)$. Bestem de såkalte *klassiske vendepunktene* for en partikkel med energien E funnet i pkt.a), og merk av disse punktene på skissen.

c) Bestem, med minst mulig regning/beregninger, forventningsverdiene $<x>$ og $<p_x>$ i tilstanden $\psi(x)$ gitt i (1.4).

d) Det kan vises at vi har

$$<x^2> = \frac{a^2}{5} \qquad \text{og} \qquad <p_x{}^2> = \frac{7\hbar^2}{5a^2}\ . \tag{2.5}$$

Bruk dette sammen med resultatene i pkt.c) til å finne usikkerhetene Δx og Δp_x, og angi deretter produktet $\Delta x\,\Delta p_x$. Gi en kort kommentar til resultatet.

Oppgave 3

Vi skal her se på en partikkel med masse m i et sentralfelt U(r). Den tidsuavhengige Schrödingerligningen er da

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right\}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \tag{3.1}$$

og denne kan løses ved å innføre kulekoordinater (r,θ,ϕ) og bruke metoden med separasjon av de variable.

Oppgitt:

(i) For et sentralfelt kan bølgefunksjonen $(\vec{r},\theta,\phi)$ skrives på formen

$$\psi(r) = R(r)Y_l^{m_l}(\theta,\phi), \tag{3.2}$$

der $Y_\ell^{m_\ell}$ er egenfunksjoner for dreieimpulsoperatorene $\hat{L}^2$og $\hat{L}_z$ slik at

$$\hat{L}^2 Y_\ell^{m_\ell} = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_\ell^{m_\ell}, \qquad \hat{L}_z Y_\ell^{m_\ell} = m_\ell \hbar Y_\ell^{m_\ell}. \tag{3.3}$$

Funksjonene $Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\phi)$ antas her kjent for alle mulige verdier av ℓ og m_ℓ, og det forutsettes videre at disse funksjonene er normert separat i vinkelrommet.

(ii) Vi har operatorrelasjonen

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}, \tag{3.4}$$

og i kulekoordinater gjelder videre at

$$d^3\vec{r} = r^2 dr d\Omega = r^2 dr\, \sin\theta d\theta d\phi. \tag{3.5}$$

a) Dersom $\psi(\vec{r})$ angitt i (3.2) skal være en løsning av Schrödingerligningen i (3.1) må radialfunksjonen R(r) generelt oppfylle ligningen

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}U(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}\right\}R(r) = 0. \tag{3.6}$$

Vis dette, og angi videre hvilke verdier kvantetallene ℓ og m_ℓ kan anta. Skriv opp normeringsbetingelsen for bølgefunksjonen $\psi(\vec{r})$ i (3.2), og forklar kort hva det betyr at funksjonene $Y_\ell^{m_\ell}(\theta,\phi)$ er normert separat i vinkelrommet [se (i) foran]. Påvis ut fra dette at $R(r)$ må tilfredsstille betingelsen

$$\int_0^\infty dr\, r^2 |R(r)|^2 = 1. \tag{3.7}$$

b) En partikkel innestengt i en kule med radius r_0(en såkalt kvanteprikk) svarer til bevegelse i et sentralfelt der potensialet U(r) er gitt som

$$U(r) = \left\{\begin{matrix} 0 & for & 0 \le r \le r_0, \\ \infty & for & r \ge r_0. \end{matrix}\right\} \tag{3.8}$$

Vis med utgangspunkt i (3.6) at funksjonen

$$g(r) \equiv rR(r) \tag{3.9}$$

må tilfredsstille følgende ligning for *punkter inne i kulen:*

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}g(r) = 0. \tag{3.10}$$

der vi har innført

$$k \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \qquad\qquad (E \geq 0 \text{ forutsatt}). \tag{3.11}$$

Det kan vises at for å oppnå fysisk akseptable løsninger så må g(r) bestemt ved (3.10) forsvinne i sentrum av kulen, dvs. at g(r) generelt må tilfredsstille betingelsen

$$g(r = 0) = 0. \tag{3.12}$$

Begrunn kort hvorfor funksjonen g(r) generelt også må tilfredsstille betingelsen

$$g(r = r_0) = 0. \tag{3.13}$$

c) Fra (3.10) ser vi at løsningen for g(r) vil avhenge av kvantetallet ℓ . Skriv opp den alminnelige løsningen, $g_0(r)$, av denne ligningen for tilfellet ℓ =0, og vis ut fra betingelsene i (3.12) og (3.13) at vi bare har akseptable løsninger for bestemte, diskrete verdier av energien E. Finn en formel for de tillatte energiverdiene, E_n, og vis at de tilhørende løsningene $g_{0,n}(r)$ for $0 \leq r \leq r_0$ har formen

$$g(r) = N_{0,N}\, sin\left(n\pi \frac{r}{r_0}\right), \qquad\qquad n = 1, 2, 3, ... \tag{3.14}$$

Bestem til slutt normeringskonstanten $N_{0,n}$.

d) Energiene i punkt c) avhenger av størrelsen på den kuleformede partikkelen. Det betyr at partiklene inne i kulen utøver et trykk på overflaten av kulen. Dette trykket kan beregnes ved å ta utgangspunkt i et uttrykk av formen dE=F·dr. Beregn trykket som utøves i en partikkel der bare grunntilstanden er besatt.

Oppgave 4

a) Forklar hvorfor Lennard-Jones potensialet er et realistisk potensial for å beskrive vekselvirkningen mellom atomene i et Ar_2-molekyl.

Bestem krumningen av Lennard-Jones potensialet for likevektsavstanden i Ar_2-molekylet, og bruk harmonisk oscillator approksimasjonen til å bestemme nullpunktsenergien for vibrasjoner. Sammenlign dette med minimum i Lennard-Jones potensialet og bestem dissosiasjonsenergien for Ar_2-molekylet. Relevante data er gitt nedenfor.

Oppgitt: Lennard-Jones potensialet:

$$V(R) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right] \tag{4.1}$$

med	σ(nm)	ε(eV)
Ar	0.340	$1.05 \cdot 10^{-2}$

Argon har atomvekt 39.95 og atomær masseenhet er $m_u = 1.66 \cdot 10^{-27}$ kg.

b) Avstanden mellom kjernene i et CO molekyl er $R_o = 0.113$ nm, dissosiasjonsenergien er 9.60 eV og vibrasjonsfrekvensen er $\nu_o = \frac{\omega_o}{2\pi} = 6.51 \cdot 10^{13}$Hz. Massen til karbonatomet er $1.99 \cdot 10^{-26}$ kg og oksygen $2.66 \cdot 10^{-26}$ kg. Beregn på bakgrunn av de oppgitte data

i) Energiforskjellen mellom de to laveste vibrasjonsnivåene
ii) Parametrene i Morse potensialet for CO.

Oppgitt: Morse potensialet kan skrives på formen

$$V(x) = A(e^{-2ax} - 2e^{-ax}) \tag{4.2}$$

der $x = R - R_0$.

c) For store vibrasjonsamplituder vil energinivåene ikke lenger være gitt som $E_\nu = \hbar\omega_o\left(\nu + \frac{1}{2}\right)$. For Morse potensialet er det mulig å bestemme bølgefunksjonene og de tilsvarende energinivåene analytisk. Resultatet er at energinivåene er gitt av

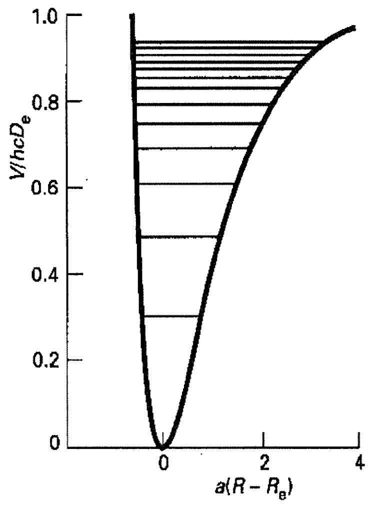
$$E_\nu = \hbar\omega_o\left(\nu + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_o x_e\left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 \tag{4.3}$$

"Fjærkonstanten" for små amplituder er da gitt av uttrykket $k = 2Aa^2$. Videre er $\omega_0 x_e = \frac{a^2\hbar}{2\mu}$ og $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$. Her er μ den effektive masse.

Oppgave: Vis at antall bundne tilstander i Morse potensialet er endelig, $\nu = 0,1,2,\cdots \nu_{max}$, der

$$\nu_{max} \le \frac{A}{\hbar\omega_0/2} - \frac{1}{2} \tag{4.5}$$

Bestem ν_{max} for parametrene i Morse potensialet beregnet i punkt b). Se også figuren under. Den viser energinivåene i et Morse potensial. R_e på figuren tilsvarer R_0 i teksten. hcD_e figuren tilsvarer A i Morse potensialet.



Oppgitte konstanter:
Elektronets masse m_e: $9.109 \cdot 10^{-31}$ kg
Elektronets ladning e: $1.602 \cdot 10^{-19}$ C
Plancks konstant $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ Js