

## Partikler og bølger (10 point)

Ved partikel-bølge dualitet forstås, at en partikel kan tilskrives bølgeegenskaber og omvendt at en bølge også har partikelegenskaber. Dette er et af de centrale begreber i kvantemekanikken. I denne opgave vil vi benytte dette begreb sammen med nogle få grundlæggende antagelser til at undersøge nogle udvalgte kvantefænomener, som vedrører to partikeltyper, nemlig fermioner og bosoner.

### Del A. En kvantepartikel i en kasse (1.4 point)

Betragt bevægelsen af en partikel med masse  $m$  i en endimensional potentialbrønd, hvor partiklens potentielle energi  $V(x)$  er givet ved

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L; \\ \infty, & x < 0 \text{ eller } x > L. \end{cases} \quad (1)$$

En klassisk partikel kan bevæge sig i brønden med en vilkårlig kinetisk energi. For en kvantepartikel er derimod kun bestemte, positive, diskrete energiniveauer tilladte. Når kvantepartiklen har en sådan tilladt energi, vil den være beskrevet som en stående de Broglie bølge med knudepunkter ved potentialbrøndens to vægge.

- |            |   |       |
|------------|---|-------|
| <b>A.1</b> | Bestem den mindst mulige energi $E_{\min}$ som kvantepartiklen kan have i brønden. Udtryk dit svar ved størrelserne $m$ , $L$ og Planckkonstanten $h$ . | 0.4pt |
|------------|---|-------|

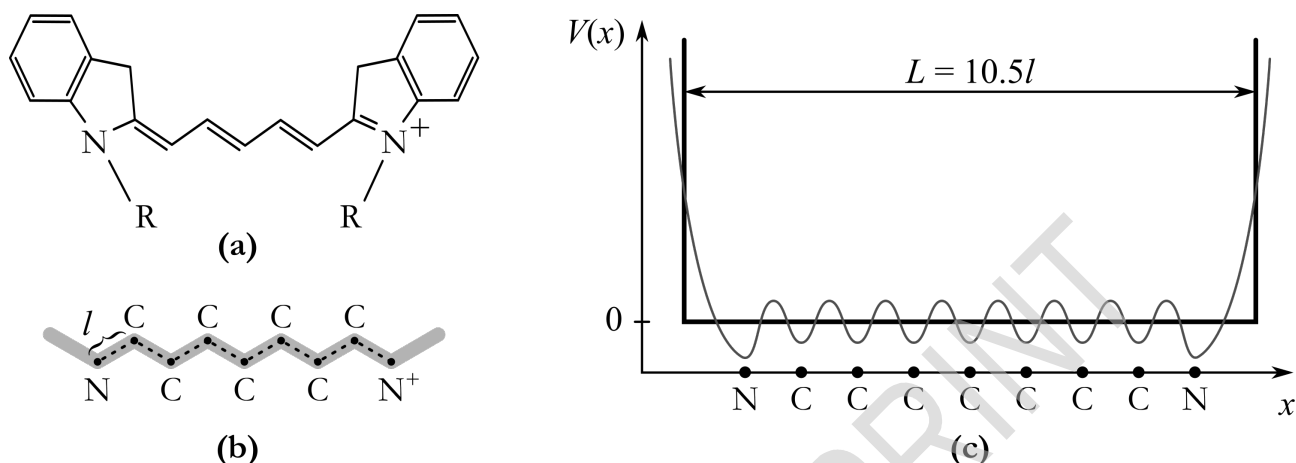
Tilstanden for partiklen med mindst mulig energi kaldes grundtilstanden. De øvrige energiniveauer herover kaldes exciterede tilstande. Energiniveauerne  $E_n$  angives i voksende rækkefølge, hvor  $E_1$  som grundtilstanden.

- |            |   |       |
|------------|---|-------|
| <b>A.2</b> | Bestemt det generelle udtryk for energien $E_n$ (hvor $n = 1, 2, 3, \dots$ ). | 0.6pt |
|------------|---|-------|

- |            |   |       |
|------------|---|-------|
| <b>A.3</b> | Partiklen kan foretage en instantan overgang fra én tilstand til en anden ved at emitte eller absorbere en foton med en energi, der er lig med energiforskellen mellem de to tilstande. Bestem bølglængden $\lambda_{21}$ af den foton, der udsendes, når en partikel henfalder fra den første exciterede tilstand ( $E_2$ ) til grundtilstanden ( $E_1$ ). | 0.4pt |
|------------|---|-------|

### Del B. Optiske egenskaber af molekyler (2.1 point)

I denne del skal du undersøge nogle optiske egenskaber af cyanin Cy5-molekylet. Dette molekyle anvendes ofte til farvning, og molekylestrukturen er vist på Fig. 1a. Molekylets optiske egenskaber er hovedsageligt bestemt af kulstofkæden, som består af skiftevis enkelt- og dobbeltbindinger mellem kulstofatomer, se Fig. 1b. Indflydelsen fra ringene i hver ende af molekylet og fra radikalerne R er meget mindre. Tre af de fire valenselektroner i hvert C-atom (og i N-atomerne) i kulstofkæden danner kemiske bindinger, mens resten af valenselektronerne er "delte", så de kan bevæge sig langs hele kulstofkæden. Den potentielle energi for de elektroner, der kan bevæge sig langs kulstofkæden, er vist som den tyndt optrukne oscillerende funktion på Fig. 1c, hvor funktionens minimumspunkter svarer til C- og N-atomernes positioner.



Figur 1. (a) Den kemiske struktur af cyanin Cy5-molekylet. For at forenkle diagrammet er hydrogenatomer ikke vist, og R angiver radikaler. (b) Kulstofkæden i Cy5-molekylet, hvor midt-afstanden mellem atomerne er  $l$ . (c) Den potentielle energi for en elektron, der kan flytte sig langs kulstofkæden (tyndt optrukket linje) og tilnærmelsen til den potentielle energi ved trinfunktionen angivet i ligning (1) (tykt optrukket linje).

Vi vil tilnærme den nævnte potentielle energi med den simple funktion angivet i ligning 1 (tykt optrukket linje på Fig.1 c). Her er  $L = 10.5l$ , hvor  $l = 140$  pm er afstanden mellem to naboatomer (se også Fig. 1b). Vi har nu en "elektrongas" bestående af 10 elektroner (7 fra C-atomerne, 2 fra N-atomet og 1 fra  $N^+$ -ionen), som kan bevæge sig i den endimensionale potentialbrønd omtalt i del A. Du kan se bort fra vekselvirkningen mellem elektronerne, men du skal dog tage hensyn til at elektronerne er fermioner, der adlyder Paulis udelukkelsesprincip. Du kan se bort fra kernerens bevægelse.

**B.1** Bestem et udtryk for den største bølgelængde  $\lambda$  som en foton kan have, hvis den skal absorberes af Cy5-molekylet, når elektronerne har placeret sig således, at molekylet er i sin grundtilstand. Svaret skal udtrykkes ved  $l$ , fysiske konstanter og et dimensionsløst tal. Beregn desuden den numeriske værdi af dit svar. 0.8pt

**B.2** Et andet farvemolekyle, Cy3, har en lignende struktur, men kulstofkæden er to C-atomer kortere. Vil absorptionsspektret skifte mod den blå eller den røde del af spektret, sammenlignet med Cy5-molekylet? Beregn den numeriske værdi for ændringen  $\Delta\lambda$  i bølgelængde. Du kan regne med, at fjernelsen af de to C-atomer ikke ændrer molekylets facon og kun forkorter længden af kulstofkæden med to led. 0.4pt

Fra den exciterede tilstand kan molekylerne spontant henfalde til grundtilstanden ved at udsende fotoner. Den gennemsnitlige rate  $K$  af henfaldsbegivenheder (den relative ændring af antallet af molekyler i den exciterede tilstand  $dN/N$  i løbet af tiden  $dt$ , d.v.s.  $K = \frac{1}{N} \frac{dN}{dt}$ ) afhænger af bølgelængden  $\lambda$  af den udsendte foton, af det elektriske dipolmoment  $d$  (som tilnærmet er  $d \simeq el$ , hvor  $e$  er elementarladningen), af vakuumpermittiviteten  $\epsilon_0$  og af Planckkonstanten  $h$ .

**B.3** Benyt dimensionsanalyse til at bestemme et udtryk for den gennemsnitlige rate  $K$ , udtrykt ved  $\epsilon_0, h, \lambda$  og  $d$ . Den dimensionsløse, konstante faktor i udtrykket har værdien  $k = \frac{16}{3}\pi^3$ . 0.7pt

- B.4** For Cy5-molekylet er  $d \approx 2.4$  el. Bestem gennemsnitslevetiden  $\tau_{\text{Cy5}}$  for den laveste exciterede tilstand for Cy5-molekylet. Gennemsnitslevetiden er den reciprokke værdi af den gennemsnitlige rate. 0.2pt

### Del C. Bose-Einstein kondensation (1.5 point)

Denne del er ikke direkte afhængig af del A og B. I del C skal du undersøge den kollektive opførsel af bosoniske partikler. Bosoner adlyder ikke Paulis udelukkelsesprincip og kan derfor ved lave temperaturer eller høje partikeltætheder udvise et dramatisk fænomen kaldet Bose-Einstein kondensation (BEC). Bose-Einstein kondensation er en faseovergang til en kollektiv kvantetilstand: Et stort antal identiske partikler samler sig i en enkelt kvantetilstand og begynder at opføre sig som én samlet bølge. Overgangen opnås typisk ved nedkøling af et bestemt antal partikler til under den kritiske temperatur for faseovergangen. Faseovergangen kan i princippet også opnås for fastholdt temperatur ved at ændre partikeltætheden, så den kommer over den kritiske værdi.

Først skal du undersøge sammenhængen mellem temperatur og partikeltæthed ved overgangen. Det viser sig, at de kritiske værdier kan udledes ud fra følgende simple princip: *Bose-Einstein kondensation indtræder, når de Broglie bølgelængden svarende til middelværdien af kvadratet på partiklernes fart er lig med den typiske afstand mellem partiklerne i gassen.*

- C.1** Givet en ikke-vekselvirkende gas af  $^{87}\text{Rb}$ -atomer i termisk ligevægt. Opskriv udtrykkene for atomernes typiske bevægelsesmængde  $p$  og typiske de Broglie bølgelængde  $\lambda_{\text{dB}}$  som funktion af atomets masse  $m$ , gassens absolutte temperatur  $T$  og fysiske konstanter. 0.4pt

- C.2** Bestem et udtryk for den typiske afstand  $\ell$  mellem partiklerne i gassen som funktion af partikeltætheden  $n$ . Udled herved et udtryk for den kritiske temperatur  $T_c$  som funktion af atomets masse, partikeltætheden og fysiske konstanter. 0.5pt

For at kunne opnå BEC i laboratoriet, må de anvendte atomare gasser nedkøles til under  $T_c = 100$  nK.

- C.3** Hvad er partikeltætheden  $n_c$  af Rb-atomerne i gassen ved den nævnte temperatur? For at sammenligne, skal du også beregne den 'almindelige' partikeltæthed  $n_0$  af en ideal gas ved standardtemperatur og standardtryk (STP), dvs. ved  $T_0 = 300$  K og  $p_0 = 10^5$  Pa. Hvor mange gange større er tætheden  $n_0$  af den 'almindelige' gas i forhold til partikeltætheden  $n_c$ ? Benyt, at atommassen af et Rb-atom er 87 atommasseenheder ( $m_{\text{amu}}$ ). 0.6pt

### Optisk gitter dannet af tre stråler (5.0 point)

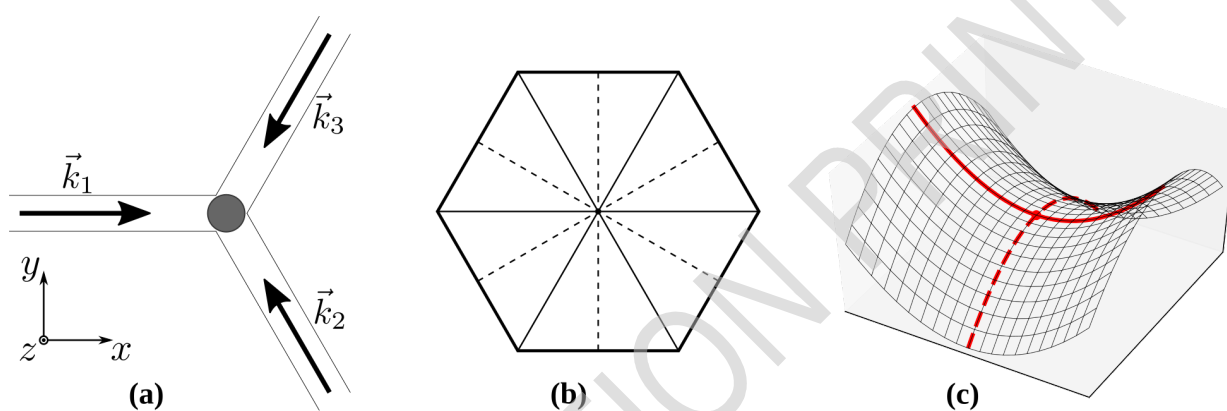
De første Bose-Einstein kondensater blev fremstillet i 1995, og siden da har det eksperimentelle arbejde delt sig i flere retninger. I denne del skal du undersøge en særlig nyttig måde til at placere kondensatet i potential der varierer periodisk i rummet. Potentialer er dannet ud fra interferens mellem kohærente laserstråler. På grund af den periodiske opførsel af det resulterende interferensmønster taler man om *optiske gitter*. Den potentielle energi  $V(\vec{r})$  som et atom har, når det bevæger sig i et optisk gitter, er proportional med den lokale lysintensitet, og i dine beregninger skal du antage, at

$$V(\vec{r}) = -\alpha \langle |\vec{E}(\vec{r}, t)|^2 \rangle. \quad (2)$$

Her er  $\alpha$  en *positiv* konstant, og vinkelsymbolerne omkring en størrelse angiver gennemsnit over tiden, hvilket eliminerer led, der svinger hurtigt. Det elektriske felt fra laser nr.  $i$  er givet ved

$$\vec{E}_i = E_{0,i} \vec{e}_i \cos(\vec{k}_i \cdot \vec{r} - \omega t), \quad (3)$$

hvor amplituden er  $E_{0,i}$ , bølgevektoren  $\vec{k}_i$ , og enhedsvektoren, der beskriver polarisationsretningen, er  $\vec{e}_i$ .



Figur 2. (a) Optisk gitter med tre stråler: Tre plane bølger med bølgevektorer  $\vec{k}_{1,2,3}$  krydser hinanden og interfererer i området angivet ved den grå cirkel. (b) Symmetriretninger i en ligesidet sekskant. Fuldt optrukne og stiplede linjer viser de to sæt symmetriakser. (c) Sadel-punkt: Et punkt på en flade, hvor tangenthældningen i alle retninger er nul, men som ikke er et lokalt ekstremumspunkt. Bevæger man sig langs den fuldt optrukne snitkurve optræder et minimum. Men man er nødt til også at se på hvad der sker langs den stiplede snitkurve for at skelne mellem et minimumspunkt og et sadelpunkt (som vist på figuren).

Din opgave er at undersøge *trekantede optiske gitter* dannet ved interferens mellem tre kohærente laserstråler med samme intensitet. En typisk situation er vist på Fig. 2a. Her er alle tre stråler polariseret i  $z$ -retningen. Strålerne udbreder sig i  $xy$ -planen, og skærer hinanden i lige store vinkler på  $120^\circ$ . Vælg retningen for  $x$ -aksen så den er parallel med bølgevektoren  $\vec{k}_1$ .

**D.1** Benyt ligning 2 og 3 til at udlede et udtryk for den potentielle energi  $V(\vec{r})$  som funktion af  $\vec{r} = (x, y)$  i strålernes plan. 1.4pt  
*Vink:* Resultatet kan udtrykkes pænt som et konstant led plus en sum af tre cosinusfunktioner med argumenter  $\vec{b}_i \cdot \vec{r}$ . Opskriv venligst dine resultater på denne form og identificér vektorerne  $\vec{b}_i$ .

**D.2** Den fremkomne potentielle energi har seksfoldig rotationssymmetri, dvs. at potentialfunktionen er invariant med hensyn til en drejning om origo på et helt tal gange  $60^\circ$ . Giv et simpelt argument for at dette faktisk er tilfældet. 0.5pt

Den nævnte symmetri forenkler analysen af den todimensionale potentialfunktion  $V(\vec{r})$ . Som vist på Fig. 2b, har en ligesidet sekskant symmetrilinjer, der forbinder modsatte hjørner (fuldt optrukne linjer) og midtpunkterne på modsatte sider (stiplede linjer). Man behøver derfor kun at se nærmere på, hvad der sker langs koordinataksene  $x$  og  $y$  langs symmetrilinjerne.



- D.3** Udled formelen for potentialet  $V(\vec{r})$  langs koordinataksene, dvs. bestem snit-funktionerne  $V_X(x) \equiv V(x, 0)$  og  $V_Y(y) \equiv V(0, y)$ . Bestem positionen af ekstremumpunkterne for  $V_X(x)$  og  $V_Y(y)$  som funktion af én variabel. Da disse funktioner er periodiske skal du i dit svar kun angive én repræsentant fra hver familie af de periodisk gentagne minimums- og maksimumspunkter. 1.2pt

Vi er interesserede i at bestemme positionen af de såkaldte *gitterpunkter*, dvs. minimumspunkterne for den fulde to-dimensionale potentialfunktion  $V(\vec{r})$ . De fundne minimumspunkter for de to funktioner  $V_X$  og  $V_Y$  identificerer mulige ekstremumpunkter, men skal stadig tjekkes for, om de kunne være saddelpunkter, se Fig. 2c.

- D.4** Undersøg dine resultater fra det foregående spørgsmål for at bestemme de sande minimumspunkter for det optiske gitter: Identificér alle minimumspunkter tættest på origo. Hvad er afstanden mellem to nabo-minimumspunkter (benævnt *gitterkonstanten*) for det optiske gitter? Udtryk dit svar ved bølgelængden  $\lambda_{\text{las}}$  af laseren. 0.8pt

De ultrakolde atomer er ladningsneutrale, så deres vekselvirkning er kun relevant, når to eller flere atomer sidder tæt på hinanden i samme gitterpunkt i det optiske gitter. I eksperimenter kan man dog godt studere vekselvirkning mellem atomer over større afstande. En mulig metode er at benytte såkaldte *Rydberg-atomer*. Det er atomer, hvor en elektron er exciteret til et energiniveau med et meget højt kvantetal  $n$ . Størrelsen af et Rydberg-atom kan estimeres ved at beregne radius for den klassiske cirkelbane for en elektron med impulsmoment  $n\hbar$ , hvor  $\hbar$  er den reducerede Planckkonstant.

- D.5** Beregn den værdi af  $n$ , der svarer til, at radius af et Rb Rydberg-atom er sammenlignelig med bølgelængden for laseren  $\lambda_{\text{las}}$ . Udtryk dit formelsvar ved størrelsen  $\lambda_{\text{las}}$  og fysiske konstanter. Bestem sluttelig talværdien for  $n$ , når  $\lambda_{\text{las}} = 380$  nm. 1.1pt