NTNU
Fakultet for Naturvitskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Løysingsframlegg prøveeksamen TFY4215/FY1006 Innføring i Kvantemekanikk

Faglærar: Professor Jens O. Andersen
Institutt for Fysikk, NTNU
Telefon: 73593131

February 4, 2015

Oppgåve 1

For $|x| \geq L$ er $V(x) = \infty$ og difor er $\psi(x) \equiv 0$ i dette området. I området $|x| < L$ og $x \neq 0$ er Schrödingerlikniknga

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) &= E\psi(x) \\ &= 0\,. \end{aligned} \tag{1}$$

Integrasjon gjev då $\psi(x) = ax + b$, der a og b er konstantar. Vi finn først løysinga til høgre for $x = 0$ ved å bruke randkrava. Vi har $\lim_{x\to 0^+}\psi(x) = \psi(0)$ og $\psi(L) = 0$. Dette gjev $b = \psi(0)$ og $aL + b = 0$. Løysinga er da

$$\psi(x) = \psi(0)\left[1 - \frac{x}{L}\right]\,. \tag{2}$$

Løysinga til venstre for $x = 0$ er da gjeve ved $\psi(x) = \psi(0)\left[1 + \frac{x}{L}\right]$ og løysinga for alle x kan da skrivast som $\psi(x) = \psi(0)\left[1 - \frac{|x|}{L}\right]$.

For å finne samanhengen mellom α og L, integrerer vi Schrödingerlikninga mellom $x = -\epsilon$ og $x = \epsilon$ og tar grensa $\epsilon \to 0$ etterpå. For $|x| \leq L$ og $E = 0$ er Schrödingerlikninga

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = \alpha\delta(x)\psi(x) \tag{3}$$

Integrasjon gjev då

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi''(x) = \int_{-\epsilon}^{\epsilon}\alpha\delta(x)\psi(x) \; . \tag{4}$$

Dette gjev

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\right] = \alpha\psi(0) \; . \tag{5}$$

Frå likning (2) har vi $\psi'(x) = -\frac{\psi(0)}{L}\text{sign}(x)$ og difor $\psi'(0^{\pm}) = \pm\frac{\psi(0)}{L}$. Innsett gjev dette

$$\frac{\hbar^2}{mL}\psi(0) = \alpha\psi(0) \; . \tag{6}$$

Denne likninga kan ein lett løyse med omsyn på α:

$$\alpha = \underline{\underline{\frac{\hbar^2}{mL}}} \; . \tag{7}$$

For å finne $\psi(0)$, må vi normere $\psi(x)$. Dette gjev

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-L}^{L} |\psi(x)|^2 \, dx \\ &= \int_{-L}^{L} |\psi(0)|^2 \left[1 - \frac{|x|}{L}\right]^2 dx \\ &= \frac{2}{3}L|\psi(0)|^2 \; . \end{aligned} \tag{8}$$

Dette gjev $\psi(0) = \sqrt{\frac{3}{8L}}$, der vi har sett fasen til ψ er lik null. Altså er den normaliserte bølgjefunksjonen lik

$$\underline{\underline{\psi(x) = \sqrt{\frac{3}{2L}}\left[1 - \frac{|x|}{L}\right]}} \; . \tag{9}$$

Merk: $\psi(x)$ er anten symmetrisk eller antisymmetrisk sidan potensialet er symmetrisk. Finst det ein antisymmetrisk bølgjefunksjon som har energi $E = 0$? For $x > 0$ er løysinga framleis på forma $\psi(x) = ax + b$. Ein odde funksjon tilfredsstiller alltid $\psi(0) = 0$ og difor er $b = 0$. Randkravet $\psi(L) = 0$ impliserer da at $a = 0$. Same resonnemet gjeld for $x < 0$. Difor er $\psi(x) \equiv 0$ og det finst altå ingen antisymmetrisk bølgjefunksjon med $E = 0$.

Oppgåve 2

I området $x \leq 0$ er $\psi \equiv 0$ sidan $V(x) = \infty$. I området $0 < x < L$ er $V(x) = 0$ og Schrödingerlikninga blir da

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) \quad = \quad E\psi(x) \ , \tag{10}$$

der $0 < E < V_0$ er energien til den bundne tilstanden. Den generelle løysinga er

$$\psi(x) \quad = \quad A\sin kx + B\cos kx \ , \tag{11}$$

der A og B er konstantar, og $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. I området $x \geq L$ er Schrödingerlikninga

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) \quad = \quad [E - V_0]\,\psi(x) \ . \tag{12}$$

Den generelle løysinga er da

$$\psi(x) \quad = \quad Ce^{Kx} + De^{-Kx} \ , \tag{13}$$

der C og D er konstantar og $K = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$.

b) Vi noterer oss at $B = 0$ pga randkravet $\psi(0) = 0$. Vidare må vi ha $C = 0$ sidan $\psi(x)$ skal vere normerbar. Vidare gjev kontinuiteten til $\psi(x)$ og $\psi'(x)$ i $x = L$

$$A\sin kL \quad = \quad De^{-KL} \tag{14}$$

$$Ak\cos kL \quad = \quad -DKe^{-KL} \ . \tag{15}$$

Divisjon gjev da

$$kL\cot kL \quad = \quad -KL \ . \tag{16}$$

Innsetting for K gjev til slutt ei likning for E

$$\underline{\underline{kL\cot kL = -\sqrt{\frac{2mV_0L^2}{\hbar^2} - (kL)^2}}} \ . \tag{17}$$

Denne likninga må løysast numerisk for k, dvs for E. Grunntilstanden har ingen nullpunkt viss ein ser bort frå randkravet i $x = 0$. $\psi(x)$ er difor sinusoidal i området $0 < x < L$ og avtar eksponensielt for $x > L$ som er forbode i klassisk fysikk.

c) Dersom $V_0 \to \infty$ må $\cot kL \to -\infty$ fordi k og L er endelege. Dette tilsvarer nullpunkta til $\sin kL$ der ein nærmar seg nullpunktet frå venstre. Dette gjev

$$kL = n\pi \ , \tag{18}$$

der $n = 1, 2, 3....$ Denne grensa tilsvarer partikkel i boks og bølgetalet er i dette tilfellet $k = \frac{n\pi}{L}$ som nettopp er (18). I denne grensa må ein sjølsagt ha $D = 0$.

Oppgåve 3

a) Etter innsetting av $\psi(r, \phi) = Cre^{-\frac{1}{2}m\omega r^2/\hbar}e^{i\mu\phi}$ i Schrödingerlikninga får vi

$$Cre^{-\frac{1}{2}m\omega r^2/\hbar}e^{i\mu\phi}\left[\frac{\hbar^2(1-\mu^2)}{2mr^2} + 2\hbar\omega - E\right] \;=\; 0 \ . \tag{19}$$

Denne likninga skal gjelde for alle r og difor får ein

$$\underline{\underline{\mu = \pm 1}} \qquad\qquad \underline{\underline{E = 2\hbar\omega}} \tag{20}$$

b) Sidan $\psi(r, \theta)$ ikkje er normert, blir middelverdien $\langle r \rangle$

$$\langle r \rangle \;=\; \frac{\int |\psi(r,\theta)|^2 r \, d^2r}{\int |\psi(r,\theta)|^2 \, d^2r} \ , \tag{21}$$

der nemnaren er normeringsintegralet. Sidan bølgjefunksjonen absoluttverdikvadrat er uavhengig av polarvinkelen θ, kansellerer vinkelintegralet i tellar og nemnar. Ved innsetting får vi da

$$\begin{aligned}
\langle r \rangle \;&=\; \frac{\int |\psi(r,\theta)|^2 r^2 \, dr}{\int |\psi(r,\theta)|^2 r \, dr} \ . \\
&=\; \frac{\int_0^\infty r^4 e^{-m\omega r^2/\hbar} \, dr}{\int_0^\infty r^3 e^{-m\omega r^2/\hbar} \, dr} \\
&=\; \underline{\underline{\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}}} \ .
\end{aligned} \tag{22}$$

c) Nei, dette er ikkje grunntilstanden til den todimensjonale oscillatoren. Dersom vi går til kartesiske koordinatar, kan vi skrive Hamiltonoperatoren som ein sum av av to Hamiltonoperatorar for ein eindimensjonal oscillator. Sidan $V = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2$, er oscillatoren isotrop. Energien til ein todimensjonal oscillator er gjeve ved summen av energien til den eindimensjonale oscillatoren og kan då skrivast som

$$\begin{aligned}
E \;&=\; \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right) + \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + m\right) \\
&=\; \underline{\underline{\hbar\omega\,(1 + n + m)}} \ ,
\end{aligned} \tag{23}$$

der m og n er heiltal. I a) fann vi at $E = 2\hbar\omega$. Dette tilsvarer $n = 1$ og $m = 0$ eller omvendt. Dette er altså første eksiterte tilstand som er dobbelt degenerert. Ein av tilstandane svarer til $\mu + 1$ og den andre til $\mu = -1$.

Oppgåve 4

a) For ein operator $\hat{A}$ har vi

$$(\Delta A)^2 \quad = \quad \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \; , \tag{24}$$

som gjev informasjon om spreiinga av måleresultata for observabelen A i tilstanden ψ. Innhaldet er da at produktet av usikkerheita for x og p_x aldri kan bli mindre enn $\frac{1}{2}\hbar$. Dette tyder at ein ikkje kan spesifisere posisjon og impuls til ein partikkel samtidig. Posisjon og impuls kan ikkje vere skarpe samtidig.

b) Hamiltonoperatoren for ein oscillator i ein romleg dimensjon er

$$\hat{H} \quad = \quad \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \; , \tag{25}$$

der m er massen og ω er frekvensen. Operatoren $\hat{p}$ kommuterer med operatoren $\frac{\hat{p}^2}{2m}$, slik at

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{p}] &= \frac{1}{2}m\omega^2[\hat{x}^2, \hat{p}] \\ &= \frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{x}\right) \\ &= i\hbar m\omega^2\hat{x} \end{aligned} \tag{26}$$

Innsetting gjev då

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle \quad = \quad -m\omega^2\langle x\rangle. \tag{27}$$

Dette er ikkje noko anna ein Newtons 2.lov for middelverdiane $\langle x\rangle$ og $\langle p\rangle$. Dersom $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ er krafta $F = -\frac{dV}{dX} = -m\omega^2 x$. Dette gjev den klassiske likninga

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} &= -\frac{dV}{dx} \\ &= -m\omega^2 x \; . \end{aligned} \tag{28}$$

Dette er eit eksempel på Ehrenfests teorem.

c) Atomet kan eksistere i eit diskret sett av tilstandar med ein bestemt energi E. Når elektronet hoppar frå eit diskret energinivå til eit anna med lågare energi, blir energidifferansen sendt ut som elektromagnetisk stråling som forklarer dei diskrete diskrete spektrallinjene for hydrogen (viss det nye energinivået har høgare energi vil det kreve tilføring av eit lyskvant). Dette er ideen om kvantesprang bryt med klassisk fysikk. I tillegg bevegar elektrona seg i sirkelbaner der radien er gjeve av klassisk mekanikk. Dette er ikkje i samsvar med klassisk fysikk fordi elektron i sirkelbaner sender ut stråling og vil raskt spiralere inn mot kjerna og atomet vil kollapse. I tillegg postulerte Bohr at banespinnet er kvantisert og er gjeve ved $|\mathbf{L}| = n\hbar$, der $n = 1, 2, 3, ...$ Dette gjev rett verdi for energinvåa E_n til hydrogenatomet og difor rett spektrum, men i grunntilstanden til H er banespinnet $|\mathbf{L}| = 0$.

d) La $\hat{A}$ vere ein hermitesk operator, ψ_n ein normert eigenfunksjon til operatoren og A_n den tilhøyrande eigenverdien. Vi har da

$$\begin{aligned}\int \psi_n^* \hat{A} \psi_n \, d\tau &= A_n \int \psi_n^* \psi_n \, d\tau \\ &= A_n \, . \end{aligned} \tag{29}$$

Frå definisjonen av den adjungerte til ein operator kan vi skrive

$$\begin{aligned}\int \psi_n^* \hat{A}^\dagger \psi_n \, d\tau &= \int (\hat{A}\psi_n)^* \psi_n \, d\tau \\ &= A_n^* \int \psi_n^* \psi_n \, d\tau \\ &= A_n^* \end{aligned} \tag{30}$$

Sidan $\hat{A}$ er hermitesk, er (29) lik (30), dvs $A_n = A_n^*$, altså reell. Q.E.D.

La $\psi(x)_1$ og $\psi(x)_2$ vere to vilkårlege (normerbare) funksjonar.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^\dagger \psi_2(x) \, dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_1(x)\right]^* \psi_2(x) \, dx \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi_1^*(x)}{dx} \psi_2(x) \, dx \, , \end{aligned} \tag{31}$$

der vi har brukt definisjonen på den adjungerte til ein operator. Delvis integrasjon gjev no

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^\dagger \psi_2(x) \, dx &= ih \frac{d\psi_1^*(x)}{dx} \psi_2(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - ih \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \frac{d\psi_2(x)}{dx} \, dx \, , \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_2(x) \, dx \, , \end{aligned} \tag{32}$$

der vi har brukt at bidraget frå randa er lik null. Dette viser at operatoren $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ er hermitesk. Q.E.D.

e) Ein bunden tilstand er beskrive av ein bølgjefunksjon som er normerbar. Ein slik tilstand er lokalisert i rommet. Det vil seie at sannsynlegheiten for å finne partikkelen uendeleg langt unna ($|\mathbf{r}| \to \infty$) er lik null. Eksempel: Alle energieeigentilstandar for hydrogenatomet med $E < 0$. Planbølgjer er *ikkje* bundne eller normerbare tilstandar.