

Oppgave 1: Interferens med C₆₀-molekyler

Denne oppgaven tar utgangspunkt i artikkelen *Quantum interference experiments with large molecules*, av O. Nairz, M. Arndt og A. Zeilinger (Am. J. Phys. **71**, 319-325 (2003), lagt ut på itslearning). Bruk gjerne artikkelen som støtte når du løser oppgaven.

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*?

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.)

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 $\nu = E/h$.

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 molekylerne 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?

e) Til slutt vil vi vurdere om det er grunnlag for å påstå at molekylerne 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 molekylerne $L \sim 200 \mu\text{m}$. (Kommentar: Dette er ca 1000 ganger lenger enn diffraksjonsapparaturens utstrekning langs strålegangen. Videre kan kreftene ("vekselvirkningen") mellom to slike molekyler i innbyrdes avstand $200 \mu\text{m}$ trygt neglisjeres. Det *er* derfor grunnlag for å hevde at disse knøttsmå molekylerne farer gjennom apparaturen som bølger og 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 $\cos kx$?

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.

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.

Oppgave 3: Noen kontrollspørsmål og små oppgaver

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

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

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

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

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.

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

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

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

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

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

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 $\hat{K}$? Er Ψ_9 en egenfunksjon til $\hat{p}_x$?

Beskriver Ψ_9 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: $\lambda = 1.46$ Å.]

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

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 $V(\mathbf{r})$.

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

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 $x = L$.)

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 $|\psi_n(x)|^2$?

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 $n = 3$.

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 $|\psi_1(x)|^2 dx$.)

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).

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.