

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:

Jon Andreas Støvneng, tel. 73 59 36 63, eller 45 45 55 33

EKSAMEN I
FY1006 INNFØRING I KVANTEFYSIKK/
TFY4215 INNFØRING I KVANTEFYSIKK

Onsdag 11. august 2010

kl. 9.00 - 13.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator;

Rottmann: Matematisk formelsamling;

Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk, eller

Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter;

Aylward & Findlay: SI Chemical Data.

Et ark med uttrykk og formler (vedlegg 1) er heftet ved.

Sensuren faller i august.

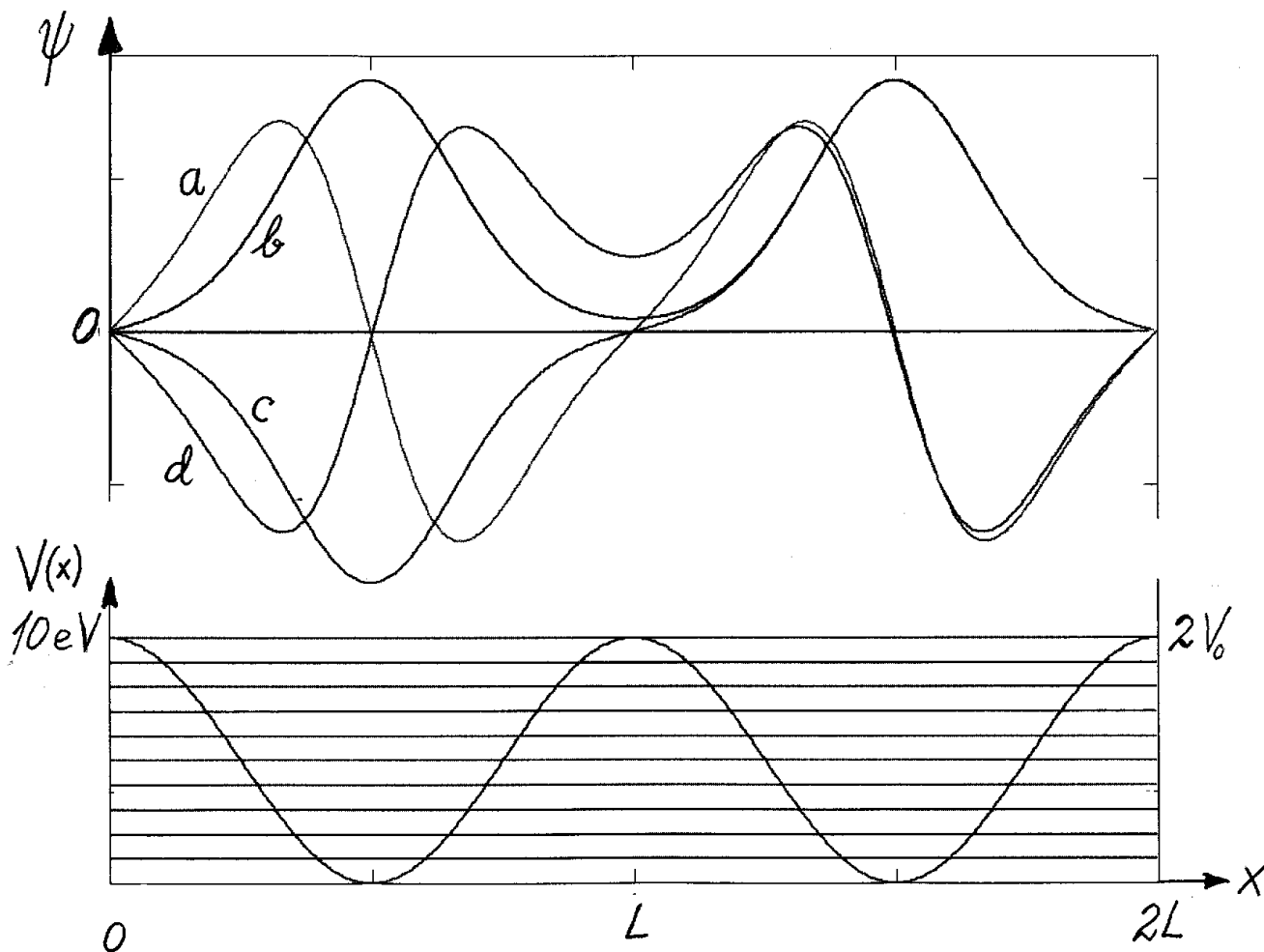
Oppgave 1 (Teller 30 %)

Et elektron (med masse m_e) beveger seg i et endimensjonalt bokspotensial med en sinusformet "bunn",

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x < 0 \text{ og for } x > 2L, \\ V_0[1 + \cos(2\pi x/L)] & \text{for } 0 < x < 2L. \end{cases}$$

Potensialet er vist i figuren på neste side, hvor det framgår at $V_0 = 5$ eV.

a. •Redegjør for symmetriegenskaper (med hensyn på punktet $x = L$) og antall nullpunkter (i intervallet $0 < x < 2L$) for grunntilstanden ψ_1 og første eksiterte tilstand ψ_2 i dette potensialet. •Forklar hva vi mener med klassisk tillatte og klassisk forbudte områder samt klassiske vendepunkter for en energieigenfunksjon i et slikt potensial. •Forklar også hva vi mener med den relative krumningen til energieigenfunksjonen, *finn* den relative krumningen uttrykt ved potensialet og energien, og beskriv krumningsegenskapene i klassisk tillatte og klassisk forbudte områder samt i klassiske vendepunkter.



b. Figuren viser øverst fire av energieigenfunksjonene og nederst potensialet $V(x)$. De horisontale strekene (med avstand $0.2 V_0 = 1 \text{ eV}$) er tatt med for å gjøre det lettere å lese av potensialverdier. •Angi (med begrunnelse) hvilke fire tilstander dette er.

Nær $x = 0$, nær $x = L$ og nær $x = 2L$ vil du se av figuren at den relative krumningen har samme fortegn for alle de fire tilstandene. •Hva forteller dette om de fire energiene i forhold til $2V_0$? •Hvor mange klassiske vendepunkter har vi for hver av de fire tilstandene?

•Anslå de fire energiene (i eV) ved hjelp av diagrammene.

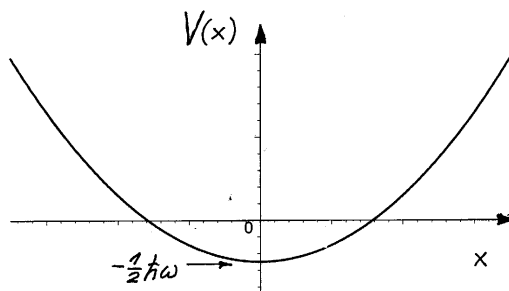
c. Anta nå at vi flytter den harde vegg på høyresiden fra $x = 2L$ til $x = L$, slik at det nye potensialet ($V^{(c)}$) er lik uendelig for $x < 0$ og $x > L$ og ellers har samme form som før: $V^{(c)}(x) = V_0[1 + \cos(2\pi x/L)]$. •Forklar hvorfor grunntilstandsenergien $E_1^{(c)}$ i dette potensialet er lik energien E_2 (for første eksiterte tilstand) i det opprinnelige potensialet. Også energien $E_2^{(c)}$ er lik en av energiene for det opprinnelige potensialet. •Hvilken?

Alle energiene og bølgefunksjonene er beregnet (numerisk) for en viss lengdeparameter L , som ikke oppgis. • Finn et *estimat* for L , i enheter av Bohr-radien a_0 . [Hint: Ved å Taylor-utvikle $V^{(c)}(x)$ omkring punktet $x = L/2$ vil du finne at $V^{(c)}$ er tilnærmet harmonisk i et område rundt dette punktet. Bruk dette til å finne en (tilnærmet korrekt) sammenheng mellom $E_1^{(c)}$ og L , og finn herav et estimat for L/a_0 ved å sette $E_1^{(c)}$ lik den E_2 -verdien du fant i pkt. **b**.

Mangler du sistnevnte verdi, kan du sette $E_2 = fV_0$, der f blir stående som en ukjent tallfaktor. Oppgitt: $\hbar^2/(2m_e a_0^2) = 13.6 \text{ eV}$.]

Oppgave 2 (Teller 22.5 %)

En partikkel med masse m beveger seg i et endimensjonalt harmonisk oscillatorpotensial, $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega$.



Energieigenfunksjonene for dette potensialet er de samme som for potensialet $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, mens de tilhørende energiene er $E_n = n\hbar\omega$. Ved $t = 0$ prepareres systemet i en (normert) begynnelsestilstand

$$\Psi(x, 0) = \beta^{1/4} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp[-\beta m\omega(x - x_0)^2/2\hbar],$$

hvor både β og x_0 er større enn null. Det opplyses at usikkerhetene i x og p_x i begynnelsestilstanden (dvs ved $t = 0$) er

$$(\Delta x)_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\beta m\omega}} \quad \text{og} \quad (\Delta p_x)_0 = \sqrt{\frac{\beta\hbar m\omega}{2}}.$$

For $\beta \gg 1$ er $(\Delta x)_0$ mye mindre enn for grunnstilstanden. Til gjengjeld er $(\Delta p_x)_0$ svært stor (stor "kvantevillskap").

Uansett valg av parametre kan bølgefunksjonen utvikles i de stasjonære oscillatorløsningene:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) (e^{-i\omega t})^n. \quad (1)$$

a. •Lag en prinsippskisse av sannsynlighetstettheten, og angi forventningsverdien $\langle x \rangle_0$ av posisjonen, i begynnelsestilstanden. •Vis også at $\langle p_x \rangle_0 = 0$.

b. •Hva er den fysiske tolkningen av koeffisientene c_n i ligning (??)?

For å danne oss et begrep om hvilke n som gir viktige bidrag kan vi beregne forventningsverdien av energien. •Bruk resultatene fra pkt. **a** og de oppgitte usikkerhetene til å vise at

$$\langle E \rangle = \frac{1}{4} \hbar\omega \left(\beta + \frac{1}{\beta} - 2 \right) + \frac{1}{2} m\omega^2 x_0^2.$$

[Hint: $\langle E \rangle$ er tidsuavhengig, og finnes ved å addere forventningsverdiene av kinetisk og potensiell energi ved $t = 0$.]

Anta at $\beta = 400$, mens x_0 er liten, la oss si $\approx \sqrt{\hbar/m\omega}$. •Hva er da $\langle E \rangle$ og $\langle n \rangle$?

c. For $t = 0$ har vi fra ligning (??):

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x).$$

I denne summen opphever altså alle bidragene hverandre nesten fullstendig, unntatt for x -verdier i et lite område rundt x_0 . Siden alle egenfunksjonene som bidrar i denne summen har en “utstrekning” som er mye større enn $(\Delta x)_0$ (når $\beta \gg 1$), kan vi ikke vente å finne en slik kansellering for alle t . For de fleste verdier av t betyr dette at “utstrekningen” av $\Psi(x, t)$ vil være “oppblåst”, og mer jo større β er (dvs jo større “kvantevillskapen” er). Men det finnes unntak:

• Vis at når t er et helt multiplum NT av oscillatorens klassiske periode $T = 2\pi/\omega$, så er

$$\Psi(x, NT) = \Psi(x, 0),$$

dvs at bølgefunksjonen “gjenskapes” for hver gang t passerer et helt antall perioder.

Det skjer interessante ting også midt mellom disse tidspunktene, f.eks for $t = T/2$. • Finn ut hva, ved å betrakte speilbildet av $\Psi(x, T/2)$, dvs $\Psi(-x, T/2)$. [Hint: Bruk symmetriegenskapene til egenfunksjonene $\psi_n(x)$.]

Oppgave 3 (Teller 22.5 %)

Et myon μ^- med ladning $-e$ og masse m_μ beveger seg i det elektriske feltet fra en kjerne med ladning Ze . Vi regner kjernen som uendelig tung.

a. Systemet befinner seg i grunntilstanden, som beskrives av en bølgefunksjon på formen $\psi = C \exp(-r/a_\mu)$. • Vis at dreieimpulsen i denne tilstanden er lik null. • Sett inn denne oppgitte bølgefunksjonen i den tidsuavhengige Schrödingerligningen, og finn forholdet a_μ/a_0 mellom “radien” a_μ og Bohr-radien a_0 samt forholdet mellom grunntilstandsenergien (E_μ) og Rydberg-energien $\hbar^2/(2m_e a_0^2)$. [Disse resultatene viser hvordan “radius” og energi skalerer.] • Finn også tallverdiene av disse forholdene, når det oppgis at $Z = 92$ og $m_\mu/m_e \approx 206.8$.

b. Anta nå at det hydrogenlignende atomet i pkt. **a** fanger inn et elektron, og at hele systemet (kjerne, myon og elektron) havner i den stasjonære tilstanden der den totale energien er så lav som mulig, dvs i grunntilstanden for dette tre-partikkel-systemet. (Myonet har en begrenset levetid, men det ser vi bort fra her.) Elektronet beskrives i denne tilstanden med veldig god tilnærming av en bølgefunksjon på formen

$$\psi_e = C_e \exp(-r/a_e).$$

• Forklar hvorfor, og angi hvor stor a_e er. • Angi også forholdet mellom elektronets energi E_e i denne tilstanden og Rydberg-energien.

c. Etter innfangningen av elektronet vil myonet bevege seg i potensialet

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{|\psi_e|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_e|} d^3r_e,$$

der det siste leddet representerer frastøtningen mellom elektronet og myonet, og altså er kommet i tillegg til det opprinnelige potensialet. • Forklar hvorfor dette tilleggsleddet ikke påvirker myonets *bølgefunksjon* (dvs at denne beholder formen funnet under pkt. **a**). • Hvilken effekt har elektronet på myonets *energi*? [Hint: For $|\mathbf{r}| \ll a_e$ er integralet i formelen over tilnærmet lik forventningsverdien av $1/r$ for elektronet. Normeringskonstanten C_e er lik $(\pi a_e^3)^{-1/2}$.]

Oppgave 4 (Teller 12%)

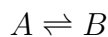
Hamiltonoperatoren for et molekyl er

$$H = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_A -\frac{\hbar^2}{2M_A} \nabla_A^2 + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \sum_{A<B} \frac{Z_A Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{AB}} + \sum_{i,A} \frac{-Z_A e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{iA}}$$

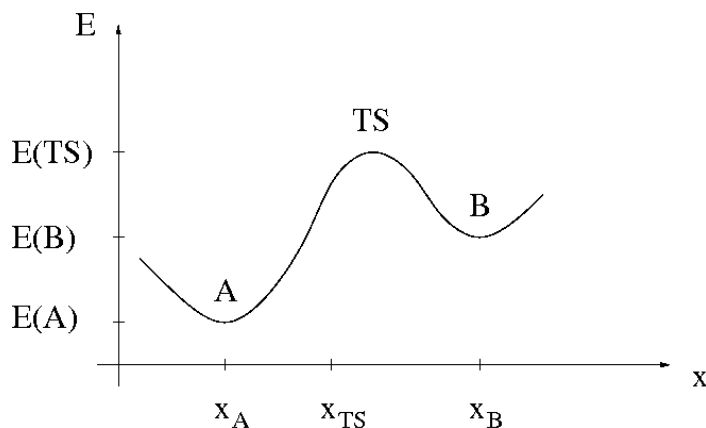
- Gjør kort rede for betydningen av de ulike summene som inngår i H . (Vi har her sett bort fra et eventuelt ytre potensial.)
- I Born–Oppenheimer–tilnærmelsen neglisjerer vi én av de fem summene i H . Hvilken, og med hvilken begrunnelse?
- Hva innebærer Pauliprinsippet?
- Et molekyl $CR_1R_2R_3R_4$ er optisk aktivt dersom de fire substituentene R_1 , R_2 , R_3 og R_4 som sitter på det sp^3 -hybridiserte karbonatomet alle er forskjellige. Hvorfor er dette en betingelse? (Dvs, hva er spesielt med 4 ulike substituentene, i forhold til om to eller flere av dem er like?)

Oppgave 5 (Teller 13%)

En kjemisk likevekt



beskrives av følgende energifunksjon $E(x)$:



Her er E systemets totale energi, og x er en eller annen dimensjonsløs reaksjonskoordinat (som generelt kan være både positiv og negativ).

• Diskuter hvordan kinetikken og den termodynamiske likevekten mellom de to tilstandene A og B avhenger av de ulike energiene angitt i figuren.

Vi kan modellere en slik kjemisk likevekt med energifunksjonen

$$E(x) = E_0 (x^4 + 3x^3 + x^2)$$

- Bestem x_A , x_{TS} og x_B . Verifiser at x_{TS} tilsvarer et (lokalt) energimaksimum.
- Bestem aktiveringsenergien E_a for reaksjonen $B \rightarrow A$, samt reaksjonsenergien $\Delta E = E_A - E_B$.

Vedlegg 1: Formler og uttrykk (Noe av dette kan du få bruk for.)

Taylor-utviklingen

$$F(x) = F(x_0) + (x - x_0)F'(x_0) + \frac{1}{2!}(x - x_0)^2F''(x_0) + \dots$$

Laplace-operatoren og dreieimpulsoperatører i kulekoordinater

$$\begin{aligned}\nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}; \\ \hat{\mathbf{L}}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right), \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}; \\ \hat{L}_x &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right); \\ [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] &= 0, \quad [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad \text{osv.}\end{aligned}$$

Relativbevegelse for to-partikkel-system

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) &= E\psi(\mathbf{r}); \\ m &= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{reduert masse}); \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.\end{aligned}$$

Hydrogenlignende system

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z\hbar^2}{ma_0 r} \equiv -\frac{\hbar^2}{mar}; \quad E_n = -\frac{1}{2}(\alpha Z)^2 \frac{mc^2}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{1}{(l+1+n_r)^2}.$$

Vinkelfunksjoner

$$\begin{aligned}\left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathbf{L}}^2 \\ \hat{L}_z \end{array} \right\} Y_{lm} &= \left\{ \begin{array}{l} \hbar^2 l(l+1) \\ \hbar m \end{array} \right\} Y_{lm}, \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_{l'm'}^* Y_{lm} = \delta_{l'l} \delta_{m'm}; \\ Y_{00} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \equiv Y_{p_z}, \quad Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}; \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}. \\ \hat{\mathcal{P}} Y_{lm} &= (-1)^l Y_{lm}.\end{aligned}$$

Endimensjonal harmonisk oscillator

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) \psi_n(x) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n(x); \quad (\psi_n, \psi_k) = \delta_{nk};$$

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \quad C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4};$$

$$\psi_1(x) = C_0 \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \quad \psi_2(x) = \frac{C_0}{2} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \dots;$$

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x).$$

Energiegenfunksjoner og radialligning, kulesymmetrisk potensial $V(r)$

$$\psi(r, \theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi);$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}^l(r)\right] u(r) = E u(r), \quad V_{\text{eff}}^l(r) \equiv V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}, \quad u(0) = 0.$$

Tidsutvikling av forventningsverdier

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} \right\rangle.$$

Ehrenfests teorem

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle; \quad \frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = \langle -\nabla V(\mathbf{r}) \rangle.$$

Noen konstanter

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (\text{Bohr-radien});$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137.0360} \quad (\text{finstrukturkonstanten});$$

$$\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6 \text{ eV} \quad (\text{Rydberg-energien}).$$

Noen integraler

$$\int_0^\infty x^n e^{-\beta x} dx = \frac{n!}{\beta^{n+1}}.$$