Forslag til arbejde med miniprojekt Kvantemekanik

Brobygning 2007 – Nanoteknologi

Partikel/Bølge dualitet - de Broglie-bølgelængden

1. Bestem bølgelængden af en elektron med kinetisk energi 100eV
2. Bestem bølgelængden af en tennisbold med massen 100g og farten 150km/h

Hvad kan vi se udlede af disse resultater? Har de Broglie bølgelængden af objekter nogen praktisk betydning i vores hverdag?

Heisenbergs Usikkerhedsprincip

Vi forestiller os en partikel, der kun kan bevæge sig langs x-aksen i et koordinat system (1-dim). Hvis usikkerheden på positionen i alle tilfælde er 1 Å, brug da Heisenbergs usikkerhedsprincip til at bestemme følgende.

3. Usikkerheden på hastigheden for en tennisbold på 100g
4. Usikkerheden på hastigheden for en elektron

Igen, hvad kan vi udlede af disse resultater? Hvilken rolle spiller usikkerhedsprincippet i vores hverdag?

Schrödingerligningen

Schrödingerligningen spiller samme rolle i kvantemekanikken, som Newtons anden lov spiller i den klassiske mekanik. Før vi kigger på Schrödingerligningen ser vi på hvordan Newtons anden lov kan bruges til at bestemme bevægelsesligningen for en klassisk partikel.

5. Bestem ved integration hastigheden af en partikel påvirket af kraften F som funktion af tiden t.

   Brug Newtons anden lov (1-dim): $m\frac{d^2r}{dt^2} = F$
6. Bestem på tilsvarende vis positionen som funktion af tiden.

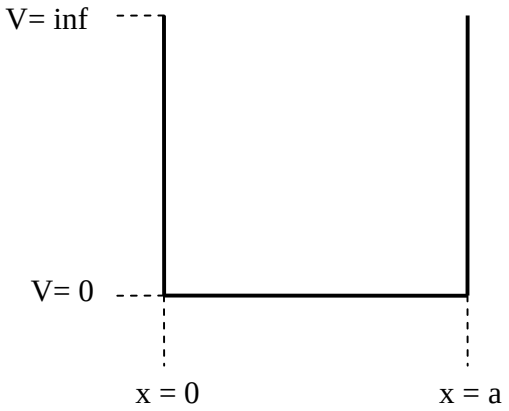
Newtons anden lov beskriver bevægelsen af en partikel påvirket af kraften F, Schrödingerligningen beskriver sandsynligheds fordelingen af positionen af en kvantepartikel påvirket af et potential V! Dette kunne f.eks. være en elektron i en orbital omkring en atomkerne, påvirket af coulombkræften mellem elektron og kerne. Schrödingerligningen ser ud som følger:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Vi vil i de følgende opgaver prøve at løse Schrödingerligningen for et simpelt system og derved belyse nogle af de vigtigste punkter i kvantemekanikken.

Partikel i en "Kasse"

Denne model illustrer nogle af de væsentlige aspekter inden for kvantemekanik. Vi skal regne på en partikel (det kunne f.eks. være en elektron) begrænset af et uendeligt højt potentiale (en såkaldt kvantebrønd). Tegningen nedenfor illustrerer ideen:



Vi skal i det følgende bestemme bølgefunktionen for en partikel i denne potential brønd.

7. Opstil Schrödingerligningen for en partikel i kassen, idet det udnyttes at sandsynligheden for ophold uden for kassen altid er 0, fordi potentialet er uendeligt højt.
8. Løs den andenordens differentialligning, der fremkommer ved at gætte på en linearkombination af sinus og cosinus som løsning [$\Psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$].
9. Brug grænsebetingelserne til at tilpasse løsningen [$\Psi(0) = 0$ og $\Psi(a) = 0$]

Vi vil diskutere relationen af de opnåede resultater i forhold til orbitaler og energiniveauer i atomer og se hvilke vigtige analogier, der kan trækkes fra denne meget simple beregning til atomer og molekyler.

Resonant Tunnelering

Ideen er her at i skal prøve at se, hvordan konceptet omkring en partikel i en kasse kan bruges til at konstruere en speciel type diode. Hvor en traditionel diode leder ved alle spændinger over en bestemt spænding, leder tunneldioder kun ved ganske bestemte spændinger. Denne mærkværdige opførsel bygger på princippet omkring kvantisering af energierne i en kvantebrønd. I vil få mulighed for at forsøge jer lidt frem med en computer-simulation, som kan bruges til at berege I-V kurver for tunneldioder.