NTNU
Fakultet for Naturvitskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Eksamen TFY4215/FY1006 Innføring i kvantemekanikk Vår 2013

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

Onsdag 22. mai 2013
kl. 15.00-19.00

Tilletne hjelpemiddel:
Godkjend kalkulator
Rottmann: Matematisk Formelsamling
Rottmann: Matematische Formelsammlung
Barnett & Cronin: Mathematical Formulae
Angell og Lian: Fysiske størrelser og enheter: navn og symboler

Oppgåvesettet er på fem sider. Les oppgåvene nøye. Spør dersom noko er uklart. Lykke til.

Oppgåve 1

I denne oppgåva skal vi studere ein partikkel med masse μ som bevegar seg i eit rotasjonssymmetrisk potensial $V(\mathbf{r}) = V(r)$ i to dimensjonar.

a) Vis at den tidsuavhengige Schrödingerlikninga i polarkoordinatar (r, ϕ) kan skrivast som

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{L_z^2}{\hbar^2 r^2}\right)+V(r)\right]\psi(r,\phi) = E\psi(r,\phi)\,. \qquad (1)$$

Forklar kvifor $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$. Dei simultane eigenfunksjonane for $\hat{H}$ og L_z kan skrivast på forma $\psi(r, \phi) = R(r)e^{im\phi}$. Finn dei moglege verdiane for m.

b) Vis at radiallikninga for $R(r)$ kan skrivast som

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2}\right)\right] R(r) + V(r)R(r) \quad = \quad ER(r) \; . \tag{2}$$

c) I resten av oppgåva er $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$, det vil seie vi studerer ein isotrop todimensjonal oscillator. Vi skriv nå bølgjefunksjonen som $R(r) = u(x)$ der $x = r\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$ er ein dimensjonslaus variabel. I tillegg skriv vi $u(x) = P(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}$. Radiallikninga for $P(x)$ kan da skrivast som

$$\left[P''(x) + \left(\frac{1}{x} - 2x\right)P'(x) + \left(\epsilon - 2 - \frac{m^2}{x^2}\right)P(x)\right] \quad = \quad 0 \; , \tag{3}$$

der $\epsilon = E/(\frac{1}{2}\hbar\omega)$. Dette treng du ikkje vise. Bruk likning (3) til å finne spektret (energinivåa) til den isotrope todimensjonal oscillatoren.

d) Det finst ei løysing der $P(x)$ er konstant. Vis at dette gjev $m = 0$ og $\epsilon = 2$. Den neste bølgjefunksjonen er $P(x) \sim x$. Finn ϵ og dei moglege verdiane for m i dette tilfellet.

e) Bølgjefunksjonane som svarer til $P(x) =$ konstant og $P(x) \sim x$ kan skrivast som

$$\psi_0(r, \phi) = Ae^{-\frac{1}{2}\mu\omega r^2/\hbar} \; , \qquad \psi_m(r, \phi) = Bre^{-\frac{1}{2}\mu\omega r^2/\hbar}e^{im\phi} \; , \tag{4}$$

der A og B er normeringskonstantar.

Forklar kvifor $\psi_0(r, \phi)$ er grunntilstanden for den todimensjonale oscillatoren. Vis at

$$\langle r^2 \rangle \quad = \quad \frac{\hbar}{\mu\omega} \tag{5}$$

i grunntilstanden $\psi_0(r, \phi)$. Bruk dette til å finne middelverdiane $\langle E_p \rangle = \langle V(r) \rangle$ og $\langle E_k \rangle = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 \right\rangle$ i grunntilstanden $\psi_0(r, \phi)$. Kommenter resultatet. Finn den klassiske venderadien r_{vende} i tilstanden $\psi_m(r, \phi)$.

Oppgåve 2

I dei fleste tilfella i kvantemekanikk kan ein ikkje løyse Schrödingerliknikngа eksakt. Ein kan da løyse problemet numerisk. Eit alternativ er å bruke *variasjonsmetoden*. Ein gjettar på ei rimeleg form på bølgjefunksjonen ψ. Denne bølgjefunksjonen ψ kallar ein da ein *prøvebølgjefunksjon*. ψ inneheld ein eller fleire parametre som ein kan variere. Ideen er å minimalisere energien til ψ som funksjon av desse parametrane. Ein kan da vise at energien E_{min} som ein får med denne prosedyra alltid er høgare enn den verkelege grunntilstandsenergien til systemet. Egil Hylleraas (1898-1965) var ein norsk fysikar som i tida rett før 1930 brukte variasjonsmetoden til å rekne ut E_{min} for Helium. Han brukte svært mange parametre i prøvebølgjefunksjonen sin, men han hadde ikkje PC og matlab tilgjengeleg. Han fekk eit resultat som berre var eit par prosent høgare enn den eksperimentelle verdien for grunntilstanden i Helium. Hylleraas var ein framifrå fysikar som gav store bidrag til å forstå to-elektron atom. Vi skal gå i Hylleraas' fotefar og bruke variasjonsmetoden på eit enkelt problem.

Potensialet vi skal studere er på forma

$$V(x) \quad = \quad \begin{cases} \infty \, , & x < 0 \\ Fx \, , & x \geq 0 \end{cases} \, , \tag{6}$$

der $F > 0$ er ein konstant. Sjå figur 1.

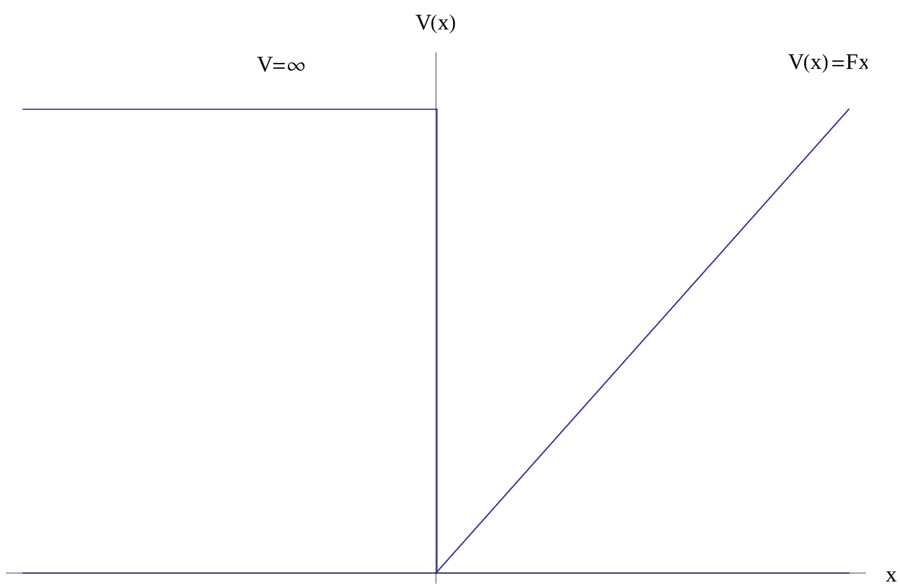

Figure 1: Potensialet $V(x)$ i oppgåve 2.

Prøvebølgjefunksjonen vi skal bruke er

$$\psi(x) \quad = \quad \begin{cases} 0 \, , & x < 0 \\ Axe^{-\alpha x} \, , & x \geq 0 \end{cases} \, , \tag{7}$$

der A er ein normeringskonstant og $\alpha > 0$ er ein variasjonsparameter.

a) Forklar at $\psi(x)$ beskriv ein bunden tilstand i potensialet $V(x)$. Vis at den normerte bølgjefunksjonen er

$$\psi(x) = 2\alpha^{\frac{3}{2}} x e^{-\alpha x} . \tag{8}$$

b) Vis at middelverdien til den potensielle energien er

$$\langle V(x) \rangle = \frac{3F}{2\alpha} . \tag{9}$$

c) Vis at middelverdien til den kinetiske energien er

$$\langle E_k \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 . \tag{10}$$

d) Bruk resultata i a) – c) til å finne den verdien av α som minimaliserer energien i tilstanden ψ og finn $E_{\rm min}$. Samanlikn svaret med

$$E_{\rm min}^{\rm eksakt} = 2.33811 \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{3}} F^{\frac{2}{3}} , \tag{11}$$

som er den numerisk eksakte verdien for grunntilstandsenergien for potensialet i likning (6).

Oppgåve 3

I denne oppgåva er det fire delspørsmål du kan svare på uavhengig av kvarandre.

a) La $\hat{H}$ vere Hamiltonoperatoren for ein partikkel med masse m som bevegar seg i tre dimensjonar der potensialet $V(\mathbf{r}) = V(r)$ er kulesymmetrisk. $\hat{H}$ er da på forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right] + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r) , \tag{12}$$

der $\hat{\mathbf{L}}$ er dreieimpulsoperatoren. Finn kommutatoren $[\hat{H}, r]$.

b) Bølgjefunksjonen for grunntilstanden i hydrogen er

$$\psi_{100}(r,\phi,\theta) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} , \tag{13}$$

der a_0 er Bohrradien. Finn bølgjefunksjonen i impulsrommet, $\Phi(p)$, der $p = |\mathbf{p}|$. Kva er tolkninga av $|\Phi(p)|^2$?

Hint: Koordinatsystemet i posisjonsrommet (x, y, z) kan veljast slik at $\mathbf{p}$ peiker i z-retning. Skriv ut $\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}$ i dette koordinatsystemet og bruk at $z = r\cos\theta$ og bruk kulekoordinatar (r, ϕ, θ).

c) Forklar forskjellen mellom klassisk mekanikk og kvantemekanikk. Du treng ikkje skrive ei lærebok, men nemne eit par viktige skilnader.

d) Figur 2 viser eit potensialsprang der potensialet er gjeve ved

$$V(x) \quad = \quad \begin{cases} 0 \,, & x < 0 \\ V_0 \,, & x \geq 0 \end{cases} \,, \tag{14}$$

der $V_0 > 0$ er ein konstant.

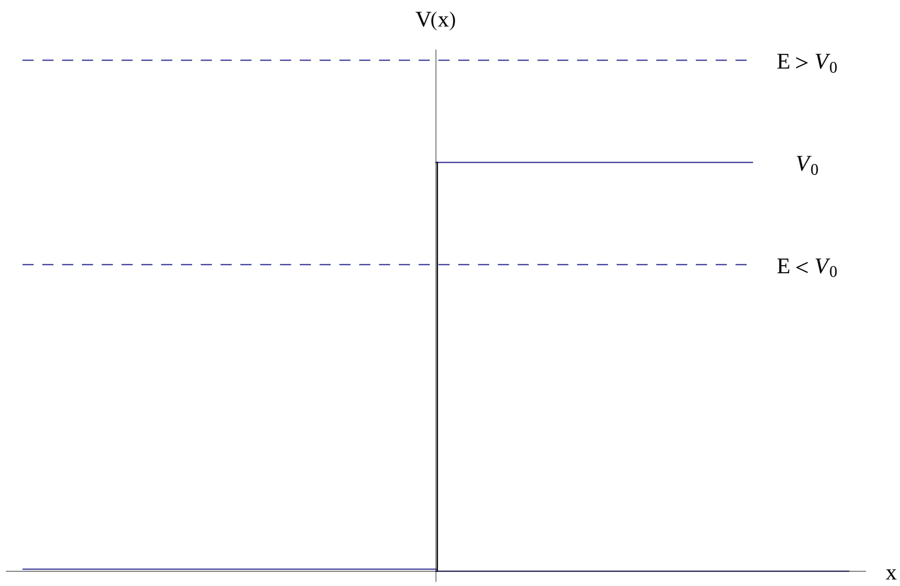

Figure 2: Potensialet $V(x)$ i oppgåve 3d.

Vi sender ein partikkel med masse m og energi E inn frå venstre mot potensialspranget. I det eine tilfellet er $E > V_0$ og i det andre tilfellet er $E < V_0$. Kva skjer med partikkelen i dei to tilfella viss vi bruker klassisk fysikk? Og viss vi bruker kvantemekanikk?
