

FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU. Våren 2015.
Løsningsforslag til øving 1.

Oppgave 1: Interferens med C₆₀-molekyler

a) C₆₀-molekyler, såkalte buckyballs, har form som en fotball, med karbonatomer i alle hjørnene av overflatens femkanter og sekskanter. I eksperimentene sublimerer materialet i en keramisk ovn ved temperatur 900 K. Hva betyr det at stoffet *sublimerer*?

Sublimasjon betyr at stoffet gjennomgår en faseovergang direkte fra fast stoff til gass. Dette skjer så lenge partialtrykket av stoffet i den omgivende atmosfæren er mindre enn trykket som tilsvarer stoffets trippelpunkt.

b) Bestem massen til ett slik molekyl. Avstanden mellom to nærmeste nabo karbonatomer, dvs *bindingslengden*, er ca 1.4 Å. Bruk dette til å anslå molekylets diameter. (Tips: Ikke foreta omstendelige geometriske utregninger; et estimat holder. Men ta med i betraktningen at "elektronskyen" rundt atomene bidrar med ca en hel bindingslengde på utsiden, slik at ca 3 Å må legges til det du får ved å måle avstanden mellom to diametralt motsatt plasserte atomer.)

Massen til 1 karbonatom er ca 12 u, der 1 u er ca $1.66 \cdot 10^{-27}$ kg. En buckyball har da masse $60 \cdot 12 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27}$ kg $\simeq 1.2 \cdot 10^{-24}$ kg.

Inspeksjon av en fotball eller et bilde av en fotball eller en buckyball på nett viser at det går ca 5 bindingslengder på lengden mellom diametralt motsatte atomer. Med bindingslengde 1.4 Å er dette ca 7 Å. Et tillegg på 3 Å for elektronskyen på utsiden gir en diameter omkring 1 nm.

c) Uten hastighetsfiltrering kommer de fleste av molekylerne ut av ovnen med hastigheter mellom 100 og 400 m/s, og med middelhastighet ca 200 m/s. Med et mekanisk hastighetsfilter og kollimatorer (en innretning med forholdsvis smale åpninger; se Fig. 3 i artikkelen) oppnår man en tynn stråle med molekyler med smal hastighetsfordeling omkring 117 m/s. Hva er impulsen til et molekyl med hastighet 117 m/s? Hva er kinetisk energi? Bruk svarene dine til å bestemme molekylenes bølgeegenskaper, dvs de Broglie bølgelengden $\lambda = h/p$ og den tilhørende frekvensen $\nu = E/h$.

Impuls: $p = mv = 1.2 \cdot 10^{-24} \cdot 117 = 1.4 \cdot 10^{-22}$ kg m.

Kinetisk energi: $K = mv^2/2 = 1.2 \cdot 10^{-24} \cdot 117^2/2 = 8.2 \cdot 10^{-21}$ J = 0.051 eV = 51 meV.

Bølgelengde: $\lambda = h/p = 6.626 \cdot 10^{-34}/1.4 \cdot 10^{-22} = 4.7 \cdot 10^{-12}$ m = 4.7 pm.

Frekvens: $\nu = E/h = K/h = 8.2 \cdot 10^{-21}/6.626 \cdot 10^{-34} = 1.2 \cdot 10^{13}$ Hz.

Molekylerne sendes inn mot et *diffraksjonsgitter* med spalteavstand $d = 100$ nm. Bølger som passerer gjennom et slik diffraksjonsgitter, kan interferere konstruktivt eller destruktivt, på samme vis som i dobbeltspalte-eksperimentet, som vi diskuterte på første samling. Resultatet er det samme som med to spalter: Maksimal intensitet observeres i retninger bestemt ved

$$d \sin \theta = n\lambda \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots),$$

mens minimal intensitet observeres i retninger bestemt ved

$$d \sin \theta = \left(n + \frac{1}{2}\right) \lambda.$$

Her angir θ vinkelen relativt molekylenes fartsretning før de treffer diffraksjonsgitteret (se evt side 14 i notatene).

d) Hvis bølgelengden λ er liten i forhold til spalteavstanden ("gitterkonstanten") d , blir avbøyningen θ også liten, i hvert fall for de laveste ordens interferensmaksima ($n = 1, 2, \dots$). Vis at dette er tilfelle her. Da kan beregningen av f.eks 1. ordens maksimum ($n = 1$) forenkles ved å bruke tilnærmelsen $\sin \theta \simeq \theta$. Hva blir avbøyningsvinkelen for 1. ordens maksimum i dette eksperimentet (for molekylene med hastighet 117 m/s)? Avstanden fra diffraksjonsgitteret til detektoren er 1.2 m. Hvor stor blir da avstanden mellom 0. og 1. ordens maksimum på detektoren? Angi svaret i μm . Stemmer svaret ditt med det observerte interferensmønsteret i Fig. 7 i artikkelen?

Her er $\lambda/d = 4.7 \cdot 10^{-12} / 100 \cdot 10^{-9} = 4.7 \cdot 10^{-5}$, som er mye mindre enn 1. Dermed er $\theta = \lambda/d = 4.7 \cdot 10^{-5}$ (radianer) for 1. ordens maksimum. Hvis vi kaller avstanden mellom 0. og 1. ordens maksimum på detektoren for z , har vi $\tan \theta = z/L$, med $L = 1.2$ m. Med $\theta \ll 1$ kan vi sette $\tan \theta = \theta$, slik at $z = \theta L = 4.7 \cdot 10^{-5} \cdot 1.2 = 5.7 \cdot 10^{-5}$ m = 57 μm . Dette stemmer bra med Fig. 7 i artikkelen.

e) Til slutt vil vi vurdere om det er grunnlag for å påstå at molekylene interfererer med seg selv eller ei på sin vei gjennom diffraksjonsapparatet. For å kunne si noe om dette, må vi kunne sammenligne relevante tids- eller lengdeskalaer, f.eks midlere (minste-)avstand L mellom to molekyler i strålen og diffraksjonsapparatets utstrekning, målt langs strålegangen. Sistnevnte størrelse er i artikkelen oppgitt å være ca 200 nm. Det er videre oppgitt at med middelhastighet 200 m/s er partikkelfluksen ca $3 \cdot 10^9$, målt i enheten pr kvadratcentimeter og pr sekund. (Dvs: ca 3 milliarder molekyler passerer et tverrsnitt på en kvadratcentimeter pr sekund.) Bruk tallverdiene for partikkelfluks og middelhastighet til å beregne partikkeltettheten, dvs antall molekyler pr volumenhet i strålen. Beregn deretter midlere volum pr molekyl, og vis til slutt at dette innebærer en midlere avstand mellom molekylene $L \sim 200 \mu\text{m}$. (Kommentar: Dette er ca 1000 ganger lenger enn diffraksjonsapparatets utstrekning langs strålegangen. Videre kan kreftene ("vekselvirkningen") mellom to slike molekyler i innbyrdes avstand 200 μm trygt neglisjeres. Det er derfor grunnlag for å hevde at disse knøttsmå molekylene farer gjennom apparatet som bølger og interfererer med seg selv.)

Antall molekyler pr volumenhet i strålen (med partikkelfluks I og hastighet v): $n = I/v = 3 \cdot 10^9 / 200 = 1.5 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-3}$.

Midlere volum pr molekyl: $V = 1/n = 6.7 \cdot 10^{-12} \text{ m}^3$.

Dette tilsvarer en boks med sidekanter $L = V^{1/3} = 1.9 \cdot 10^{-4} \text{ m} = 190 \mu\text{m}$.

Dette blir da omtrentlig avstand mellom "nabomolekyler" i strålen, og dette er mye lenger enn apparatets utstrekning i strålens retning. Vi må derfor konkludere med at molekylene stort sett interfererer med seg selv.

Oppgave 2: Operatorer, egenfunksjoner og egenverdier

a) Når en operator virker på en funksjon, fås vanligvis en *ny* funksjon. Hva blir f.eks resultatene om du lar operatoren $\partial/\partial x$ virke på funksjonene $\exp(-x^2)$, $\sin kx$ og $\cos kx$?

$$\begin{aligned} \frac{\partial \exp(-x^2)}{\partial x} &= -2x \exp(-x^2) \\ \frac{\partial \sin kx}{\partial x} &= k \cos kx \\ \frac{\partial \cos kx}{\partial x} &= -k \sin kx \end{aligned}$$

b) Det kan også hende at en operator anvendt på en funksjon gir som resultat samme funksjon multiplisert med en *konstant*. Funksjonen kalles da en egenfunksjon til vedkommende operator, og konstanten kalles en egenverdi til operatoren. Vis f.eks at $\exp(ikx) [= \cos kx + i \sin kx]$ er en egenfunksjon til operatoren $\hat{p}_x = (\hbar/i)\partial/\partial x$, og finn egenverdien.

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \exp(ikx)}{\partial x} = \hbar k \exp(ikx),$$

dvs vi har fått tilbake samme funksjon som vi startet med, multiplisert med en konstant, $\hbar k$. Følgelig er funksjonen $\exp(ikx)$ en egenfunksjon til operatoren $\hat{p}_x = (\hbar/i)\partial/\partial x$, og den tilhørende egenverdien er $\hbar k$.

c) Vis at funksjonen $e^{-x^2/2}$ er en egenfunksjon til operatoren

$$\hat{h} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2,$$

og bestem egenverdien.

Vi trenger den 2. deriverte av den oppgitte funksjonen:

$$\begin{aligned} \frac{d \exp(-x^2/2)}{dx} &= -x \exp(-x^2/2), \\ \frac{d^2 \exp(-x^2/2)}{dx^2} &= -\exp(-x^2/2) + x^2 \exp(-x^2/2). \end{aligned}$$

Dermed:

$$\begin{aligned} \hat{h} \exp(-x^2/2) &= \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 \right) \exp(-x^2/2) \\ &= +\frac{1}{2} \exp(-x^2/2) - \frac{x^2}{2} \exp(-x^2/2) + \frac{x^2}{2} \exp(-x^2/2) \\ &= \frac{1}{2} \exp(-x^2/2). \end{aligned}$$

Dette viser at $e^{-x^2/2}$ er egenfunksjon til operatoren $\hat{h}$, med egenverdi $1/2$.

Oppgave 3: Noen kontrollspørsmål og små oppgaver

1. Hvilken fysisk observabel (dvs: observerbar (målbar) fysisk størrelse) svarer til operatoren

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}?$$

Til operatoren $\hat{p}_x = (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ svarer x -komponenten av partikkelens impuls $\mathbf{p}$.

2. Hvilken operator $\hat{K}$ svarer til den kinetiske energien

$$K = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 = \mathbf{p}^2 / 2m?$$

Operatoren for kinetisk energi $K(\mathbf{p})$ bestemmes ved å erstatte $\mathbf{p}$ med operatoren $(\hbar/i)\nabla$ i det klassiske uttrykket for K . Dermed:

$$\hat{K} = \frac{(\hbar/i)^2 \nabla^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}.$$

3. Vis at de Broglie-bølgen $\Psi_3 = \exp[i(px - p^2 t / 2m) / \hbar]$ er en egenfunksjon til impulsoperatorene $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$ og $\hat{p}_z$ og til kinetisk-energi-operatoren $\hat{K}$, og bestem de respektive egenverdiene.

Siden Ψ_3 kun avhenger av x , og ikke av y eller z , er det klart at egenverdiene p_y og p_z begge er lik null. Derivasjon av Ψ_3 mhp x gir $ip\Psi_3/\hbar$, som multiplisert med $\hbar/i$ gir egenverdien $p_x = p$. Derivasjon to ganger

mhp x gir $-p^2\Psi_3/\hbar^2$, som multiplisert med $-\hbar^2/2m$ gir egenverdien $K = p^2/2m$.

4. Samme sak for $\Psi_4 = \exp[i(-px - p^2t/2m)/\hbar]$.

Sammenlignet med Ψ_3 så gir en gangs derivasjon samme resultat, men med motsatt fortegn, slik at her er $p_x = -p$, en plan bølge som forplanter seg i negativ x -retning (hvis $p > 0$). To gangers derivasjon gir samme resultat som med Ψ_3 , slik at K blir den samme.

5. Hvilke fysiske impulser svarer de to de Broglie-bølgene ovenfor til?

Ψ_3 svarer til fysisk impuls $\mathbf{p} = p \hat{x}$, Ψ_4 svarer til fysisk impuls $\mathbf{p} = -p \hat{x}$.

6. Vis at $\cos kx$ ikke er en egenfunksjon til $\hat{p}_x$.

Derivasjon av cosinus gir sinus, dermed kan ikke $\cos kx$ være egenfunksjon til $\hat{p}_x$.

7. Vis at Ψ_3 oppfyller den tidsavhengige Schrödingerligningen (SL) (T1.24) for en fri partikkel.

$$\frac{\partial \Psi_3}{\partial t} = -\frac{ip^2}{2m\hbar} \Psi_3$$

og

$$\nabla^2 \Psi_3 = \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi_3.$$

Dermed er

$$i\hbar \Psi_3 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Psi_3,$$

som vi skulle vise.

8. Vis at realdelen av Ψ_3 *ikke* oppfyller (T1.24).

Realdelen av Ψ_3 er en cosinus-funksjon. En gangs derivasjon mhp t gir som resultat en sinus, mens to gangers derivasjon mhp x gir som resultat en cosinus. Dermed kan realdelen av Ψ_3 umulig oppfylle SL.

9. Ifølge superposisjonsprinsippet (T1.35) er $\Psi_9 = \Psi_3 + \Psi_4$ en løsning av (T1.24), og derfor en fysisk akseptabel bølgefunksjon for en fri partikkel. Er Ψ_9 en egenfunksjon til $\widehat{K}$? Er Ψ_9 en egenfunksjon til $\hat{p}_x$? Beskriver Ψ_9 en fysisk tilstand med veldefinert impuls?

$$\begin{aligned}\widehat{K}\Psi_9 &= \frac{p^2}{2m}\Psi_9, \\ \hat{p}\Psi_9 &= p(\Psi_3 - \Psi_4).\end{aligned}$$

Med andre ord, Ψ_9 er egenfunksjon til $\widehat{K}$ (med egenverdi $p^2/2m$), men ikke egenfunksjon til $\hat{p}$ eller $\hat{p}_x$. Dermed kan Ψ_9 ikke beskrive en fysisk tilstand med veldefinert impuls.

10. Ved termisk likevekt vil atomene i en enatomig gass (ifølge det såkalte ekvipartisjonsprinsippet) ha en gjennomsnittlig energi $\frac{1}{2}k_B T$ pr frihetsgrad, dvs $\frac{3}{2}k_B T$ pr atom. Når nøytroner bremses opp i en såkalt moderator i en kjernereaktor, ender de opp som "termiske" nøytroner, i likevekt med omgivelsene, dvs med en gjennomsnittlig kinetisk energi $\frac{3}{2}k_B T$. Anta $T = 300$ K og finn den gjennomsnittlige kinetiske energien K til nøytronene i elektronvolt (eV). Regn også ut de Broglie-bølgelengden som svarer til denne kinetiske

energien K . [Svar: $\lambda = 1.46 \text{ \AA}$.]

Ved temperatur 300 K har vi $K = 3k_B T/2 = 3 \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 300/2 = 6.2 \cdot 10^{-21} \text{ J}$, dvs ca 39 meV. Med $K = p^2/2m$ og $p = h/\lambda$ har vi $\lambda = h/p = h/\sqrt{2mK} = h/\sqrt{3mk_B T} = 6.626 \cdot 10^{-34} / \sqrt{(3 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 300)} = 1.45 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1.45 \text{ \AA}$.

11. Vis at funksjonen $\psi = Ce^{ikx}$ er en egenfunksjon til impulsoperatoren $\hat{p}$ (se (T1.22)), og bestem egenverdien.

$\hat{p}\psi = (\hbar/i)\nabla\psi = (\hbar/i)(ik)\hat{x}\psi = \hbar k\hat{x}\psi$, som viser at ψ er egenfunksjon til impulsoperatoren, med egenverdi $\hbar k\hat{x}$.

12. Skriv ned (og *memorer*) den tidsavhengige Schrödingerligningen (SL) og den tidsuavhengige Schrödingerligningen (TUSL) for en partikkel med masse m som beveger seg i et tredimensjonalt potensial $V(\mathbf{r})$.

SL:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t),$$

med

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}).$$

TUSL:

$$H \Psi(\mathbf{r}, t) = E \Psi(\mathbf{r}, t).$$

13. Hva blir SL og TUSL når potensialet er endimensjonalt, $V = V(x)$? [Hint: Det klassiske uttrykket for energien er da $E = p_x^2/2m + V(x)$.]

Tilsvarende som i 12, men med $\partial^2/\partial x^2$ i stedet for ∇^2 og $V(x)$ i stedet for $V(\mathbf{r})$.

Oppgave 4: Partikkel i boks

Det siste vi gjorde på første samling var å løse den TUSL for en uendelig dyp potensialbrønn, eller ”partikkel i boks”, som vi gjerne sier. Det å løse ligningen betyr her å finne egenfunksjonene $\psi_n(x)$ som oppfyller de nødvendige grensebetingelsene, samt å bestemme de tilhørende energieigenverdiene E_n . For den endimensjonale boksen mellom $x = 0$ og $x = L$ fant vi, for $n = 1, 2, \dots$:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad , \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

a) Hvor mange nullpunkter har tilstand nr n ? (Der vi ikke teller med nullpunktene i $x = 0$ og i $x = L$.)

Grunntilstanden, $n = 1$, har ingen nullpunkter, 1. eksiterte tilstand, $n = 2$, har ett nullpunkt, osv. Dvs at tilstand n har $n - 1$ nullpunkter.

b) En funksjon $f(x)$ er *symmetrisk* omkring et punkt a dersom $f(a+x) = f(a-x)$ og *antisymmetrisk* omkring et punkt a dersom $f(a+x) = -f(a-x)$. Hva kan du si om symmetriegenskapene til egenfunksjonene $\psi_n(x)$? Hva kan du si om symmetriegenskapene til $|\psi_n(x)|^2$?

Grunntilstanden og alle eksiterte tilstander med odde n er symmetriske omkring boksens midtpunkt $x = L/2$. Tilstander med like n er antisymmetriske omkring $L/2$. Absoluttkvadratet av bølgefunksjonen er symmetrisk omkring $L/2$ for alle n .

c) Med null potensial ($V = 0$) og positive energieigenverdier ($E_n > 0$) kan vi fra TUSL umiddelbart konkludere med at forholdet mellom bølgefunksjonenes krumning, ψ_n'' , og ψ_n selv i dette problemet må ha et bestemt fortegn, for alle n . Har vi her $\psi_n''/\psi_n > 0$ eller $\psi_n''/\psi_n < 0$? Betyr dette at ψ_n krummer "inn mot" eller "bort fra" x -aksen? Sjekk konklusjonen din ved å skissere ψ_n for $n = 2$ og $n = 3$.

Her er $\psi_n''/\psi_n = -2mE_n/\hbar^2 < 0$ for alle n . Det betyr at ψ_n krummer inn mot x -aksen. Skisse: ...

d) Vis at for en partikkel i grunntilstanden ($n = 1$) er sannsynligheten ca 82% for at den befinner seg i den midtre halvdel av boksen, dvs mellom $x = L/4$ og $x = 3L/4$. (Tips: Sannsynligheten for at partikkelen befinner seg mellom x og $x + dx$ er gitt ved $|\psi_1(x)|^2 dx$.)

Vi finner den ønskede sannsynligheten ved å integrere $|\psi_1(x)|^2$ fra $L/4$ til $3L/4$:

$$\begin{aligned} P &= \int_{L/4}^{3L/4} \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx \\ &= \frac{2}{L} \cdot \frac{L}{\pi} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \sin^2 u du \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \frac{1}{2} (1 - \cos 2u) du \\ &= \frac{1}{\pi} \left[u - \frac{1}{2} \sin 2u \right]_{\pi/4}^{3\pi/4} \\ &= \frac{1}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} - \frac{1}{2} \sin(3\pi/2) + \frac{1}{2} \sin(\pi/2) \right) \\ &= \frac{1}{\pi} (\pi/2 + 1/2 + 1/2) \\ &= 1/2 + 1/\pi \\ &\simeq 0.82, \end{aligned}$$

dvs ca 82%. Her har vi substituert $u = \pi x/L$ og brukt den trigonometriske identiteten $\sin^2 u = (1 - \cos 2u)/2$.

e) Med moderne nanoteknologi er det mulig å lage virkelige systemer der partikler effektivt bare kan bevege seg i en dimensjon, og avgrenset til svært korte lengder L . Anta at et elektron befinner seg i et slik system, med lengde 5 nm. Betrakt systemet som en endimensjonal boks og bestem de tre laveste energinivåene E_1 , E_2 og E_3 . Oppgi svarene i enheten meV (millielektronvolt).

Energinivåene er

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Med $m = 9.11 \cdot 10^{-31}$ kg, $L = 5 \cdot 10^{-9}$ m og $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Js finner vi

$$E_1 = 2.39 \cdot 10^{-21} \text{ J} = 15 \text{ meV},$$

og videre $E_2 = 4E_1 = 60 \text{ meV}$ og $E_3 = 9E_1 = 150 \text{ meV}$.

Er dette små eller store energier og energiforskjeller? For å si noe om det, må vi ha noe å sammenligne med, og vi kan knytte det til vår makroskopiske verden ved å sammenligne med typisk termisk energi $k_B T$. Ved romtemperatur, ca 300 K, er $k_B T \simeq 25 \text{ meV}$. Dette er mindre enn, men av samme størrelsesorden som avstanden fra grunntilstanden til 1. eksiterte tilstand, $E_2 - E_1 = 45 \text{ meV}$. Med andre ord, denne boksen vil "oppføre seg kvantemekanisk": Selv ved romtemperatur vil elektronet befinne seg i grunntilstanden, og det er knapt nok termisk energi tilgjengelig til å eksitere elektronet opp i 1. eksiterte tilstand. Og dersom vi senker temperaturen til f.eks 77 K (som tilsvarer flytende nitrogen), vil elektronet med stor sannsynlighet befinne seg i boksens grunntilstand.

f) Beregn energiforskjellen mellom grunntilstanden og 1. eksiterte tilstand (dvs $E_2 - E_1$) dersom du – med din masse – befant deg i en endimensjonal boks med lengde $L = 1$ m.

Med $m = 70$ kg og $L = 1$ m blir $E_1 = 7.8 \cdot 10^{-70}$ J = $5 \cdot 10^{-48}$ meV. Det betyr at avstanden fra grunntilstanden til 1. eksiterte tilstand er ca 10^{-47} meV. Setter vi dette lik termisk energi $k_B T$, finner vi at det tilsvarer en temperatur $6 \cdot 10^{-47}$ K. Med andre ord: Ingen fare for at du ville merke noe til kvantisering i en slik situasjon.