Fakultet for Naturvitskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Fasit Kontekesamen TFY4215/FY1006 Innføring i kvantefysikk 2015

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

August 2015
kl. 09.00-13.00

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

Oppgåve 1

a) Vi har $[V(r)] = J$ og difor $[ar] = J$. Dette impliserer at $[a] = j/m = \underline{\underline{N}}$. αr er dimensjonslaus sidan dette leddet er i eksponenten. Dette impliserer at $[\alpha] = \underline{\underline{1/m}}$.

b) Skissa er vist i figur 1. For at prøvebølgjefunksjon skal vere akseptabel, må den vere normerbar. Dette impliserer (etter vinkelintegrasjonen)

$$\begin{aligned}\int_0^\infty R^2(r) r^2\, dr < \infty &= |A|^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r} r^2\, dr \\ &< \infty\,. \end{aligned} \tag{1}$$

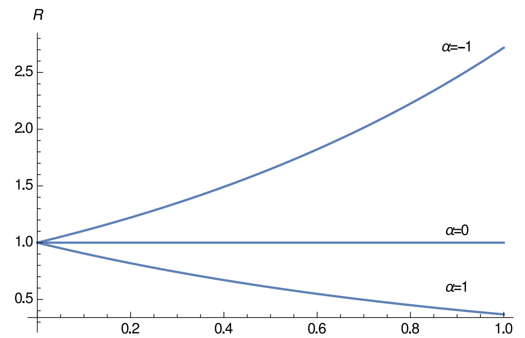

Figure 1: Radialbølgjefunksjonen for $\alpha = -1$, $\alpha = 0$ og $\alpha = 1$.

Dette er oppfylt for $\underline{\underline{\alpha > 0.}}$.

c) Normeringsintegralet er

$$
\begin{aligned}
1 &\overset{!}{=} \int |\psi_0|^2 d^3r \\
&= |A|^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r}\, dr \int Y_{lm}^2(\theta,\phi)\, d\Omega \\
&= |A|^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r}\, dr \\
&= |A|^2 \frac{1}{4\alpha^3}\,, \qquad (2)
\end{aligned}
$$

der vi i tredje linje har brukt at $Y_{lm}(\theta, \phi)$ er ortonormert. Dette gjev

$$
A = \underline{\underline{2\alpha^{\frac{3}{2}}}}\,, \qquad (3)
$$

der fasen til ψ_0 er reell.

d) Midlere potensiell energi er gjeven ved integralet

$$
\begin{aligned}
\langle V\rangle(\alpha) &= a \int \psi_0^* r \psi_0\, d^3r \\
&= 4a\alpha^3 \int_0^\infty r^3 e^{-2\alpha r}\, dr \int Y_{lm}^2(\theta,\phi)\, d\Omega \\
&= 4a\alpha^3 \int_0^\infty r^3 e^{-2\alpha r}\, dr \\
&= \underline{\underline{\frac{3a}{2\alpha}}}\,. \qquad (4)
\end{aligned}
$$

e) Midlere kinetisk energi finn ein ved innsetting av $\psi_0(x)$ i uttrykket for $\langle K\rangle$. Dette gjev

$$
\langle K\rangle(\alpha) = \int d^3r\, \psi_0 \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} \right] \right\} \psi_0\,. \qquad (5)
$$

Vi bruker nå at ψ_0 er eigenfunksjon til $\hat{\mathbf{L}}^2$ med eigenverdi $\hbar^2 l(l+1)$. Etter integrasjon over vinklane får ein

$$\begin{aligned}
\langle K\rangle(\alpha) &= -\frac{\hbar^2}{2m}4\alpha^3\int_0^\infty dr\, r^2 e^{-\alpha r}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]e^{-\alpha r} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}4\alpha^3\int_0^\infty \left[\alpha^2 r^2 - 2\alpha r - l(l+1)\right]e^{-2\alpha r}\,dr \\
&= \underline{\underline{\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2\left[1+2l(l+1)\right]}}\,. \qquad (6)
\end{aligned}$$

Dette er på forma som er oppgjeven i oppgåva med

$$B = \underline{\underline{\frac{\hbar^2}{2m}}}\,. \qquad (7)$$

f) Vi definerer $C = \frac{\hbar^2}{2m}\left[1+2l(l+1)\right]$ slik at forventningsverdien til energien kan skrivast som

$$\langle H\rangle(\alpha) = \frac{3a}{2\alpha}+C\alpha^2\,. \qquad (8)$$

Vi skal minimalisere α som ein finn ved å løyse

$$\frac{d\langle H\rangle(\alpha)}{d\alpha} = 0\,. \qquad (9)$$

Ein får då

$$2\alpha_0 C - \frac{3a}{2\alpha_0^2} = 0\,, \qquad (10)$$

med løysing

$$\alpha_0 = \underline{\underline{\left(\frac{3a}{4C}\right)^{\frac{1}{3}}}}\,. \qquad (11)$$

Innsett i likninga får ein ved litt opprydding

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle(\alpha_0) &= \left(\frac{9a^2C}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\left(1+2^{\frac{1}{3}}\right) \\
&= \underline{\underline{\left(\frac{9a^2}{4}\right)^{\frac{1}{3}}\left(1+2^{\frac{1}{3}}\right)\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{3}}\left[1+2l(l+1)\right]^{\frac{1}{3}}}}\,. \qquad (12)
\end{aligned}$$

Her ser ein at $l=0$ gjev lågast energi. Det effektive potensialet

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\,, \qquad (13)$$

er minst for $l = 0$. Ein ventar då å finne grunntilstanden for $l = 0$ og variasjonsmetoden viser dette.

Merknad: For å vise at verdien α_0 som vi har funne tilsvarer eit minimum, må ein sjekke den andrederiverte av $\langle H\rangle(\alpha)$. Ein får

$$\begin{aligned} \frac{d^2\langle H\rangle(\alpha)}{d\alpha^2} &= 2C + \frac{3}{\alpha^2} \\ &> 0 \ , \end{aligned} \tag{14}$$

som viser at dette er minimum.

Oppgåve 2

a) Ved innsetting får ein

$$\hat{L}_z f(\phi,\theta) = \hbar f(\phi,\theta) \ , \tag{15}$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 f(\phi,\theta) = 2\hbar^2 f(\phi,\theta) \ , \tag{16}$$

Dersom vi bruker eigenverdilikningane $\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar Y_{lm}(\theta,\phi)$ og $\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\phi)$, finn vi eigenverdiane $\underline{\underline{m = 1}}$ og $\underline{\underline{l = 1}}$.

b) Ved rotasjon ein vinkel $\frac{\pi}{2}$ rundt y-aksen har vi transformasjonane

$$x \rightarrow -z \ , \tag{17}$$

$$y \rightarrow y \ , \tag{18}$$

$$z \rightarrow x \ . \tag{19}$$

Dette impliserer

$$\begin{aligned} \sin\theta e^{i\phi} &= \sin\theta(\cos\theta + i\sin\theta) \\ &= \frac{x}{r} + i\frac{y}{r} \\ &\rightarrow -\frac{z}{r} + i\frac{y}{r} \\ &= -\cos\theta + i\sin\theta\sin\phi \ . \end{aligned} \tag{20}$$

Dette gjev

$$g(\theta,\phi) = \underline{\underline{\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(-\cos\theta + i\sin\theta\sin\phi)}} \ . \tag{21}$$

c) Ved innsetting får ein at $g(\theta,\phi)$ er ein eigentilstand til $\hat{L}_x$ med eigenverdi $\hbar$. Altså er $\underline{\underline{m = 1}}$. Sidan vi har rotert ein eigentilstand til $\hat{L}_z$ med eigenverdi$m = 1$ rundt ein vinkel $\frac{\pi}{2}$ rundt y-aksen får vi ein eigentilstand til

$\hat{L}_x$ med eigenverdi $m = 1$.

d) Vi kan skrive

$$
\begin{aligned}
g(\phi, \theta) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left(-\cos\theta + i \sin\theta \sin\phi\right) \\
&= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left[-\cos\theta + \frac{1}{2}\sin\theta \left(e^{i\phi} + e^{-i\phi}\right)\right] \ . \qquad (22)
\end{aligned}
$$

Det første leddet er ein eigenfunksjon til $\hat{L}_z$ med eigenverdi 0. Det vil seie $m = 0$. Det andre leddet er ein eigenfunksjon til $\hat{L}_z$ med eigenverdi $\hbar$. Det vil seie $m = -1$. Det tredje leddet er ein eigenfunksjon til $\hat{L}_z$ med eigenverdi $-\hbar$. Det vil seie $m = -1$. Moglege måleresultat er såleis $m = 0, \pm 1$ og $g(\theta, \phi)$ er ikkje ein eigenfunksjon til $\hat{L}_z$. L_z er difor **ikkje skarp** i denne tilstanden.

Merknad: Sidan koeffisienten foran dei to ledda inni hakeparantesen har same absolutverdi, er sannsynlegheiten for å måle $m = 1$ og $m = -1$ like store. Middelverdien er difor $\langle \hat{L}_z \rangle = 0$.

Oppgåve 3

a) Dersom $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$, har vi

$$
\begin{aligned}
\int \psi^* \hat{F} \psi \, d\tau &= \int \psi^* \hat{F}^\dagger \psi \, d\tau \\
&= \int (\hat{F}\psi)^* \psi \, d\tau \ , \qquad (23)
\end{aligned}
$$

der vi andre linje har brukt definisjonen av $\hat{F}^\dagger$. Dersom ψ er eigenfunksjon ψtil $\hat{F}$ med eigenverdi f finn vi

$$
\begin{aligned}
f \int \psi^* \psi \, d\tau &= \int (f\psi)^* \psi \, d\tau \\
&= f^* \int \psi^* \psi \, d\tau \ . \qquad (24)
\end{aligned}
$$

Sidan normeringsintegralet ikkje er null finn vi $f - f^* = 0$ eller at f er reell.

Vidare har vi med $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2}$ og definisjonen av $\hat{F}^\dagger$

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{F}^\dagger \psi(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{F}\psi(x)\right)^* \psi(x) dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\right)^* \psi(x) dx \ . \qquad (25)
\end{aligned}
$$

Delvis integrasjon gjev

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{F}^\dagger\psi(x)dx &= \frac{d\psi^*(x)}{dx}\psi(x)\Big|_{x=-\infty}^{x=\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\psi^*(x)}{dx}\frac{d\psi(x)}{dx}dx \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\psi^*(x)}{dx}\frac{d\psi(x)}{dx}dx\ , \end{aligned} \tag{26}$$

der vi har brukt at $\psi(\pm\infty) = 0$ sidan $\psi(x)$ er kvadratisk integrerbar. Integrasjon ein gong til gjev

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{F}^\dagger\psi(x)dx &= -\psi^*\frac{d\psi(x)}{dx}\Big|_{x=-\infty}^{x=\infty} + \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{F}\psi(x)dx\ , \end{aligned} \tag{27}$$

der vi har nytta at $\psi^*(\pm\infty) = 0$ sidan $\psi(x)$ er kvadratisk integrerbar. Sidan $\psi(x)$ er ein vilkårleg kvadratisk integrerbar funksjon har vi $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$ som operatoridentitet og $\hat{F}$ er difor hermitesk.

b) Klassisk mekanikk er deterministisk. I prinsipp kan vi løyse Newtons bevegelseslikningar viss vi kjenner kreftene på systemet og initialkrava. I kvantemekanikken gjev bølgjefunksjonen ψ, som er løysinga av Schrödingerlikninga, all informasjon om systemet. Denne informasjonen er av statistisk natur. For eksempel vil $|\psi(x,t)|^2$ 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) (vanlegvis) ikkje vere skarpe samtidig. Det vil seie at systemet ikkje er i ein eigentilstand for begge observable samtidig. Eit døme er posisjonen x og impulsen p. Usikkerheita til slike observable er gjevne ved uskarpheitsrelasjonar.

c) 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 2.

d) I potensrekkjemetoden skriv vi løysinga til ei differensiallikning som ei rekkje

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^{n+s}\ , \tag{28}$$

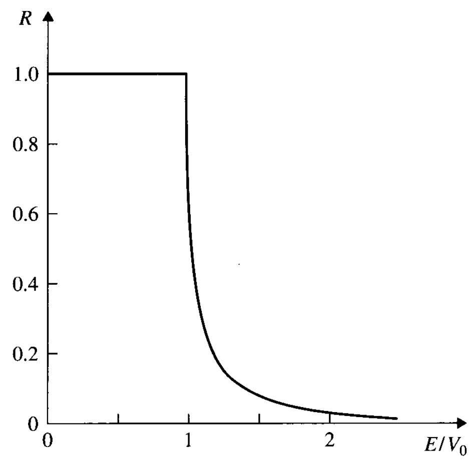

Figure 2: Refleksjonskoeffisient for eit potensialsprang som funksjon av E/V_0.

der s er eit heiltal. Ein finn uttrykke for dei ulike deriverte av $f(x)$ ved å derivere kvart ledd i rekkja. Til dømes er

$$f'(x) \quad = \quad \sum_{n=1}^{\infty} a_n(n+s)x^{n+s-1} \,, \tag{29}$$

Ein sett nå inn for dei ulike ledda i differensiallikninga og samlar ledd med same potens x^k for alle k. Koeffisienten foran må då vere identisk lik null og dette gjev ein *rekursjonsformel* der a_n er uttrykt ved hjelp av lågare koeffisientar, vanlegvis a_{n-1} og a_{n-2}. Av og til må ein krevje at rekkja bryt av, det vil seie at $a_k = 0$ for $k \geq n$ for passe n (bundne tilstandar). Døme på bruk av potensrekkjemetoden er harmonisk oscillator, Legendres differensiallikning og radiallikninga for hydrogenatomet.