NTNU

Fakultet for Naturvitskap og Teknologi

Institutt for Fysikk

Kontinuasjonseksamen TFY4215/FY1006 Innføring i kvantemekanikk august 2013

Faglærar: Professor Jens O. Andersen

Institutt for Fysikk, NTNU

Telefon: 73593131

Mandag 5, august 2013

kl. 09.00-13.00

Tilletne hjelpemiddel:

Godkjend kalkulator

Rottmann: Matematisk Formelsamling

Rottmann: Matematische Formelsammlung

Barnett & Cronin: Mathematical Formulae

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

Oppgåve 1

I denne oppgåva skal vi studere ein partikkel med masse μ som bevegar seg i eit rotasjonssymmetrisk potensial $V(\mathbf{r}) = V(r)$ i tre romlege dimensjonar.

a) Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga i kulekoordinatar (r, ϕ, θ) kan skrivast som

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right)+V(r)\right]\psi(r,\phi,\theta) \quad = \quad E\psi(r,\phi,\theta)\,. \qquad (1)$$

Forklar kvifor Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ kommuterer med $\mathbf{L}^2$. Dei simultane eigenfunksjonane til $\hat{H}$ og $\mathbf{L}^2$ kan skrivast som $\psi(r,\phi,\theta) = R(r)Y_{lm}(\phi,\theta)$ der $Y_{lm}(\phi,\theta)$ er dei sfærisk harmoniske. Kva verdiar kan l og m ta? (Her krev ein ikkje bevis).

b) Bruk

$$\mathbf{L}^2 Y_{lm}(\phi,\theta) \;=\; \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\phi,\theta)\ , \tag{2}$$

til å vise at radiallikninga for $R(r)$ kan skrivast som

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\right] R(r) + V(r)R(r) \;=\; ER(r)\ . \tag{3}$$

c) I resten av oppgåva er $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$, det vil seie vi studerer ein isotrop tredimensjonal oscillator. Vi skriv nå bølgjefunksjonen som $R(r) = u(x)$ der $x = r\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$ er ein dimensjonslaus variabel. I tillegg skriv vi $u(x) = P(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}$. Vis at radiallikninga for $P(x)$ kan skrivast som

$$\left[P''(x) + 2\left(\frac{1}{x} - x\right)P'(x) + \left(\epsilon - 3 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right)P(x)\right] \;=\; 0\ , \tag{4}$$

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

d) Bruk likning (4) til å finne spektret (energinivåa) til den isotrope tredimensjonale oscillatoren.

e) Det finst ei løysing der $P(x)$ er konstant. Vis at dette gjev $l = 0$ og $\epsilon = 3$. Den neste bølgjefunksjonen er $P(x) \sim x$, Finn ϵ og dei moglege verdiane for l i dette tilfellet.

f) Bølgjefunksjonen som svarer til $P(x) =$ konstant kan skrivast som

$$\psi_0(r,\phi,\theta) = Ae^{-\frac{1}{2}\mu\omega r^2/\hbar}\ , \tag{5}$$

der A er ein nomeringskonstant.

Forklar kvifor $\psi_0(r,\phi,\theta)$ er grunntilstanden for den tredimensjonale oscillatoren. Vis at

$$\langle r^2\rangle \;=\; \frac{3}{2}\frac{\hbar}{\mu\omega}\ , \tag{6}$$

i grunntilstanden $\psi_0(r,\phi,\theta)$. Bruk dette til å finne middelverdiane $\langle E_p\rangle = \langle V(r)\rangle$ og $\langle E_k\rangle = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\right\rangle$ i grunntilstanden $\psi_0(r,\phi)$. Kommenter resultatet.

Oppgåve 2

I dei fleste tilfella i kvantemekanikk kan ein ikkje løyse Schrödingerlikniknga eksakt. Ein kan da løyse problemet numerisk. Eit alternativ er å bruke *variasjonsmetoden*. Ein gjettar på ei rimeleg form på bølgjefunksjonen ψ. Denne bølgjefunksjonen ψ kallar ein da ein *prøvebølgjefunksjon*. ψ inneheld ein eller fleire parametre som ein kan variere. Ideen er å minimalisere energien til ψ som funksjon av desse parametrane. Ein kan da vise at energien $E_{\rm min}$ som ein får med denne prosedyra alltid er høgare enn den verkelege grunntilstandsenergien til systemet. Egil Hylleraas var ein norsk fysikar som i tida rett før 1930 brukte variasjonsmetoden til å rekne ut $E_{\rm min}$ for Helium. Han brukte svært mange parametre i prøvebølgjefunksjonen sin, men han hadde ikkje PC og matlab tilgjengeleg. Han fekk eit resultat som berre var eit par prosent høgare enn den eksperimentelle verdien for grunntilstanden i Helium. Hylleraas var ein framifrå fysikar som gav store bidrag til å forstå to-elektron atom. Vi skal gå i Hylleraas' fotefar og bruke variasjonsmetoden på eit enkelt eindimensjonalt problem.

Potensialet vi skal studere er på forma

$$V(x) \;=\; \begin{cases} \infty\,, & x < 0 \\ Fx\,, & x \geq 0 \end{cases}\,, \tag{7}$$

der $F > 0$ er ein konstant. Sjå figur 1.

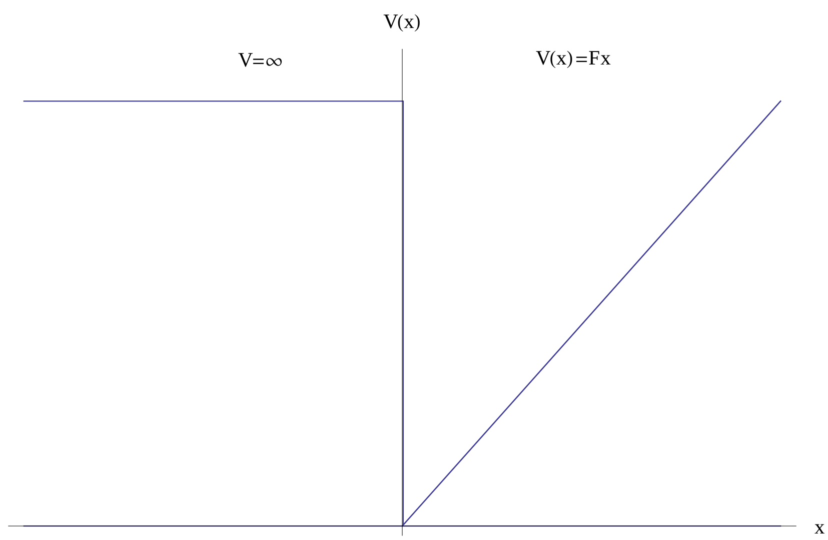

Figure 1: Potensialet $V(x)$ i oppgåve 2.

Prøvebølgjefunksjonen vi skal bruke er

$$\psi(x) \;=\; \begin{cases} 0\,, & x < 0 \\ Axe^{-\alpha x^2}\,, & x \geq 0 \end{cases}\,, \tag{8}$$

der A er ein normeringskonstant og $\alpha > 0$ er ein variasjonsparameter.

a) Forklar at $\psi(x)$ beskriv ein bunden tilstand i potensialet $V(x)$. Rekn ut koeffisienten A.

b) Vis at middelverdien til den potensielle energien er

$$\langle V(x) \rangle \;=\; \sqrt{\frac{2}{\pi\alpha}} \,, \tag{9}$$

c) Vis at middelverdien til den kinetiske energien er

$$\langle E_k \rangle \;=\; \frac{3\hbar^2}{2m}\alpha \,. \tag{10}$$

d) Bruk resultata i a) – c) til å finne den verdien av α som minimaliserer energien i tilstanden ψ og finn E_{min}. Samanlikn resultatet med

$$E_{\text{min}}^{\text{eksakt}} \;=\; 2.33811 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{3}} F^{\frac{2}{3}} \,, \tag{11}$$

som er den numerisk eksakte verdien for grunntilstandsenergien for potensialet i likning (7).

Oppgåve 3

I denne oppgåva er det fire delspørsmål du kan svare på uavhengig av kvarandre.

a) Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga for bølgjefunksjonen $\psi(x)$ med potensial $V(x)$ og energi E er

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) \;=\; E\psi(x) \,. \tag{12}$$

Gjer kort greie for krumningseigenskapane til $\psi(x)$. Er $\psi(x)$ kontinuerleg? Er $\psi(x)$ glatt? Gje eit eksempel på eit potensial $V(x)$ der $\psi(x)$ er kontiunerleg men ikkje glatt.

b) Heisenbergs uskarpheitsrelasjon for operatorane $\hat{x}$ og $\hat{p}_x$ er

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{1}{2}\hbar \,. \tag{13}$$

Forklar kort det fysiske innhaldet i likning (13).

c) La $\psi(x)$ vere bølgjefunksjonen til ein partikkel som bevegar seg på x-aksen. Kva er tolkninga av $|\psi(x)|^2$?

d) Figur 2 viser eit potensialsprang der potensialet er gjeve ved

$$V(x) = \begin{cases} 0\,, & x < 0 \\ V_0\,, & x \geq 0 \end{cases}\,, \tag{14}$$

der $V_0 > 0$ er ein konstant.

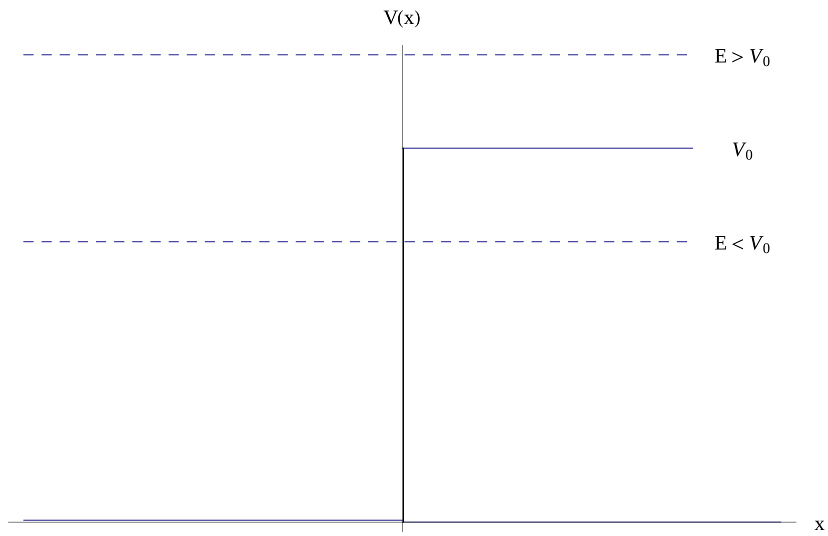

Figure 2: Potensialet $V(x)$ i oppgåve 3d.

Vi sender ein partikkel med masse m og energi E inn frå venstre mot potensialspranget. I det eine tilfellet er $E > V_0$ og i det andre tilfellet er $E < V_0$. Kva skjer med partikkelen i dei to tilfella viss vi bruker klassisk fysikk? Og viss vi bruker kvantemekanikk?

–