

### Inlämningsuppgift 3

Atomerna i fasta ämnen sitter inte stilla utan vibrerar kring sina jämviktslägen. Dessa så kallade "gittersvängningar" är avgörande för ämnets specifika värme och andra termiska egenskaper, och man har därför stort intresse av att studera dem både teoretiskt och experimentellt. Den allra enklaste teoretiska modellen för gittersvängningar formulerades av Einstein i början av 1900-talet och kallas därför "Einsteinmodellen". Grundtanken är att när en atom rubbas från sitt jämviktsläge ger de omgivande atomerna upphov till en kraft som strävar att återföra atomen till jämviktsläget. Kraften  $F$  antas vara proportionell mot förflyttningen  $x$  enligt formeln

$$F = -kx$$

där  $k$  är en konstant som är olika för olika ämnen, och där minustecknet anger att kraften är återförande, d.v.s. riktad åt motsatt håll som förflyttningen. Vi begränsar oss här till förflyttningar längs  $x$ -axeln, men modellen kan lätt generaliseras till tre dimensioner. Ett lämpligt siffervärde på konstanten  $k$  för ett visst ämne kan bestämmas genom att man jämför modellens förutsägelser med experimentella termodynamiska data eller elastiska egenskaper (mjuka material har små  $k$ -värden och hårda material har höga  $k$ -värden).

Från kursen i mekanik känner vi igen detta som en harmonisk oscillator. Varje atom uppför sig som om den vore bunden till sitt jämviktsläge genom elastiska fjädrar med den sammanlagda fjäderkonstanten  $k$ . Atomen kommer därför att utföra en harmonisk svängningsrörelse med vinkelfrekvensen  $\omega = \sqrt{k/m}$ , där  $m$  är atomens massa. Svängningarnas amplitud beror på hur stor energin  $E$  är. Den lägsta tänkbara energin svarar mot att atomerna ligger stilla i sina jämviktslägen. Enligt klassisk fysik är detta vad som gäller vid den absoluta nollpunkten ( $T = 0 \text{ K} = -273,15 \text{ }^\circ\text{C}$ ).

Syftet med denna inlämningsuppgift är att undersöka hur en kvantmekanisk behandling av svängningarna skiljer sig från den klassiska mekanikens beskrivning av samma fenomen. Börja med att erinra dig vad du lärde dig i del 1a av kursen och skriv ner hur den potentiella energin  $U(x)$  ser ut för fjäderkraften  $F = kx$ ! Skriv sedan ner schrödingerekvationen för en atom med massan  $m$  som rör sig under inverkan av denna potential!

För fortsättningen av uppgiften behöver du ett par siffervärden. För att få ett realistiskt värde på kraftkonstanten  $k$  väljer vi det som gäller för aluminium,

$$k = 70 \text{ N/m}$$

Detta värde skall användas av alla. Däremot låter vi vinkelfrekvensen  $\omega$  variera mellan olika individer. Du skall använda ett värde som du räknar fram ur ditt födelsedatum enligt formeln

$$\omega = \frac{S \cdot 10^{13}}{4} \text{ s}^{-1}$$

där  $S$  är summan av de 6 första siffrorna i ditt personnummer. Exempel: för den som har födelsedatum 390104 fås  $\alpha = (3+9+0+1+0+4) \cdot 10^{13}/4 \text{ s}^{-1} = 4,25 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ . Proceduren ger i allmänhet värden som är helt rimliga för verkliga ämnen.

Lös nu följande uppgifter:

### (a) Vågfunktioner och sannolikhetstätheter

I Physics Handbook och andra tabeller finner man följande vågfunktioner för grundtillståndet och de två lägsta exciterade tillstånden hos en harmonisk oscillator:

$$\begin{aligned}\psi_0(x) &= \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right) \\ \psi_1(x) &= \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} 2\alpha x \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right) \\ \psi_2(x) &= \left(\frac{\alpha}{8\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} (4\alpha^2 x^2 - 2) \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)\end{aligned}$$

där konstanten  $\alpha$  är definierad som

$$\alpha = \sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}}$$

Skissera ovanstående tre vågfunktioner som funktioner av  $x$ , och skissera på liknande sätt motsvarande sannolikhetstätheter.

### (b) Energier och amplituder

Visa genom direkt insättning att grundtillståndets vågfunktion  $\psi_0(x)$  ovan är en lösning till Schrödingerekvationen och bestäm på så sätt grundtillståndets energi uttryckt i vinkelfrekvensen  $\omega$ . Beräkna den svängningsamplitud som denna energi skulle ge enligt klassisk teori och markera den i skissen över sannolikhetstätheterna! Gör sedan en ungefärlig uppskattning av sannolikheten att finna atomen utanför det klassiskt tillåtna området, d.v.s. på större avstånd från jämviktsläget än den beräknade svängningsamplituden!

### (c) Nollpunktssvängningar

En av slutsatserna från den kvantmekaniska behandlingen är tydligen att grundtillståndets energi inte är noll. I motsats till vad klassisk fysik säger ligger alltså atomerna inte stilla vid den absoluta nollpunkten utan de utför så kallade "nollpunktssvängningar". Det kan ses som en illustration av Heisenbergs osäkerhetsrelation som förbjuder en partikel att samtidigt ha ett bestämt läge (jämviktsläget) och en bestämd hastighet (noll).

Avstånden mellan näraliggande atomer i fasta ämnen är av storleksordningen 0,5 nm. Tror du med hänsyn till resultatet från föregående deluppgift att nollpunktssvängningarna har någon väsentlig betydelse för materialegenskaperna, om de värden på  $k$  och  $\omega$  som du räknat med är realistiska?

Betrakta de tre metallerna litium (Li), aluminium (Al) och wolfram (W). För dessa ämnen gäller att avstånden mellan atomerna är av ungefär samma storleksordning, men i andra avseenden finns det stora skillnader. Wolfram är en tung och hård metall, litium är en lätt och mjuk metall, medan aluminium i båda dessa avseenden intar en mellanställning. Diskutera vilken betydelse dessa skillnader kan ha för de atomernas svängningsrörelse. För vilken av de tre metallerna tror du att nollpunktssvängningarna är störst?