Løsningsforslag
Eksamen 30. mai 2007
FY2045 Kvantefysikk

Oppgave 1

a. •I grensen $b \to 0$ er potensialet $V(x)$ et enkelt bokspotensial, $V = V_0$ for $-a < x < 0$ og uendelig ellers. Den tidsuavhengige Schrödingerligningen (TUSL) tar da for $-a < x < 0$ formen

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - E]\psi \equiv -k^2\psi, \qquad k \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)}.$$

Den generelle løsningen er

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx,$$

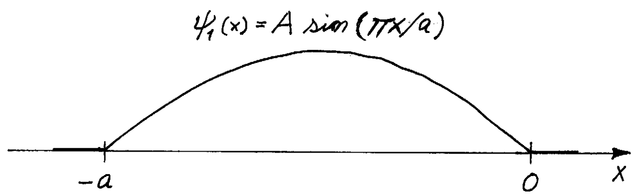
Randbetingelsene $\psi(0) = 0$ og $\psi(-a) = 0$, som sørger for en kontinuerlig bølgefunksjon, gir

$$B = 0 \qquad \text{og} \qquad A\sin(-ka) = 0, \quad \text{dvs} \quad ka = n\pi.$$

Grunntilstanden (som svarer til $n = 1$) og den tilhørende energien er

$$\psi_1(x) = A\sin\frac{\pi x}{a} \qquad \text{og} \qquad E_1 = V_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}(1 + \pi^2),$$

den siste en faktor $1 + \pi^2 = 10.87$ ganger potensialverdien $V_0 = \hbar^2/(2ma^2)$.



•Når $b \to \infty$, vil (som for en *vanlig* boks) grunntilstandsenergien E_1 gå mot null. [Mer generelt vil energien E_1 avta jevnt og trutt fra verdien ovenfor mot null, når b økes fra null til uendelig.]

b. •For $0 < x < b$, hvor potensialet er lik null, kan den generelle løsningen av TUSL skrives på formen

$$\psi_1(x) = A\sin[k_1(x - b)] + B\cos[k_1(x - b)] \qquad (k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_1}).$$

Kontinuiteten i $x = b$ krever at $B = 0$, q.e.d.

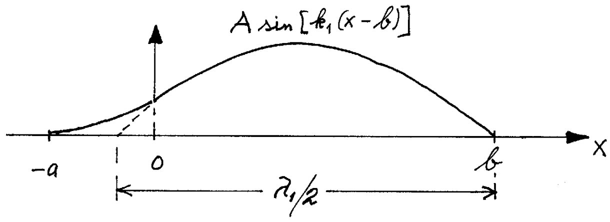
•Da grunntilstanden skal være fri for nullpunkter i intervallet $-a < x < b$, må intervallet $0 < x < b$ svare til mindre enn en halvbølge av sinusen. Dette krever at

$$k_1 b < \pi, \quad \text{q.e.d.}$$

c. •Når b er så stor at grunntilstandsenergien E_1 blir mindre enn V_0, blir området $-a < x < 0$ klassisk forbudt for grunntilstanden, og den relative krumningen i dette området,

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - E_1],$$

blir positiv — ψ_1 krummer da <u>utover</u> fra aksen i dette området. •Fordi kontinuiteten av bølgefunksjonen krever at $\psi_1(-a) = 0$, må da prinsippskissen av grunntilstanden se slik ut:



•Fordi ψ_1 krummer utover fra aksen for $-a < x < 0$, ser vi her at den stiplede forlengelsen av sinusbølgen (som beskriver ψ_1 for $x > 0$) skjærer x-aksen et sted mellom $x = -a$ og $x = 0$. Følgelig er

$$b < \lambda_1/2 < b + a, \quad \text{q.e.d.}$$

d. •For $E_1 = V_0$ følger det fra TUSL at ψ_1'' er lik null i intervallet $-a < x < 0$, slik at ψ_1 må være lineær i dette området. Da den samtidig skal være lik null for $x = -a$, har vi altså

$$\psi_1 = B(x+a) \qquad \text{og} \qquad \psi_1' = B \qquad \text{for} \qquad -a < x < 0.$$

Den logaritmisk deriverte umiddelbart til venstre for origo er altså

$$\frac{\psi_1'(0^-)}{\psi_1(0^-)} = \frac{1}{a}.$$

For $0 < x < b$ hadde vi $\psi_1 = A\sin[k_1(x-b)]$, slik at $\psi_1' = k_1 A\cos[k_1(x-b)]$. Kontinuiteten i origo av ψ_1 og ψ_1', og dermed av ψ_1'/ψ_1, krever da at

$$\frac{\psi_1'(0^-)}{\psi_1(0^-)} = \frac{1}{a} = \frac{\psi_1'(0^+)}{\psi_1(0^+)} = \frac{k_1\cos k_1 b}{\sin[k_1(-b)]} = -\frac{k_1}{\tan k_1 b},$$

dvs

$$\tan k_1 b = -k_1 a.$$

Med $E_1 = V_0$ er bølgetallet k_1 ganske enkelt

$$k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_1} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV_0} = \frac{1}{a}.$$

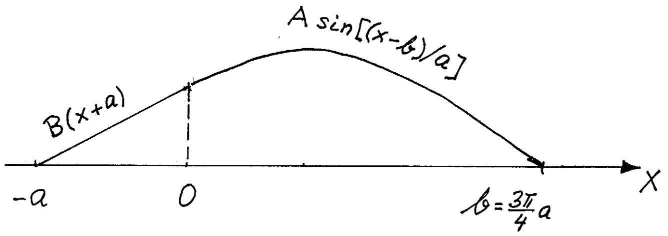
Kontinuiteten i origo krever altså at

$$\tan k_1 b = \tan\frac{b}{a} = -1.$$

Fordi $k_1 b$ skal være mindre enn π (slik at ψ_1 blir fri for nullpunkter), blir da b entydig bestemt:

$$k_1 b = \frac{3}{4}\pi \quad \Longrightarrow \quad b = \frac{3\pi}{4k_1} = \frac{3\pi}{4}\, a \approx 2.36\, a.$$

Skissen av grunntilstanden ψ_1 blir da slik:



•Første eksiterte tilstand, $\psi_2(x)$, skal ha ett nullpunkt i intervallet $-a < x < b$. Dersom denne tilstanden skal ha energien $E_2 = V_0$, blir regnestykket akkurat som ovenfor, bare med $k_1 b = 3\pi/4 + \pi$. $\tan k_1 b$ er da fortsatt lik -1, og $\sin[k_1(x-b)]$ får plass til en ekstra halv bølgelengde, slik at det blir ett nullpunkt. Venstre del av grafen for ψ_2 blir akkurat som ψ_1 ovenfor, men i tillegg har altså ψ_2 en ekstra halv bølgelengde til høyre, idet b er forlenget til

$$b = \frac{7\pi}{4k_1} = \frac{7\pi}{4}\, a \approx 5.50\, a.$$

Oppgave 2

a. •Radialligningen for funksjonen $u_{ln_r}(r) = rR_{ln_r}(r)$ er "éndimensjonal":

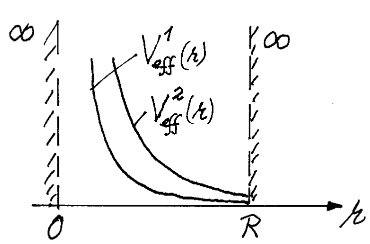
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] u(r) = Eu(r), \qquad 0 < r < R, \qquad u(0) = 0,$$

og beskriver altså formelt en éndimensjonal bevegelse i et effektivt potensial

$$V^l_{\text{eff}}(r) = \begin{cases} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} & \text{for} \quad 0 < r < R, \\ \infty & \text{for} \quad r < 0 \;\text{ og for }\; r > R. \end{cases}$$

(Her fanger betingelsen $V = \infty$ for $r < 0$ opp at $u(0) = 0$ og at $r > 0$.) Vi må også ha $u(R) = 0$, da $V = \infty$ for $r > R$ og bølgefunksjonen skal være kontinuerlig.

For $l = 0$ er dette et rent bokspotensial. For $l \geq 1$ har vi i tillegg et positivt frastøtende ledd som øker i størrelse med økende l:



"Bunnen" av boksen heves altså med økende l. Den laveste energien må vi derfor vente å finne for $l = 0$, dvs for en s-bølge. For en gitt l, deriblant $l = 0$, vil vi ha flere energiegenfunksjoner. Disse skiller seg fra hverandre ved antall nullpunkter (n_r) i intervallet $0 < r < R$. Da ligningen ovenfor er éndimensjonal, vet vi at energiegenverdien vil øke med økende n_r. Konklusjonen er at grunntilstanden for denne kuleformede boksen må ha $l = 0$ og $n_r = 0$.

•For $l = 0$ beskriver radialligningen som nevnt en ordinær éndimensjonal boks med vidde bestemt av $0 < r < R$. Grunntilstanden er derfor

$$\psi = \frac{u_{l=0,n_r=0}}{r} Y_{00}, \qquad \text{med} \qquad u_{00}(r) = A \sin kr = A \sin \frac{\pi r}{R}.$$

Grunntilstandsenergien er derfor

$$E_{\text{kule}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu R^2}.$$

b. For en kubisk boks med sidekant L kan grunntilstanden skrives på formen

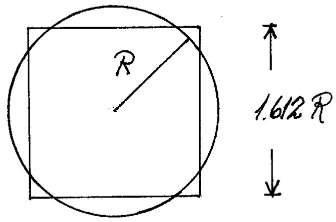
$$\psi_{111} = A \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{\pi y}{L} \sin \frac{\pi z}{L} \qquad \left(k_x = k_y = k_z = \frac{\pi}{L} \right),$$

og har energien

$$E_{\text{kube}} = \frac{\hbar^2}{2\mu}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = 3\, \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu L^2}.$$

For en kubisk boks med samme volum som kula ovenfor ($V_0 = L^3 = \frac{4}{3}\pi R^3$) ser vi at sidekanten er

$$L = (4\pi/3)^{1/3} R \quad (\approx 1.612\, R).$$



Forholdet mellom grunntilstandsenergiene for kuben og kula blir altså

$$\frac{E_{\text{kube}}}{E_{\text{kule}}} = 3\, \frac{R^2}{L^2} = 3 \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{2/3} = 1.154.$$

For et gitt volum blir altså "kvantevillskapen" mindre for den kuleformede boksen enn for den kubiske.

c. • I grunntilstanden vil de N spinn-$\frac{1}{2}$-fermionene okkupere $N/2$ romlige én-partikkel-tilstander, med impulser innenfor en kuleflate i impulsrommet. Radien av denne kuleflata er den maksimale én-partikkel-impulsen. Volumet av denne kula i impulsrommet er $\frac{4}{3}\pi p_F^3$. Denne såkalte Fermi-impulsen p_F er da ifølge den oppgitte formelen bestemt av relasjonen

$$\frac{N}{2} = \frac{V_0 \cdot \frac{4}{3}\pi p_F^3}{h^3}.$$

Denne formelen avhenger som vi ser bare av *størrelsen* av volumet V_0, ikke av *formen.* Fermi-impulsen,

$$p_F = h \left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{V_0} \right)^{1/3} = \hbar \left(3\pi^2 \frac{N}{V_0} \right)^{1/3},$$

og Fermi-energien (den maksimale én-partikkel-energien),

$$E_F = \frac{p_F^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(3\pi^2\frac{N}{V_0}\right)^{2/3},$$

er derfor den samme for kula og kuben, når de to volumene er like store.

•Med $\mu = m_e$ og en antallstetthet $N/V_0 = 10^{23}\text{cm}^{-3}$ blir Fermi-energien

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\left(3\pi^2\frac{N}{V_0}a_0^3\right)^{2/3} = 13.6\,\text{eV}\left(3\pi^2\cdot 10^{23}\cdot(0.529\cdot 10^{-8})^3\right)^{2/3} \approx 7.85\text{ eV}.$$

Oppgave 3

a. •Da $S_x^2 = S_y^2 = S_z^2$ alle er proporsjonale med enhetsmatrisen, følger det umiddelbart at en vilkårlig spinor er en egenspinor til alle disse operatorene,

$$S_x^2\chi = S_y^2\chi = S_z^2\chi = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}\chi,$$

med samme egenverdi $\hbar^2/4$. Videre er

$$\mathbf{S}^2\chi = \frac{3\hbar^2}{4}\chi, \quad \text{q.e.d.}$$

så her er egenverdien $3\hbar^2/4$.

•Egenverdien til $\mathbf{S}^2$ kan skrives på formen

$$\frac{3\hbar^2}{4} = \hbar^2\cdot\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1) \equiv \hbar^2 s(s+1),$$

med $s = \frac{1}{2}$. Vi sier da at spinnet er $\frac{1}{2}$. Tallet $\frac{1}{2}$ angir altså verdien av spinnkvantetallet (dreieimpulskvantetallet).

•Da egenverdien til S_x^2 (og til S_y^2 og S_z^2) er $\hbar^2/4$, vil en måling av S_x^2 med sikkerhet gi $\hbar^2/4$. En måling av S_z (eller S_x eller S_y) må da gi $\pm\frac{1}{2}\hbar$. Dette er også i tråd med den generelle regelen, som sier at vi for et dreieimpulskvantetall j kan måle $J_z = \hbar m_j$, med $m_j = -j, -j+1, \cdots, j$.

•Da *operatorene* S_x, S_y og S_z ikke kommuterer (jf den oppgitte dreieimpulsalgebraen), kan de tilsvarende *observablene* ikke ha skarpe verdier samtidig. Vi sier da at observablene S_x, S_y og S_z er ikke-kompatible. Dette betyr eksempelvis at en måling av S_x på en tilstand med skarp S_z vil forstyrre tilstanden, dvs endre den. (Dette fordi målingen vil etterlate spinnet med en skarp S_x, og da kan ikke S_z være skarp lenger.)

b. Det er lett å se at de to spinorene er egenspinorer til S_y:

$$S_y\chi_{\pm\hat{\mathbf{y}}} = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ \pm i/\sqrt{2}\end{pmatrix} = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ \pm i/\sqrt{2}\end{pmatrix} = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\chi_{\pm\hat{\mathbf{y}}}.$$

Egenverdiene er altså hhvis $+\frac{1}{2}\hbar$ og $-\frac{1}{2}\hbar$. Normeringen er også lett å kontrollere:

$$\chi_{\pm\hat{\mathbf{y}}}^\dagger\chi_{\pm\hat{\mathbf{y}}} = (1/\sqrt{2} \quad \mp i/\sqrt{2})\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\ \pm i/\sqrt{2}\end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2} = 1, \quad \text{q.e.d.}$$

c. •Vi regner ut

$$\begin{aligned}\chi^\dagger\chi &= (a^* \;\; b^*)\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = (1/\sqrt{2} \;\; \tfrac{1}{2}(1-i))\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \tfrac{1}{2}(1+i) \end{pmatrix} \\ &= \tfrac{1}{2} + \frac{1}{4}(1-i)(1+i) = \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{2} = 1,\end{aligned}$$

og konstaterer at $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ er normert, qed.

•I formelen

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

er a og b sannsynlighetsamplitudene — og $|a|^2 = \frac{1}{2}$ og $|b|^2 = (1-i)(1+i)/4 = \frac{1}{2}$ er sannsynlighetene — for å måle henholdsvis $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$ og $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$.

d. •De mulige måleresultatene er egenverdiene, $S_y = \pm\frac{1}{2}\hbar$. Sannsynlighets*amplitudene* for å måle hhvis $S_y = +\frac{1}{2}\hbar$ og $S_y = -\frac{1}{2}\hbar$ er gitt ved projeksjonene av tilstanden $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ før målingen på de respektive egentilstandene for S_y. Disse projeksjonene er

$$\begin{aligned}\chi^\dagger_{\pm\hat{\mathbf{y}}}\chi &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & \mp i/\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \tfrac{1}{2}(1+i) \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2} \mp \frac{i}{\sqrt{2}} \cdot \tfrac{1}{2}(1+i) \\ &= \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \mp \frac{i}{2\sqrt{2}}.\end{aligned}$$

Sannsynlighetene blir da hhvis

$$P_\pm = |\chi^\dagger_{\pm\hat{\mathbf{y}}}\chi|^2 = \frac{1}{4}\left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + \frac{1}{8} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2\sqrt{2}} = \begin{cases} 0.853 \\ 0.147 \end{cases}.$$