Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Jan Myrheim
Telefon: 73 59 36 53 (mobil 90 07 51 72)

Eksamen i fag FY1004 Innføring i kvantemekanikk
Fredag 30. mai 2008
Tid: 09.00–15.00

Sensurfrist: Fredag 20. juni 2008

Tillatte hjelpemidler: Kalkulator, matematiske tabeller.

Alle deloppgaver teller likt ved sensuren.

Noen nyttige konstanter:	
Lyshastigheten i vakuum	$c = 299\,792\,458\,\mathrm{m/s}$
Permeabiliteten i vakuum	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\,\mathrm{N/A^2}$
Permittiviteten i vakuum	$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) = 8{,}854\,817\,187 \times 10^{-12}\,\mathrm{F/m}$
Den reduserte Plancks konstant	$\hbar = 1{,}054\,572\,7 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$
Elementærladningen	$e = 1{,}602\,177\,3 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}$
Elektronmassen	$m_\mathrm{e} = 9{,}109\,390 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$
Protonmassen	$m_\mathrm{p} = 1{,}672\,623 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$
Deuteronmassen	$m_\mathrm{d} = 3{,}343\,586 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$
Bohr-radien	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(e^2 m_\mathrm{e}) = 5{,}291\,772\,5 \times 10^{-11}\,\mathrm{m}$

Oppgave 1:

Spinnet til en partikkel med spinn 1/2, for eksempel et elektron, er en vektor

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}\ .$$

De tre komponentene av $\vec{\sigma}$ er Pauli-matrisene

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\ , \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\ , \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\ .$$

a) Anta at spinntilstanden til partikkelen er gitt ved spinoren

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\ .$$

Beregn forventningsverdiene $\langle\sigma_x\rangle$, $\langle\sigma_y\rangle$ og $\langle\sigma_z\rangle$ i denne tilstanden.
Vi definerer for eksempel

$$\langle\sigma_x\rangle = \psi^\dagger \sigma_x \psi\ .$$

Hvorfor sier vi at dette er en tilstand med «spinn opp» i z-retningen?

b) Anta i stedet at spinntilstanden er gitt ved spinoren

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} .$$

Beregn forventningsverdiene $\langle \sigma_x \rangle$, $\langle \sigma_y \rangle$ og $\langle \sigma_z \rangle$ i denne tilstanden.

Beregn også variansene $\mathrm{var}(\sigma_x)$, $\mathrm{var}(\sigma_y)$ og $\mathrm{var}(\sigma_z)$. Vi definerer for eksempel

$$\mathrm{var}(\sigma_x) = \langle (\sigma_x - \langle \sigma_x \rangle)^2 \rangle = \langle {\sigma_x}^2 \rangle - \langle \sigma_x \rangle^2 .$$

I hvilken retning har denne tilstanden spinn opp?

c) I en litt forenklet beregning av energinivåene til hydrogenatomet antar vi at atomkjernen er uendelig tung, så den ligger i ro. Vi ser bort fra egenspinnet til atomkjernen, men inkluderer egenspinnet til elektronet. Vi ser også bort fra relativistiske korreksjoner, som for eksempel spinn-banekopling. Da er energinivåene entydig bestemt av hovedkvantetallet $n = 1, 2, \ldots$.

Det første eksiterte nivået i hydrogenatomet, med $n = 2$, har 8 tilstander, som kan skjelnes fra hverandre for eksempel ved hjelp av egenverdiene for $\vec{L}^{\,2}$ og L_z, der $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ er banedreieimpulsen til elektronet, og egenverdien for S_z, som er z-komponenten av egenspinnet til elektronet.

Hva er egenverdiene for $\vec{L}^{\,2}$, L_z, og S_z i de 8 tilstandene i nivået $n = 2$?

d) En av de 8 tilstandene med $n = 2$ beskrives av følgende bølgefunksjon med to komponenter,

$$\Psi = \Psi(\vec{r}) = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} r\, \mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\, Y_{11}(\theta, \varphi) ,$$

der a_0 er Bohr-radien (se tabell over konstanter først i oppgavesettet), mens C er en normeringskonstant.

Polarkoordinatene (r, θ, φ) er definert ved at

$$x = r \sin\theta \cos\varphi , \qquad y = r \sin\theta \sin\varphi , \qquad z = r \cos\theta .$$

De sfærisk harmoniske funksjonene $Y_{\ell,m_\ell} = Y_{\ell,m_\ell}(\theta, \varphi)$ med $\ell = 0$ og $\ell = 1$ er

$$\begin{aligned}
Y_{00} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} , \\
Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} , \\
Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta , \\
Y_{1,-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} .
\end{aligned}$$

I denne tilstanden Ψ er både L_z og S_z kvantisert, slik at

$$L_z \Psi = \hbar \Psi , \qquad S_z \Psi = \frac{\hbar}{2} \Psi .$$

Vis at

$$\Psi = C' \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (x + \mathrm{i}y)\, \mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}} \ .$$

Hva er sammenhengen mellom normeringskonstantene C og C'?

Hvis hydrogenatomet er i tilstanden Ψ, og vi roterer det 90 grader om x-aksen, i retning med urviseren, får vi en normert bølgefunksjon Φ der y-komponenten av banedreieimpulsen $\vec{L}$ og egenspinnet $\vec{S}$ begge er kvantisert, slik at

$$L_y \Phi = \hbar \Phi \ , \qquad S_y \Phi = \frac{\hbar}{2}\, \Phi \ .$$

Skriv ned bølgefunksjonen Φ.

Oppgave 2:

To partikler med masser m_1 og m_2 beveger seg i tre dimensjoner. Den potensielle energien V til systemet når partiklene er i posisjonene $\vec{r}_1$ og $\vec{r}_2$, er en funksjon bare av den relative posisjonen $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$,

$$V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = V(\vec{r}) \ .$$

Massesenterposisjonen defineres som

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \ .$$

Partiklene har impulser $\vec{p}_1$ og $\vec{p}_2$. Den totale impulsen er

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \ .$$

Den relative impulsen defineres som

$$\vec{p} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} \ .$$

Komponentene av posisjonene $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$ og impulsene $\vec{p}_1$, $\vec{p}_2$ oppfyller kanoniske kommutasjonsrelasjoner, det vil si at

$$[x_1, p_{1x}] = [y_1, p_{1y}] = [z_1, p_{1z}] = [x_2, p_{2x}] = [y_2, p_{2y}] = [z_2, p_{2z}] = \mathrm{i}\hbar \ ,$$

mens alle andre kommutatorer mellom de seks operatorene er null.

a) Komponentene av posisjonene $\vec{R}$, $\vec{r}$ og impulsene $\vec{P}$, $\vec{p}$ oppfyller også kanoniske kommutasjonsrelasjoner. Vis spesielt at

$$[x, p_x] = [X, P_x] = \mathrm{i}\hbar \ ,$$

og at

$$[x, P_x] = [X, p_x] = 0 \ .$$

b) Hamilton-operatoren for topartikkelsystemet er

$$H = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\ .$$

Vis at

$$H = \frac{\vec{P}^{\,2}}{2M} + \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r})\ ,$$

når vi innfører den totale massen M og den reduserte massen m, definert ved at

$$M = m_1 + m_2\ , \qquad \frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\ .$$

c) I den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen $H\psi = E\psi$ for dette topartikkelsystemet er det mulig å separere variable ved å anta at bølgefunksjonen ψ er et produkt på formen

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{\mathrm{ms}}(\vec{R})\,\psi_{\mathrm{rel}}(\vec{r})\ .$$

De to bølgefunksjonene ψ_{ms} og ψ_{rel} beskriver da henholdsvis massesenterbevegelsen og relativbevegelsen.

Utled en tidsuavhengig Schrödinger-ligning for hver av bølgefunksjonene ψ_{ms} og ψ_{rel}.

Disse to ligningene bestemmer energien E som en sum av to bidrag, $E = E_{\mathrm{ms}} + E_{\mathrm{rel}}$.

Hvilke verdier er mulige for energibidraget E_{ms} fra massesenterbevegelsen?

d) I et hydrogenatom er den potensielle energien

$$V = V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\, r}\ ,$$

der $r = |\vec{r}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. Grunntilstandsenergien er

$$E_1 = -\frac{1}{2}\,\alpha^2 mc^2 = -13{,}6\ \mathrm{eV}\ ,$$

der m er den reduserte massen, og α er finstrukturkonstanten,

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\,\hbar c} = \frac{1}{137{,}035\,990}\ .$$

Hvorfor er energien proporsjonal med den reduserte massen, og ikke for eksempel med elektronmassen alene?

Regn ut numerisk den reduserte massen, uttrykt ved elektronmassen, for et atom av hydrogen, med et elektron og et proton, for et atom av deuterium, med et elektron og et deuteron, og for et atom av positronium, som består av et elektron og et positron (elektronet og positronet har samme masse).

Hva er grunntilstandsenergien i positronium?

Se tabell over fysiske konstanter først i oppgavesettet.

e) Hydrogen α-linjen i hydrogenspektret har bølgelengde 656,28 nm. Den er den viktigste spektrallinjen til hydrogen innenfor den synlige delen av spektret.

Hva er bølgelengden for den tilsvarende linjen i spektret til deuterium?

Doppler-effekten på grunn av termiske bevegelser av atomene gjør spektrallinjene bredere. På soloverflaten er temperaturen nærmere 6000 K, og Doppler-effekten gir da hver spektrallinje til hydrogen en bredde som er 4×10^{-5} av bølgelengden.

Når vi tar hensyn til Doppler-effekten, er det da mulig å se forskjell på spektrallinjene til hydrogen og deuterium, og dermed måle mengdeforholdet mellom dem på Sola?

Oppgave 3:

Den tidsavhengige Schrödinger-ligningen for en endimensjonal harmonisk oscillator er

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \psi(x,t) \ . \tag{1}$$

Her er m massen til partikkelen, og ω er vinkelfrekvensen til oscillatoren.
I hele denne oppgaven ser vi på den spesielle bølgefunksjonen

$$\psi(x,t) = C\,\mathrm{e}^{-\alpha x^2 + \beta(t)\,x + \gamma(t)} \ , \tag{2}$$

der C og α er konstante koeffisienter, mens $\beta(t)$ og $\gamma(t)$ er tidsavhengige koeffisienter.

a) Vis at bølgefunksjonen $\psi(x,t)$ i ligning (2) er en løsning av den tidsavhengige Schrödinger-ligningen (1) når følgende tre ligninger er oppfylt:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{m\omega}{2\hbar} \ , \\ \frac{\mathrm{d}\beta}{\mathrm{d}t} &= -\mathrm{i}\omega\beta \ , \\ \frac{\mathrm{d}\gamma}{\mathrm{d}t} &= -\mathrm{i}\,\frac{\omega}{2} + \mathrm{i}\,\frac{\hbar\beta^2}{2m} \ . \end{aligned} \tag{3}$$

En slik løsning av Schrödinger-ligningen kalles en *koherent tilstand* for den harmoniske oscillatoren.

b) Vi setter $\alpha = m\omega/(2\hbar)$, i følge ligning (3). En løsning av ligning (3) for β og γ er da

$$\beta(t) = 2\alpha x_0\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \ , \qquad \gamma(t) = -\mathrm{i}\,\frac{\omega t}{2} - \frac{\alpha x_0^2}{2}\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t} \ ,$$

der x_0 er en vilkårlig integrasjonskonstant. Vi antar her at x_0 er reell og positiv.

Vis at da er

$$|\psi(x,t)|^2 = |C|^2\,\mathrm{e}^{-2\alpha(x - x_0\cos(\omega t))^2 + \alpha x_0^2} \ .$$

c) Normeringskonstanten C velges slik at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; |\psi(x,t)|^2 = |C|^2 \, \mathrm{e}^{\alpha x_0^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-2\alpha(x - x_0 \cos(\omega t))^2} = 1 \; .$$

Forventningsverdien i denne tilstanden av posisjonen x er

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; x \, |\psi(x,t)|^2 = x_0 \cos(\omega t) \; .$$

Forventningsverdien av x^2 er

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; x^2 \, |\psi(x,t)|^2 = x_0^2 \cos^2(\omega t) + \frac{1}{4\alpha} = x_0^2 \cos^2(\omega t) + \frac{\hbar}{2m\omega} \; .$$

Beregn forventningsverdien av impulsen p, definert som

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; (\psi(x,t))^* \, \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x} \, \psi(x,t) \; .$$

Hint: en mulig metode er å vise først at

$$\langle p \rangle = -\mathrm{i}\hbar(-2\alpha \, \langle x \rangle + \beta) \; .$$

Beregn også $\langle p^2 \rangle$, for eksempel ved å vise først at

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 (4\alpha^2 \, \langle x^2 \rangle - 4\alpha\beta \, \langle x \rangle + \beta^2 - 2\alpha) \; .$$

Merk at β er en kompleks størrelse. Er forventningsverdiene $\langle p \rangle$ og $\langle p^2 \rangle$ reelle?

d) Beregn usikkerhetene Δx og Δp i den samme tilstanden, i følge definisjonene

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\mathrm{var}(x)} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \; , \\ \Delta p &= \sqrt{\mathrm{var}(p)} = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \; . \end{aligned}$$

Hva menes med at den koherente tilstanden $\psi(x,t)$ er en minimum usikkerhetstilstand?

Hva er forventningsverdien av energien, det vil si av Hamilton-operatoren

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \; ?$$

Er $\langle H \rangle$ tidsavhengig?

e) Den koherente tilstanden gitt ved bølgefunksjonen $\psi(x,t)$ ovenfor illustrerer Bohrs korrespondanseprinsipp, at klassisk mekanikk kan utledes fra kvantemekanikk, i en viss forstand.

Den koherente tilstanden er en kvantemekanisk tilstand til den harmoniske oscillatoren som ligner maksimalt på en klassisk tilstand. Begrunn kort denne påstanden!

Hva er energien til den klassiske harmoniske oscillatoren i den tilsvarende klassiske tilstanden?