Eksamen 29.07.02 i SIF4045 Kvantemekanikk

Løsningsskisse

Oppgave 1

a) At $\psi = 0$ der potensialet er uendelig er som det må være. I det resterende intervallet $|x| < a$ setter vi inn den oppgitte grunntilstands-bølgefunksjonen i Schrödingerlikningen

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''}{\psi} + V(x)$$

Det gir energien

$$E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{-2N}{N(a^2-x^2)} + \frac{\hbar^2}{ma^2}\frac{x^2}{x^2-a^2} = \underline{\underline{\frac{\hbar^2}{ma^2}}}.$$

b) Middelverdien beregnes slik:

$$\begin{aligned}
\langle T \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x)\,\widehat{T}\,\psi_0(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_0\,dx = \frac{-\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a} N(a^2-x^2)(-2N)\,dx \\
&= \frac{\hbar^2}{m}N^2\int_{-a}^{a}(a^2-x^2)\,dx = \frac{\hbar^2}{m}\frac{15}{16a^5}\frac{4a^3}{3} = \underline{\underline{\frac{5\hbar^2}{4ma^2}}}. \qquad (1)
\end{aligned}$$

Vi har benyttet at $\widehat{p}_x = (\hbar/i)d/dx$ og brukt den oppgitte verdien av normeringskonstanten N.

Oppgave 2

a) Vi kan beregne kommutatoren

$$\widehat{K} = [a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a \qquad (2)$$

på to måter.

I metode 1 anvender vi kommutatoren på en vilkårlig energiegentilstand $|n\rangle$ for oscillatoren og bruker de oppgitte egenskapene for stigeoperatorene:

$$\widehat{K}|n\rangle = a\sqrt{n+1}|n+1\rangle - a^\dagger\sqrt{n}|n-1\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle - \sqrt{n}\sqrt{n}|n\rangle = |n\rangle.$$

Siden enhver tilstand $|\psi\rangle$ kan uttrykkes som en lineærkombinasjon av energiegentilstander, $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$, og siden vi har sett at operatoren $\widehat{K}$ reproduserer enhver egentilstand, vil alltid $\widehat{K}|\psi\rangle = |\psi\rangle$. Altså er

$$\widehat{K} = \underline{\underline{1}}.$$

I metode 2 uttrykker vi stigeoperatorene i kommutatoren ved operatorene for posisjon og impuls, og benytter den basale kommutatoren $[\widehat{q}, \widehat{p}] = i\hbar$:

$$\begin{aligned} aa^\dagger - a^\dagger a &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\widehat{q} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\widehat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\widehat{q} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\widehat{p}\right) \\ &\quad - \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\widehat{q} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\widehat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\widehat{q} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\widehat{p}\right) \\ &= -\frac{i}{\hbar}\widehat{q}\widehat{p} + \frac{i}{\hbar}\widehat{p}\widehat{q} = -\frac{i}{\hbar}\,[\widehat{q}, \widehat{p}] = -\frac{i}{\hbar}\,i\hbar = 1, \end{aligned}$$

samme svar som ved metode 1.

Vha $a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ får vi

$$a|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{(n-1)!}}\,|n-1\rangle\, e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Ved å sette $n = m+1$, og vha $E_{m+1} = (m+1+\frac{1}{2})\hbar\omega = E_m + \hbar\omega$, blir dette

$$a|\alpha\rangle = \; e^{-i\omega t} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{m+1}}{\sqrt{m!}}\,|m\rangle e^{-iE_m t/\hbar} = \alpha e^{-i\omega t}\,|\alpha\rangle.$$

Da $a|\alpha\rangle \propto |\alpha\rangle$ er $|\alpha\rangle$ en egentilstand for senkeoperatoren a.

b) Den duale tilstand til $|\alpha\rangle$ er

$$\langle\alpha| = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*m}}{\sqrt{m!}} e^{+iE_m t/\hbar}\,\langle m|,$$

og vi får

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_m \sum_n \frac{\alpha^{*m}\alpha^n}{\sqrt{m!n!}} \langle m|n\rangle e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} = e^{-|\alpha|^2} \sum_n \frac{(\alpha^*\alpha)^n}{n!} = e^{-|\alpha|^2} e^{|\alpha|^2} = 1,$$

dvs at normeringen er korrekt. Vi har brukt at energiegentilstandene er ortonormerte.

c) Vi skal beregne

$$\langle\alpha|\widehat{q}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle\alpha|a + a^\dagger|\alpha\rangle.$$

Vi trenger

$$\langle\alpha|a|\alpha\rangle = \alpha e^{-i\omega t}\langle\alpha|\alpha\rangle = \alpha e^{-i\omega t},$$

og

$$\langle\alpha|a^\dagger|\alpha\rangle = \langle\alpha|a|\alpha\rangle^* = \alpha^* e^{i\omega t}.$$

Det gir

$$\langle q \rangle = \langle \alpha | \widehat{q} | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\alpha e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t} \right) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \Re e \left(\alpha e^{-i\omega t} \right).$$

Ved å sette $\alpha = |\alpha| e^{i\varphi}$ får vi, med $q_0 = \sqrt{2\hbar/(m\omega)}$,

$$\langle q \rangle = q_0 |\alpha| \cos(\omega t - \varphi),$$

en oscillasjon med maksimalutsving $q_0|\alpha|$.

d) Første ordens perturbasjonsteori gir korreksjonen

$$E_n^{(1)} = \langle n | \widehat{H}_1 | n \rangle = -\frac{1}{8m^3c^2} \langle n | \widehat{p}^4 | n \rangle$$

til n'te energinivå. Innsetting av

$$\widehat{p} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} i \left(a^\dagger - a \right),$$

som følger av de oppgitte uttrykkene for stigeoperatorene, gir

$$E_n^{(1)} = -\frac{1}{8m^3c^2} \left(\frac{m\hbar\omega}{2} \right)^2 \langle n | (a^\dagger - a)^4 | n \rangle = -\frac{\hbar^2\omega^2}{32mc^2} \langle n | (a^\dagger - a)^4 | n \rangle.$$

Fjerdepotensen gir 16 ulike ledd, men det er bare leddene med like mange heve- og senke-operatorer som gir et ikke-forsvinnende bidrag:

$$\begin{aligned}
\langle n | (a^\dagger - a)^4 | n \rangle &= \langle n | a^{\dagger 2} a^2 + a^\dagger a^2 a^\dagger + a^\dagger a a^\dagger a + a^2 a^{\dagger 2} + a a^{\dagger 2} a + a a^\dagger a a^\dagger | n \rangle \\
&= \sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-1}\sqrt{n} + \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\sqrt{n}\sqrt{n} + \sqrt{n}\sqrt{n}\sqrt{n}\sqrt{n} \\
&\quad + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+2}\sqrt{n+1} + \sqrt{n}\sqrt{n}\sqrt{n+1}\sqrt{n+1} \\
&\quad + \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\sqrt{n+1} \\
&= n(n-1) + (n+1)n + n^2 + (n+1)(n+2) + n(n+1) + (n+1)^2 \\
&= 6n^2 + 6n + 3. \qquad (3)
\end{aligned}$$

Alt i alt får vi den relativistiske korreksjonen

$$E_n^{(1)} = -\frac{3\hbar^2\omega^2}{32mc^2} (2n^2 + 2n + 1).$$

Oscillatorspektret er derfor

$$E_n = \hbar\omega \left[n + \tfrac{1}{2} - \frac{3\hbar\omega}{32mc^2} (2n^2 + 2n + 1) + \ldots \right]$$

Det er tydeligvis en utvikling i forholdet mellom oscillatorenergi $\hbar\omega$ og hvilemassenergi mc.

Oppgave 3

a)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{antall partikler ut i romvinkel } d\Omega \text{ pr. tidsenhet}}{d\Omega \cdot \text{ innfallende partikkelstrøm}}.$$

b) Som læreboka

c) Totaltverrsnittet blir

$$\begin{aligned}\sigma &= \int |f(\vartheta)|^2 \, d\Omega = \int_0^\pi f^*(\vartheta) f(\vartheta) \; 2\pi \sin\vartheta \; d\vartheta \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \int_0^\pi \sum_\ell \sum_{\ell'} (2\ell+1)(2\ell'+1) e^{i\delta_\ell - i\delta_{\ell'}} \sin\delta_\ell \sin\delta_{\ell'} P_\ell(\cos\vartheta) P_{\ell'}(\cos\vartheta) \; \sin\vartheta \, d\vartheta.\end{aligned}$$

Vi bruker ortogonalitet av Legendre-polynomene:

$$\int_0^\pi P_\ell(\cos\vartheta) P_{\ell'}(\cos\vartheta) \; \sin\vartheta \; d\vartheta = \int_{-1}^1 P_\ell(x) P_{\ell'}(x) \; dx = \begin{cases} 0 & \text{hvis } \ell \neq \ell' \\ \frac{2}{2\ell+1} & \text{hvis } \ell = \ell' \end{cases}$$

Det gir

$$\underline{\underline{\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^\infty (2\ell+1) \sin^2\delta_\ell.}}$$

Foroverretningen er $\vartheta = 0$, dvs $\cos\vartheta = 1$. For denne verdien blir alle Legendre-polynomene lik 1,

$$P_\ell(1) = 1.$$

Derved

$$f(0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^\infty (2\ell+1) e^{i\delta_\ell} \sin\delta_\ell = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^\infty (2\ell+1)(\cos\delta_\ell \sin\delta_\ell + i \sin\delta_\ell^2)$$

Vi ser at imaginærdelen av dette er lik totaltverrsnittet på en konstant nær:

$$\Im m \; f(0) = \frac{k}{4\pi} \, \sigma,$$

som skulle bevises.

Oppgave 4

a) Som læreboka.

b) Hamiltonoperatoren er

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

I vårt tilfelle er prøvefunksjonen f reell, så vi kan glemme komplekskonjugasjonene. For enkelhets skyld gjør vi en delvis integrasjon i kinetisk-energi-leddet,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f f''\, dx = -\int_{-\infty}^{\infty} f' f'\, dx,$$

der overflateleddet er null fordi $f(\pm\infty) = 0$.

Vi trenger følgende integraler:

$$\begin{aligned}
\int f^2\, dx &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tau x^2}\, dx = \sqrt{\pi}\, \tau^{-\frac{1}{2}} \\
\int f'^2\, dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \tau^2 x^2 e^{-\tau x^2}\, dx = \sqrt{\pi} \tau^2 \tfrac{1}{2} \tau^{-\frac{3}{2}} = \tfrac{1}{2}\sqrt{\pi}\, \tau^{\frac{1}{2}} \\
\int x^6 f^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} x^6 e^{-\tau x^2}\, dx = \sqrt{\pi}\ \tfrac{15}{8} \tau^{-\frac{7}{2}} \\
\int x^2 f\, dx &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\tau x^2}\, dx = \sqrt{\pi}\ \tfrac{1}{2} \tau^{-\frac{3}{2}}
\end{aligned}$$

Ved innsetting i uttrykket for E_{RR} får vi

$$E_{RR} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\tau}{2} + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{16}{a^6} \cdot \frac{15}{8\tau^3} - \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{12}{a^2} \cdot \frac{1}{2\tau}$$

Vi innfører en dimensjonsløs variasjonsparameter x ved å sette $\tau = x/a^2$. Det gir

$$E_{RR} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{x}{2} + \frac{30}{x^3} - \frac{6}{x} \right).$$

τ (og dermed x) må være positiv for at f skal være normerbar, så vi undersøker $x > 0$. Funksjonen

$$f(x) = \frac{x}{2} + \frac{30}{x^3} - \frac{6}{x}$$

blir uendelig både for $x \to 0$ og for $x \to \infty$, så den må ha et minimum. Nullstilling av den deriverte gir

$$f'(x) = \frac{1}{2} - \frac{90}{x^4} + \frac{6}{x^2} = 0.$$

Det gir en annengradslikning for $x^2 = y$:

$$y^2 + 12y - 180 = 0, \text{ eller } (y+6)^2 = 180 + 36 = 216, \text{ dvs } y = \sqrt{216} - 6 = 8,6969$$

Det gir $x = 2,94906$ og dermed blir det beste estimat med denne prøvefunksjonen lik

$$E_{RR} = \underline{\underline{0,6097 \frac{\hbar^2}{2ma^2}}}.$$