Løsningsforslag
Eksamen 27. mai 2011
FY1006/TFY4215 Innføring i kvantefysikk

Oppgave 1

a. ♠For en energiegenfunksjon med energi $E = V_1$ følger det fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at den i området $x < 0$ må oppfylle ligningen

$$\psi_E'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi_E = \frac{2m}{\hbar^2}[V_1 - V_1]\psi_E = 0.$$

Den generelle løsningen i dette området er da $\psi_E = Ax + B$. Her må A settes lik null for å unngå at ψ_E divergerer i grensen $x \to -\infty$. Altså må egenfunksjonen ha formen

$$\psi_E = B \quad \text{(en konstant)} \text{ for } \quad x < 0.$$

♠Dette betyr at ψ_E ikke er normerbar i vanlig forstand (dvs ikke er kvadratisk integrerbar og ikke lokalisert). En slik energiegenfunksjon må derfor beskrive en ubunden tilstand.

♠For $x > b$ er $V(x) = 2V_1$, og vi ser at ψ_E i dette området må oppfylle ligningen

$$\psi_E'' = \frac{2m}{\hbar^2}[2V_1 - V_1]\psi_E = \frac{1}{a_0^2}\,\psi_E \equiv \kappa^2\psi_E, \quad \text{med} \quad \kappa = \frac{1}{a_0}.$$

Den generelle løsningen i dette området er da $C\exp(-\kappa x) + D\exp(\kappa x)$. Her må D settes lik null for å unngå at ψ_E divergerer i grensen $x \to \infty$. Vi har altså at

$$\psi_E = Ce^{-\kappa x} \qquad \text{for} \quad x > b, \quad \text{q.e.d.}$$

b. ♠For $0 < x < b$ er $V(x) = 0$, og med $E = V_1$ har vi da at

$$\psi_E'' = \frac{2m}{\hbar^2}[-V_1]\psi_E = -\frac{1}{a_0^2}\,\psi_E \equiv -k^2\psi_E,$$

med den generelle løsningen

$$\psi_E = D\cos kx + F\sin kx, \qquad (\text{hvor } k = \frac{1}{a_0} = \kappa),$$

slik at

$$\psi_E' = -kD\sin kx + kF\cos kx.$$

Kontinuiteten av ψ og ψ' i $x = 0$ gir

$$D = B \qquad \text{og} \qquad kF = 0,$$

slik at

$$\psi_E = B\cos kx \quad \text{ for } 0 < x < b, \quad \text{q.e.d.}$$

♠I dette området er da $\psi_E' = -kB\sin kx$. Kontinuiteten av ψ'/ψ i $x = b$ gir da

$$\frac{-kB\sin kb}{B\cos kb} = -\kappa.$$

For at løsningen ψ_E med energien $E = V_1$ skal eksistere må altså

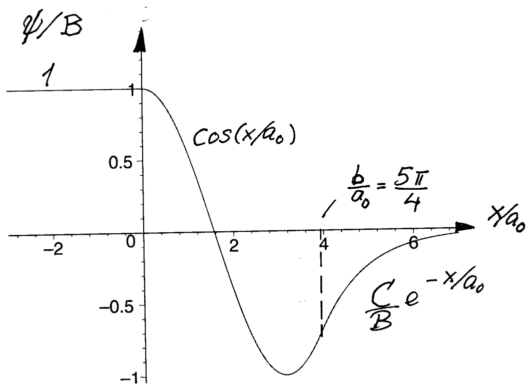
$$\tan kb = \frac{\kappa}{k} = 1 \qquad (\text{idet } k = \kappa = 1/a_0),$$

dvs kb må ha en av verdiene $kb = b/a_0 = \pi/4,\ \pi/4+\pi,\ \pi/4+2\pi,$ osv. Denne spesielle typen energiegenfunksjon eksisterer altså bare når brønnvidden har en av de diskrete verdiene

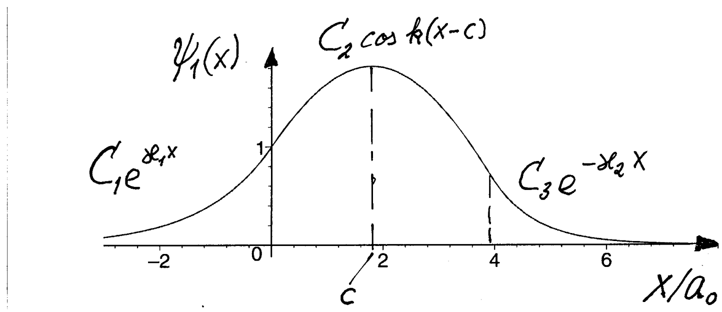
$$b = (1/4+n)\pi a_0, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots, \quad \text{q.e.d.}$$

c. ♠For $b = \pi a_0/4$ er tilstanden med energien $E = V_1$ grunntilstanden for dette systemet. [1] Når b gjøres større, vil grunntilstandsenergien minke, slik at grunntilstanden blir en bunden tilstand. (Jf kvantevillskap.)

♠For egenfunksjonen med $E = V_1$ er bølgetallet som vi så $k = 1/a_0$. Med $kb = 5\pi/4$ vil da funksjonen $\cos kx$ i området $0 < x < b$ dekke 5/8 periode. Denne egenfunksjonen får da ett nullpunkt, og ser slik ut (når vi ser bort fra normeringen):



♠Grunntilstanden vil ha vesentlig lavere energi, og er fri for nullpunkter. For $x < 0$ er den av typen $C_1 \exp(\kappa_1 x)$. For $0 < x < b$ er den sinusformet, og kan skrives f.eks på formen $C_2 \cos[k(x-c)]$. For $x > b$ er den av typen $C_3 \exp(-\kappa_2 x)$. Prinsippskissen blir som følger:



♠Ved å kreve kontinuitet av ψ'/ψ for $x = 0$ og $x = b$ finner en betingelsene

$$\kappa_1 = k \tan kc \qquad \text{og} \qquad -k\tan[k(b-c)] = -\kappa_2,$$

der

$$\kappa_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_1 - E_1)}, \qquad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_1} \quad \text{og} \quad \kappa_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(2V_1 - E_1)}.$$

De to ligningene ovenfor kan da brukes til å finne de to ukjente, som er c og grunntilstandsenergien E_1.

[1] Dette kan en overbevise seg om ved å se litt på hvordan en tilstand med lavere energi måtte krumme i de tre x-områdene.

Oppgave 2

a. ♠Egenfunksjonene er ganske enkelt de sfæriske harmoniske:

$$\widehat{H}Y_{lm} = \frac{\widehat{\mathbf{L}}^2}{2I}Y_{lm} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r_0^2}Y_{lm}.$$

Med den reduserte massen

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \tfrac{1}{2}m$$

blir da energiegenverdiene

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m r_0^2}\,; \qquad l = 0,\,1,\,2,\,\cdots.$$

♠Grunntilstanden har energien $E_0 = 0$. Første eksiterte nivå har vi for $l = 1$. Differansen mellom disse nivåene er altså

$$\begin{aligned} E_1 - E_0 &= E_1 = \frac{2\hbar^2}{m r_0^2} = \frac{2\hbar^2}{30000\, m_e \cdot 16 a_0^2} = \frac{1}{120000}\,\frac{\hbar^2}{2 m_e a_0^2} \\ &= \frac{1}{120000} \cdot 13.6 \text{ eV} = 1.13 \cdot 10^{-4} \text{ eV}. \end{aligned}$$

♠Fysisk tolkning: Absoluttkvadratet $|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2$ av egenfunksjonene gir sannsynlighetsfordelingen for retningsvektoren

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

fra kjerne 2 til kjerne 1.

♠I grunntilstanden er sannsynlighetstettheten $|Y_{00}|^2 = 1/4\pi$ isotropt fordelt over alle retninger. Intervallet $0 < \theta < \pi/2$ svarer til halvparten av hele vinkelrommet, så sannsynligheten for å finne θ i dette intervallet er femti prosent.

♠En energiegentilstand har veldefinert dreieimpulskvantetall l og dermed veldefinert paritet $(-1)^l$. Sannsynlighetsfordelingen i vinkelrommet vil derfor være symmetrisk med hensyn på rom-inversjon, Det vil derfor være like stor sannsynlighet for å observere θ i intervallet $0 < \theta < \pi/2$ som i intervallet $\pi/2 < \theta < \pi$.

b. ♠Med $x = r - r_0$ er kraften i den harmoniske tilnærmelsen $F_h = -kx$. Dette svarer til det harmoniske potensialet $V_h = \frac{1}{2}kx^2$, eventuelt pluss en konstant, som er uten fysisk betydning, og derfor droppes.

♠Den tidsuavhengige Schrödingerligningen for relativbevegelsen (vibrasjonen) er da

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}kx^2\right]\psi(x) = E\psi(x),$$

der $\mu = m/2$ er den reduserte massen funnet ovenfor. Ved å sammenligne med de oppgitte formlene for den harmoniske oscillatoren finner vi da at (den klassiske vinkelfrekvensen er) $\omega = \sqrt{k/\mu} = \sqrt{2k/m}$, og at energien som skal til for å eksitere til første vibrasjonsnivå er

$$E_1 - E_0 = \hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{2k}{m}} = 6.582 \cdot 10^{-16}\text{eVs}\sqrt{\frac{2 \cdot 10^3 \text{N/m}}{2.733 \cdot 10^{-26}\text{Ns}^2/\text{m}}} = 0.178 \text{ eV}.$$

♠Grunntilstanden er

$$\psi_0 = C_0 \exp(-\mu\omega x^2/2\hbar); \qquad C_0 = \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}.$$

Kvadratet av usikkerheten er da

$$\begin{aligned}(\Delta r)^2 &= \left\langle (r-r_0)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle = C_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\mu\omega x^2/\hbar) = \frac{\hbar}{2\mu\omega} \\ &= \frac{\hbar^2}{m(\hbar\omega)}.\end{aligned}$$

Forholdet mellom usikkerheten i avstanden mellom de to kjernene og forventningsverdien av denne avstanden er altså

$$\frac{\Delta r}{r_0} = \frac{\hbar}{r_0\sqrt{m(\hbar\omega)}} = \frac{1.055\cdot 10^{-34}}{4\cdot 0.529\cdot 10^{-10}\sqrt{2.733\cdot 10^{-26}\cdot 0.178\cdot 1.602\cdot 10^{-19}}} = 1.79\cdot 10^{-2}.$$

Oppgave 3

a. ♠Ved $t=0$ er forventningsverdien av posisjonen

$$\begin{aligned}\langle\, x\,\rangle_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,0)\, x\, \Psi(x,0)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip_o x/\hbar} f^*(x)\, x\, f(x) e^{ip_0 x/\hbar} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x|f(x)|^2 dx = 0, \quad \text{q.e.d.,}\end{aligned}$$

fordi integranden er antisymmetrisk.

♠Forventningsverdien av impulsen er

$$\begin{aligned}\langle\, p_x\,\rangle_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip_0 x/\hbar} f^*(x) \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left[e^{ip_0 x/\hbar} f(x)\right] dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip_0 x/\hbar} f^*(x) \frac{\hbar}{i}\, e^{ip_o x/\hbar}\left[\frac{ip_0}{\hbar} f(x) + \frac{df}{dx}\right] dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\left[p_0\, f(x) + \frac{\hbar}{i}\frac{df}{dx}\right] dx = p_0 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)^2| dx}_{=1} + 0 = p_0,\end{aligned}$$

idet produktet av f^* og df/dx er antisymmetrisk.

b. ♠Ved å derivere den første av de to ligningene i Ehrenfests teorem med hensyn på t og bruke den andre ligningen finner vi at

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle\, x\,\rangle = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\langle\, p_x\,\rangle = \frac{1}{m}\langle -\partial V/\partial x\,\rangle = -\omega^2\langle\, x\,\rangle.$$

Den generelle løsningen er

$$\langle\, x_t\,\rangle = A\sin\omega t + B\cos\omega t \qquad \Longrightarrow \qquad \langle\, p_x\,\rangle_t = m\frac{d}{dt}\langle\, x\,\rangle_t = m\omega A\cos\omega t - m\omega B\sin\omega t.$$

For $t=0$ har vi da

$$0 = B \qquad \text{og} \qquad p_0 = m\omega A,$$

slik at løsningen er

$$\langle\, x\,\rangle_t = \frac{p_0}{m\omega}\sin\omega t \qquad \text{og} \qquad \langle\, p_x\,\rangle_t = p_0\cos\omega t.$$

Oppgave 4

a. ♠Siden den oppgitte vinkelfunksjonen

$$Y(\theta,\phi)=\tfrac{1}{2}\sqrt{3}\,Y_{11}+\tfrac{1}{2}\,Y_{1,-1}$$

er en lineærkombinasjon av Y_{11} og $Y_{1,-1}$, begge med $l=1$, er Y en egenfunksjon til $\widehat{\mathbf{L}}^2$ med egenverdi $\hbar^2 l(l+1)=2\hbar^2$. Ifølge målepostulatet må dette da være måleresultatet.

♠Observablene E, $\mathbf{L}^2$ og L_z kalles kompatible fordi de kan ha skarpe verdier samtidig når potensialet er kulesymmetrisk som her. Dette henger sammen med at de tre tilhørende *operatorene*, $\widehat{H}$, $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $\widehat{L}_z$ kommuterer.

♠Fra formelen ovenfor kan vi lese ut at de mulige måleresultatene for L_z i dette tilfellet er $+\hbar$ og $-\hbar$. Sannsynlighetene er absoluttkvadratene av de respektive koeffisientene, dvs

$$P_{L_z=+\hbar}=\frac{3}{4}\qquad\text{og}\qquad P_{L_z=-\hbar}=\frac{1}{4}.$$

b. ♠Målingen av L_z vil ifølge målepostulatet etterlate systemet med en vinkelfunksjon som enten er Y_{11} eller $Y_{1,-1}$. Tilstanden til systemet endres altså ved målingen av L_z.

♠Siden L_z er kompatibel med E og $\mathbf{L}^2$, vil målingen av L_z ikke endre verdiene av disse observablene. (Én måte å preparere en tilstand med skarpe verdier av E, $\mathbf{L}^2$ og L_z er f.eks å måle de tre observablene i tur og orden.)

♠Forventningsverdien av L_z i den opprinnelig preparerte tilstanden er

$$\langle\, L_z\,\rangle = P_{L_z=+\hbar}\cdot(+\hbar)+P_{L_z=-\hbar}\cdot(-\hbar)=\tfrac{1}{2}\hbar,$$

og da forventningsverdien av L_z^2 åpenbart er lik $\hbar^2$, blir usikkerheten i L_z i den preparerte tilstanden

$$\Delta L_z=\left(\left\langle\, L_z^2\,\right\rangle-\langle\, L_z\,\rangle^2\right)^{1/2}=\tfrac{1}{2}\sqrt{3}\,\hbar.$$

c. ♠Fra figuren ser vi at radialfunksjonen $u(r)$ har to nullpunkter (for $0<r<\infty$), dvs radialkvantetallet er $n_r=2$. Følgelig er hovedkvantetallet $n=l+1+n_r=1+1+2=4$, og energien er $E_4=E_1/16=-(\alpha Z)^2 m_e c^2/32$. Samme konklusjon kan trekkes ved å se på krumningen. I det oppgitte diagrammet ser vi at den relative krumningen til radialfunksjonen u skifter fortegn for Zr/a_0 ca lik 30. Dette viser at $n=4$, idet figuren også viser at det ytre krysningspunktet (ytre venderadius) mellom energilinjene for energiene E_3, E_4 og E_5 og det effektive potensialet $V^1_{\text{eff}}(r)$ opptrer ved henholdsvis $Zr/a_0\approx 16.5, 31$ og 48.

♠For hovedkvantetallet $n=4$ kan dreieimpulskvantetallet l ha verdiene 0,1,2 og 3. Antall verdier av det magnetiske kvantetallet m for en gitt l er $2l+1$. Antallet lineært uavhengige romlige energiegenfunksjoner med $n=4$ blir derfor

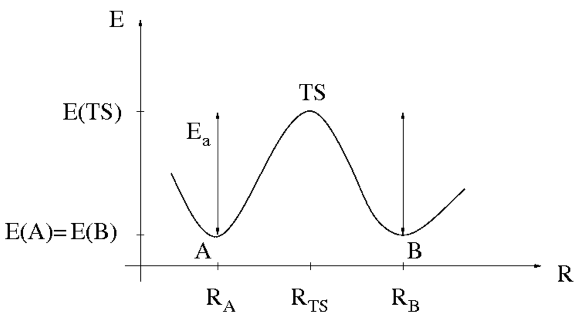
$$\sum_{l=0}^{3}(2l+1)=1+3+5+7=16(=n^2).$$

[For $n=5$ er den tilsvarende summen lik 25.]

Oppgave 5

♠ s-, p- og d-orbitaler tilsvarer hhvis $l = 0$, $l = 1$ og $l = 2$. Heltallene i gaussorbitalene er da hhvis $a = b = c = 0$, $a+b+c = 1$ og $a+b+c = 2$. Pariteten er $+1$ for s og d, og -1 for p.

♠



Reaksjonens transisjonstilstand (TS) er angitt i figuren, dvs det lokale maksimum (sadelpunkt) mellom de to minima A og B. Aktiveringsenergien er $E_a = E(TS) - E(A)$, se figuren. Reaksjonens hastighet avhenger eksponentielt av forholdet mellom E_a og termisk energi, dvs $k \sim \exp(-E_a/k_B T)$, der k_B er Boltzmanns konstant.

Oppgave 6

♠ Total bindingsenergi er

$$\Delta E = E(G - C) - E(G) - E(C) = -0.0494084\,\text{au},$$

eller -1.34391 eV. Fordelt på 3 hydrogenbindinger blir dette 448 meV pr hydrogenbinding.

♠ Antall translasjonsfrihetsgrader = Antall rotasjonsfrihetsgrader = 3 for både G, C og baseparet G-C. (Ingen av systemene er lineære.) Da gjenstår 42 vibrasjonsfrihetsgrader for G, 33 for C, og 81 for baseparet G-C. (Siden totalt antall frihetsgrader er 3 ganger antall atomer for et gitt system.)

Oppgave 7

♠ Likevekt tilsvarer energiminimum, så $d = 1.1$ Å. Her er potensialdybden $V_0 = 30$ eV.

♠ Det er tilstrekkelig å rekkeutvikle eksponentialfunksjonen til 1. orden i $x - d$:

$$V_M(x) \simeq V_0 \left(1 - 1 + \kappa(x-d)\right)^2 - V_0 = -V_0 + \kappa^2 V_0 (x-d)^2.$$

Vi ser da, ved sammenligning med harmonisk oscillator $V_h(x) = \frac{1}{2}k(x-d)^2$ at

$$k = 2\kappa^2 V_0.$$

Vi har tallverdiene $V_0 = 30$ eV og $\kappa = 1.35$ Å^{-1}. Dermed:

$$k = 2 \cdot (1.35 \cdot 10^{10})^2 \cdot 30 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \simeq 1750\,\text{N/m}.$$

Vi har videre $d = 1.1$ Å og $m = 7m_p$, og dessuten sammenhengen $\omega^2 = k/m$. Dermed:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2} \cdot 1.05 \cdot 10^{-34} \cdot \sqrt{\frac{1750}{7 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}}} \simeq 2.03 \cdot 10^{-20}\,\text{J} \simeq 127\,\text{meV}.$$