

2.1 Gitt en én-dimensjonal GaAs-kuantebønn med en bredde på 21nm. Energien til elektronene i kuantebønnen

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8m^* L^2}$$

der  $m^*$  er den effektive massen spesifikk for GaAs;  
 $m^* = 0,067 m_e$ .

Kommentar: Til en god approksimasjon kan man for krystaller betrakte elektronene som frie partikler med en effektiv masse ulik elektronmassen. Forskjellen mellom en fri partikkel og et elektron bundet i en krystall er interaksjonen med potensialet fra de andre atomene og elektronene. Bemerk: må ikke forveksles med redusert masse.

Ønsker å finne energidifferansen mellom  $n=2$  og  $n=3$  i eV,

$$\Delta E_{3 \rightarrow 2} = E_3 - E_2 = \frac{h^2}{8m^* L^2} (3^2 - 2^2) = \frac{5h^2}{8m^* L^2}$$

Setter vi inn  $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ ,  $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  og  $L = 21 \text{ nm} = 2,1 \cdot 10^{-8} \text{ m}$  får vi energien i J. Konverterer denne til eV ved relasjonen  $1 \text{ eV} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ . Dette gir

$\Delta E_{3 \rightarrow 2} = 0,064 \text{ eV}$ , som stemmer nok så godt overens med den eksperimentelle verdi 0,05 eV.

2.2

Betrakter her et  $N_2$  molekyl i en én-dimensjonal boks med lengde

$L = 1 \text{ cm} = 1 \cdot 10^{-2} \text{ m}$ . Betrakter for enkelhets skyld  $N_2$  molekylet

som én partikkel med masse  $m = 2 \cdot 14 \cdot m_p = 28 m_p$ , der

massen til protonet  $m_p = 1,674 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ . Tilsvarende oppgave

2.1 finner vi energidifferansen

$$\Delta E_{2 \rightarrow 1} = E_2 - E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} (2^2 - 1^2) = \frac{3h^2}{8mL^2}$$

Dette gir ved innsettning  $\Delta E_{2 \rightarrow 1} = \underline{\underline{3,5 \cdot 10^{-38} \text{ J}}} (= 2,2 \cdot 10^{-19} \text{ eV})$

Ønsker så å finne den  $n$  som tilsvare en gjennomsnittlig termisk energi ved  $T = 300 \text{ K}$

$$E_T = \frac{1}{2} k_B T$$

der Boltzmann's konstant  $k_B = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ . Krever

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \stackrel{!}{=} \frac{1}{2} k_B T$$

og får

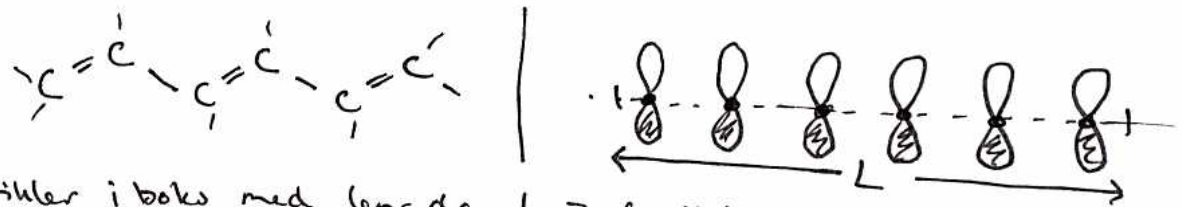
$$n = \sqrt{\frac{4mL^2 k_B T}{h^2}} = \frac{2L}{h} \sqrt{m k_B T}$$

Dette gir  $\underline{\underline{n = 420 \cdot 10^6}}$

Kommentar: Den kvantemekaniske "partikkel i boks"-effekten er neglisjerbar, og man vil uten særlig tap av presisjon kunne betrakte  $N_2$ -molekylet som en klassisk partikkel.

2.3

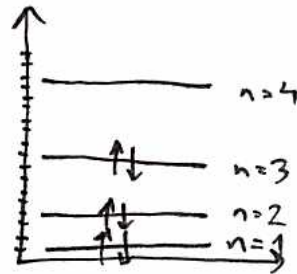
Skal her betrakte  $\pi$ -elektronene til hexa-1,3,5-triene



som partikler i boks med lengde  $L = 6 \cdot 144 \text{ pm}$ , og beregne bølglengden til et foton tilsvarende overgangen fra HOMO

til LUMO (Highest Occupied og Lowest Unoccupied Molecular Orbital). Hver av de 6  $sp^2$ -hybridiserte C-atomene vil bidra med ett  $\pi$ -elektron hver. Totalt har vi 6  $\pi$ -elektroner som må fylle energinivåene

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8m_e L^2}$$



I henhold til "Hunds regel" fylles orbitalene med lavest energi først, måo vil de tre laveste energinivåene,  $n=1, 2, 3$  være fylt (se figur) med to elektroner hver (en med spin opp og en med spin ned). HOMO vil da tilsvare energinivå  $n=3$  og LUMO  $n=4$ , dette gir energidifferansen

$$\Delta E_{4 \rightarrow 3} = \frac{h^2}{8m_e L^2} (4^2 - 3^2) = \frac{7h^2}{8m_e L^2}$$

Finer bølglengden ved å sette

$$\frac{hc}{\lambda} = \Delta E_{4 \rightarrow 3} = \frac{7h^2}{8m_e L^2} \quad \Leftrightarrow \quad \lambda = \frac{8m_e c L^2}{7h}$$

som gir ( $\text{pm} = 10^{-12} \text{ m}$ )

$$\lambda = 352 \text{ nm}$$

Måo ikke en fantastisk overensstemmelse med den eksperimentelle verdi på 258 nm

2.4

Skal her betrakte  $\pi$ -elektronene til  $\beta$ -Caroten som partikler i en  $\text{en-dimensjonal}$  boks med lengde  $L = 3,17 \text{ nm}$  ( $= 22 \cdot 144 \text{ pm}$ ). Det er totalt 22  $\pi$ -elektroner, mao. må de 11 laveste energinivåene være fylt iht. Paulis regel (se oppgave 2.3). HOMO tilsvarer mao.  $n=11$  og LUMO  $n=12$ , dette gir

$$a) \quad \Delta E_{\text{LUMO} \rightarrow \text{HOMO}} = \frac{h^2}{8m_e L^2} (12^2 - 11^2) = \frac{23h^2}{8m_e L^2} = \underline{\underline{1,38 \cdot 10^{-19} \text{ J}}}$$

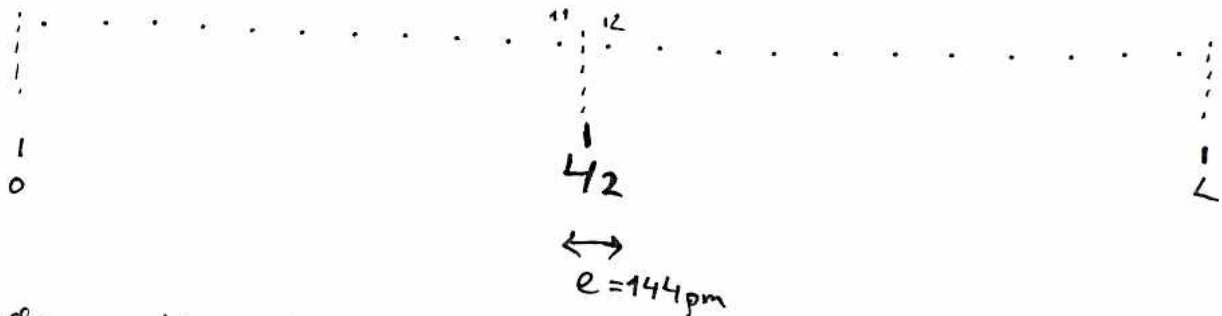
b) Finner bølglengden  $\lambda$  ved  $\frac{hc}{\lambda} \stackrel{!}{=} \Delta E_{\text{LUMO} \rightarrow \text{HOMO}}$ :

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E_{\text{LUMO} \rightarrow \text{HOMO}}} = \underline{\underline{1,44 \mu\text{m}}}$$

c) Bølgefunksjonene til de ulike orbitalene er gitt som (se (2.11) bok)

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Midtpunktet mellom C-atom nummer 11 og 12 er  $L/2$ , og  $\frac{L}{2}$  kaller



avstanden mellom atomene  $l$ ;  $l = 144 \text{ pm}$ . Dersom vi antar at

$\psi_n$  varierer lite i området mellom C-atomene 11 og 12 vil

$$\int_{c11}^{c12} \psi_n^* \psi_n dx \cong l \cdot (\psi_n(x = L/2))^2$$

Fordi det er to elektroner i hver orbital  $\psi_n$  vil

$$2 \sum_{n=1}^{11} \int_{c11}^{c12} \psi_n^* \psi_n dx \cong 2 \cdot 2 \sum_{n=1}^{11} l \cdot (\psi_n(x = L/2))^2$$



2.4 forts

beskrive sannsynligheten for å finne et elektron mellom C11 og C12,

$$2 \sum_{k=1}^{11} e \left[ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{k\pi}{2}\right) \right]^2$$

$$= \frac{4e}{L} \sum_{k=1}^{11} \sin^2\left(\frac{k\pi}{2}\right)$$

$$L = 22 \cdot e, \sin^2\left(\frac{k\pi}{2}\right) = \begin{cases} 1 & k \text{ odde (1, 3, 5, 7, 9, 11)} \\ 0 & k \text{ like (2, 4, 6, 8, 10)} \end{cases}$$

bindende

anti-bindende

$$= \frac{4e}{22e} \cdot 6 = \frac{24}{22} = 1,09$$

Mao vil sannsynligheten for å finne et elektron mellom C11 og C12 være 1,09

d) Skal her avgjøre bindingsordren til bindinger mellom C11 og C12

I henhold til argumentasjonen over vil ikke-bindende elektroner ha null sannsynlighet for å befinne seg mellom C11 og C12, mao. må de 1,09 elektronene mellom C11 og C12 være bindende; dette gir bidraget fra  $\pi$ -elektronene:

$$\text{Bindingsorden} = \frac{\text{antall bindende elektroner}}{2} = 0,545$$

I tillegg vil  $\sigma$ -elektroner danne enkeltbindinger mellom samtlige C-atomer, altså utgjør  $\sigma$ -elektronene en bindingsorden på 1.

Total bindingsorden mellom C11 og C12 blir da 1,545

**2.5** En partikkel befinner seg i en én-dimensjonal boks med lengde  $L$ . Vi skal her beregne sannsynligheten,  $P_n$ , for at partiklen befinner seg mellom  $x=0$  og  $x=L/4$ , som funksjon av kvantetallet  $n$ . I hht. likning (2.11) i boka er

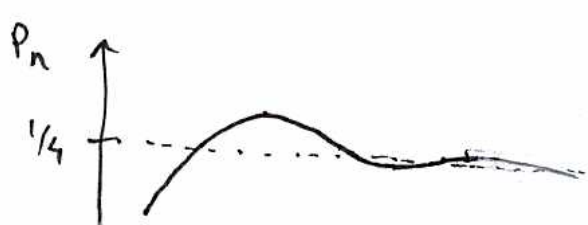
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n=1,2,3,\dots$$

Dette gir

$$\begin{aligned} P_n &= \int_0^{L/4} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^{L/4} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= \frac{1}{L} \int_0^{L/4} (1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)) dx \\ &= \frac{1}{L} \left[ x - \frac{L}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right]_0^{L/4} \\ &= \frac{1}{L} \left[ \frac{L}{4} - \frac{L}{2n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \right] \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \end{aligned}$$

Mao er sannsynligheten for å finne partiklen mellom  $x=0$  og  $x=L/4$

$P_n = \frac{1}{4} - \frac{1}{2n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)$ . Dette gir  $P_1=0,091$ ,  $P_2=0,25$ ,  $P_3=0,303$   
 $P_4=0,25$  osv. Når  $n$  blir stor vil  $\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)$  kun skifte mellom  $+1, 0$  og  $-1$  mens  $\frac{1}{2n\pi}$  blir mindre og mindre.  $P_n$  vil mao. oscillere om  $\frac{1}{4}$  med stadig minkende oscillasjoner



3.1

Ved refleksjon av et foton er posisjonen til et elektron bestemt med en nøyaktighet  $\Delta x = 0,01 \text{ nm} = 10^{-11} \text{ m}$ . Den simultane usikkerheten i bevegelsesmengden er gitt ved Heisenbergs usikkerhetsrelasjon

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \Leftrightarrow m_e \Delta x \Delta v \geq \hbar/2 \Leftrightarrow \Delta v \geq \frac{\hbar}{2m_e \Delta x}$$

Setter vi inn  $\hbar = h/2\pi = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} / 2\pi$ ,  $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  og  $\Delta x = 10^{-11} \text{ m}$  får vi

$$\underline{\underline{\Delta v = 5,8 \cdot 10^6 \text{ m/s}}}$$

3.2

Ved bestemmelse av en partikkels posisjon antar vi at usikkerheten  $\Delta x = \lambda$ , der  $\lambda$  er De Broglie bølglengden.

Dette gir  $p = h/\lambda$   
 $\Delta x = \lambda = \frac{h}{p}$

eller

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{h}{p} \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{h}{4\pi}$$

Heisenbergs  
usikkerhets-  
relasjon

dette gir

$$\underline{\underline{\frac{\Delta v}{v} \geq \frac{1}{4\pi}}}$$

3.3

Betrakt elektronet i H-atomet som en partikkel i en én-dimensjonal boks med lengde  $L = 2a_0$ . Gjennomsnittlig kinetisk energi,  $E_k$ , oppgitt til å være  $\hbar^2/2mea_0^2$

$$E_k = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2mea_0^2} \Leftrightarrow p^2 = \frac{\hbar^2}{a_0^2} \Leftrightarrow p = \pm \frac{\hbar}{a_0}$$

Da elektronet kan bevege seg i begge retninger er begge verdier mulige løsninger, og det er naturlig å sette  $\Delta p = \hbar/a_0$

### 3.3 forts.

Vidne vil det være naturlig å sette usikkerheten i posisjon som halve boksens lengde, noe  $\Delta x = a_0$ .

Dette gir

$$\Delta x \cdot \Delta p = h$$

Bemerk: Dette er kun en tilnærming av usikkerhetene  $\Delta x$  og  $\Delta p$ .

### 3.4

Heisenbergs usikkerhetsrelasjon kan (for bølger) skrives på formen

$$\Delta \lambda \Delta x \geq \frac{\lambda^2}{4\pi}$$

i følge worked problem 3.1. Vidne er det oppgitt at bølgelengden  $\lambda$  kan bestemmes med en relativ nøyaktighet

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda} = 10^{-7}$$

Dette gir

$$\Delta x \geq \frac{\lambda^2}{4\pi \Delta \lambda} = \frac{\lambda}{4\pi} \cdot \frac{\lambda}{\Delta \lambda} = \frac{\lambda}{4\pi} \cdot 10^7$$

a) Røntgen stråling med  $\lambda = 0,5 \text{ nm} = 5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$  gir en usikkerhet i posisjonen

$$\underline{\underline{\Delta x \geq 0,4 \text{ mm}}}$$

b) Synlig lys med bølgelengde  $\lambda = 500 \text{ nm}$  gir en usikkerhet i posisjonen

$$\underline{\underline{\Delta x \geq 0,4 \text{ m}}}$$