

OPPGAVER MED LØSNINGSFORSLAG

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) $p = \hbar^2 k^2/2m$

B: Siden $\hat{p} \exp(ikx) = (\hbar/i)d \exp(ikx)/dx = \hbar k \exp(ikx)$, er $p = \hbar k$.

2) Hva er partikkelens energi E ?

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

E: $\hat{H} \exp(ikx) = (-\hbar^2/2m)d^2 \exp(ikx)/dx^2 = \hbar^2 k^2/2m$.

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) $\Delta p = \hbar k/m$

A: Skarpt definert impuls betyr at $\Delta p = 0$.

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) $\Delta x = m/\hbar k$

B: Med skarpt definert impuls p blir x fullstendig ubestemt.

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) $j = \hbar^2 k^2/2m$

D: Fra formelarket har vi

$$j = \text{Re} \left[\Psi^* \left(\frac{\hbar}{mi} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi \right].$$

Tidsavhengige faktorer faller bort, og vi står igjen med

$$j = \text{Re} \left[\exp(-ikx) \frac{\hbar}{mi} (ik) \exp(ikx) \right] = \hbar k/m.$$

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) $|x| \leq \sqrt{\hbar/m\omega}$

E: I det klassisk tillatte området er $E \geq V$, og i grunntilstanden er $E = \hbar\omega/2$. Dermed: $\hbar\omega/2 \geq m\omega^2 x^2/2$, som gir $|x| \leq \sqrt{\hbar/m\omega}$.

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) $\langle E \rangle = 7\hbar\omega/6$

B: Absoluttkvadratet av koeffisientene c_n gir sannsynligheten for at en måling av energien skal resultere i verdien $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Dermed er

$$\langle E \rangle = (1/2) \cdot \hbar\omega/2 + (1/4) \cdot 3\hbar\omega/2 + (1/6) \cdot 5\hbar\omega/2 + (1/12) \cdot 7\hbar\omega/2 = 32\hbar\omega/24 = 4\hbar\omega/3.$$

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) $\langle E \rangle = 7\hbar\omega/6$

A: Målingen påvirker den kvantemekaniske tilstanden: Partikkelen havner i egentilstanden med energi $3\hbar\omega/2$, og etter målingen vet vi med sikkerhet at en ny måling vil gi samme verdi.

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) $T = 8mL^2/13h$

A: I $\rho(x, t)$ får vi to tidsuavhengige ledd, fra absoluttkvadratet av hver av de to stasjonære tilstandene for seg. "Kryssleddene" blir til sammen proporsjonale med faktoren $\sin((E_3 - E_2)t/\hbar)$. Her er

$$E_3 - E_2 = \frac{9\hbar^2\pi^2}{2mL^2} - \frac{4\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2},$$

slik at

$$T = 2\pi/\omega = 2\pi\hbar/(E_3 - E_2) = 4mL^2/5\pi\hbar = 8mL^2/5h.$$

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

D: Kvantetallene må være en "variant" av (123) for at kvadratsummen skal bli 14. Det er 6 mulige kombinasjoner: (123), (231), (312), (132), (213) og (321).

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

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

A: Operatoren for y -komponenten av impulsen inneholder derivert med hensyn på y , som kommuterer med x .

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

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

E: Dreieimpulsens y -komponent er $L_y = zp_x - xp_z$, dvs $\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$. Her kommuterer det siste leddet med x , men ikke det første:

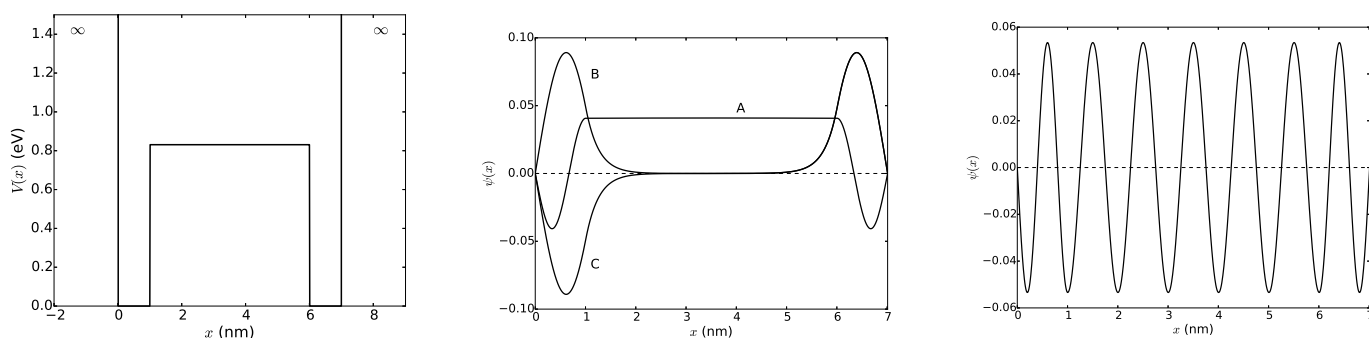
$$[x, z\hat{p}_x] = xz(\hbar/i)\partial/\partial x - (\hbar/i)\partial/\partial x(xz) = -\hbar z/i = i\hbar z.$$

13) Til hvilke operatorer 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

D: Hamiltonoperatoren inneholder ∇^2 , og her vil de tre (kartesiske) leddene i \widehat{H} påvirke ψ helt likt: trekke ut en faktor k^2 og skifte fortegn. Dermed blir $\widehat{H}\psi = (\hbar^2 k^2/2m)\psi$, som viser at ψ er en egenfunksjon til \widehat{H} . De ulike impulsoperatorene inneholder *en* partiell derivasjon og vil gjøre om sinus til cosinus, og omvendt. Dermed kan ψ ikke være egenfunksjon til noen av disse.

Med moderne molekylstråleepitaksi 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 energiegentilstander for et elektron i dette potensialet.



14) Figuren i midten viser tre energiegentilstander, 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

B: Tilstand A har to nullpunkter, tilstand C har ett nullpunkt, og tilstand B har ingen nullpunkter. Dermed B, C, A fra lavest til høyest energi. (Vi ser at B og C har omtrent overlappende sannsynlighetstetthet i hele området. Disse tilstandene har derfor nesten lik energi, men bare nesten.)

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) $E_A \gg V_0$

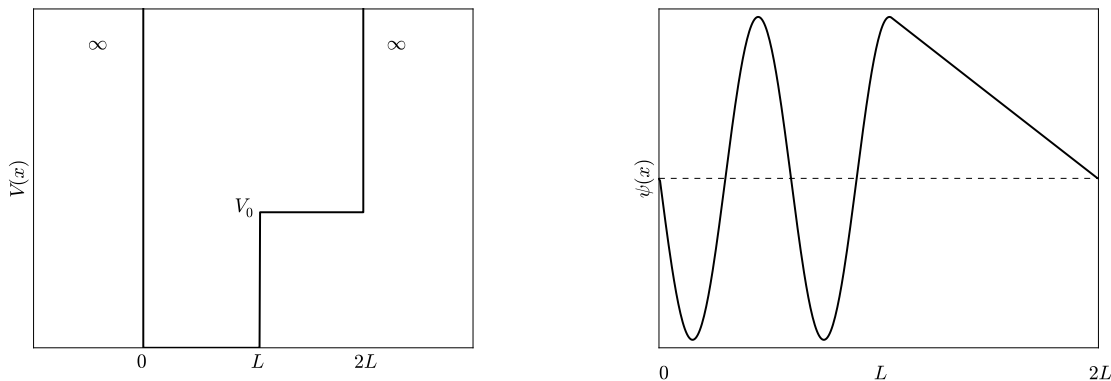
C: Tilstand A er konstant i det midterste barriereområdet, dvs at $\psi''_A = 0$ (og $\psi'_A = 0$), og dermed gir Schrödingerligningen at $E_A \simeq V_0$.

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) $25V_0$

B: Fra figuren ser vi at det er plass til ca 5 kvarte bølglengder på 1 nm der $V = 0$, mens bølglengden er ca 1 nm der $V = V_0$. Partikkelens kinetiske energi er proporsjonal med k^2 , dvs omvendt proporsjonal med λ^2 . Dermed har vi $E/(E - V_0) = 1/(4/5)^2 = 25/16$, dvs $E = 25E/16 - 25V_0/16$, dvs $9E/16 = 25V_0/16$, dvs $E = 25V_0/9 \simeq 2.8V_0$.

I et annet eksperiment har du produsert det endimensjonale potensialet i figuren 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

B: Tilstanden $\psi(x)$ har tre nullpunkter og er (i et endimensjonalt potensial som her) følgelig 3. eksiterte tilstand, dvs 3 tilstander med lavere energi.

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) $V_0 = 25\pi^2\hbar^2/3mL_0^2$

D: Siden $\psi(x)$ er (praktisk talt) lineær i området $L < x < 2L$, er $\psi''(x) = 0$ her, og energien er $E = V_0$. Vi ser videre at det går 7 kvarte bølgelengder på intervallet $0 < x < L$ for denne tilstanden. Dermed har vi $V_0 = E = \hbar^2 k^2 / 2m = \hbar^2 \cdot 4\pi^2 / 2m\lambda^2$, som med $L = 7\lambda/4$, dvs $\lambda = 4L/7$, dvs $\lambda^2 = 16L^2/49$, gir resultatet $V_0 = 49\hbar^2\pi^2/8mL^2$.

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) $2a_0$

E: Klassisk venderadius r_1 når $E_1 = V(r_1) = -e^2/4\pi\epsilon_0 r_1$. Fra formelarket har vi $E_1 = -\hbar^2/2ma_0^2$,

slik at

$$r_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{2ma_0^2}{\hbar^2} = \frac{\hbar^2}{ma_0} \cdot \frac{2ma_0^2}{\hbar^2} = 2a_0.$$

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 $r = 2a_0$

A: Siden $\psi(r) \sim \exp(-r/a_0)$, er $\rho = |\psi|^2$ maksimal i origo, $r = 0$.

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 $r = 2a_0$

C: Radialtettheten går som $r^2 \exp(-2r/a_0)$. Vi finner ut hvor denne er maksimal ved å derivere mhp r og sette lik null:

$$\frac{d}{dr} r^2 \exp(-2r/a_0) = 2r \exp(-2r/a_0) - (2r^2/a_0) \exp(-2r/a_0) = 0,$$

som gir $r = a_0$.

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

D: Vi får et bidrag $(n + 1/2)\hbar\omega$ til energien for hver av de tre dimensjonene. Total energi blir dermed $E = (N + 3/2)\hbar\omega$, med $N = n_x + n_y + n_z = 0, 1, 2, 3, \dots$. Med 3 like kvantetall (f eks (111)) er det kun 1 mulighet. Med 2 like kvantetall (f eks (110)) er det 3 muligheter. Med 3 ulike kvantetall (f eks (210)) er det 6 muligheter. Vi skal finne ut hvor mange ulike tilstander vi har for $N \leq 4$. Vi teller opp:

$N = 0$: (000).

$N = 1$: (100), (010), (001).

$N = 2$: (110), (101), (011), (200), (020), (002).

$N = 3$: (111), (210), (201), (120), (102), (012), (021), (300), (030), (003).

$N = 4$: (211), (121), (112), (310), (301), (130), (103), (031), (013), (220), (202), (022), (400), (040), (004).

I alt $1 + 3 + 6 + 10 + 15 = 35$. (Generelt, for en isotrop tredimensjonal harmonisk oscillator er degenerasjonsgraden $g_N = (N + 1)(N + 2)/2$.)

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) $(0, \pm\sqrt{\hbar/m\omega}, 0)$

A: Vi bruker formelarket og finner at

$$\rho_{110} \sim x^2 y^2 \exp(-m\omega r^2/\hbar) = x^2 \exp(-m\omega x^2/\hbar) y^2 \exp(-m\omega y^2/\hbar) \exp(-m\omega z^2/\hbar).$$

Da er det strengt tatt ikke nødvendig å regne: Vi ser umiddelbart at vi må velge $z = 0$, slik at B) og C) er utelukket. Vi innser videre at x og y må opptre likt når det gjelder maksimalpunktene, siden ρ_{110} avhenger på samme måte av x og y . Dermed er D) og E) også utelukket, og vi står igjen med alternativ A). Med regning: Sett den deriverte lik null. I to eller tre dimensjoner: Sett gradienten lik null.

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 spinn-tilstander, ”opp” eller ”ned”. Husk også Pauliprinsippet.

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

E: Lavest mulig total energi med 10 elektroner har vi når 2 elektroner okkuperer tilstanden (000) (et med spinn opp, et med spinn ned), 2 elektroner okkuperer hver av de tre tilstandene (100), (010) og (001), mens de 2 resterende elektronene okkuperer tilstander som tilsvarer $N = 2$. Total energi: $2 \cdot 3/2 + 6 \cdot 5/2 + 2 \cdot 7/2 = 3 + 15 + 7 = 25$ dvs $25\hbar\omega$.

25) Ikke-vekselvirkende elektroner som avgrenses til en kvadratisk todimensjonal ”boks” (flate) med sidekanter $L = 1.0 \mu\text{m}$ har mulige energinivåer $E = (n_x^2 + n_y^2)\pi^2\hbar^2/2m_e L^2$, 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 spinn-tilstander, ”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

B: Her har vi en flate med areal 10^{-12} m^2 , så med den oppgitte antallstettheten 10^{16} pr m^2 , betyr det at vi har 10^4 elektroner. Vi trenger da 5000 romlige tilstander (to elektroner i hver romlig tilstand, et med spinn opp og et med spinn ned). Lager vi oss et koordinatsystem med n_x og n_y langs de to aksene, innser vi at hver mulige kombinasjon av n_x og n_y , dvs hver enkelt romlige tilstand, opptar et areal lik 1 i den positive kvadranten ($n_x > 0$ og $n_y > 0$). Det betyr at vi med 10000 elektroner vil okkupere samtlige tilstander på kvartssirkelen med radius $n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$, dvs med areal $\pi n^2/4$. Med areal 1 pr romlig tilstand har vi dermed $\pi n^2/4 = 5000$. Denne verdien av n^2 tilsvarer nettopp den maksimale energien som vi er på jakt etter her: $E_F = n^2\pi^2\hbar^2/2m_e L^2$, som med $n^2 = 20000/\pi$ blir $E_F = 20000\pi \cdot (1.05 \cdot 10^{-34})^2/2 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-12} = 3.8 \cdot 10^{-22} \text{ J} = 2.4 \text{ meV}$. (Hvis en innser at maksimalverdien av $n_x^2 + n_y^2$ må være av størrelsesorden antall elektroner, eller

antall romlige tilstander, finner en raskt ut at E_F må bli noen meV.)

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 $d = 0.27$ 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 μeV C) 9.0 meV D) 9.0 eV E) 9.0 keV

B: Egenverdiene til $\hat{\mathbf{L}}^2$ er $l(l+1)\hbar^2$, $l = 0, 1, 2, \dots$. Jodmolekylets treghetsmoment er

$$I = 2m_{\text{I}}(d/2)^2 = 253.8 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \cdot (0.135 \cdot 10^{-9})^2 = 7.68 \cdot 10^{-45} \text{ kg m}^2.$$

Da blir $\Delta K = K_1 - K_0 = 2\hbar^2/2I = 1.44 \cdot 10^{-24} \text{ J} = 9.0 \mu\text{eV}$.

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 $\kappa = 17.1 \text{ nm}^{-1}$ 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 μeV C) 26 meV D) 26 eV E) 26 keV

C: Nær bunnen (ved $x = d$) er Morse-potensialet tilnærmet harmonisk:

$$V_M(x) \simeq V_0 (1 - 1 + \kappa(x - d))^2 = \kappa^2 V_0 (x - d)^2.$$

Setter vi dette lik $(1/2)m\omega^2(x - d)^2$ (der m er molekylets reduserte masse, $m = m_{\text{I}}/2$), har vi sammenhengen

$$\hbar\omega = \hbar\kappa\sqrt{2V_0/m} = 1.05 \cdot 10^{-34} \cdot 17.1 \cdot 10^9 \cdot \sqrt{2 \cdot 1.7 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} / 63.45 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27}} = 4.12 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 26 \text{ meV}.$$

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) $x_{\text{TS}} = 4$

A: De tre stasjonære punktene (dvs to energiminima samt transisjonstilstanden) finner vi ved å derivere $E(x)$ og sette lik null: $dE/dx = E_0(2x^3 - 3x^2 - 2x) = 0$, der den mest åpenbare løsningen er $x = 0$. Den andrederiverte i $x = 0$ er -2 , som betyr negativ krumning, og dermed er dette reaksjonens transisjonstilstand.

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

B: De to andre løsningene er gitt ved $2x^2 - 3x - 2 = 0$, dvs $x = -1/2$ og $x = 2$. Vi har $E''(x) = E_0(6x^2 - 6x - 2)$, og innsetting av disse to løsningene gir begge positiv verdi for E'' , med andre ord er dette energiminima. Vi finner at $E(-1/2) = -3E_0/32 = -0.3$ eV og $E(2) = -4E_0 = -12.8$ eV. Siden starttilstanden er oppgitt å være et lokalt energiminimum, må dette tilsvare $x = -1/2$, med energi -0.3 eV. Siden transisjonstilstanden har energi $E = 0$, blir aktiveringsenergien 0.3 eV.

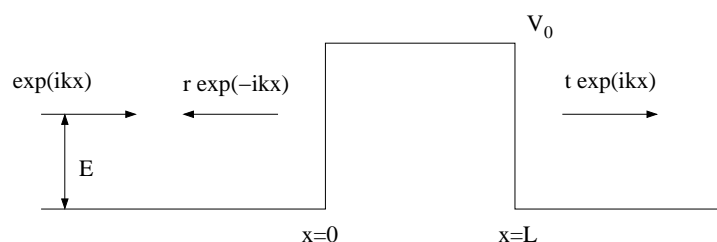
30) Hvor mye energi frigjøres (som varme) i reaksjonen? (Dvs, hva er energiforskjellen mellom begynnelses- og slutt-tilstanden?)

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

E: Frigitt energi pr reaksjon er $-0.3 - (-12.8) = 12.5$ 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 $E(k)$.

To ganger derivasjon mhp x gir i hvert tilfelle en faktor $(ik)^2 = -k^2$ og samme funksjon som vi startet med. Det viser at den gitte bølgefunksjonen er en egenfunksjon til \widehat{H} , med energieigenverdi $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$.

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 $\psi_b(x)$.)

(i): Hvis $E > V_0$, er også barriereområdet et klassisk tillatt område, med trigonometriske funksjoner som generell løsning: $\psi_b(x) = a \sin qx + b \cos qx$, med $q = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$.

(ii): Hvis $E < V_0$, er barriereområdet et klassisk forbudt område, med eksponentialfunksjoner (evt hyperbolske funksjoner) som generell løsning: $\psi_b(x) = a \exp(\kappa x) + b \exp(-\kappa x)$, med $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

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 ?

Vi bruker uttrykket for j i formelarket og finner $j_i = \hbar k/m$, $j_r = -|r|^2 \hbar k/m$ og $j_t = |t|^2 \hbar k/m$. Basert på kravet om sannsynlighetsbevarelse tolkes dermed $R = |j_r/j_i| = |r|^2$ og $T = |j_t/j_i| = |t|^2$ som sannsynligheten for henholdsvis refleksjon og transmisjon, slik at $R + T = 1$.

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 ?

Kravet om kontinuerlig ψ og $d\psi/dx$ overalt, og spesifikt i $x = 0$ og $x = L$, gir oss fire ligninger, for fastleggelse av 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.
- Med $E = V_0$ er $q = 0$ og $\sin qL = 0$, men slik at $\sin^2(qL)/q^2 = (qL)^2/q^2 = L^2$. Dermed er $T(V_0) = (1 + k^2 L^2/4)^{-1}$.

- $T = 1$ når $\sin qL = 0$ (med $q > 0$), dvs $qL = n\pi$ og $\lambda = 2\pi/q = 2\pi L/n\pi = 2L/n$. Dvs, et helt antall halve bølgelengder på barriereområdet utstrekning L . Se forøvrig oppgave g).
- Hvis $E \gg V_0$, er $q \simeq k$, og $T \simeq 1$. Det samme som med klassisk fysikk!

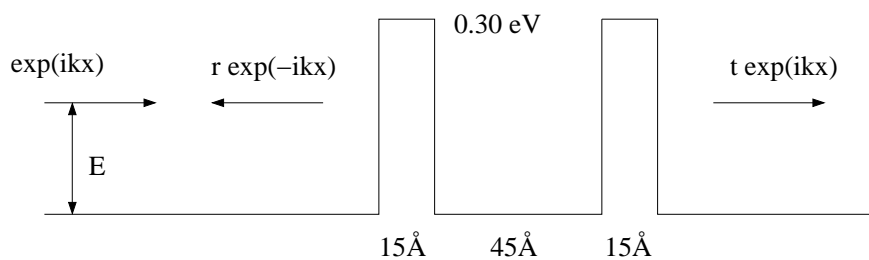
f) Hvis $E < V_0$, er transmisjonssannsynligheten

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

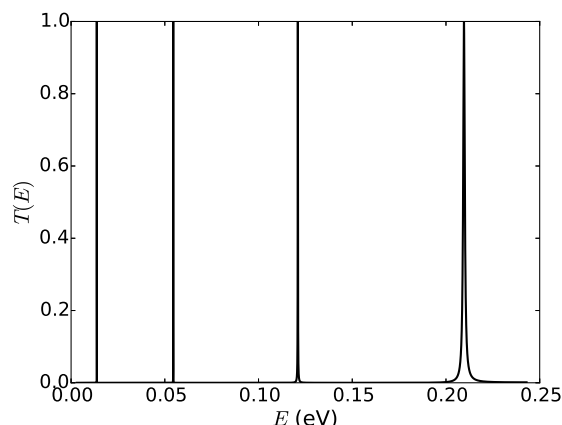
Her er $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ og $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

- 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 .
- Med $E \ll V_0$ er $k \ll \kappa$, slik at faktoren $(k/\kappa + \kappa/k)^2 \simeq \kappa^2/k^2 \gg 1$. Videre, med $\kappa L \gg 1$, er $\sinh^2 \kappa L \simeq \exp(2\kappa L)/4$. Dermed er $T \simeq (16k^2/\kappa^2) \exp(-2\kappa L)$, og inntrengningsdybden blir $\xi = 1/2\kappa$.
- I grensen $L \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow \infty$ med endelig $\beta = V_0 L$, blir $\kappa \gg k$, slik at $(k/\kappa + \kappa/k)^2 \simeq \kappa^2/k^2$, som i forrige kulepunkt. Men her vil $\kappa L \rightarrow 0$, siden $\kappa \sim \sqrt{V_0}$, med den følge at $\sinh^2 \kappa L \simeq \kappa^2 L^2$. Dermed er $T \simeq (1 + \kappa^4 L^2/4k^2)^{-1}$. Her er $\kappa^4 L^2 = (2mV_0 L/\hbar^2)^2 = (2m\beta/\hbar^2)^2$, og med $k^2 = 2mE/\hbar^2$ får vi endelig at $T = (1 + E_\delta/E)^{-1}$, med $E_\delta = m\beta^2/2\hbar^2$.

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.
- De fire bølgelengdene som tilsvarer de oppgitte energiene er 103, 52, 35 og 27 Å.
- Dette er litt mer enn det som tilsvarer stående bølger inne mellom de to barrierene, på brønnbredden 45 Å, hhv 90, 45, 30 og 22.5 Å, dvs med 1/2, 2/2, 3/2 og 4/2 bølgelengder på brønnens bredde.

Diskusjon: Både her og i 2. kulepunkt i oppgave e) ser det ut til at elektronet interfererer med seg selv på en slik måte at det oppstår destruktiv interferens i bakoverretning og konstruktiv interferens i foroverretning. Det er rimelig at dette inntreffer når partikkelens bølgelengde tillater stående bølger, over enkeltbarrierens utstrekning L i oppgave e) og over brønnens utstrekning på 45 Å i denne oppgaven. Med slike bølgelengder kan vi se for oss bølger som reflekteres gjentatte ganger ved endene av nevnte områder før de til slutt slipper ut den ene eller andre veien, og da med en fase som gir utsløkning bakover ($R = 0$) og forsterkning framover ($T = 1$). Vi kan betrakte dette som en endimensjonal variant av retningsavhengig interferens når en bølge passerer en dobbeltspalte eller et diffraksjonsgitter.