Kollokvium 4
Grunnlaget for Schrödingerligningen

12. februar 2015

I dette kollokviet skal vi se litt på grunnlaget for Schrödingerligningen, og på når den er relevant. Den første oppgaven er en diskusjonsoppgave om opphavet til ligningen. I den andre oppgaven skal vi regne litt omtrentlig på i hva slags fysiske systemer kvantefysikk er viktig. Denne oppgaven finnes også som Oppgave 1.18 i Griffiths.

Oppgave 1 Diskusjonsoppgave
På kollokviumssiden finner du en artikkel av Felix Bloch som diskuterer opphavet til kvantemekanikken og Schrödingerligningen. Les artikkelen, med spesiell vekt på de første to sidene, og tenk gjennom/diskuter med de andre på kollokviet følgende:

- Hvorfor må en bølgeligning være en differensialligning i posisjon og tid?
- Hvordan tror du Schrödinger gikk frem for å lage seg en ny bølgeligning på basis av de Broglies bølger? (Hva slags ingredienser må den ha? Hva slags konstanter kan inngå? Hva må enhetene være?)
- Hva skjer med Schrödingerligningen om vi lar $m \to 0$, og hva skjer når $h \to 0$?

Oppgave 2 Når er beregninger i kvantemekanikk relevante?
Kvantemekanikk er generelt sett relevant når de Broglies bølgelengde ($\lambda = h/p$) for den partikkelen man betrakter er større enn den karakteristiske størrelsen til systemet man ser på (d). I et system i termisk likevekt ved temperaturen T (i Kelvin), er den gjennomsnittlige kinetiske energien til en partikkel gitt ved

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2}k_B T, \tag{1}$$

hvor k_B er Boltzmanns konstant. Derfor er den typiske de Broglie bølgelengden til en partikkel i systemet

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}. \tag{2}$$

Meningen med denne oppgaven er å forutsi hvilke typer systemer som må behandles med kvantemekanikk, og hvilke som trygt kan beskrives med klassisk fysikk.

a) **Faste stoffer.** Gitteravstanden mellom to atomer i et typisk fast stoff er rundt $d = 0.3$ nm. Finn temperaturen hvor de frie[1] *elektronene* i det faste stoffet blir kvantemekaniske. Under hvilken temperatur er

[1] I et fast stoff er de indre elektronene til et atom bundet til kjernen, og for disse vil den relevante størrelsen være radiusen til atomet. De ytre elektronene er ikke bundet, og for disse er den relevante avstanden gitteravstanden mellom atomene. Her er det disse siste vi vil diskutere.

kjernene i et fast stoff kvantemekaniske? (Bruk natrium som eksempel.) *Moral:* De frie elektronene i et fast stoff er *alltid* kvantemekaniske; kjernene er nesten *aldri* kvantemekaniske. Det samme er tilfelle for vesker hvor avstanden mellom atmomer er omlag den samme, med unntak av helium under 4 K.

Svar: Dersom størrelsen til systemet d skal være mindre enn bølgelengden λ, må vi ha:

$$d < \frac{h}{\sqrt{3mk_BT}}, \tag{3}$$

som løst for temperaturen T blir

$$T < \frac{h^2}{3mk_Bd^2}. \tag{4}$$

For elektroner med masse $m = 0.511$ MeV/c^2 og med Boltzmanns konstant gitt fra Kompendiet som $k_B = 8.61 \times 10^{-5}$ eV/K må vi ha en temperatur som er mindre enn

$$\begin{aligned} T &< \frac{(hc)^2}{3mc^2k_Bd^2} \\ &= \frac{(1240 \text{ nm eV})^2}{3 \cdot 0.511 \text{ MeV} \cdot 8.61 \times 10^{-5} \text{ eV/K} \cdot (0.3 \text{ nm})^2} \\ &= 130000 \text{ K} = 1.3 \times 10^5 \text{ K}. \end{aligned} \tag{5}$$

For natriumatomer er massen $m \simeq 23m_p$ hvor $m_p = 938$ MeV/c^2 er massen til et proton (protoner og nøytroner har omlag samme masse). Vi regner ganske omtrentelig her fordi vi bare er interessert i størrelsesorden av svaret. Dette betyr at vi må ha en temperatur

$$\begin{aligned} T &< \frac{(1240 \text{ nm eV})^2}{3 \cdot 23 \cdot 938 \text{ MeV} \cdot 8.61 \times 10^{-5} \text{ eV/K} \cdot (0.3 \text{ nm})^2} \\ &= 3 \text{ K}, \end{aligned} \tag{6}$$

for å se kvantemekaniske effekter.

b) **Gasser.** Ved hvilken temperatur er atomene i en idéell gass med trykk P kvantemekaniske? *Hint:* Bruk gassloven for en idéell gass ($PV = Nk_BT$) for å finne avstanden mellom to atomer i gassen. Svaret skal bli

$$T < \frac{1}{k_B}\left(\frac{h^2}{3m}\right)^{3/5} P^{2/5}. \tag{7}$$

For at gassen skal oppvise kvantemekaniske egenskaper så vil vi, naturligvis, at m skal være så liten som mulig og P så stor som mulig. Sett inn tall for helium ved én atmosfæres trykk og finn T. Er hydrogengass i det ytre rom, hvor avstanden mellom hydrogenmolekylene er omlag 1 cm og temperaturen er 3 K, kvantemekanisk?

Svar: Her må vi først finne hvor langt det er mellom gassatomene (eller mer generelt molekylene), d. Hvis vi lar hvert atom oppta et volum $V = d^3$ (en boks med sidelengder d), og $PV = Nk_BT$ gjelder for gassen, så er for et atom $N = 1$ slik at avstanden mellom atomene uttrykt ved trykket P og temperaturen T må være:

$$d = \left(\frac{k_BT}{P}\right)^{1/3}. \tag{8}$$

Med utgangspunk, som i **a)**, at

$$T < \frac{h^2}{3mk_Bd^2}, \tag{9}$$

så får vi

$$\begin{aligned} T &< \frac{h^2}{3mk_B\left(\frac{k_BT}{P}\right)^{2/3}} \\ T^{5/3} &< \frac{h^2P^{2/3}}{3mk_B^{5/3}} \\ T &< \frac{1}{k_B}\left(\frac{h^2}{3m}\right)^{3/5} P^{2/5}, \end{aligned} \tag{10}$$

som var det vi skulle vise.

For helium, som har $m = 4m_p$, og ved en atmosfæres trykk $P = 1.0 \times 10^{-13}$ N/nm^2, er da

$$\begin{aligned} T &< \frac{1}{k_B}\left(\frac{(hc)^2}{3mc^2}\right)^{3/5} P^{2/5} \\ &= \frac{1}{8.61 \times 10^{-5}\text{ eV/K}}\left(\frac{(1240\text{ nm eV})^2}{3 \cdot 4 \cdot 938\text{ MeV}}\right)^{3/5} (6.25 \times 10^{-4}\text{ eV nm}^{-3})^{2/5} \\ &= 2.9\text{ K}. \end{aligned} \tag{11}$$

Her har vi brukt at enheten Newton (for kraft) kan skrives som

$$1\text{ N} = \frac{1\text{ J}}{1\text{ m}} = \frac{1\text{ J}}{10^9\text{ nm}} = 6.25 \times 10^9\text{ eV nm}^{-1}, \tag{12}$$

slik at

$$\begin{aligned} P &= 1.0 \times 10^{-13}\text{ N nm}^{-2} \\ &= 1.0 \times 10^{-13}\text{ nm}^{-2} \cdot 6.25 \times 10^9\text{ eV nm}^{-1} \\ &= 6.25 \times 10^{-4}\text{ eV nm}^{-3}. \end{aligned} \tag{13}$$

Eventuelt kunne vi regnet denne oppgaven med SI-enheter (sukk). Merk at helium blir til en veske under 4.2 K ved en atmosfæres trykk, slik at vi egentlig ikke kan undersøke de kvantemekaniske egenskapene til heliumgass ved slike lave trykk. Flytende helium derimot oppfører seg meget besynderlig på grunn av kvantemekaniske effekter.

For hydrogengass med $m = 2m_p$ og $d = 10^7$ nm er

$$\begin{aligned} T &< \frac{(hc)^2}{3mc^2 k_B d^2} \\ &= \frac{(1240 \text{ nm eV})^2}{3 \cdot 2 \cdot 938 \text{ MeV} \cdot 8.61 \times 10^{-5} \text{ eV/K} \cdot (10^7 \text{ nm})^2} \\ &= 3.2 \times 10^{-14} \text{ K}, \end{aligned} \tag{14}$$

som vil si at gassen definitivt ikke er kvantemekanisk.