FYS2140 Hjemmeeksamen – Vår 2016

Ditt **kandidatnummer**

8. mars 2016

Viktig info:

- Elektronisk innlevering på devilry med frist fredag 18. mars kl. 16.00.
- Leveringsfristen er absolutt.
- Bevarelsen må merkes tydelig med ditt kandidatnummer (finnes på Studentweb) fordi innleveringen skjer anonymt (ikke knyttet til navnet ditt på devilry). Besvarelser uten kandiatenummer stryker automatisk.
- Hjemmeeksamen teller ca. 20% av karakteren i FYS2140 og må være bestått for å bestå kurset.
- Dette er en hjemmeeksamen, så dere har full anledning til å bruke forelesningsnotater og annen faglitteratur for å finne fram til nødvendig informasjon, og til å samarbeide. Til gjengjeld skal den innleverte besvarelsen være individuell, og vi forbeholder oss retten til å trekke ut noen av dere til en muntlig redegjørelse for besvarelsen deres senere.
- Der vi ber om kommentarer eller forklaringer, ønsker vi korte og konsise svar som viser at dere har forstått poenget. Dersom du ikke bruker LaTeX skal besvarelsen være pent og oversiktlig ført inn. Husk å bruk fornuftige enheter i regningen, noen av oppgavene med numeriske svar er nær umulig å få til uten.
- Eventuell programkode vil ikke taes i betraktning i vurderingen av besvarelsen, men du kan gjerne legge ved relevante plott av resultater.
- Lykke til!

Det er i alt mulig å få 20 poeng på denne eksamen. Noen av deloppgavene kan (bør) løses numerisk.

Oppgave Det såkalte **Morsepotensialet** er gitt ved:[1]

$$V(x) = V_0 \left[e^{-2b(x-x_0)} - 2e^{-b(x-x_0)} \right], \tag{1}$$

hvor x_0, b og V_0 er tre reelle positive konstanter.

a) Finn minimum til potensialet. [1 poeng]

b) Vis at harmonisk oscillator potensialet er en god tilnærming til (1) når $b(x - x_0)$ er liten, og vis at forholdet mellom parametrene i harmonisk oscillator potensialet og Morsepotensialet er $V_0 b^2 = \frac{1}{2} m\omega^2$. [3 poeng]

c) Lag en plot av Morsepotensialet og tilnærmingen ved hjelp av harmonisk oscillator potensialet i samme figur. Bruk verdiene $V_0 = 10.20\,\text{eV}$, $b = 12.60\,\text{nm}^{-1}$ og $x_0 = 0.127\,\text{nm}$. [1 poeng]

Morsepotensialet brukes for å beskrive vibrasjon i di-atomiske molekyler, som for eksempel hydrogenklorid, HCl. Da er x avstanden mellom de to atomene når vi antar at det tyngste atomet er uendelig tungt og ligger i ro. Vibrasjon i molekyler er et tema vi kommer tilbake til mot slutten av kurset. Her skal vi bare løse Schrödingerligningen for bevegelsen til hydrogenatomet med harmonisk oscillator potensialet som en tilnærming, og til slutt med hele Morsepotensialet. I det følgende vil vi velge, som i deloppgave **c)**, $V_0 = 10.20\,\text{eV}$, $b = 12.60\,\text{nm}^{-1}$ og $x_0 = 0.127\,\text{nm}$, fordi dette er realistiske verdier for en modell av nettopp HCl.

d) Finn de to laveste energiegentilstandene ψ_0 og ψ_1 og de tilhørende energiene i harmonisk oscillator tilnærmingen. Oppgi svaret som et plott av ψ_0 og ψ_1, og gi de numeriske verdiene for energiene. [3 poeng]

e) Hvor mange bundne tilstander bør det finnes i harmonisk oscillator tilnærmingen? [1 poeng]

f) La oss anta at molekylet begynner i tilstanden

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x). \tag{2}$$

Finn forventningsverdien til posisjonen x og bevegelsesmengden p som funksjon av tiden t. Du kan velge om du vil gjøre dette analytisk og gi uttrykket for $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$, eller numerisk og bare vise et plot av $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$ mot t. [4 poeng]

[1] Philip M. Morse, *Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels*, Phys. Rev. 34, 57–64 (1929).

g) Vi tenker oss nå at vi gjør nå en måling av vibrasjonsenergien til molekylet. Hva slags verdier kan vi få? Gitt at vi måler $-9.65\,\text{eV}$, hvilken tilstand er molekylet i etter målingen? [1 poeng]

h) Hvor mye endrer vibrasjonsenergiene seg når vi tar hensyn til at det tunge atomet (klor) har en endelig masse? Vil dette ha noe å si for modellen vår? [1 poeng]

i) For hvilke verdier av x er Morsepotensialet (1) en fysisk akseptabel beskrivelse av vibrasjonspotensialet mellom to atomer? [1 poeng]

Den siste oppgaven er en åpen oppgave uten en helt opplagt fremgangsmåte. Du kan forsøke å løse den både numerisk og analytisk, eller ved en kombinasjon. For å forhindre for mye arbeid både for dere, og vi som skal rette, setter vi en maksimal lengde for svaret på denne deloppgaven på fire sider (sider, ikke ark).

Vi vil gi poeng alt etter hvor godt du svarer, og hvor godt du bruker den kvantemekanikken vi har lært til nå i kurset. Det vi ikke vil gi poeng for er det å bare oppgi svaret fra wikipedia, vi vil ha argument for hvordan det er funnet. Vær oppmerksom på at oppgaven er utfordrende, og at vi ikke forventer at så mange får full score her.

j) Finn de samme svarene som i de tidligere deloppgavene ved å bruke Morsepotensialet i stedet for harmonisk oscillator tilnærmingen, og sammenlign. Konkret er vi er ute etter det følgende:

- Egentilstandene ψ_0 og ψ_1. Svar gjerne med et plott som sammenligner med de tilsvarende for harmonisk oscillator.
- Egenenergiene E_0 og E_1.
- Hvor mange bundne tilstander finnes det?

Hint:

- Dersom du vil prøve en analytisk tilnærming så kan det lønne seg å bytte variable til den enhetsløse koordinaten

$$z = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar b} e^{-b(x-x_0)}, \tag{3}$$

  anta at at $\psi(z) = e^{-z}u(z)$, og finne ligningen til $u(z)$. Merk at denne fortsatt er vanskelig å løse. Du kan enten måtte bruke en rekkeutvikling av $u(z)$ i z^{a+n}, hvor a er et positivt reelt tall og n er indeksen for rekken, eller finne en annen lur antagelse for formen til $u(z)$.
- Schrödingerligningen med Morsepotensialet er også utfordrende å løse numerisk! Den vanlige Eulermetoden vil nok ikke virke.

Vi anbefaller istedet å tenke på ligningen som en egenverdiligning med matriser $(D + V)\psi = E\psi$, hvor ψ er en vektor, og D og V er to matriser på hver sin spesielle form, som representerer den andrederiverte og potensialet. For eksempel `python` biblioteket `scipy.sparse.linalg` inneholder effektive metoder for å løse slike egenverdiligninger.

[4 poeng]