SIF4045 KVANTEMEKANIKK 23.05.00

Løsningsforslag

Oppgave 1

a) Med $\widehat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$ blir

$$\widehat{q}^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(a+a^\dagger)^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2+aa^\dagger+a^\dagger a+a^{\dagger 2})|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle\right).$$

Vi har brukt $a|0\rangle = 0$, $a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$, $a|1\rangle = |0\rangle$ og $a^\dagger|1\rangle = \sqrt{2}\,|2\rangle$. Ved å ta skalarproduktet med $\langle 0|$ får vi da egentilstandene er ortonormerte:

$$\langle 0|\widehat{q}^2|0\rangle = \underline{\underline{\frac{\hbar}{2m\omega}}}.$$

For fjerdepotensen kan vi gjøre det på samme vis. Alternativt bruker vi fullstendighetsrelasjonen $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ til å skrive

$$\langle 0|\widehat{q}^4|0\rangle = \sum_n \langle 0|\widehat{q}^2|n\rangle\langle n|q^2|0\rangle = \sum_n |\langle n|\widehat{q}^2|0\rangle|^2.$$

Uttrykket vi fant for $\widehat{q}^2|0\rangle$ viser at det er bare $n = 0$ og $n = 2$ som bidrar. Det gir

$$\langle 0|\widehat{q}^4|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(1+2) = \underline{\underline{\frac{3\hbar}{2m\omega}}}.$$

b) For $c = 1$ får vi en symmetrisk oscillator, med $E_0(1) = \frac{1}{2}\hbar\omega$. For $c = \infty$ er potensialet u endelig til venstre for origo. Dette området er derfor utilgjengelig, og $\psi = 0$ her. Da bølgefunksjonen er kontinuerlig må bølgefunksjonen i det tilgjengelige området $x > 0$ også være null i origo. Forøvrig er Schrödingerlikningen for $x > 0$ den samme som for den symmetriske oscillatoren. Oscillator-egenfunksjonene $\psi_n(q)$ for odde n er null i origo, og den med lavest energi er $\psi_1(q)$, som altså er grunntilstanden i "halvoscillator"-problemet. Energien er $E_0(\infty) = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

c) Ved å innføre $\omega = \widehat{\omega}/c$ blir potensialet

$$V(q) = \begin{cases} \frac{1}{2} m \widehat{\omega}^2 q^2 & \text{for } q \leq 0 \\ \frac{1}{2} m c^{-2} \widehat{\omega}^2 q^2 & \text{for } q \geq 0. \end{cases}$$

For $c \to 0$ vil potensialet på høyre side blir svært stort, så vi er i samme situasjon som i punkt b), med svaret

$$E_0 = \tfrac{3}{2} \hbar \widehat{\omega} = \tfrac{3}{2} c \hbar \omega.$$

Så grunntilstandsenergien går mot null proporsjonalt med c.

d) Som læreboka.

e) Ved å sette $c = 1 + \lambda$, dvs $c^2 = 1 + 2\lambda + \mathcal{O}(\lambda^2)$, blir avviket fra det vanlige symmetriske oscillatorpotensialet:

$$\lambda \widehat{H}_1 = \begin{cases} m\omega^2 q^2 \ \lambda + \mathcal{O}(\lambda^2) & \text{for } q \leq 0 \\ 0 & \text{for } q \geq 0. \end{cases}$$

Siden grunntilstanden $\langle q|0\rangle$ i det uperturberte problemet er symmetrisk i posisjonen q, blir middelverdien av perturbasjonen <u>halvparten</u> av

$$\langle 0| m\omega^2 q^2 \ \lambda |0\rangle.$$

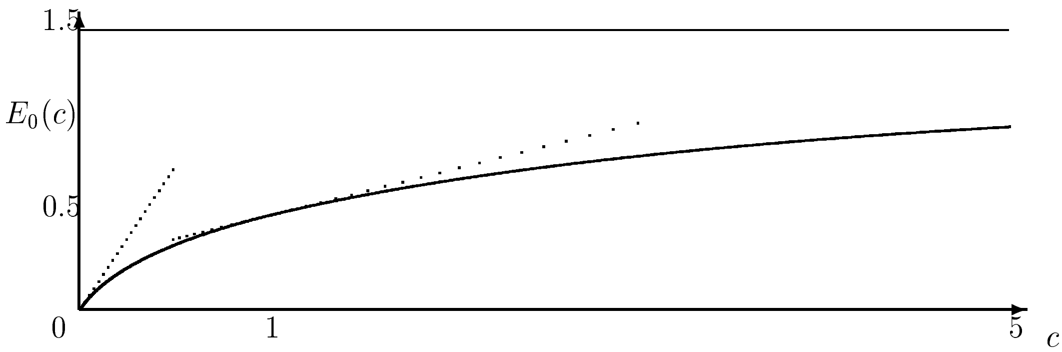
Dette regnet vi ut i oppgave 1a). Vi får

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega + \tfrac{1}{2}\lambda \tfrac{1}{2}\hbar\omega.$$

Førsteordensbidraget blir da

$$\frac{E_0(c)}{\hbar\omega} = \underline{\underline{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}(c-1).}}$$

Skisse:



Oppgave 2

a) Med $A_x = -\mathcal{B}y$, $A_y = 0$, $\varphi = 0$ og $\widehat{\vec{p}} = (\hbar/i)(\partial/\partial x, \partial/\partial y)$ tar Hamilton-operatoren formen

$$\widehat{H} = \frac{\left[\widehat{\vec{p}} - q\vec{A}\right]^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) - \frac{iq\hbar\mathcal{B}}{m}y\frac{\partial}{\partial x} + \frac{q^2\mathcal{B}^2}{2m}y^2.$$

Siden $\widehat{H}$ ikke inneholder x vil $\widehat{p}_x$ kommutere med $\widehat{H}$. Da de to operatorene kommuterer eksisterer felles egenfunksjoner. Schrödingerlikningen $\widehat{H}\psi = E\psi$ blir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi - \frac{iq\hbar\mathcal{B}}{m}y\frac{\partial}{\partial x}\psi + \frac{q^2\mathcal{B}^2}{2m}y^2\psi = E\psi.$$

b) Med $\psi(x,y) = e^{ik_x x}\varphi(y)$ innsatt blir likningen for φ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + \left[\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{q\mathcal{B}k_x}{m}y + \frac{q^2\mathcal{B}^2}{2m}y^2\right]\varphi = E\varphi(y).$$

Med $y_0 = -\hbar k_x/(q\mathcal{B})$ og $\omega_c^2 = q^2\mathcal{B}^2/m^2$ kan dette omskrives til

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + \tfrac{1}{2}m\omega_c^2(y-y_0)^2\varphi = E\varphi.$$

Nå ser vi at dette er harmonisk-oscillator-likningen med forskjøvet origo. Energiverdiene er derfor

$$E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_c = \underline{\underline{(n+\tfrac{1}{2})\frac{\hbar|q|\mathcal{B}}{m}}}.$$

Oppgave 3

a) Som læreboka.

b)

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\,\frac{g}{r}e^{-r/a}\,d^3r.$$

Med polarakse langs $\vec{q}$ og $d^3r = r^2dr\,\sin\vartheta\,d\vartheta\,d\varphi$ gjør vi integrasjonen over vinklene først. Vha

$$\int_0^\pi e^{-iqr\cos\vartheta}\,\sin\vartheta\,d\vartheta = \left[\frac{1}{iqr}e^{-iqr\cos\vartheta}\right]_0^\pi = \frac{1}{iqr}\left[e^{iqr} - e^{-iqr}\right]$$

står vi igjen med

$$\begin{aligned} f &= \frac{img}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \left[e^{-(a^{-1}-iq)r} - e^{-(a^{-1}+iq)r} \right] \, dr = \frac{img}{\hbar^2 q} \left[\frac{1}{a^{-1}-iq} - \frac{1}{a^{-1}+iq} \right] \\ &= -\frac{2mg}{\hbar^2 (a^{-2}+q^2)} \end{aligned} \tag{1}$$

Det gir tverrsnittet

$$\frac{d\sigma_A}{d\Omega} = |f|^2 = \underline{\underline{\left[\frac{2mg}{\hbar^2(q^2+a^{-2})} \right]^2}}.$$

c) Når ϑ er spredningsvinkelen er (se boka)

$$q = 2\hbar^{-1} p \sin(\vartheta/2).$$

d)

$$f_M = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \left[V(\vec{r}) + V(\vec{r}-\vec{d}) \right] \, d^3 r.$$

Ved å innføre $\vec{r} = \vec{d} + \vec{r}\,'$ i siste integral blir dette identisk med første integral, bortsett fra en faktor $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{d}}$:

$$f_M = f_A \left[1 + e^{-i\vec{q}\cdot\vec{d}} \right].$$

Tverrsnittet for spredning på molekylet blir da

$$\frac{d\sigma_M}{d\Omega} = |f_M|^2 = |f_A|^2 (1 + e^{-i\vec{q}\cdot\vec{d}})(1 + e^{i\vec{q}\cdot\vec{d}}) = \underline{\underline{\frac{d\sigma_A}{d\Omega} \Big(1 + 2\cos(\vec{q}\cdot\vec{d}) \Big)}},$$

som skulle bevises.

e) Tverrsnittet, midlet over alle orienteringer av $\vec{d}$ er, når vi bruker $\vec{q}$ som polarakse,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\sigma_M}{d\Omega} \right\rangle &= \frac{d\sigma_A}{d\Omega} \left\langle \Big(2 + 2\cos(\vec{q}\cdot\vec{d}) \Big) \right\rangle \\ &= \frac{d\sigma_A}{d\Omega} \frac{1}{4\pi} \int \left(2 + 2\cos(qd\cos\vartheta) \right) \, \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi \\ &= \Big[-\cos\vartheta - (qd)^{-1} \sin(qd\cos\vartheta) \Big]_0^\pi \\ &= \underline{\underline{2 \left[1 + \frac{\sin(qd)}{qd} \right] \frac{d\sigma_A}{d\Omega}}} \end{aligned}$$

Vi ser at

$$\text{for } qd \ll 1 \text{ fås } \frac{d\sigma_M}{d\Omega} \approx 4\frac{d\sigma_A}{d\Omega},$$

$$\text{for } qd \gg 1 \text{ fås } \frac{d\sigma_M}{d\Omega} \approx 2\frac{d\sigma_A}{d\Omega},$$

I det første tilfellet ligger molekylene så nær hverandre på bølgelengdeskala at en får en konstruktiv interferens mellom de spredte bølgene fra hvert molekyl, fordobling av spredningsamplituden, og firedobling av spredningstverrsnittet. (En kan også se det slik at potensialet blir dobbelt så sterkt når $d \to 0$.)

I det siste tilfellet ligger molekylene så langt fra hverandre på bølgelengdeskala at tverrsnittene bare adderer seg.