NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Jan Myrheim
Telefon: 73 59 36 53 (mobil 90 07 51 72)

Eksamen i fag FY1004 Innføring i kvantemekanikk
Lørdag 6. desember 2008
Tid: 09.00–15.00

Sensurfrist: Lørdag 20. desember 2008

Tillatte hjelpemidler: Kalkulator, matematiske tabeller.

Noen nyttige konstanter:	
Lyshastigheten i vakuum	$c = 299\,792\,458\,\mathrm{m/s}$
Permeabiliteten i vakuum	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\,\mathrm{N/A^2}$
Permittiviteten i vakuum	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) = 8{,}854\,817\,187 \times 10^{-12}\,\mathrm{F/m}$
Den reduserte Plancks konstant	$\hbar = 1{,}054\,572\,7 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$
Elementærladningen	$e = 1{,}602\,177\,3 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}$
Elektronmassen	$m_\mathrm{e} = 9{,}109\,390 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$
Protonmassen	$m_\mathrm{p} = 1{,}672\,623 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$
Bohr-radien	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(e^2 m_\mathrm{e}) = 5{,}291\,772\,5 \times 10^{-11}\,\mathrm{m}$

Oppgave 1:

Spinnet til en partikkel med spinn 1/2, for eksempel et elektron, er en vektor

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}\,.$$

De tre komponentene av $\vec{\sigma}$ er Pauli-matrisene

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

a) Anta at spinntilstanden til partikkelen er gitt ved spinoren

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Beregn forventningsverdiene $\langle\sigma_x\rangle$, $\langle\sigma_y\rangle$ og $\langle\sigma_z\rangle$ i denne tilstanden.
Vi definerer for eksempel

$$\langle\sigma_x\rangle = \psi^\dagger\sigma_x\psi\,.$$

Hvorfor sier vi at dette er en tilstand med «spinn opp» i z-retningen?

b) Anta i stedet at spinntilstanden er gitt ved spinoren

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Beregn forventningsverdiene $\langle \sigma_x \rangle$, $\langle \sigma_y \rangle$ og $\langle \sigma_z \rangle$ i denne tilstanden.

Beregn også variansene $\mathrm{var}(\sigma_x)$, $\mathrm{var}(\sigma_y)$ og $\mathrm{var}(\sigma_z)$. Vi definerer for eksempel

$$\mathrm{var}(\sigma_x) = \langle (\sigma_x - \langle \sigma_x \rangle)^2 \rangle = \langle {\sigma_x}^2 \rangle - \langle \sigma_x \rangle^2 .$$

I hvilken retning har denne tilstanden spinn opp?

Fordi elektronet har elektrisk ladning $q = -e$ og spinner om sin egen akse, har det et magnetisk moment

$$\vec{\mu} = g \frac{q}{2m} \vec{S} = -g \frac{e}{2m} \vec{S} = -g \frac{e\hbar}{4m} \vec{\sigma} .$$

Her er m elektronmassen, $q/(2m)$ kalles det gyromagnetiske forholdet, og tallet $g = 2{,}00233$ er den gyromagnetiske faktoren for elektronet.
Det magnetiske momentet $\vec{\mu}$ i et magnetfelt $\vec{B}$ har en potensiell energi $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Vi antar at $\vec{B}$ er konstant i tid og rom og har retning langs den positive x-aksen. Hvis vi bare ser på spinnet til elektronet, så er Hamilton-operatoren H lik den potensielle energien,

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = g \frac{e\hbar}{4m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \hbar\omega \, \sigma_x ,$$

der

$$\omega = \frac{geB}{4m} \qquad \text{med} \qquad B = |\vec{B}| .$$

Tilstanden til elektronspinnet beskrives av en spinor

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \tag{1}$$

som er tidsavhengig og oppfyller Schrödingerligningen

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}t} = H\psi .$$

c) Vis at komponentene ψ_1, ψ_2 av spinoren ψ oppfyller ligningene

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \psi_1 = -\mathrm{i}\omega \, \psi_2 , \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \psi_2 = -\mathrm{i}\omega \, \psi_1 ,$$

og at den mest generelle løsningen av disse ligningene er

$$\psi_1(t) = a \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + b \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} , \qquad \psi_2(t) = a \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - b \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} , \tag{2}$$

der a og b er vilkårlige komplekse konstanter.

Normeringsbetingelsen

$$\psi^\dagger \psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 1 \tag{3}$$

gir en relasjon mellom konstantene a og b. Hvilken relasjon?

d) Beregn forventningsverdiene $\langle \sigma_x \rangle$, $\langle \sigma_y \rangle$ og $\langle \sigma_z \rangle$ i tilstanden ψ som er gitt av ligningene (1), (2) og (3).

Disse forventningsverdiene kan variere periodisk med tiden (det avhenger delvis av konstantene a og b). Hva er perioden?

Hva er forventningsverdien $\langle H \rangle$ av Hamilton-operatoren $H = \hbar\omega\, \sigma_x$?

Er denne forventningsverdien tidsavhengig?

Oppgave 2:

En partikkel med masse m beveger seg i en endimensjonal potensialbrønn med flat bunn og med uendelig høye vegger i posisjonene $x = -a$ og $x = a$ $(a > 0)$. Bølgefunksjonen $\Psi = \Psi(x,t)$ beskriver tilstanden til partikkelen ved tidspunktet t, og oppfyller den tidsavhengige Schrödinger-ligningen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) \tag{4}$$

for $-a \leq x \leq a$. Bølgefunksjonen oppfyller dessuten randkravene $\Psi(-a,t) = \Psi(a,t) = 0$.

a) La $\psi(x) = \Psi(x,0)$, det vil si at bølgefunksjonen $\psi(x)$ beskriver tilstanden til partikkelen ved $t = 0$.

Anta at $\psi(x)$ er en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \psi(x) = E\,\psi(x) \tag{5}$$

for $-a \leq x \leq a$, med randkravene $\psi(-a) = \psi(a) = 0$. Her er E energien.

Løs den tidsavhengige Schrödinger-ligningen (4). Det vil si, bestem hvordan bølgefunksjonen $\Psi(x,t)$ avhenger av tiden t.

I dette tilfellet kalles $\Psi(x,t)$ en stasjonær tilstand. Hvorfor?

Er $\Psi(x,t)$ en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen for $t \neq 0$? Begrunn svaret.

b) Ligning (5) med randkrav har alltid den trivielle løsningen $\psi(x) = 0$ for $-a \leq x \leq a$, men vi ser bort fra den. Bare spesielle diskrete verdier av energien E er slik at ligning (5) med randkrav har ikke-trivielle løsninger.

Hvis ψ og ϕ begge er ikke-trivielle løsninger av ligning (5) med randkrav, med samme energi E, så må $\phi(x) = \eta\psi(x)$ for alle x, der η er en konstant. Begrunn denne påstanden.

c) Paritetstransformasjonen P transformerer et punkt x over i $-x$, og en bølgefunksjon ψ over i $\phi = P\psi$ definert ved at $\phi(x) = \psi(-x)$ for alle x.

Vis at hvis ψ er en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen (5) med energi E, så er $\phi = P\psi$ en løsning av den samme ligningen med samme energi E.

I følge punkt b) ovenfor må da $\phi(x) = \eta\psi(x)$ for alle x, der η er en konstant.

Når $P\psi = \eta\psi$ for en konstant η, så er ψ en egenfunksjon for paritetsoperatoren P med egenverdi η, og vi sier at η er pariteten til bølgefunksjonen ψ.

Hvilke verdier kan pariteten η ha? Begrunn svaret.

d) Bølgefunksjonene

$$\psi(x) = \phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) \qquad \text{og} \qquad \psi(x) = \chi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right)$$

oppfyller begge den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen (5) med energi

$$E = E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} ,$$

bortsett fra at randkravene er oppfylt bare for spesielle verdier av n.
Randkravene $\phi_n(-a) = \phi_n(a) = 0$ er oppfylt når $n = 1, 3, 5, \ldots$.
Randkravene $\chi_n(-a) = \chi_n(a) = 0$ er oppfylt når $n = 2, 4, 6, \ldots$.
Vis at energiegenfunksjonene $\psi = \phi_n$ og $\psi = \chi_n$ er normerte, slik at

$$\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x \, |\psi(x)|^2 = 1 .$$

Hva er pariteten til ϕ_n og χ_n?

e) Anta nå at partikkelen ved tiden $t = 0$ er i tilstanden $\psi(x) = \Psi(x, 0)$, med

$$\psi(x) = N\,(a^2 - x^2) \qquad \text{for} \qquad -a \le x \le a .$$

Beregn normeringskonstanten N slik at ψ er normert,

$$\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x \, |\psi(x)|^2 = 1 .$$

Har denne tilstanden en bestemt paritet, og hva er i så fall pariteten?
Har denne tilstanden en bestemt energi, og hva er i så fall energien?

f) Beregn forventningsverdien av energien,

$$\langle H \rangle = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x \, \psi^* \, H\psi ,$$

i tilstanden $\psi(x) = N\,(a^2 - x^2)$. Her er H Hamilton-operatoren,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} .$$

Sammenlign $\langle H \rangle$ med grunntilstandsenergien. Kommentar?

g) Bølgefunksjonen $\psi(x) = N\,(a^2 - x^2)$ kan utvikles i en Fourier-rekke for $-a \le x \le a$, det gir at

$$\begin{aligned}\psi(x) &= b_1\,\phi_1(x) + b_3\,\phi_3(x) + b_5\,\phi_5(x) + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} b_{2k+1}\,\phi_{2k+1}(x) \\ &= \frac{32a^2N}{\pi^3}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\,\frac{1}{(2k+1)^3}\,\cos\!\left(\frac{(2k+1)\pi x}{2a}\right) ,\end{aligned}$$

der

$$b_{2k+1} = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\;(\phi_{2k+1}(x))^*\,\psi(x) = (-1)^k\,\frac{32\,a^{5/2}N}{(2k+1)^3\,\pi^3} .$$

Uttrykk forventningsverdien av energien, $\langle H\rangle$, ved koeffisientene $b_1, b_3, b_5, \ldots$ og energi-egenverdiene $E_1, E_3, E_5, \ldots$.

h) Når bølgefunksjonen ved $t = 0$ er $\Psi(x,0) = \psi(x) = N\,(a^2 - x^2)$, så er

$$\Psi(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k+1}(t)\,\phi_{2k+1}(x) ,$$

med tidsavhengige koeffisienter $c_1(t), c_3(t), c_5(t), \ldots$.

Ved tiden $t = 0$ har vi koeffisientene

$$c_{2k+1}(0) = b_{2k+1} = (-1)^k\,\frac{32\,a^{5/2}N}{(2k+1)^3\,\pi^3} .$$

Hva er $c_{2k+1}(t)$ ved en vilkårlig tid t?

Forventningsverdien av energien er

$$\langle H\rangle = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\;(\Psi(x,t))^*\,H\Psi(x,t) .$$

Er den tidsavhengig?