

I. FLERVALGSOPPGAVER (Teller 2.5% \times 30 = 75%)

En fri partikkel med masse m befinner seg i det konstante potensialet $V = 0$ og beskrives av (den ikke normerbare) bølgefunksjonen

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar},$$

med $\psi(x) = \exp(ikx)$. Oppgavene 1 – 5 omhandler denne partikkelen.

1) Hva er partikkelens impuls p ?

- A) $p = k$ B) $p = \hbar k$ C) $p = k/m$ D) $p = \hbar k/m$ E) $p = \hbar^2 k^2/2m$

2) Hva er partikkelens energi E ?

- A) $E = k$ B) $E = \hbar k$ C) $E = k/m$ D) $E = \hbar k/m$ E) $E = \hbar^2 k^2/2m$

3) Hva er usikkerheten (standardavviket) Δp i partikkelens impuls?

- A) $\Delta p = 0$ B) $\Delta p = \infty$ C) $\Delta p = \hbar k$ D) $\Delta p = i\hbar k$ E) $\Delta p = \hbar k/m$

4) Hva er usikkerheten (standardavviket) Δx i partikkelens posisjon?

- A) $\Delta x = 0$ B) $\Delta x = \infty$ C) $\Delta x = 1/k$ D) $\Delta x = i/k$ E) $\Delta x = m/\hbar k$

5) Hva er sannsynlighetsstrømmen j for denne tilstanden?

- A) $j = k$ B) $j = \hbar k$ C) $j = k/m$ D) $j = \hbar k/m$ E) $j = \hbar^2 k^2/2m$

En partikkel med masse m befinner seg i potensialet $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ (dvs en endimensjonal harmonisk oscillator). Energieigenfunksjoner $\psi_n(x)$ og tilhørende energieigenverdier E_n er oppgitt i formelarket. Oppgavene 6 – 8 omhandler dette systemet.

6) Hva er det klassisk tillatte området når partikkelen befinner seg i grunntilstanden?

- A) $x = 0$ B) $|x| \geq \sqrt{m\omega/\hbar}$ C) $|x| \leq \sqrt{m\omega/\hbar}$ D) $|x| \geq \sqrt{\hbar/m\omega}$ E) $|x| \leq \sqrt{\hbar/m\omega}$

7) Anta at partikkelen befinner seg i (den normerte men ikke-stasjonære) tilstanden

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^3 c_n \psi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar),$$

med $c_0 = 1/\sqrt{2}$, $c_1 = 1/2$, $c_2 = 1/\sqrt{6}$ og $c_3 = 1/\sqrt{12}$. Hva er forventningsverdien $\langle E \rangle$ av partikkelens energi?

- A) $\langle E \rangle = 3\hbar\omega/2$ B) $\langle E \rangle = 4\hbar\omega/3$ C) $\langle E \rangle = 5\hbar\omega/4$ D) $\langle E \rangle = 6\hbar\omega/5$ E) $\langle E \rangle = 7\hbar\omega/6$

8) En måling av partikkelens energi gir som resultat $3\hbar\omega/2$. Etter energimålingen, hva er forventningsverdien $\langle E \rangle$ av partikkelens energi?

- A) $\langle E \rangle = 3\hbar\omega/2$ B) $\langle E \rangle = 4\hbar\omega/3$ C) $\langle E \rangle = 5\hbar\omega/4$ D) $\langle E \rangle = 6\hbar\omega/5$ E) $\langle E \rangle = 7\hbar\omega/6$

9) En partikkel med masse m befinner seg i bokspotensialet $V(x) = 0$ for $0 < x < L$, $V(x) = \infty$ ellers. Energieigenfunksjoner $\psi_n(x)$ og tilhørende energieigenverdier E_n er oppgitt i formelarket. Anta at partikkelen befinner seg i (den normerte men ikke-stasjonære) tilstanden

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=2}^3 c_n \psi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar),$$

med $c_2 = c_3 = 1/\sqrt{2}$. Sannsynlighetstettheten $\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$ vil da variere harmonisk med tiden. Hva er perioden T for ρ ?

- A) $T = 8mL^2/5h$ B) $T = 8mL^2/7h$ C) $T = 8mL^2/9h$
 D) $T = 8mL^2/11h$ E) $T = 8mL^2/13h$

10) Energinivåene for en partikkel med masse m i en kubisk boks med sidekanter L er

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2),$$

med positive heltallige kvantetall n_x, n_y, n_z . Hva er degenerasjonsgraden til energinivået $7\hbar^2 \pi^2 / mL^2$?

- A) 1 B) 2 C) 3 D) 6 E) 18

11) Hva er kommutatoren $[x, \hat{p}_y]$?

- A) 0 B) $i\hbar$ C) $i\hbar x$ D) $i\hbar y$ E) $i\hbar z$

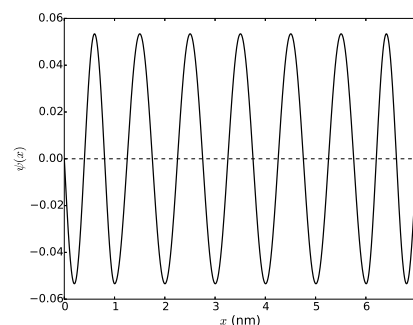
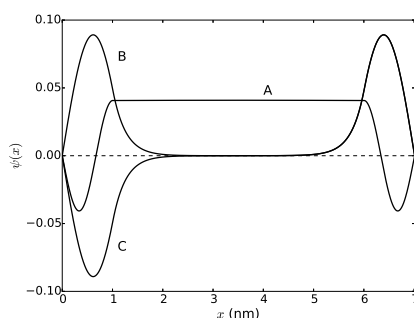
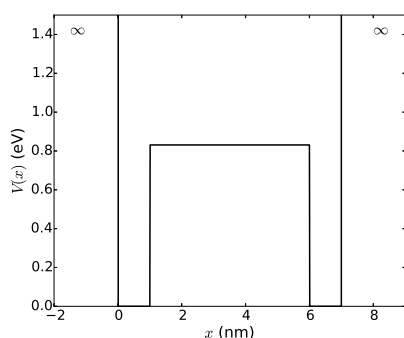
12) Hva er kommutatoren $[x, \hat{L}_y]$?

- A) 0 B) $i\hbar$ C) $i\hbar x$ D) $i\hbar y$ E) $i\hbar z$

13) Til hvilke operatører er $\psi(x, y, z) = \sin(kx + kz) \cos(ky)$ en egenfunksjon?

- A) \hat{p}_x og \hat{p}_z B) \hat{p}_y C) \hat{p}_y og \hat{H} D) \hat{H} E) Ingen av de hittil nevnte

Med moderne molekylstrålepitaksi har du produsert en lagdelt halvlederstruktur som gir opphav til et endimensjonalt potensial (figuren til venstre) $V(x) = 0$ for $0 < x < 1$ og $6 < x < 7$ nm; $V(x) = V_0 = 0.83$ eV for $1 < x < 6$ nm; $V(x) \simeq \infty$ ellers. Vi skal i oppgavene 14 – 16 se nærmere på noen energiegntilstander for et elektron i dette potensialet.



14) Figuren i midten viser tre energiegntilstander, merket A, B og C. (Den stiplede linjen angir rett og slett x -aksen.) Ranger disse tilstandene, fra lavest til høyest energi.

- A) A, B, C B) B, C, A C) C, A, B D) A, C, B E) B, A, C

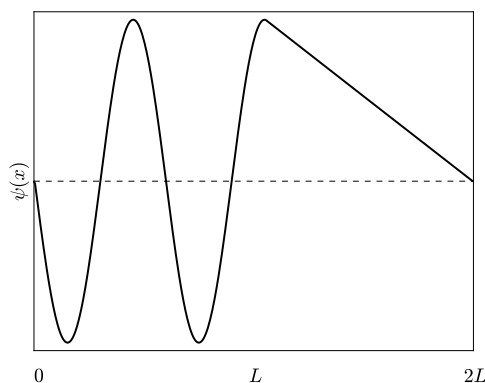
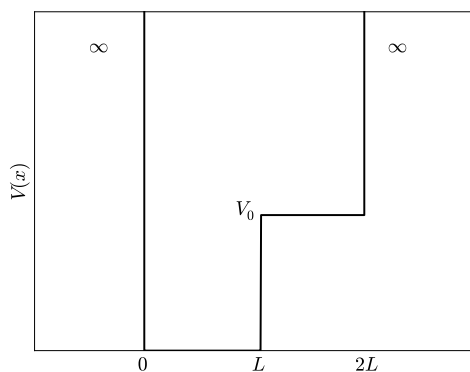
15) Hva kan du si om energien E_A i tilstand A?

- A) $E_A \ll V_0$ B) $E_A \simeq V_0/2$ C) $E_A \simeq V_0$ D) $E_A \simeq 3V_0/2$ E) $E_A \gg V_0$

16) Hva er et fornuftig estimat av energien i tilstanden i figuren til høyre?

- A) $1.2V_0$ B) $2.8V_0$ C) $5.0V_0$ D) $9.4V_0$ E) $25V_0$

I et annet eksperiment har du produsert det endimensjonale potensialet i figuren nedenfor, til venstre: $V(x) = 0$ for $0 < x < L$ og $V(x) = V_0$ for $L < x < 2L$; $V(x) \simeq \infty$ ellers. Oppgavene 17 og 18 handler om dette potensialet.



17) Hvor mange tilstander har lavere energi enn tilstanden $\psi(x)$ i figuren til høyre? (Stiplet linje angir x -aksen.)

- A) 1 B) 3 C) 5 D) 7 E) 9

18) Hva er V_0 ?

- A) $V_0 = 25\pi^2\hbar^2/27mL_0^2$ B) $V_0 = 49\pi^2\hbar^2/27mL_0^2$ C) $V_0 = 25\pi^2\hbar^2/8mL_0^2$
 D) $V_0 = 49\pi^2\hbar^2/8mL_0^2$ E) $V_0 = 25\pi^2\hbar^2/3mL_0^2$

Grunntilstanden i hydrogenatomet er $\psi_{100} = Y_{00} R_{10}$. (Se formelarket.) Oppgavene 19 – 21 dreier seg om denne tilstanden.

19) Hva er den klassiske venderadien (dvs ytre grense for det klassisk tillatte området)?

- A) 0 B) $a_0/2$ C) a_0 D) $3a_0/2$ E) $2a_0$

20) Hvor er sannsynlighetstettheten $\rho_{100} = |\psi_{100}|^2$ størst?

- A) i $r = 0$ B) i $r = a_0/2$ C) i $r = a_0$ D) i $r = 3a_0/2$ E) i $r = 2a_0$

21) Hvor er radialtettheten $\rho_{100}r^2$ størst?

- A) i $r = 0$ B) i $r = a_0/2$ C) i $r = a_0$ D) i $r = 3a_0/2$ E) i $r = 2a_0$

Den isotrope tredimensjonale harmoniske oscillatoren,

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}m\omega^2r^2 = V(r),$$

har energiegentilstander på produktform, $\psi_{n_x n_y n_z} \equiv (n_x n_y n_z) = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z)$, der $\psi_{n_x}(x)$ osv er energiegentilstander til den tilsvarende endimensjonale harmoniske oscillatoren (se formelark). Oppgavene 22 – 24 dreier seg om denne isotrope harmoniske oscillatoren.

22) Hvor mange forskjellige slike energiegentilstander $(n_x n_y n_z)$ har vi med energi $E \leq 11\hbar\omega/2$?

- A) 5 B) 15 C) 25 D) 35 E) 45

23) I hvilke posisjoner (x, y, z) er $\rho_{110} = (110)^2$ maksimal?

- A) $(\pm\sqrt{\hbar/m\omega}, \pm\sqrt{\hbar/m\omega}, 0)$ B) $(0, \pm\sqrt{\hbar/m\omega}, \pm\sqrt{\hbar/m\omega})$ C) $(\pm\sqrt{\hbar/m\omega}, 0, \pm\sqrt{\hbar/m\omega})$
 D) $(\pm\sqrt{\hbar/m\omega}, 0, 0)$ E) $(0, \pm\sqrt{\hbar/m\omega}, 0)$

24) Hva blir systemets totale energi dersom det inneholder 10 ikke-vekselvirkende elektroner? Anta lav temperatur, slik at elektronene inntar tilstander som resulterer i lavest mulig total energi. Husk at *en* romlig tilstand gir opphav til *to* ulike tilstander, siden et elektron har to mulige spinntilstander, "opp" eller "ned". Husk også Pauliprinsippet.

- A) $5\hbar\omega$ B) $10\hbar\omega$ C) $15\hbar\omega$ D) $20\hbar\omega$ E) $25\hbar\omega$

25) Ikke-vekselvirkende elektroner som avgrenses til en kvadratisk todimensjonal "boks" (flate) med sidekanter $L = 1.0 \mu\text{m}$ har mulige energinivåer $E = (n_x^2 + n_y^2)\pi^2\hbar^2/2m_eL^2$, med $n_x \geq 1$ og $n_y \geq 1$. Anta at du har en slik todimensjonal elektrongass med tetthet 10^{12} pr cm^2 . Hva er da energien E_F til elektronet med høyest energi (Fermienergien)? Anta lav temperatur, slik at elektronene inntar tilstander som resulterer i lavest mulig total energi. Husk at *en* romlig tilstand gir opphav til *to* ulike tilstander, siden et elektron har to mulige spinntilstander, "opp" eller "ned". Husk også Pauliprinsippet.

- A) $24 \mu\text{eV}$ B) 2.4 meV C) 0.24 eV D) 24 eV E) 2.4 keV

26) En klassisk stiv rotator har (kinetisk) energi $K = \mathbf{L}^2/2I$. Her er \mathbf{L} dreieimpulsen (se formelvedlegg) og $I = \sum_j m_j r_j^2$ treghetsmomentet (relativt en akse gjennom massesenteret). Jodmolekylet I_2 har bindingslengde $d = 0.27 \text{ nm}$ og masse $2m_{\text{I}} = 253.8u$. Hva er energidifferansen mellom laveste og nest laveste rotasjonstilstand for I_2 (når vi betrakter molekylet som en stiv rotator)?

- A) 9.0 neV B) $9.0 \mu\text{eV}$ C) 9.0 meV D) 9.0 eV E) 9.0 keV

27) Vekselvirkningen mellom de to atomene i jodmolekylet beskrives brukbart med Morse-potensialet

$$V_M(x) = V_0 \left(1 - e^{-\kappa(x-d)}\right)^2.$$

Her angir x avstanden mellom de to atomene, mens V_0 , κ og d (bindingslengden) er parametre som kan tilpasses eksperimentelle målinger eller nøyaktige beregninger. For jodmolekylet gir verdiene $V_0 = 1.7$ eV og $\kappa = 17.1$ nm⁻¹ brukbare resultater. Hva gir denne modellen for energidifferansen mellom jodmolekylets vibrasjonstilstander, $\Delta E = \hbar\omega$? (Tips: Anta små utsving fra likevekt og et tilnærmet harmonisk potensial. Når $|x| \ll 1$ er $\exp(x) \simeq 1 + x$.)

- A) 26 neV B) 26 μ eV C) 26 meV D) 26 eV E) 26 keV

En kjemisk reaksjon kan modelleres med energifunksjonen

$$E(x) = E_0 \left(\frac{1}{2}x^4 - x^3 - x^2\right).$$

Her er $E_0 = 3.2$ eV, mens x er en dimensjonsløs reaksjonskoordinat. Anta at reaksjonen starter i et lokalt energiminimum og går via en transisjonstilstand (dvs et lokalt energimaksimum) til et globalt energiminimum. Oppgavene 28 – 30 dreier seg om denne reaksjonsmodellen.

28) Hva er verdien av x i reaksjonens transisjonstilstand?

- A) $x_{\text{TS}} = 0$ B) $x_{\text{TS}} = 1$ C) $x_{\text{TS}} = 2$ D) $x_{\text{TS}} = 3$ E) $x_{\text{TS}} = 4$

29) Hva er reaksjonens aktiveringsenergi? (Dvs, forskjellen mellom transisjonstilstandens energi og energien i begynnelsestilstanden.)

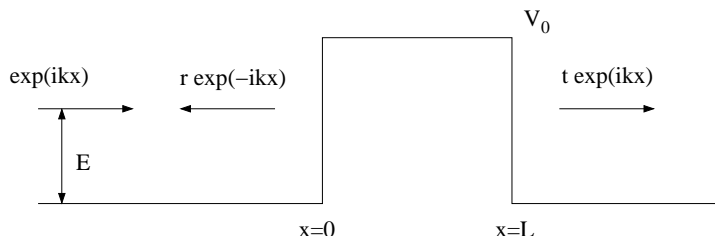
- A) 0.1 eV B) 0.3 eV C) 0.5 eV D) 0.7 eV E) 0.9 eV

30) Hvor mye energi frigjøres (som varme) i reaksjonen? (Dvs, hva er energiforskjellen mellom begynnelses- og slutt-tilstanden?)

- A) 4.5 eV B) 6.5 eV C) 8.5 eV D) 10.5 eV E) 12.5 eV

II. ENDIMENSJONAL SPREDNING (Teller 25%)

Potensialbarrieren i figuren nedenfor, med høyde V_0 og bredde L , kan realiseres i en lagdelt halvlederstruktur.



Vi ser på en stasjonær situasjon, der sannsynlighetsstrømmen ikke endrer seg med tiden. Et elektron kommer inn fra venstre med veldefinert impuls og beskrives med den plane bølgen $\psi_i(x) = \exp(ikx)$. Når elektronet treffer barrieren, er det en viss sannsynlighet for at det reflekteres og en (resterende) sannsynlighet for at det transmitteres. Vi antar elastiske kollisjoner, slik at et reflektert elektron kan beskrives med $\psi_r(x) = r \exp(-ikx)$ mens et transmittert elektron kan beskrives med $\psi_t(x) = t \exp(ikx)$.

- a) Vis at den totale bølgefunksjonen, $\psi_i(x) + \psi_r(x)$ i området $x < 0$ og $\psi_t(x)$ i området $x > L$, er en egenfunksjon til Hamiltonoperatoren $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$, og bestem på den måten elektronets energi $E(k)$.
- b) Finn generelle uttrykk for bølgefunksjonen $\psi_b(x)$ i barriereområdet $0 < x < L$, (i) for $E > V_0$ og (ii) for $E < V_0$. (NB: Vi er ute etter hva slags matematiske funksjoner som inngår i bølgefunksjonen. Du trenger ikke å regne ut de ubestemte integrasjonskonstantene i $\psi_b(x)$.)
- c) Finn uttrykk for sannsynlighetsstrømmene assosiert med innkommende, reflektert og transmittert bølge, henholdsvis j_i , j_r og j_t . Hva er da den fysiske betydningen av r og t ?
- d) Problemet inneholder fire ubestemte størrelser, r , t og de to integrasjonskonstantene i $\psi_b(x)$ – disse kan vi kalle a og b . Hvilke (fire) grensebetingelser benyttes til å fastlegge r , t , a og b ?
- e) Hvis $E \geq V_0$, er transmisjonssannsynligheten

$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right)^2 \sin^2 qL \right]^{-1}.$$

Her er $q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ og $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

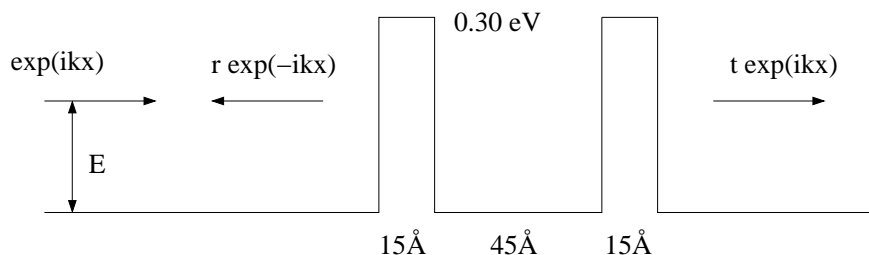
- Hva er verdien av T når $E = V_0$?
- For bestemte verdier av E er $T = 1$. Hva er da elektronets bølgelengde i barriereområdet?
- Hvis $E \gg V_0$, bør T bli den samme med kvantemekanikk som med klassisk mekanikk (den såkalte klassiske grensen). Sjekk om dette er tilfelle her.

f) Hvis $E < V_0$, er transmisjonssannsynligheten

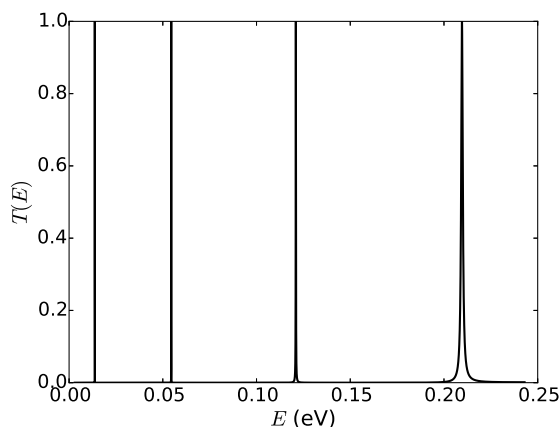
$$T = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k} \right)^2 \sinh^2 \kappa L \right]^{-1}.$$

Her er $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ og $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

- Når $E \ll V_0$ og $\kappa L \gg 1$, blir $T \ll 1$, og T avtar eksponensielt med barrieretykkelsen L , dvs $T \sim \exp(-L/\xi)$. Vis dette, og finn et uttrykk for "inntrengningsdybden" ξ .
 - Hvis vi lar $L \rightarrow 0$ og $V_0 \rightarrow \infty$, på en slik måte at produktet $\beta = V_0 L$ er endelig (dvs verken null eller uendelig), får vi en såkalt δ -funksjonsbarriere, $V(x) = \beta \delta(x)$. Vis at uttrykket for T ovenfor reduserer seg til $T = (1 + E_\delta/E)^{-1}$ i denne grensen, og bestem dermed størrelsen E_δ .
- g) Potensialet i figuren nedenfor består av to barrierer med høyde 0.30 eV og bredde 15 Å, adskilt av en "brønn" med bredde 45 Å der $V = 0$ (som til høyre og venstre for "dobbelbarrieren").



Transmisjonssannsynligheten $T(E)$ for dette systemet ser slik ut, for innkommende elektroner med energi E mellom 0 og 0.25 eV:



Med andre ord, potensialbarriere nummer to sørger for at elektroner med bestemte energier (her, ca 0.014, 0.055, 0.12 og 0.21 eV) *helt sikkert* vil transmitteres!

- Regn ut elektronets bølgelengde ved disse fire energiene.
- Sammenlign med det du fant under 2. kulepunkt i oppgave e), og diskuter resultatene i lys av fenomener som resonans, interferens og stående bølger.