

FYS2140, våren 10: Oblig 12

Dette oppgavesettet ble gitt som avsluttende eksamen våren 2007.

Oppgave 1: Molekyler

I denne oppgaven skal vi studere vibrasjoner i diatomiske molekyler. Den effektive, endimensjonale Schrödingerligningen for systemet kan skrives som

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + V(r)\psi(r) = E_{vib}\psi(r) \quad (1)$$

der $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ er den reduserte massen (m_1 og m_2 er massene til de to atomene i molekylet), r er den relative koordinaten, dvs avstanden mellom atomene, og $V(r)$ er det effektive potensialet de to atomene opplever.

For molekyler med kovalent binding brukes ofte det såkalte *Morsepotensialet*,

$$V(r) = A \left[e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)} \right] \quad (2)$$

der A, a, r_0 er parametre som har forskjellige verdier for ulike typer av molekyler. Figuren viser en skisse av dette potensialet.

- a) Vis at likevektsavstanden mellom atomene (dvs avstanden med minst potensiell energi) er gitt ved $r = r_0$.

Vi skal nå studere små utslag rundt denne likevekten.

- b) Hvis vi antar at utslagene (dvs $a(r - r_0)$) er små, kan vi tilnærme potensialet ved en Taylorutvikling til 2. orden rundt likevektspunktet. Vis at dette tilnærmede potensialet blir

$$\tilde{V}(r) = V(r_0) + \frac{1}{2}K(r - r_0)^2 \quad (3)$$

der $K = 2Aa^2$, og at Schrödingerligningen nå kan skrives som

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\tilde{\psi}(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}Ky^2\tilde{\psi}(y) = \epsilon\tilde{\psi}(y) \quad (4)$$

der $y = r - r_0$, $\tilde{\psi}(y) = \psi(y + r_0)$, og $\epsilon = E_{vib} - V(r_0)$.

Hva kaller vi systemet som beskrives av denne typen Schrödingerligning?

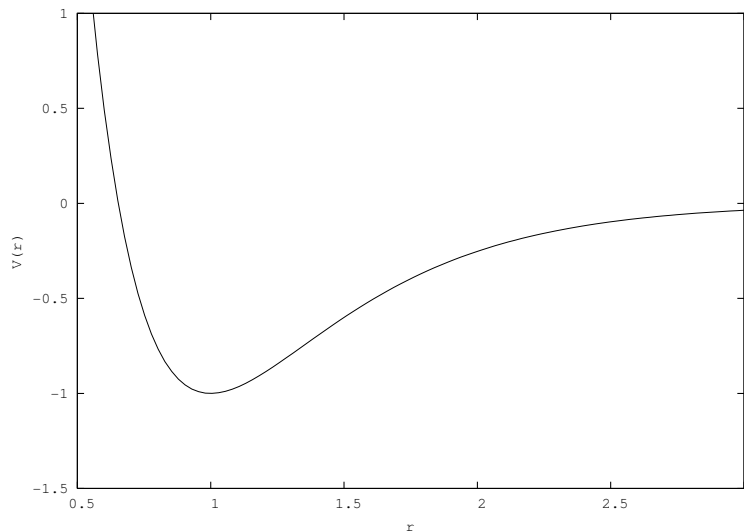
- c) Sett opp (uten utledning) det kvantiserte energispekteret som følger fra Schrödingerligningen (4), uttrykt ved konstantene a, A og μ .

Hvorfor er ikke dette uttrykket gyldig for vilkårlig store kvantetall n ?

For oksygenmolekylet O_2 finner man følgende tilnærmede verdier for konstantene i Morsepotensialet: $A = 5.2\text{eV}$, $r_0 = 0.12\text{nm}$ og $a = 27\text{nm}^{-1}$.

- d) Beregn molekylets bindingsstyrke ("fjærkonstanten") K , samt den karakteristiske energien for vibrasjonsoverganger, $\hbar\omega_0 = \hbar\sqrt{K/\mu}$ (massen til et oksygenatom er $16u$; vi minner også om at $\hbar c = 197.3\text{eV nm}$).

Sammenlign det siste svaret med den typiske størrelsen på rotasjonsenergien, som for O_2 er ca 10^{-3}eV .



Figur 1: En skisse av morsepotensialet. Tallene på aksene er vilkårlige.

Oppgave 2: Partikler i boks

I denne oppgaven skal vi (nok en gang) bruke det uendelige bokspotensialet ($V(x) = 0$ for $0 < x < L$, ∞ ellers) som et eksempel på et enkelt, endimensjonalt kvantemekanisk system. Som kjent er energispekteret for en partikkel med masse m gitt ved

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5)$$

med tilhørende egenfunksjoner

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (6)$$

a) Forklar hva som menes med en egenfunksjon og egenverdi for en operator.

Vis at funksjonene ψ_n i (6) *ikke* er egenfunksjoner for bevegelsesmengden, dvs at bevegelsesmengden ikke har en skarp verdi i disse tilstandene.

Gi en enkel kvalitativ forklaring på hvorfor tilstandene i boksen ikke kan ha skarp bevegelsesmengde.

Vi skal nå se på en superposisjon av tilstandene i (6)

$$\psi(x) = \mathcal{N} [\psi_2(x) - 2\psi_4(x) + \psi_6(x) + 2\psi_8(x)] \quad (7)$$

b) Beregn normeringskonstanten \mathcal{N} .

c) Anta at vi måler energien til en partikkel i tilstand (7).

Hva er da sannsynligheten for at måleresultatet skal bli $(16\pi^2\hbar^2)/(2mL^2)$?

Og hva er sannsynligheten for å finne partikkelen i grunntilstanden?

- d)** Vi kan også tenke oss at vi utfører en posisjonsmåling på en partikkel som befinner seg i tilstanden (7). Hva er sannsynligheten (eller mer presist sannsynlighetstettheten) for å finne partikkelen i midten av boksen, $x = (L/2)$?

Begrunn svaret. (Hint: Ingen regning nødvendig! Bruk de generelle egenskapene til egenfunksjonene ψ_n .)

La oss nå generalisere til en situasjon der det befinner seg to partikler i boksen, henholdsvis med $n = a$ og $n = b$. Vi antar at disse er identiske fermioner og at de befinner seg i en symmetrisk spinttilstand. Vi ser bort fra vekselvirkningen mellom dem.

- e)** Vis at romdelen til to-partikkelbølgefunksjonen da kan uttrykkes som en 2×2 determinant,

$$\psi_{rom}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_a(x_1) & \psi_a(x_2) \\ \psi_b(x_1) & \psi_b(x_2) \end{vmatrix} \quad (8)$$

Uttrykket (8) kan generaliseres til flere partikler. Antar at vi nå har tre identiske fermioner i boksen, med $n = a, b$ og c , og at spinndelen av bølgefunksjonen igjen er symmetrisk. Da kan vi skrive

$$\psi_{rom}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_a(x_1) & \psi_a(x_2) & \psi_a(x_3) \\ \psi_b(x_1) & \psi_b(x_2) & \psi_b(x_3) \\ \psi_c(x_1) & \psi_c(x_2) & \psi_c(x_3) \end{vmatrix} \quad (9)$$

- f)** Vis at denne bølgefunksjonen er antisymmetrisk under ombytte av et hvilket som helst par av koordinater, og at den oppfyller Pauliprinsippet. (Hint: Direkte bruk av determinanternes generelle matematiske egenskaper forenkler regningen betraktelig.)