

UNIVERSITETET I OSLO

Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Eksamen i: FYS2140 Kvantefysikk

Dato: 16. august 2024, kl 9:00-13:00 (4 timer)

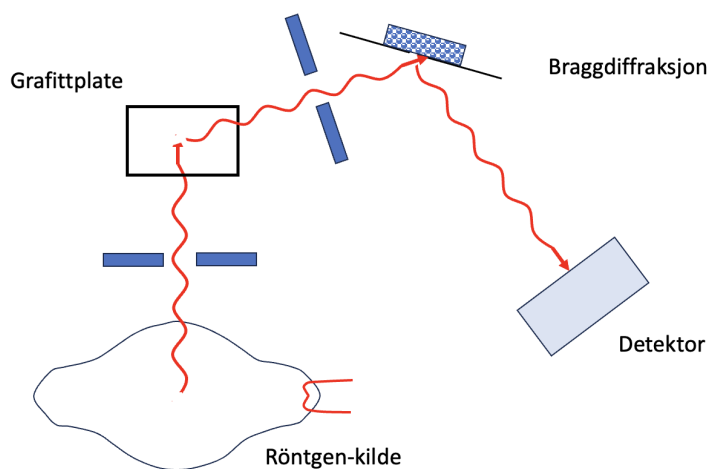
Oppgavesettet er på: 4 sider

Tillatte hjelpemidler: Rottman: 'Matematisk formelsamling', Øgrim og Lian: 'Fysiske størrelser og enheter', Angell og Lian: 'Fysiske størrelser og enheter'. Godkjent kalkulator. Ett A4-ark med egne notater (begge sider av arket).

Kontroller at oppgavesettet er komplett før du begynner å besvare spørsmålene.

Oppgave 1 Compton-spredning

Arthur Holly Compton mottok Nobelprisen i fysikk i 1927 for sin oppdagelse (1923) av lysets partikkelnatur. Figur 1 skisserer eksperimentoppstillingen hvor han sendte høyenergetiske röntgenstråler med energi $E_\gamma = 0.017 \text{ MeV}$ mot en grafitplate.



Figur 1: Prinsippskisse av Compton-eksperimentet.

- a) Hvilken bølgelengde λ og bevegelsesmengde p_γ hadde den innsendte röntgenstrålen? (Det kan være nyttig å bruke relasjonen $hc = 1240 \text{ eV nm}$.)

Svar: Ettersom $E_\gamma = hc/\lambda$, får vi

$$\lambda = \frac{hc}{E_\gamma} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{0.017 \cdot 10^6 \text{ eV}} = 0.073 \text{ nm.} \quad (1)$$

Videre er $p_\gamma = E_\gamma/c = 0.017 \text{ MeV}/c$ med enheter som anbefales i dette kurset. (Alternativt kan man skrive $p_\gamma = 9.08 \cdot 10^{-24} \text{ kg m/s}$ eller $p_\gamma = 5.67 \cdot 10^{-5} \text{ eV s/m}$, eventuelt bruke andre enheter som nm og J.)

I et sitat¹ utdyper Compton sin frustrasjon over at hans eksperiment baseres både på lysets partikkelnatur og dets bølgenatur, et paradoks kjent som partikkel-bølge dualismen i kvantefysikken.

- b) Forklar de to viktigste stegene som röntgenstrålen gjennomgår på sin vei fra kilde til detektor i Fig. 1 og ved hvilke steder lyset oppfører seg som partikkel og som bølge.

Svar: *I det første steget* spres röntgenstrålen mot elektroner i en grafittplate. To spalter definerer hvilken vinkel θ den utgående strålen har i forhold til den innkommende strålen. Denne spredningen viser seg å kunne forklares ved at et foton kolliderer med et elektron på samme måte som en partikkel ville gjøre. Altså oppfører lyset som en *partikkel* ved grafittplaten.

I det siste steget spres röntgenstrålen mot gitteret i en krystall med kjent gitterkonstant d mellom krystallagene. I følge klassisk fysikk vil lyset kunne beskrives som elektromagnetiske bølger som interfererer. Når lyset treffer Bragg-krystallen oppstår diffraksjon som gir konstruktiv interferens ved en viss vinkel mellom krystallens overflate og den innkommende og utgående strålen. Detektoren gir maksimalt utslag når konstruktiv interferens oppstår. Siden gitterkonstanten er kjent, gir dette oss bølgelengden til det spredte lyset. Altså oppfører lyset seg som en *bølge* ved Bragg-krystallen.

I forbindelse med sitt eksperiment utledet Compton formelen

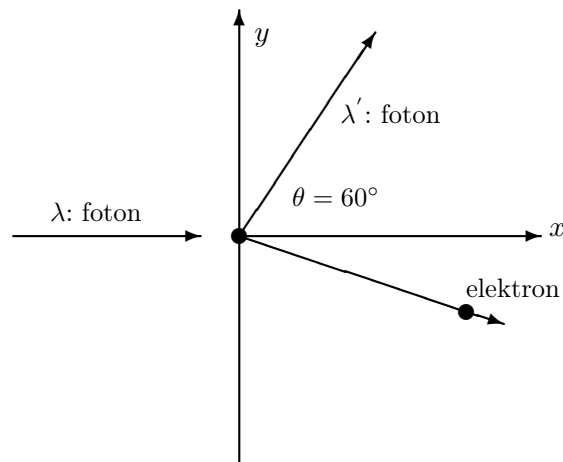
$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta), \quad (2)$$

hvor $\lambda_C = h/mc$ kalles Comptonbølgelengden.

- c) Forklar symbolene i Likn. (2) og tegn bevegelsesmengde-vektorene i spredningsprosessen $\gamma + e \rightarrow \gamma' + e'$ med tilhørende symboler og størrelser.

Svar: $\Delta\lambda$ er bølgelengdeforandring ved spredning. λ er bølgelengden til innkommende foton. λ' er bølgelengden til utgående foton etter spredning. λ_C er Comptonbølgelengden. θ er spredningsvinkelen for fotonet. Figur 2 viser spredningsprosessen med $\theta = 60^\circ$.

¹'The crystal spectrometer measured a wavelike phenomenon, interference. But the effect of the graphite scatterer on the value of that wavelike property could be understood only in terms of particle-like behavior'.



Figur 2: Comptonspredning i vinkel $\theta = 60^\circ$.

- d) Skriv ned forutsetningene for Likn. (2) samt likningene for de konserveringslover som er brukt (du skal *ikke* utlede Comptonformelen).

Svar: I beregningen av bølgelengden til det spredte fotonet antar vi at elektronet er initielt i ro og $p = h/\lambda$. Videre bruker vi konserveringssatsene før og etter støtet;

- Bevaring av energi: $E_\gamma + E_e = E'_\gamma + E'_e$
- Bevaring av bevegelsesmengde: $\vec{p}_\gamma + \vec{0} = \vec{p}'_\gamma + \vec{p}'_e$

- e) Finn Comptonbølgelengden for elektroner ($m_e = 0.511 \text{ MeV}/c^2$) og bølgelengdeforandringen $\Delta\lambda$ for spredning i vinkelen $\theta = 60^\circ$. I Compton-eksperimentet ser man også tilfeller hvor $\Delta\lambda \approx 0$, hvorfor?

Svar: Comptonbølgelengden for elektroner er

$$\lambda_C = h/m_e c = \frac{hc}{0.511 \text{ MeV}/c} = \frac{1240 \text{ eV nm}}{0.511 \cdot 10^6 \text{ eV}} = 2.43 \cdot 10^{-3} \text{ nm}. \quad (3)$$

Bølgelengdeforandringen i vinkel $\theta = 60^\circ$ er

$$\Delta\lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta) = 0.00243(1 - \cos(60^\circ)) \text{ nm} = 0.00121 \text{ nm}.$$

I tilfellet $\Delta\lambda \approx 0$ kan vi betrakte kollisjonen mellom fotonet og materialet som en kollisjon mellom et foton og et helt karbonatom. Vi

må da erstatte massen til elektronet med den til karbonatomet, som er 22 000 ganger tyngre enn elektronet. Da blir Comptonbølgelengden

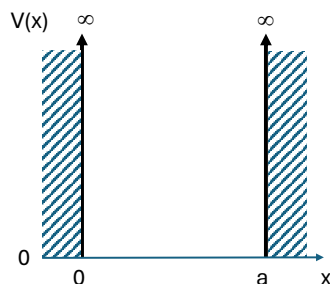
$$\lambda_C = \frac{h}{22000 m_e c} \sim 10^{-7} \text{ nm} = 0.1 \text{ fm}, \quad (4)$$

som gjør at endringen i bølgelengde $\Delta\lambda$ er knapt observerbar.

Oppgave 2 Partikkel i boks

En partikkel beveger seg i en potensialbrønn (se Fig. 3) med potensial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{ellers.} \end{cases} \quad (5)$$



Figur 3: Uendelig kassebrønnpotensial.

- a) Vis at den tidsuavhengige Schrödingerlikning (TUSL) kan skrives på formen

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x), \text{ hvor } k = \sqrt{2mE}/\hbar. \quad (6)$$

Svar: Den tidsuavhengige Schrödingerlikning (TUSL) kan skrives som

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (7)$$

hvor $V(x) = 0$ og $E > 0$. Vi forenkler TUSL slik at

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) = -k^2\psi(x), \quad (8)$$

hvor vi definerer $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

- b) Vis at $\psi(x) = A \sin(kx)$ er en løsning av Likn. (6).

Svar: Vi innsetter i Likn. (6) og får

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = A \frac{d^2 \sin(kx)}{dx^2} = Ak \frac{d \cos(kx)}{dx} = -Ak^2 \sin(kx) = -k^2\psi, \quad (9)$$

som viser at $\psi(x) = A \sin(kx)$ er en løsning.

- c) Finn k som funksjon av kvantetallet n (som vi betegner k_n) og energi-eigenverdiene E_n , hvor $n = 1, 2, 3, \dots$

Svar: Ved grensen $x = a$ må bølgefunksjonen være $A \sin(ka) = 0$. Dette krever at $ka = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm4\pi, \dots$, hvor vi utelater $n = 0$ fordi da blir $\psi(x) = 0$ for alle x . Altså gir kravet $ka = 0$ kvantiseringen $k_n = n\pi/a$, der $n = 1, 2, 3, \dots$. Energi-eigenverdiene blir dermed

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (10)$$

Fra deloppgavene over, kjenner vi nå energieigenverdifunksjonene. I tillegg oppgir vi normeringskonstanten A slik at de ortonormerte egenfunksjonene er

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x). \quad (11)$$

Vi skal nå studere den tidsavhengige Schrödingerlikningen (TASL) med følgende bølgefunksjonen ved tiden $t = 0$:

$$\Psi(x, t = 0) = C \sin^3\left(\frac{\pi}{a}x\right), \text{ hvor } C \text{ er normeringskonstanten.} \quad (12)$$

- d) Bruk den trigonometriske likheten $\sin(3\theta) = 3 \sin(\theta) - 4 \sin^3(\theta)$ til å uttrykke $\Psi(x, t = 0)$ ved hjelp av bølgefunksjoner $\psi_n(x)$, der $\psi_n(x)$ er definert i Likn. (11).

Svar: For å finne uttrykket for $\Psi(x, t = 0)$, omskriver vi den trigonometriske likningen til

$$\sin^3(\theta) = \frac{1}{4}(3 \sin(\theta) - \sin(3\theta)) \quad (13)$$

og innsetter $\theta = \pi x/a$ som gir

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{C}{4} \left(3 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \sin\left(3 \frac{\pi x}{a}\right) \right). \quad (14)$$

- e) Finn normeringskonstanten C .

Svar: Normeringsintegralet blir

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx &= \frac{|C|^2}{16} \int_0^a \left(9 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \right) dx \quad (15) \\ &= \frac{|C|^2}{16} \left(9 \frac{a}{2} + \frac{a}{2} \right) = \frac{10a|C|^2}{32} = 1,\end{aligned}$$

som gir $C = 4/\sqrt{5a}$.

- f) Skriv ned $\Psi(x, t)$ og vis at $\Psi(x, t)$ er en løsning av TASL.

Svar: Innsetter uttrykket for C i Likn. (14):

$$\begin{aligned}\Psi(x, t = 0) &= \frac{1}{\sqrt{5a}} \left(3 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) \right) \quad (16) \\ &= \frac{1}{\sqrt{10}} (3\psi_1(x) - \psi_3(x)).\end{aligned}$$

Dermed ser vi lett hvordan bølgefunksjonen utvikler seg med tiden:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{10}} \left[3\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} - \psi_3(x)e^{-iE_3t/\hbar} \right]. \quad (17)$$

Vi vil vise at $\Psi(x, t)$ tilfredsstiller TASL gitt ved $\hat{H}\Psi = i\hbar\partial\Psi/\partial t$. Her er

$$\hat{H}\Psi = \frac{1}{\sqrt{10}} \hat{H}(3\psi_1e^{-iE_1t/\hbar} - \psi_3e^{-iE_3t/\hbar}) \quad (18)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{10}} (3E_1\psi_1e^{-iE_1t/\hbar} - E_3\psi_3e^{-iE_3t/\hbar}), \quad (19)$$

som gir samme bølgefunksjon som

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{1}{\sqrt{10}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (3\psi_1e^{-iE_1t/\hbar} - \psi_3e^{-iE_3t/\hbar}) \quad (20)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{10}} (3E_1\psi_1e^{-iE_1t/\hbar} - E_3\psi_3e^{-iE_3t/\hbar}). \quad (21)$$

Dette betyr at $\Psi(x, t)$ tilfredsstiller TASL.

- g) Finn forventningsverdien av energien $\langle H(t) \rangle$. Hvilke energier vil du kunne måle ved én måling og hva er sannsynligheten for å måle en gitt energi?

Svar: Forventningsverdien av energien er

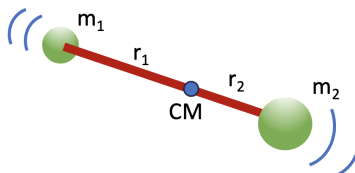
$$\begin{aligned}\langle H(t) \rangle &= \frac{1}{10} \int_0^a (9E_1 |\psi_1|^2 + E_3 |\psi_3|^2) dx \\ &= \frac{9E_1 + E_3}{10} = \frac{9E_1 + 9E_1}{10} = \frac{18}{10} E_1 = \frac{9}{10} \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2},\end{aligned}\quad (22)$$

som viser seg å være uavhengig av tiden.

Sannsynligheten for å måle en energi i en egenstilstanden gis av kvadratet av koeffesienten foran bølgefunksjonen til egentilstanden. Sammenlikner vi $c_1\psi_1 + c_3\psi_3$ med Likn. (17), finner vi sannsynligheter $p_1 = (3/\sqrt{10})^2 = 0.9$ og $p_3 = (-1/\sqrt{10})^2 = 0.1$. Det er derfor 90% sannsynlig å måle E_1 og 10% sannsynlig å måle E_3 . Det er 0% sannsynlig å måle energien $\langle H \rangle$ med én måling, siden denne hverken antar verdi E_1 eller E_3 . (Hvis man måler mange ganger på likt preparerte ensemble, vil man måle E_1 og E_3 verdier som i gjennomsnitt blir $(9E_1 + E_3)/10$.)

Oppgave 3 Diatomiske molekyler

Figur 4 illustrerer et vibrerende diatomisk molekyl med masser m_1 og m_2 der $m_2 > m_1$. Posisjonen til massesenteret (CM) er gitt ved $r_1 m_1 = r_2 m_2$. Systemet er et to-legeme problem som kan forenkles til et en-legeme problem ved å innføre redusert masse $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ og avstand $r = r_1 + r_2$ mellom atomene.

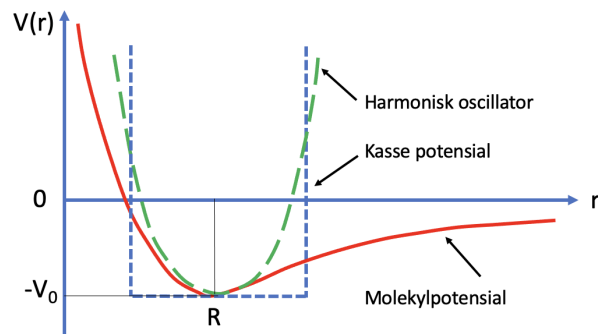


Figur 4: Skisse av et vibrerende diatomisk molekyl.

- a) Tegn potensialet $V(r)$ til et diatomisk molekyl hvor du merker av midlere avstand R og potesialdybden V_0 . Tegn også inn et av de enkle potensialene vi har lært om i dette kurset til å tilnærme det mer kompliserte potensialet til det diatomiske molekylet, og diskuter i hvilke grenser dette er en god tilnærming.

Svar:

Figur 5 visser en skisse av molekylpotensialet. Potensialet kan for eksempel tilnærmes med harmonisk oscillator potensial eller med et kassepotensial. Harmonisk oscillator gir best tilnærming, men begge potensialer er begrenset til små energier før feilen blir for stor.



Figur 5: Potensialer mellom atomene i et diatomisk molekyl.

Videre i denne oppgaven vil vi studere det nøytrale H_2 -molekylet hvor vi setter $m_1 = m_2 = m_p$. Vi antar at H_2 -molekylet kan beskrives som en harmonisk oscillator som følger Hook's lov med fjærkonstant $k = \mu\omega^2$.

- b) Skriv ned uttrykket for molekylets vibrasjonsenergi E_{vib} som funksjon av vibrasjonskvantetallet n . Hvor stort er molekylets nullpunktsenergi og hvorfor kan ikke molekylet ha $E_{\text{vib}} = 0$?

Svar: Vibrasjonsenergien er gitt ved løsningen for en en-dimensjonal harmonisk oscillator $E_{\text{vib}} = \hbar\omega(n + 1/2)$, hvor vibrasjonskvantetallet er $n = 0, 1, 2, \dots$. Nullpunktsenergien er gitt ved $n = 0$ som gir $\hbar\omega/2$.

Molekylet kan ikke ha $E_{\text{vib}} = 0$, fordi da ville bevegelsesmengden være eksakt $p = 0$ som ville bryte med Heisenbergs uskarphetsrelasjon $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$, hvor x tilsvarer r i vårt tilfelle.

I grunntilstanden har H_2 -molekylet bindingsenergi $E_B = 4.52 \text{ eV}$ og fjærkonstant $k = 573 \text{ N/m}$. Protonets masse er $m_p = 938 \text{ MeV}/c^2$.

- c) Finn vibrasjonskvantetallet n_{max} hvor vibrasjonen blir så sterk at H_2 -molekylet rives i stykker. Begrunn hvordan dette kvantetallet endrer seg hvis vi bruker en mer realistisk modell av potensialet.

Svar: Vi omskriver enheten $\text{N/m} = \text{J/m}^2 = 6.238 \text{ eV/nm}^2$ som gir at fjærkonstanten er $k = 3575 \text{ eV/nm}^2$. Vibrasjonsenergien mellom to vibrasjonsnivåer blir da

$$\hbar\omega = \frac{h\omega}{2\pi} = \frac{hc}{2c\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{hc}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu c^2}} = \frac{1240}{2\pi} \sqrt{\frac{3575}{469 \cdot 10^6}} \text{ eV} = 0.218 \text{ eV} \quad (23)$$

Vi finner det maksimale vibrasjonskvantetall når $\hbar\omega(n) = E_B$, etter-som E_B refererer til nullpunktsenergien som er $\hbar\omega/2$.

$$n_{\max} = \frac{E_B}{\hbar\omega} \approx 21. \quad (24)$$

Vi vet at generelt vil antall nivåer øke med et potensials bredde og dybde. Figur 5 viser at det realistiske potensialet er bredere ved høyere energier (dybden endres lite), og vi forventer derfor $n_{\max} \gg 21$.

Det viser seg at H_2 -molekylet er så svakt bundet at det er én og bare én elektronkonfigurasjon som kan binde molekylet sammen. I kurset har vi vist at to identiske fermioner er nærmere (fjernere fra) hverandre hvis den romlige bølgefunksjon er symmetrisk (antisymmetrisk).

- d) Hvilke symmetrier må rom-bølgefunksjonen $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ og spinn-egenfunksjonen $\chi(1, 2)$ ha for å gi sterkest binding av H_2 -molekylet? Begrunn svaret.

Svar: Den sterkeste bindingen vil inntre når det er "overskudd" av elektroner i området mellom de to protonkjernene. En symmetrisk rom-bølgefunksjon vil derfor gi best binding. Siden elektroner er fermioner, må den totale bølgefunksjon være antisymmetrisk som betyr at spinn-egenfunksjonen må være antisymmetrisk. Dette bryter heller ikke med Pauliprinsippet, som tillater at de to elektronene er i hver sin $1s$ tilstanden, men med motsatt rettede egenspinn. Altså er den totale antisymmetriske bølgefunksjonen gitt ved $\Psi^A(1, 2) = \psi^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi^A(1, 2)$.

Det finnes fire forskjellige to-partikkel spinn-egenfunksjoner:

$$\chi(1, 2) = \chi_-(1)\chi_-(2) \quad (25)$$

$$\chi(1, 2) = \chi_+(1)\chi_+(2) \quad (26)$$

$$\chi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)] \quad (27)$$

$$\chi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)]. \quad (28)$$

- e) Skriv ned spinn-egenfunksjonen(e) som du har valgt i oppgave 3 d) og vis at symmetrien med hensyn på partikkelbytte er korrekt.

Svar: I d) fant vi ut at rom-bølgefunksjonen må være symmetrisk, som betyr at spinn-bølgefunksjonen må være antisymmetrisk ved partikkelombytte. Det vil si at $\chi(2, 1) = -\chi(1, 2)$. Blant de fire forskjellige to-partikkel spinn-egenfunksjone er det kun

$$\chi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)]$$

som tilfredsstiller kravet ved partikkelbytte:

$$\begin{aligned}\chi(2,1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(2)\chi_-(1) - \chi_-(2)\chi_+(1)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_-(1)\chi_+(2) - \chi_+(1)\chi_-(2)] \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)] = -\chi(1,2)\end{aligned}$$

(De tre andre spinn-egenfunksjonene er symmetriske med hensyn på partikkelbytte: $\chi(1,2) = \chi(2,1)$.)