Løsningsforslag
SIF4045 Kvantemekanikk
01.08.00

Oppgave 1

a) Den tidsavhengige Schrödingerlikningen er

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi = \left[\frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\,\Psi.$$

Separable løsninger av denne,

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\,e^{-iEt/\hbar},$$

er stasjonære tilstander. Innsetting gir

$$\widehat{H}\Psi = E\Psi.$$

b) Den éndimensjonale tidsuavhengige Schrödingerlikningen $\widehat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ er i dette tilfellet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2\psi}{dx^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\,\psi = E\psi(x).$$

Innsetting av $\psi_0 = N\,e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ gir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}e^{-m\omega x^2/2\hbar} + \left[\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2 - E\right]e^{-m\omega x^2/2\hbar} = 0.$$

Da

$$\frac{d^2}{dx^2}\,e^{-m\omega x^2/2\hbar} = \frac{d}{dx}\left(-\frac{m\omega x}{\hbar}\right)e^{-m\omega x^2/2\hbar} = \frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar},$$

gir dette

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{m\omega}{\hbar} - E\right)e^{m\omega x^2/2\hbar} = 0,$$

eller $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$, som skulle vises.

Egenfunksjonen er normert fordi

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0(x)|^2\,dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-m\omega x^2/\hbar}\,dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}\,dy = 1.$$

c) Som læreboka.

d) Vi trenger å beregne $\langle 0|\widehat{H}_1|0\rangle$, med $\widehat{H}_1 = x^6$:

$$\langle 0|\widehat{H}_1|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) x^6 \psi_0(x)\, dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} x^6 e^{-m\omega x^2/\hbar}\, dx.$$

Vha det oppgitte integralet

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^6 \; e^{-ax^2} \; dx = \frac{15}{8}\, a^{-\frac{7}{2}} \sqrt{\pi}$$

fås

$$\langle 0|\widehat{H}_1|0\rangle = \frac{15}{8}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-\frac{7}{2}} = \frac{15}{8}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 .$$

Dette kan også beregnes vha heve- og senke-operatorene, men det er litt mer omstendelig.

Konklusjonen er at til første orden er grunntilstandsenergien lik

$$E_0 = \underline{\underline{\frac{1}{2}\hbar\omega \; + \; \frac{15}{8}\lambda \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3 .}}$$

e) Som læreboka.

f) Vi må beregne

$$E_{RR} = \frac{-(\hbar^2/2m)\int f^* f''\; dx + \int V(x)|f|^2\; dx}{\int |f|^2\; dx}.$$

Vi trenger

$$f'' = \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{1}{2}\tau x^2} = -\frac{d}{dx}\; \tau x e^{-\frac{1}{2}\tau x^2} = \left(\tau^2 x^2 - \tau\right)\; f.$$

Alle integralene kan finnes i vedlegget. Vi får

$$E_{RR} = \frac{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\tau\sqrt{\frac{\pi}{\tau}} - \tau^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\tau^{\frac{3}{2}}}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\tau^{\frac{3}{2}}} + \frac{15}{8}\lambda\frac{\sqrt{\pi}}{\tau^{\frac{7}{2}}}}{\sqrt{\frac{\pi}{\tau}}} = \frac{\hbar^2}{4m}\tau + \frac{m\omega^2}{4\tau} + \frac{15}{8}\frac{\lambda}{\tau^3}. \tag{1}$$

Den beste verdien for grunntilstandsenergien får vi ved å minimalisere E_{RR} mhp τ.

$$\frac{dE_{RR}}{d\tau} = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{m\omega^2}{4\tau^2} - \frac{45\lambda}{8\tau^4} = 0$$

bestemmer τ. Vi får en andregradslikning i τ^2:

$$\tau^4 - \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 \tau^2 - \frac{45m\lambda}{2\hbar^2} = 0,$$

med løsning

$$\tau^2 = \frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2} \pm \sqrt{\left(\frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2}\right)^2 + \frac{45m\lambda}{2\hbar^2}}.$$

Bare pluss-tegnet er akseptabelt når τ skal være reell (Vi må ha $\lambda \geq 0$ for å kunne binde partikkelen). Altså fås minimum for

$$\tau = \sqrt{\frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2} + \sqrt{\left(\frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2}\right)^2 + \frac{45m\lambda}{2\hbar^2}}}.$$

Innsetting av denne verdien i uttrykket (1) for E_{RR} gir beste energiestimat.

I dette tilfellet er prøvefunksjonen av samme <u>form</u> som den uperturberte grunntilstanden. Første ordens perturbasjonsteori er samme uttrykk som E_{RR}, men altså med en ikke-optimal funksjon. Derfor er variasjonsresultatet E_{RR} bedre (lavere) enn $E_0^0 + \lambda\, E_0^{(1)}$. Da variasjonsresultatet aldri kan bli lavere enn den eksakte grunntilstandsenergien E_0, har vi

$$E_0 < E_{RR} < E_0^0 + \lambda\, E_0^{(1)}.$$

For $\omega = 0$ er $\tau \propto \lambda^{\frac{1}{4}}$, og $E_{RR} = \frac{\hbar^2}{4m}\tau + \frac{15}{8}\frac{\lambda}{\tau^3} \propto \lambda^{\frac{1}{4}}$. Altså

$$z = \underline{\underline{\tfrac{1}{4}}}.$$

Kommentar: Denne verdien er eksakt. Det ser en ved å innføre $x = y\,\lambda^{-\frac{1}{8}}$ i den eksakte Schrödingerlikning, med resultat

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dy^2} + y^6\psi = \epsilon\psi, \qquad \text{der } \epsilon = E\,\lambda^{-\frac{1}{4}}.$$

Oppgave 2

a) Vi må teste om $\widehat{\vec{J}^{\pm}} = \widehat{\vec{J}_1} \pm \widehat{\vec{J}_2}$ oppfyller kommuteringsreglene for dreieimpuls. La oss beregne kommutatoren mellom x- og y-komponentene:

$$\left[J_x^{\pm}, J_y^{\pm}\right] = [J_{1x} \pm J_{2x}, J_{1y} \pm J_{2y}] = [J_{1x}, J_{1y}] + [J_{2x}, J_{2y}] = i\hbar J_{1z} + i\hbar J_{2z} = i\hbar J_z^{\pm}.$$

Vi ser at $[J_x^+, J_y^+] = i\hbar J_z^+$ (og tilsvarende med syklisk indeksbytte), så summen $\widehat{\vec{J}_1} + \widehat{\vec{J}_2}$ **<u>er</u>** en dreieimpulsoperator. Da $[J_x^-, J_y^-] \neq i\hbar J_z^-$, er differansen <u>ikke</u> en dreieimpulsoperator.

b) Med $\ell = 1$ og $s = \frac{1}{2}$ er de mulige verdier, $j = \ell \pm \frac{1}{2}$, lik $\underline{\underline{j = \frac{1}{2}}}$ og $\underline{\underline{j = \frac{3}{2}}}$. Kvantetallet m_j kan ta verdiene $-j, -j+1, \ldots, +j$, altså verdiene $m_j = \pm\frac{1}{2}$ når $j = \frac{1}{2}$, og verdiene $m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ når $j = \frac{3}{2}$.

Det er enkelt å vise at den oppgitte $|\psi\rangle$ er egenfunksjon for $J_z = L_z + S_z$ fordi ved operasjon med J_z gir den første tilstanden i $|\psi\rangle$ egenverdien $\hbar - \frac{1}{2}\hbar = \frac{1}{2}\hbar$ og den andre gir $0 + \frac{1}{2}\hbar$, samme egenverdi. Altså er egenverdien for J_z lik $\underline{\underline{\frac{1}{2}\hbar}}$.

For å undersøke om $|\psi\rangle$ er egentilstand for $\vec{J}^2$ er bare å operere med $\vec{J}^2$ på den oppgitte form. Siden $\ell = 1$ og $s = \frac{1}{2}$ gir $\vec{L}^2 + \vec{S}^2$ alltid en faktor $\left(2 + \frac{3}{4}\right)\hbar^2$. De resterende tre ledd krever litt mer arbeid. Vi trenger

$$\begin{aligned}
L_+S_-|m = 1, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle &= 0 \\
L_+S_-|m = 0, m_s = +\tfrac{1}{2}\rangle &= \sqrt{2}\hbar^2|m = 1, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle \\
L_-S_+|m = 1, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle &= \sqrt{2}\hbar^2|m = 0, m_s = +\tfrac{1}{2}\rangle \\
L_-S_+|m = 0, m_s = +\tfrac{1}{2}\rangle &= 0 \\
2L_zS_z|m = 1, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle &= -\hbar^2|m = 1, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle \\
2L_zS_z|m = 0, m_s = +\tfrac{1}{2}\rangle &= 0.
\end{aligned}$$

Alt i alt blir dette

$$\vec{J}^2\,|\psi\rangle = \tfrac{3}{4}\hbar^2\,|\psi\rangle.$$

Siden $\frac{3}{4} = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)$, så er $|\psi\rangle$ egentilstand for $\vec{J}^2$ med egenverdi $\underline{\underline{j = \frac{1}{2}}}$.

En ser direkte av uttrykket for $|\psi\rangle$ at sannsynligheten for å finne $m_s = \frac{1}{2}$ er $|-\sqrt{\frac{1}{3}}|^2 = \underline{\underline{\frac{1}{3}}}$.

Oppgave 3

a)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{antall partikler spredt inn i romvinkel } d\Omega \text{ pr. tidsenhet}}{d\Omega \cdot \text{ (innfallende partikkelstrøm)}}$$

b)

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \; d\Omega = \int |f(\vartheta)|^2 \; d\Omega,$$

integrert over alle vinkler. Innsatt for $f(\vartheta)$, og med $d\Omega = \sin\vartheta \; d\vartheta \; d\varphi$, får vi

$$\sigma = \frac{2\pi}{(2k)^2} \sum_\ell \sum_{\ell'} (2\ell{+}1)(2\ell'{+}1)(e^{2i\delta_\ell}{-}1)(e^{-2i\delta_{\ell'}}{-}1) \int_0^\pi P_\ell(\cos\vartheta) P_{\ell'}(\cos\vartheta) \; \sin\vartheta \, d\vartheta.$$

Da integralet er null for $\ell' \neq \ell$ og lik $2/(2\ell+1)$ for $\ell' = \ell$, får vi

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} \sum_\ell (2\ell+1)(e^{2i\delta_\ell})(e^{-2i\delta_\ell} - 1).$$

Vha $e^{2i\delta_\ell} - 1 = e^{i\delta_\ell} \; 2i \sin\delta_\ell$ og $e^{-2i\delta_\ell} - 1 = e^{-\delta_\ell} \; 2i \sin\delta_\ell$ blir dette

$$\underline{\underline{\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \; \sin^2\delta_\ell.}}$$

c) En partikkel med impuls $\hbar k$ vil ha en maksimal dreieimpuls $\hbar k \cdot a$ (mhp spredningssentret) dersom støtparameteren er mindre enn a. Siden dreieimpulsens størrelse er $\sqrt{\ell(\ell+1)\hbar^2} \approx \ell\hbar$, svarer dette til at bare ℓ-verdier som oppfyller $\ell \leq ka$ bidrar vesentlig til spredningen.

Omskrevet til energi $E = \hbar^2 k^2/2m$ vil dette si vesentlige bidrag bare hvis

$$\ell^2 \leq k^2 a^2 = \frac{E}{\hbar^2/(2ma2)}.$$

Så for $E \ll \hbar^2/(2ma^2)$ vil bare $\ell^2 \ll 1$ bidra. Da ℓ er heltallig og ikke-negativ vil det si at bare $\ell = 0$ bidrar. Og da P_0 er vinkeluavhengig (lik $1/\sqrt{4\pi}$) gir dette at <u>lavenergispredning er isotrop</u>.

d) Faseendringen δ_0 bestemmes av løsningen av radiallikningen for store r. For $\ell = 0$ og $r > a$ er radiallikningen

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR_0) + k^2 (rR_0) = 0,$$

med løsning $rR_o(r) \propto \sin(kr - ka)$, da vi må ha $R_0 = 0$ for $r \leq a$. Det gir

$$\delta_0 = \underline{\underline{\underline{-ka}}}$$

(i henhold til det asymptotiske forløp for store r, $rR_l \propto \sin(kr - \frac{1}{2}\ell\pi + \delta_\ell)$. Totaltverrsnittet blir

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \simeq \underline{\underline{\underline{4\pi a^2}}}. \qquad (ak \ll 1).$$