



NTNU

Fakultet for Naturvitenskap og Teknologi

Institutt for Fysikk

Fasit TFY4215/FY1006 Innføring i kvantemekanikk august 2014

Faglærer: Professor Jens O. Andersen

Institutt for Fysikk, NTNU

Telefon: 73593131

August 2014
kl. 15.00-19.00

Tillatte hjelpemiddel:

Godkjend kalkulator

Rottmann: Matematisk Formelsamling

Rottmann: Matematische Formelsammlung

Barnett & Cronin: Mathematical Formulae

Angell og Lian: Fysiske størrelser og enheter: navn og symboler

Oppgavesettet er på fem sider. Les oppgåvene nøye. Spør dersom noko er uklart. Lykke til.

Oppgåve 1

a) Sidan bølgefunksjonen er symmetrisk, er $\psi_0(x) = \psi_0(-x)$. Dette gjev

$$\underline{A = C} \quad (1)$$

b) Bortsett frå i punkta $x = -L$ og $x = L$, er potensialet $V(x) = 0$. Innsetting av t.d. $\psi_0(x) = Ae^{-Kx}$ i Schrödingerlikninga finn ein difor

$$-\frac{\hbar^2}{2m}K^2Ae^{-Kx} = E_0Ae^{-Kx}. \quad (2)$$

Dette gjev

$$\underline{\underline{K = +\sqrt{\frac{-2mE_0}{\hbar^2}}}}, \quad (3)$$

der vi har må velje den positive rota for at $\psi(x)$ skal vere normerbar og beskrive ein bunden tilstand. Dette tyder at $E_0 < 0$.

c) Frå uttrykka for bølgefunksjonen har vi

$$\lim_{x \rightarrow L^+} \psi(x) = Ce^{-KL}, \quad (4)$$

$$\lim_{x \rightarrow L^-} \psi(x) = B \cosh(KL). \quad (5)$$

Kontinuiteten til $\psi(x)$ i $x = L$ gjev difor

$$\underline{\underline{B \cosh(KL) = Ce^{-KL}}}. \quad (6)$$

Grunntilstanden er skissert i figur 1.

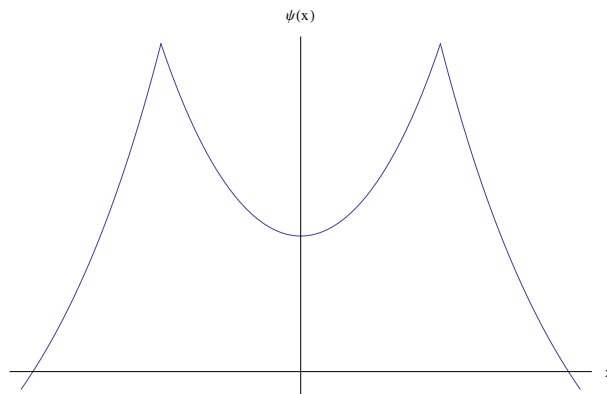


Figure 1: Symmetrisk grunntilstand.

d) Frå uttrykka for den deriverte til bølgefunksjonen har vi

$$\lim_{x \rightarrow L^+} \psi'(x) = -CKe^{-KL}, \quad (7)$$

$$\lim_{x \rightarrow L^-} \psi'(x) = BK \sinh(KL). \quad (8)$$

Med diskontinuiteten til ψ' frå formelarket, får vi

$$\underline{\underline{BK \sinh(KL) + CKe^{-KL} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}Ce^{-KL}}}. \quad (9)$$

e) Innsetting av likning (6) i likning (9) og litt opprydding gjev

$$\underline{\underline{e^{-2KL} = \frac{\hbar^2 K}{\beta m} - 1}}. \quad (10)$$

Venstresida er ein strengt minkande funksjon $f(x)$ for alle $K > 0$ og $f(0) = 1$. Høgresida er ein lineær funksjon $g(x)$ med positiv helning og $g(0) = -1$. Funksjonane $f(x)$ og $g(x)$ må då krysse kvarandre for ein verdi av $K = K^* > 0$. Det vil seie det finst nøyaktig ein bunden tilstanden der $\psi(x)$ er symmetrisk. Dette er illustrert i figur 2.

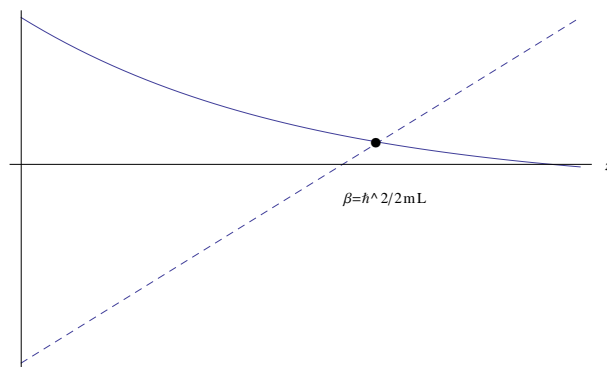


Figure 2: Grafisk løysing av (10) som gjev ein symmetrisk bunden tilstand for alle verdiar av $\beta > 0$. I plottet har ein nytta $\beta = \hbar^2/2mL$.

f) For den antisymmetriske bølgefunksjon har vi $\psi_1(x) = \psi_1(-x)$. Dette gjev $A = -C$. Bølgefunksjonen er skissert i figur 3.

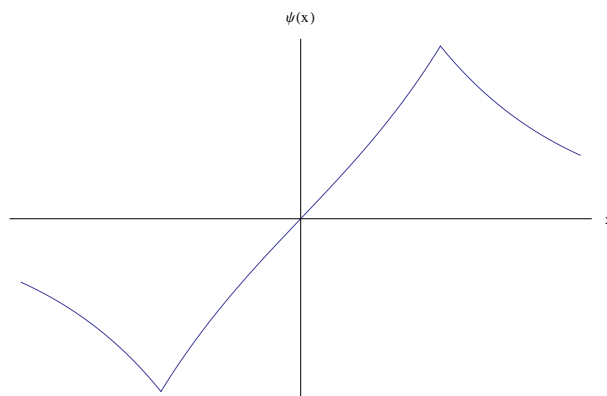


Figure 3: Antisymmetrisk fyrste eksiterte tilstand $\psi_1(x)$.

g) Kontinuiteten til $\psi(x)$ i $x = L$ gjev på same må som tidlegare

$$Ce^{-KL} = B \sinh kL, \quad (11)$$

eller $-C = \frac{1}{2}B(e^{2KL} - 1)$. Diskontinuiteten til $\psi'(x)$ i $x = L$ gjev på same måte som tidlegare

$$-KCe^{-KL} - BK \cosh KL = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}Ce^{-KL}, \quad (12)$$

eller $B(e^{2KL} + 1) = 2C \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2 K} - 1 \right)$. Dersom ein kombinerer desse to uttrykka får ein

$$e^{2KL} + 1 = (e^{2KL} - 1) \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2 K} - 1 \right), \quad (13)$$

eller etter litt opprydding

$$e^{-2KL} = 1 - \frac{\hbar^2 K}{m\beta}. \quad (14)$$

Denne likninga har ei løysing berre når $\beta > \hbar^2/2mL$. Dette er enklast å sjå grafisk. Både høgre -og venstresida er lik null ein for $K = 0$. For at ein skal eit anna skjeringspunkt, må den deriverte av høgresida mop K i $K = 0$ vere større enn den deriverte av venstresida mop K i $K = 0$. Dette gjev

$$-2L < -\frac{\hbar^2}{m\beta}, \quad (15)$$

eller $\beta > \beta_c = \hbar^2/2mL$. Dette er vist i figur 4, der den dimensjonslause variabelen er $z = 2KL$.

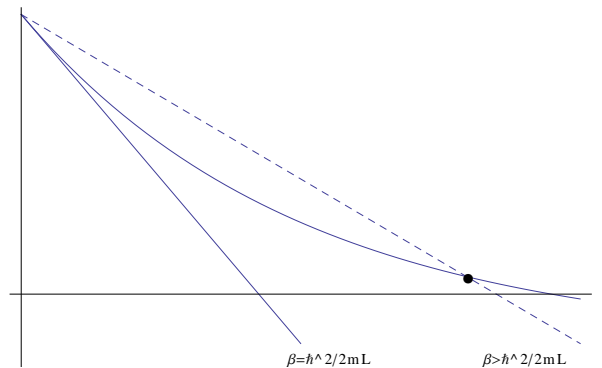


Figure 4: Grafisk løysing av (14) som gjev ein antisymmetrisk bunden tilstand for $\beta > \hbar^2/2mL$.

Oppgåve 2

a) Fysisk er det klart at refleksjonskoeffisienten må vere lik ein. Partiklane kjem inn med endeleg energi $E > 0$ og kan trenge gjennom den fyrste barrieren. Men då vil partikkelen treffe ein hard vegg med $V(x) = \infty$. Partikkelen

er såleis nøydd til å bli reflektert. Dette kan vi og vise matematisk. I område I , er bølgefunksjonen på forma

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + re^{-ikx}, \quad (16)$$

der $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ og r er ein konstant. I område II er er bølgefunksjonen på forma

$$\psi_{II}(x) = ae^{iqx} + be^{-iqx}, \quad (17)$$

der $q = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$, og a og b er konstantar. I område III , er $\psi_{III}(x) \equiv 0$. Straumen $j(x)$ er gjeve ved

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} - \psi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} \right]. \quad (18)$$

Dette gjev

$$j_I(x) = \frac{\hbar k}{m} (1 - |r|^2), \quad (19)$$

$$j_{II}(x) = \frac{\hbar}{m} q (|a|^2 - |b|^2), \quad (20)$$

$$j_{III}(x) \equiv 0. \quad (21)$$

Kontinuiteten til j i $x = L$ gjev då $j_{II}(x = L) = 0$ (ingen sluk eller kjelder). Kontinuiteten til $j(x)$ i $x = 0$ gjev då $j_I(x = 0) = 0$ (ingen sluk eller kjelder) og difor $|r|^2 = 1$. Då refleksjonskoeffisienten er $R = |r|^2$, ser vi at $R = 1$.

Kommentar: Ein kan ikkje bruke kontinuiteten til $\psi'(x)$ i $x = L$ sidan $V(x)$ er divergent i $x = L$. Viss ein gjer det får ein $a = b = 0$ og $\psi_{II} \equiv 0$. Dette impliserer i at $j_{II}(x) \equiv 0$ og difor $j_I(x) \equiv 0$, slik at $R = 1$. Svaret er rett, men ikkje framgangsmåten. Kontinuiteten til $\psi(x)$ i $x = L$ gjev at $ae^{iqL} = -b^{-iqL}$. Dette impliserer at $\psi_{II}(x) = be^{-iqL} \sinh[q(x - L)]$ som er lik null i $x = L$. $\psi_{II}(x)$ er såleis reell opp til ein uvesentleg fase og difor er $j_{II} \equiv 0$.

Oppgave 3

La \hat{F} vere ein hermiteske operator, ψ ein eigenfunksjon til \hat{F} med eigenverdi f . Vi har per definisjon av den adjungerte operatoren \hat{F}^\dagger

$$\int \psi_1^* \hat{F}^\dagger \psi_2 d\tau = \int (\hat{F} \psi_1)^* \psi_2 d\tau, \quad (22)$$

for vilkårlege bølgefunksjonar ψ_1 og ψ_2 . Dette gjev

$$\begin{aligned} \int \psi^* \hat{F}^\dagger \psi d\tau &= \int (\hat{F} \psi)^* \psi d\tau \\ &= f^* \int \psi^* \psi d\tau \end{aligned} \quad (23)$$

På den andre sida er $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$ og difor

$$\begin{aligned} \int \psi \hat{F}^\dagger \psi \, d\tau &= \int \psi \hat{F} \psi \, d\tau \\ &= f \int \psi \psi \, d\tau . \end{aligned} \quad (24)$$

Likning (23) og (24) viser at $f = f^*$ og eigenverdien er reell.

Vi bruker igjen definisjonen på ein hermitesk operator:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{F}^\dagger \psi_2(x) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{F} \psi_1(x))^* \psi_2(x) \, dx . \quad (25)$$

Dette gjev

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left[\frac{d}{dx} \right]^\dagger \psi_2(x) \, dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\psi_1(x)}{dx} \right)^* \psi_2(x) \, dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\psi_1^*(x)}{dx} \right) \psi_2(x) \, dx . \end{aligned} \quad (26)$$

Delvis integrasjon gjev

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left[\frac{d}{dx} \right]^\dagger \psi_2(x) \, dx &= \psi_1^*(x) \psi_2(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left(\frac{d\psi_2(x)}{dx} \right) \, dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left(\frac{d\psi_2(x)}{dx} \right) \, dx , \end{aligned} \quad (27)$$

der vi har brukt at $\psi_1^*(x) \psi_2(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$ sidan $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ er bundne tilstandar og normerbare. Dette viser at

$$\left[\frac{d}{dx} \right]^\dagger = \underline{\underline{-\frac{d}{dx}}} . \quad (28)$$

Operatoren $\frac{d}{dx}$ er såleis **ikkje** hermitesk.

Kommentar: Hadde operatoren vore $i \frac{d}{dx}$ hadde vi fått ein ekstra minus frå komplekskonjugeringa i likning (26). Då hadde operatoren vore hermitesk. Dette er i samsvar med at impulsoperatoren $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ er hermitesk.

Viss ein tar utgangspunkt i at \hat{p} er hermitesk, følgjer det frå reknereglane for produkt av operatorar at $\frac{d}{dx}$ ikkje er ein hermitesk operator. Dette argumentet kan til nød passere.

b) Kvantemekanisk tunnelling er at ein partikkel kvantemekanisk kan bevege seg gjennom eit område som er forbode klassisk. Eit døme er ein α -partikkel som er bevegar seg i eit brønn-potensial inni ei tung kjerne. α -partikkelen

kan tunneller gjennom barrieren og kome ut på andre sida og resultatet er radioaktivitet.

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

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{n^2}, \quad (29)$$

der $n = 1, 2, 3, \dots$. 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 forklarar 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.

d) Ved innsetting i dei oppgjevne formlane finn ein

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \sin \theta = \hbar^2 [\sin \theta - \cot \theta \cos \theta], \quad (30)$$

$$\hat{L}_z \sin \theta = 0. \quad (31)$$

Funksjonen $\psi(\theta, \phi) = \sin \theta$ er såleis **ikkje** eigenfunksjon til $\hat{\mathbf{L}}^2$, men funksjonen er eigenfunksjon til \hat{L}_z med eigenverdi $l_z = 0$.