NTNU
Fakultet for Naturvitskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Fasit TFY4215/FY1006 Innføring i kvantefysikk Vår 2014

Faglærar: Professor Jens O. Andersen
Institutt for Fysikk, NTNU

Mandag 26. mai 2014
kl. 09.00-13.00

Tillatne hjelpemiddel:
Godkjend kalkulator
Rottmann: Matematisk Formelsamling
Rottmann: Matematische Formelsammlung
Barnett & Cronin: Mathematical Formulae
Angell og Lian: Fysiske størrelser og enheter: navn og symboler

Oppgåve 1

a) I sylinderkoordinatar er

$$\mathbf{r} = \rho\mathbf{e}_\rho + z\mathbf{e}_z \tag{1}$$
$$\nabla = \mathbf{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \mathbf{e}_\phi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi} + \mathbf{e}_z\frac{\partial}{\partial z} \tag{2}$$

Dreiempulsoperatoren er gjeven ved $\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\mathbf{r}\times\nabla$. For bevegelse i xy-planet er $z = \frac{\partial}{\partial z} = 0$ og dette gjev

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\mathbf{e}_z\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$= \underline{\underline{-i\hbar \mathbf{e}_z \frac{d}{d\phi}}} \; . \tag{3}$$

Vi kan her nytte $\frac{d}{d\phi}$ istadenfor $\frac{\partial}{\partial\phi}$ sidan $\rho = R$ er konstant.

b) Hamiltonoperatoren for ein fri partikkel er gjeven ved

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \\
&= -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2}{d\phi^2} \; . \\
&= \underline{\underline{\frac{\hat{L}_z^2}{2mR^2}}} \; . \qquad (4)
\end{aligned}$$

Kommentar: Det er ein del studentar som innfører eit potensial $V(r)$. Ein kan tenkje seg at eit slikt potensial er naudsynt for å halde partikkelen på sirkelen. Det er heilt greitt viss ein da legg til at $r = R =$ konstant slik at ein kan sjå bort frå potensialet (som er konstant i denne oppgåva). Det er og ein del studentar som innfører potensialet $V(r, \phi)$ eller $V(\phi)$. Det er feil sidan det ikkje er nemnt noko om potensial i teksten. I tillegg vil eit slikt potensial ikkje kommutere med $\hat{L}_z$. Dette er det ein del som ikkje tek omsyn til eller ignorerer. Her kunne oppgåve ha vore litt meir presis, men det skal vere greit viss ein forklarer kva ein antek.

c) Dette følgjer trivielt av at $\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2mR^2}$ og at $\hat{L}_z$ kommuterer med seg sjølv.

d) Eigenfunksjonane $\psi(\phi)$ til $\hat{L}_z$ er gjevne ved

$$-i\hbar\frac{d\psi}{d\phi} = l_z\psi \; . \tag{5}$$

der l_z er eigenverdien. Denne likninga har løysing

$$\psi(\phi) = Ae^{il_z\phi/\hbar} \; , \tag{6}$$

der A er ein konstant. Sidan bølgjefunksjonen skal vere kontinuerleg, må vi ha

$$\psi(0) = \psi(2\pi) \; . \tag{7}$$

Dette gjev $e^{2\pi i l_z/\hbar} = 1$ eller

$$l_z = \underline{\underline{n\hbar}} \; . \tag{8}$$

der $n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ Sidan $\hat{H} \sim \hat{L}_z^2$ er (6) og eigenfunksjon til $\hat{H}$. Energinivåa finn ein ved innsetting

$$E_n = \underline{\underline{\frac{\hbar^2 n^2}{2mR^2}}} \; . \tag{9}$$

Vi bruker nå kvantetalet n som merkelapp på eigenfunksjonane og skriv dei som $\psi_n(\phi) = C_n e^{in\phi}$. Skalarproduktet mellom $\psi_n(\phi)$ og $\psi_m(\phi)$ er

$$\begin{aligned} \langle \psi_m \psi_n \rangle &= C_m^* C_n \int_0^{2\pi} \psi_m^*(\phi)\psi_n(\phi)\, d\phi \\ &= C_m^* C_n \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\phi}\, d\phi \, . \end{aligned} \tag{10}$$

For $n = m$, ser ein at integralet er lik $2\pi|C_n|^2$. For $n \neq m$ får vi

$$\begin{aligned} C_m^* C_n \int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\phi}\, d\phi &= \frac{C_m^* C_n}{i(n-m)} e^{i(n-m)\phi}\Big|_0^{2\pi} \\ &= 0 \, . \end{aligned} \tag{11}$$

Bølgjefunksjonane blir normerte viss $C_n = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$, der vi har vald fasen reell. Dei normerte eigenfunksjonane blir tilslutt

$$\psi_n(\phi) = \underline{\underline{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\phi}}} \, . \tag{12}$$

som viser at settet $\{\psi_n\}_{n=0}^{\infty}$ er ortonormalt.

Vi ser at grunntilstanden har $n = 0$ og er ikkje-degenerert. Tilstanden med $n = -1$ har same energi som tilstanden med $n = 1$ osb, slik at alle eksiterte tilstander har degenerasjonsgrad $g = 2$. I beviset for at det ikkje er degenerasjon i ein dimensjon, gjer ein bruk av at det finst ein x^* slik at $\psi(x^*) = 0$ for alle eigenfunksjonar. For ein partikkel som bevegar seg på ein sirkel ser vi at $\psi_n(\phi) \neq 0$ for alle ϕ, og det er ingen motsetnad mellom teoremet og resultatet i denne oppgåva.

e) Paritetsoperatoren transformerer $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ og dermed $\rho \to \rho$, $\phi \to \phi + \pi$ og $z \to -z$. Dette impliserer at

$$\hat{\mathcal{P}}\psi_n(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in(\phi+\pi)} \tag{13}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (-1)^n e^{in\phi} \\ &= (-1)^n \psi_n(\phi) \, , \end{aligned} \tag{14}$$

Svaret er altså $\underline{\underline{\text{ja}}}$ og eigenverdien til $\hat{\mathcal{P}}$ er ± 1 avhengig av om n er like eller odde.

Kommentar: Transformasjonen $\phi \to \phi + \pi$ gjev $\frac{d}{d\phi} \to \frac{d}{d\phi}$, og difor $\hat{L}_z \to \hat{L}_z$ og $\hat{H} \to \hat{H}$ under paritet. Dette impliserer at $[\hat{\mathcal{P}}, \hat{L}_z] = [\hat{\mathcal{P}}, \hat{H}] = 0$ og det eksisterer altså simultane eigenfunksjonar for desse tre operatorane og det er dei vi har funne.
Det er ein del som skriv $\hat{P}\psi(\phi) = \psi(-\phi)$ som er inspirert av $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$, men er feil.

Oppgåve 2

a) Absoluttverdikvadratet av bølgjefunksjonen er

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2\hbar}m\omega x_0^2} e^{-\frac{1}{4\hbar}m\omega x_0^2(e^{-2i\omega t}+e^{2i\omega t})} e^{\frac{m\omega x_0 x}{\hbar}(e^{-i\omega t}+e^{i\omega t})} e^{-\frac{1}{\hbar}m\omega x^2} . \tag{15}$$

Vi bruker nå at $(e^{-2i\omega t}+e^{2i\omega t}) = 2\cos(2\omega t) = 4\cos^2\omega t - 2$ og at $(e^{-i\omega t}+e^{i\omega t}) = 2\cos(\omega t)$. Etter innsetting gjev dette

$$|\Psi(x,t)|^2 = \underline{\underline{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-m\omega(x-x_0\cos(\omega t))^2/\hbar}}} . \tag{16}$$

Kommentar: Det er skuffande mange som multipliserer alle faktorar i eksponentane med to for å rekne ut $|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$. Uttrykket dei få er då **ikkje** reelt. Likevel kjem dei på mirakuløst vis fram til rett svar.
b) $|\Psi(x,t)|^2$ er lik ei Gaussfordeling med tyngdepunkt i $x = x_0\cos(\omega t)$. Forventningsverdien til x blir difor

$$\langle x\rangle_{\Psi(x,t)} = \underline{\underline{x_0\cos(\omega t)}} . \tag{17}$$

c) Vi skal rekne ut

$$\begin{aligned}\langle p\rangle_{\Psi(x,t)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\hat{p}\Psi(x,t)\,dx \\ &= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\frac{d\Psi(x,t)}{dx}\,dx\end{aligned} \tag{18}$$

Frå uttrykket for $\Psi(x,t)$ finn ein den deriverte

$$\begin{aligned}-i\hbar\frac{d\Psi(x,t)}{dx} &= im\omega\left[x - x_0e^{-i\omega t}\right]\Psi(x,t) \\ &= m\omega\Big\{i\left[x - x_0\cos(\omega t)\right] - x_0\sin(\omega t)\Big\}\Psi(x,t) .\end{aligned} \tag{19}$$

Dette gjev

$$\langle p\rangle_{\Psi(x,t)} = m\omega\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2\Big\{i[x - x_0\cos(\omega t)] - x_0\sin(\omega t)\Big\} .$$

Sidan $|\Psi(x,t|^2$ er ei Gaussfordeling sentrert rundt $x = x_0\cos(\omega t)$ er første leddet i integranden odde og gjev null ved integrasjon. Det andre leddet er uavhengig av x og integralet er difor berre normeringsintegralet som er lik ein. Dette gjev

$$\langle p\rangle_{\Psi(x,t)} = -m\omega x_0\sin(\omega t) . \tag{20}$$

Konstanten er altså $A = \underline{\underline{-m\omega x_0}}$.

Kommentar: Det er mange studentar som brukte Ehrenfests teorem til å rekne ut $\langle p\rangle_{\Psi(x,t)}$:

$$\begin{aligned} \langle p\rangle &= m\frac{d}{dt}\langle x\rangle \\ &= -m\omega x_0 \sin(\omega t) \ . \end{aligned} \tag{21}$$

Det tenkte eg ikkje på, men er meir elegant enn løysinga over.
Vi ser at $\langle x\rangle_{\Psi(x,t)}$ og $\langle p\rangle_{\Psi(x,t)}$ er lik dei klassiske løysingane for $x(t)$ og $p(t)$ for ein harmonisk oscillator med initialkrava $x(0) = x_0$ og $p(0) = 0$. Dette er eit døme på Ehrenfests teorem, men det var ikkje spurd om dette i oppgåva.

Oppgåve 3

a) Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga er

$$\hat{H}\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi) \ , \tag{22}$$

der Hamiltonoperatoren i kulekoordinatar er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right] + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r) \ . \tag{23}$$

Ved å bruke at $\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\phi)$, og $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$, kan vi skrive den tidsuavhengige Schrödingerlikninga som ei radiallikning for R på vanleg måte:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\} R(r) = 0 \ . \tag{24}$$

Dersom vi skiftar variabel $x = r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ får vi $\frac{d}{dr} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{dx}$ etc. Ved innsetting av $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega x^2$ gjev dette

$$-\frac{1}{2}\hbar\omega\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx} - \frac{l(l+1)}{x^2}\right]u(x) + \frac{1}{2}\hbar\omega x^2 u(x) = Eu(x) \tag{25}$$

Vi har $R(r) = u(x) = v(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}$. Dette gjev

$$u'(x) = v'(x)e^{-\frac{1}{2}x^2} - v(x)xe^{-\frac{1}{2}x^2} \ , \tag{26}$$

$$u''(x) = v''(x)e^{-\frac{1}{2}x^2} - 2v'(x)xe^{-\frac{1}{2}x^2} + v(x)\left(x^2 - 1\right)e^{-\frac{1}{2}x^2} \ . \tag{27}$$

Innsetting av $u'(x)$ og $u''(x)$ og forkorting med $\frac{1}{2}\hbar\omega$ og $e^{-\frac{1}{2}x^2}$ gjev

$$\underline{\underline{v''(x) + 2\left(\frac{1}{x} - x\right)v'(x) + \left(\epsilon - 3 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right)v(x) = 0}} \ , \tag{28}$$

der $\epsilon = E/(\frac{1}{2}\hbar\omega)$

b) Vi bruker potensrekkjemetoden og skriv

$$v(x) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \; . \tag{29}$$

Dette gjev

$$v'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-1} \; , \tag{30}$$

$$v''(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n(n-1) x^{n-2} = \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1) x^{n-2} \; . \tag{31}$$

Innsetting med $l = 0$ i radiallikninga gjev

$$\begin{aligned} \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} + \frac{2a_1}{x} + 2\sum_{n=2}^{\infty} a_n n x^{n-2} - 2\sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^n & \\ +(\epsilon - 3)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \;=\; 0 \; , & \end{aligned} \tag{32}$$

der vi har tatt ut eitt ledd frå summen for $v'(x)$. Dersom vi startar summen med $n = 0$ i det første og andre leddet, må vi redefinere summeindeksen. Etter litt opprydding får vi

$$\frac{2a_1}{x} + \sum_{n=0}^{\infty} \left[a_{n+2}(n+2)(n+3) + (\epsilon - 2n - 3)\, a_n\right] x^n \;=\; 0 \; .$$

Koeffisienten foran kvar potens av x må vere lik null. Dette gjev $a_1 = 0$ og rekursjonsformelen

$$a_{n+2} \;=\; \underline{\underline{\frac{2n+3-\epsilon}{(n+2)(n+3)} a_n}} \; . \tag{33}$$

$a_1 = 0$ impliserer at alle dei odde koeffisientane er lik null, $a_{2n+1} = 0$ $(n = 0, 1, 2, 3...)$

c) Ein ventar at grunntilstanden har $l = 0$ fordi det effektive potensialet er djupast i dette tilfellet. I tillegg ventar ein at polynomet $v_0(x)$ er utan nullpunkt. Det impliserer at rekkja for $v_0(x)$ bryt av etter første ledd, det vil seie for $n = 0$ i rekursjonsformelen. Dette gjev $v_0(x) = a_0$, $\epsilon = 3$ og $u(x) = a_0 e^{-\frac{1}{2}x^2}$. Dette gjev grunntilstandsenergien $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

Kommentar: Den normerte bølgjefunksjonen blir tilslutt

$$\psi_0(r, \theta, \phi) \;=\; \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{1}{2}m\omega r^2/\hbar} \; , \tag{34}$$

der vi har nytta at $Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ og innsett $x = r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. Sidan Hamilton-operatoren for ein tredimensjonal oscillator kan skrivast som ein sum av tre eindimensjonale oscillatorar, er bølgjefunksjonen eit produkt av tre slike og energien er additiv. Grunntilstanden for ein tredimensjonal oscillator er såleis produktet av 3 bølgjefunksjonar for ein eindimensjonal oscillator i grunntilstanden med energi $E_0 = 3\frac{1}{2}\hbar\omega$.

Oppgåve 4

a) Kvantemekanisk tunnellering er at ein partikkel kvantemekanisk kan bevege seg gjennom eit område som er forbode klassisk. Eit døme er ein α-partikkel som bevegar seg i eit brønn-potensial inni ei tung kjerne. α-partikkelen kan tunnellere gjennom barrieren og kome ut på andre sida og resultatet er radioaktivitet.

b) Bohr antok at elektronet bevegar seg i sirkelbaner rundt kjerna omtrent som planetar bevegar seg rundt sola (bortsett frå at dette er ellipsebaner). Radien til desse sirkelbanene er gjevne ved eit heiltal gonger de Broglie-bølgjelengda til elektronet. Desse banene var stabile (stasjonære tilstandar) der lova om elektromagnetisk stråling frå ein akselerert partikkel er oppheva. Slike baner har ulik energi:

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{n^2}\,, \tag{35}$$

der $n = 1, 2, 3...$ og α er finstrukturkonstanten. Når elektronet hoppar frå ei bane til ei anna vil atomet sende ut eller absorbere energien til eit foton som har energi lik energidifferansen mellom banene. Modellen forklarer såleis absorpsjonsspektret til hydrogen. Forventningsverdien til $\langle r\rangle$ er proporsjonal med a_0. Dette følgjer frå dimensjonsanalyse. For grunntilstanden i hydrogen har vi $\langle r\rangle = \frac{3}{2}a_0$ og a_0 er difor eit mål på kor stort hydrogenatomet er.

c) Viss ein kommutator mellom to operatorar $\hat{F}$ og $\hat{G}$ er lik null, eksisterer det eit felles fullstendig sett av eigenfunksjonar. Dei tilhøyrande observablane F og G kan då vere skarpe samtidig. Kommutatoren $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ viser at det ikkje finst tilstandar der posisjon og impuls er skarpe samtidig.

d) Ehrenfests teorem fortel oss at middelverdiane til observablane $\mathbf{r}$ og $\mathbf{p}$ tilfredstiller Newtons bevegelseslikningar.