



NTNU

Fakultet for Naturvitenskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Løysingsframlegg eksamen TFY4215/FY1006 Innføring i Kvantemekanikk vår 2013

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

May 30, 2013

Oppgave 1

a) Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga er

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r, \phi) \right] \psi(r, \phi) = E\psi(r, \phi). \quad (1)$$

der

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (2)$$

Innsetting av $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ gjev

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L_z^2}{\hbar^2 r^2} \right) + V(r, \phi) \right] \psi(r, \phi) = E\psi(r, \phi). \quad (3)$$

$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ kommuterer med \hat{H} fordi L_z kommuterer med $\frac{\partial}{\partial r}$ (partielleriverte kommuterer) fordi L_z kommuterer med r (fordi L_z er uavhengig av r) og derfor med ein vilkårlig funksjon $f(r)$.

Dersom vi krev at bølgefunksjonen skal vere eintydig får vi

$$\psi(r, 0) = \psi(r, 2\pi), \quad (4)$$

sidan $\phi = 0$ og $\phi = 2\pi$ er same punkt på sirkelen. (Ein kan sjølsagt velje eit vilkårlig punkt på sirkelen). Etter innsetting i (4) og forkorting med $R(r)$ gjev dette $1 = e^{2\pi im}$. Denne likninga har løysing

$$m = \underline{\underline{0, \pm 1, \pm 2, \dots}}. \quad (5)$$

b) Innsetting av $\psi(r, \phi) = R(r)e^{im\phi}$ i likning (1) og forkorting med $e^{im\phi}$ gjev direkte den oppgjevne likninga.

c) Dersom vi skiftar variabel $x = r\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$ får vi $\frac{d}{dr} = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \frac{d}{dx}$ etc. Ved innsetting av $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega x^2$ gjev dette

$$-\frac{1}{2}\hbar\omega \left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} - \frac{m^2}{x^2} \right] u(x) + \frac{1}{2}\hbar\omega x^2 u(x) = Eu(x) \quad (6)$$

Vi har $R(r) = u(x) = P(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}$. Dette gjev

$$u'(x) = P'(x)e^{-\frac{1}{2}x^2} - P(x)xe^{-\frac{1}{2}x^2}, \quad (7)$$

$$u''(x) = P''(x)e^{-\frac{1}{2}x^2} - 2P'(x)xe^{-\frac{1}{2}x^2} + P(x)(x^2 - 1)e^{-\frac{1}{2}x^2}. \quad (8)$$

Innsetting av $u'(x)$ og $u''(x)$ og forkorting med $\frac{1}{2}\hbar\omega$ og $e^{-\frac{1}{2}x^2}$ gjev

$$P''(x) + \left(\frac{1}{x} - 2x \right) P'(x) + \left(\epsilon - 2 - \frac{m^2}{x^2} \right) P(x) = 0. \quad (9)$$

c) Vi bruker potensrekkmjetoden og skriv

$$P(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n. \quad (10)$$

Dette gjev

$$P'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-1}, \quad (11)$$

$$P''(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} = \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2}. \quad (12)$$

Innsetting gjev da

$$\begin{aligned} \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-2} - 2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^n \\ + (\epsilon - 2) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n - m^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n-2} = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Dette kan vi skrive som

$$\begin{aligned} \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} + \frac{a_1}{x} + \sum_{n=2}^{\infty} a_n n x^{n-2} - 2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^n \\ + (\epsilon - 2) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n - m^2 \left(\frac{a_0}{x^2} + \frac{a_1}{x} \right) - m^2 \sum_{n=2}^{\infty} a_n x^{n-2} = 0. \end{aligned} \quad (14)$$

Dersom vi redefinerer $n \rightarrow n - 2$ i det første, tredje og siste leddet, får vi etter litt opprydding

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} [a_{n+2}(n+2)^2 - m^2 a_{n+2} + (\epsilon - 2n - 2) a_n] x^n \\ + \frac{a_1(1 - m^2)}{x} - \frac{a_0 m^2}{x^2} = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Koeffisienten foran kvar potens av x må vere lik null. Dette gjev rekursjonsrelasjonen

$$a_{n+2} = \frac{2n + 2 - \epsilon}{(n + 2)^2 - m^2} a_n. \quad (16)$$

I tillegg må $a_0 = 0$ viss $m^2 \neq 0$ og $a_1 = 0$ viss $m^2 \neq 1$. Rekursjonsformelen viser at $a_{n+2}/a_n \sim 2/n$ for store n som er same oppførsel som rekkja for e^{x^2} . Det vil seie at $P(x) \sim e^{x^2}$ for store x og difor at $u(x) \sim e^{\frac{1}{2}x^2}$ for store x . $u(x)$ er såleis ikkje normerbar. Einaste vegen ut er at rekkja terminerer, det vil seie $a_{n+2} = 0$ for passe heiltal n . Dette gjev

$$\epsilon = 2n + 2, \quad (17)$$

eller

$$E = \underline{\underline{\hbar\omega(n+1)}}. \quad (18)$$

d) Dersom $P(x) = A$ er konstant får vi ved innsetting i (9)

$$\left(\epsilon - 2 - \frac{m^2}{x^2} \right) A = 0, \quad (19)$$

som har løysing når $\epsilon = 2$ og $m^2 = 0$.

Dersom $P(x) = Bx$ får vi ved innsetting og litt opprydding

$$\frac{1}{x} (1 - m^2) B + x(\epsilon - 4) B = 0, \quad (20)$$

som har løysing $\epsilon = 4$ og $m^2 = 1$, det vil seie $m = \pm 1$.

e) Energien til den isotrope todimensjonale oscillatoren er

$$E = \hbar\omega(n_x + n_y + 1), \quad (21)$$

der $n_x = 0, 1, 2, \dots$ og $n_y = 0, 1, 2, \dots$. Grunntilstanden er for $n_x = n_y = 0$ og $E = \hbar\omega$ som tilsvarer $\epsilon = 2$.

Middelverdien $\langle r^2 \rangle$ kan skrivast som

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty \int_0^{2\pi} r^2 |\psi_0|^2 r dr d\phi}{\int_0^\infty \int_0^{2\pi} |\psi_0|^2 r dr d\phi}, \quad (22)$$

der nemnaren er normeringsintegralet av $\psi_0(r, \phi)$. Etter innsetting av $\psi_0(r, \phi)$ gjev vinkelintegralet 2π i tellar og nemnar. Ny variabel $x = r\sqrt{\mu\omega/\hbar}$ gjev da

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= \frac{\hbar \int_0^\infty x^3 e^{-x^2} dx}{\mu\omega \int_0^\infty x e^{-x^2} dx} \\ &= \frac{\hbar \int_0^\infty y e^{-y} dy}{\mu\omega \int_0^\infty e^{-y} dy} \\ &= \frac{\hbar}{\underline{\underline{\mu\omega}}}, \end{aligned}$$

der vi andre linje har skifta variabel, $y = x^2$. Dette gjev

$$\begin{aligned} \langle V(r) \rangle &= \frac{1}{2} \mu\omega^2 \langle r^2 \rangle \\ &= \frac{1}{\underline{\underline{2}}} \hbar\omega. \end{aligned} \quad (23)$$

Vi har $\langle H \rangle = \langle E_k \rangle + \langle V(r) \rangle$ og $E = \langle H \rangle$. Dette gjev

$$\langle E_k \rangle = E - \langle V(r) \rangle. \quad (24)$$

Sidan $E = (\frac{1}{2}\hbar\omega)\epsilon = \hbar\omega$ for grunntilstanden får vi

$$\langle E_k \rangle = \frac{1}{\underline{\underline{2}}} \hbar\omega. \quad (25)$$

Energien E er da i middel likt fordelt mellom potensiell og kinetisk energi. Venderadien er gjeve

$$E - V(r_{\text{vende}}) = 0. \quad (26)$$

Med $E = \frac{1}{2}\hbar\omega\epsilon = 2\hbar\omega$ får vi

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2 r_{\text{vende}}^2 = 2\hbar\omega, \quad (27)$$

som har løysing

$$r_{\text{vende}} = \underline{\underline{2\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}}}. \quad (28)$$

Oppgave 2

a) På grunn av faktoren $e^{-\alpha x}$ går $\psi(x) \rightarrow 0$ når $x \rightarrow +\infty$ og $\psi(x)$ er difor lokalisert. $\psi(x)$ beskriv da ein bunden tilstand.

Normeringsintegralet er

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |\psi(x)|^2 dx &= |A|^2 \int_0^\infty x^2 e^{-2\alpha x} dx \\ &= \frac{|A|^2}{8\alpha^3} \int_0^\infty y^2 e^{-y} dy \\ &= \frac{|A|^2}{4\alpha^3} \\ &\stackrel{!}{=} 1. \end{aligned} \quad (29)$$

Dersom ein veljer A reell får vi $A = 2\alpha^{\frac{3}{2}}$ og den normerte bølgefunksjonen blir

$$\psi(x) = \underline{\underline{2\alpha^{\frac{3}{2}} x e^{-\alpha x}}}. \quad (30)$$

b) Middelerdien til den potensielle energien er

$$\begin{aligned} \langle V(x) \rangle &= 4F\alpha^3 \int_0^\infty x^3 e^{-2\alpha x} dx \\ &= \frac{F}{4\alpha} \int_0^\infty y^3 e^{-y} dy \\ &= \underline{\underline{\frac{3F}{2\alpha}}}. \end{aligned} \quad (31)$$

c) Middelerdien til den kinetiske energien er

$$\begin{aligned} \langle E_k \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left[\frac{d}{dx} \psi(x) \right]^2 dx \end{aligned} \quad (32)$$

etter delvis integrasjon. Innsetting av $\psi(x)$ gjev

$$\begin{aligned}\langle E_k \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} 4\alpha^3 \int_0^\infty [1 - \alpha x]^2 e^{-2\alpha x} dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} 2\alpha^2 \int_0^\infty \left(1 - \frac{y}{2}\right)^2 e^{-y} dy \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2.\end{aligned}$$

d) Den totale energien til systemet kan vi da skrive som

$$\begin{aligned}E &= E_k + E_p \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 + \frac{3F}{2\alpha}.\end{aligned}\quad (33)$$

Verdien på α som minimaliserer E , α_{\min} , finn ein ved å løyse $\frac{dE}{d\alpha} = 0$. Dette gjev

$$\frac{\hbar^2}{m} \alpha_{\min} - \frac{3F}{2\alpha_{\min}^2} = 0,\quad (34)$$

eller

$$\alpha_{\min} = \left(\frac{3mF}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}.\quad (35)$$

Innsett i uttrykket for E får vi da

$$E_{\min} = \frac{3}{4} 6^{\frac{2}{3}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{3}} F^{\frac{2}{3}}.\quad (36)$$

der prefaktoren er $\frac{3}{4} 6^{\frac{2}{3}} \approx 2.48$. Feilen i grunntilstandsenergien er omlag 6 prosent. Ikkje dårleg. Merk: $\frac{d^2E}{d\alpha^2} = \frac{\hbar^2}{m} + \frac{3F}{\alpha^3} > 0$ for alle $\alpha > 0$ og vi har såleis eit minimum og ikkje eit maksimum.

E_k er gjeve integralet ved $(\frac{d}{dx}\psi)^2$ og blir mindre jo flatare $\psi(x)$ er ($\psi(x)$ er konstant minimerer E_k). Den potensielle energien E_p blir mindre desto meir bølgefunksjonen er konsentrert rundt $x = 0$ (som er minimum til $V(x)$). Verdien på α som minimaliserer E , α_{\min} , er da eit kompromiss mellom desse to ledda.

Oppgave 3

a) Funksjonen r kommuterer opplagt med funksjonen $V(r)$ og også med $\frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}$ fordi \mathbf{L} er uavhengig av $\frac{\partial}{\partial r}$. Vi treng difor berre å rekne ut $[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}, r]$. Vi får da

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}, r \right] \psi &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\psi) - r \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi - 2 \frac{\partial}{\partial r} \psi \\ &= 2 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi, \end{aligned}$$

der ψ er ein vilkåreleg glatt funksjon. Altså er

$$[\hat{H}, r] = \underline{\underline{-\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)}}. \quad (37)$$

b) Fouriertransformen i tre dimensjonar er

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3r. \quad (38)$$

Ved innsetting gjev dette

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} e^{-r/a_0} d^3r. \quad (39)$$

Sidan ψ er uavhengig av vinklane kan vi bruke hintet som er gjeve i oppgåva. Vinkelintegralet blir då

$$\begin{aligned} \int e^{-ipr \cos \theta / \hbar} d\Omega &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \int e^{-ipr \cos \theta / \hbar} \sin \theta d\theta \\ &= 2\pi\hbar \left[\frac{e^{-ipr \cos \theta / \hbar}}{ipr} \right]_0^\pi \\ &= \frac{2\pi\hbar}{ipr} [e^{ipr/\hbar} - e^{-ipr/\hbar}]. \end{aligned} \quad (40)$$

Innsetting av dette i radialintegralet gjev

$$\begin{aligned} \Phi(p) &= \frac{2\sqrt{\pi}\hbar}{ip} \frac{1}{(2\pi a_0 \hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty r e^{-r/a_0} [e^{ipr/\hbar} - e^{-ipr/\hbar}] dr \\ &= \underline{\underline{\frac{1}{\pi} \left(\frac{2a_0}{\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{(1 + a_0^2 p^2 / \hbar^2)^2}}} \end{aligned} \quad (41)$$

Vi noterer oss at $\Phi(p)$ er kulesymmetrisk i impulsrommet akkurat som $\psi(r, \theta, \phi)$ er kulesymmetrisk i koordinatrommet. $|\Phi(p)|^2$ gjev impulsfordelinga i grunntilstanden.

c) Klassisk mekanikk er deterministisk. I prinsipp kan vi løyse Newtons bevegelseslikningar dersom vi kjenner kreftene på systemet og initialkrava. I kvantemekanikken gjev ψ som er løysinga av Schrödingerlikninga all informasjon om systemet. Denne informasjonen er av statistisk natur. For eksempel vil $|\psi(x)|^2$ gje sannsynlegheitsfordelinga for posisjonen til ein partikkel på x -aksen. I tillegg vil to observable som ikkje er kompatible (der dei tilhøyrande operatorane ikkje kommuterer) ikkje vere skarpe samtidig. Det vil seie at systemet ikkje kan vere i ein eigentilstand for begge observable samtidig. Eksempel er posisjonen x og impulsen p . Usikkerheita i slike observable er gjevne ved uskarpheitsrelasjonar.

d) Dersom vi bruker *klassisk fysikk* vil partikkelen sprette tilbake viss $E < V_0$ (100%refleksjon). Dersom $E > V_0$ vil partikkelen beveges seg mot høgre med redusert hastighet (100% transmisjon) *Kvantemekanisk* vil refleksjonskoeffisienten, det vil seie sannsynlegheiten for at partikkelen blir reflektert vere lik 1 når $E < V_0$. Dette er klassisk oppførsel. Når $E > V_0$ er refleksjonskoeffisienten ein avtagande funksjon av E , men er positiv. Dette er altså ikkje-klassisk oppførsel. Sjå figur 1.

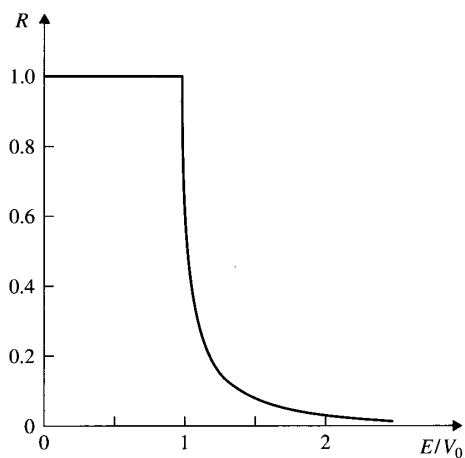


Figure 1: Refleksjonskoeffisient for eit potensialsprang som funksjon av E/V_0 .