NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:
Ingjald Øverbø, tel. 73 59 18 67, eller 97 01 23 55
Jon Andreas Støvneng, tel. 73 59 36 63, eller 45 45 55 33

EKSAMEN I
FY1006 INNFØRING I KVANTEFYSIKK/
TFY4215 INNFØRING I KVANTEFYSIKK

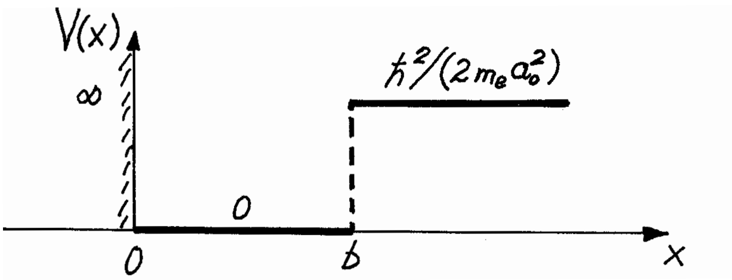
Mandag 6. august 2012
kl. 9.00 - 13.00

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 er heftet ved.

Sensuren faller i uke 35.

Oppgave 1 **(Teller 22.5 %)**

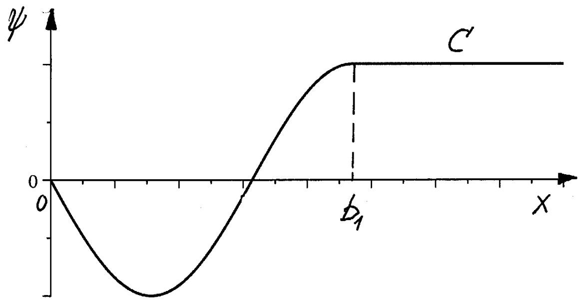


Denne oppgaven dreier seg om energiegenfunksjoner for et elektron (med masse m_e) i et endimensjonalt brønnpotensial med dybde $\hbar^2/(2m_e a_0^2) = 1$ Rydberg, avgrenset av en "hard vegg" ved $x = 0$:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for} \quad x < 0, \\ 0 & \text{for} \quad 0 < x < b, \\ \hbar^2/(2m_e a_0^2) & \text{for} \quad x > b. \end{cases}$$

Her er brønnvidden b en parameter som vi tenker oss kan varieres.

a. For en viss brønnvidde, $b = b_1$, har dette systemet en energiegenfunksjon ψ som har ett nullpunkt i intervallet $0 < x < b_1$, og som har formen $\psi = C$ (en konstant $\neq 0$) for $x > b_1$:



♠Bruk denne opplysningen og den tidsuavhengige Schrödingerligningen til å vise at energien til denne tilstanden er $E = \hbar^2/(2m_e a_0^2)$. ♠Vis videre at ψ er sinusformet i intervallet $0 < x < b_1$, og bestem bølgetallet k. ♠Finn forholdet b_1/a_0 ved hjelp av kontinuitetsbetingelsen(e) i $x = b_1$.

b. Funksjonen ψ i pkt. **a** er i realiteten 1. eksiterte tilstand for dette systemet (for $b = b_1$). ♠Finn ut hvilken form grunntilstanden ψ_1 må ha i og utenfor brønnen, og prøv å lage en noenlunde realistisk skisse av ψ_1.

c. ♠Finn ut fra skissen av ψ_1 en nedre og en øvre skranke for fasebeløpet $k_1 b_1$ (der k_1 er bølgetallet i brønnområdet). ♠Finn deretter en ligning som *bestemmer* $k_1 b_1$ (og dermed grunntilstandsenergien), og forklar hvordan denne kan løses (uten å gjennomføre beregningen). ♠Hvor mange bundne tilstander har dette systemet for $b = b_1$?

Når brønnvidden velges tilstrekkelig liten, vil dette systemet ikke ha noen bunden tilstand i det hele tatt. ♠Forklar hvilken betingelse brønnvidden b må oppfylle for at systemet skal ha minst én bunden tilstand.

Oppgave 2 **(Teller 30 %)**

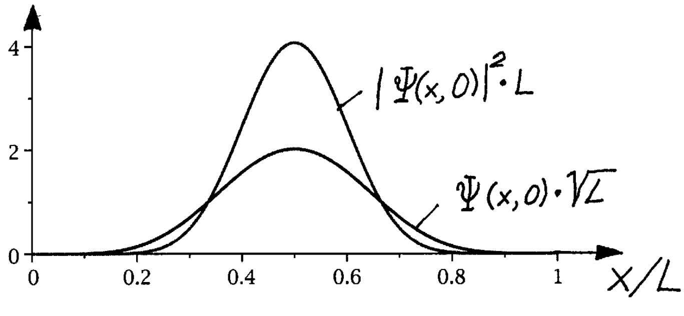
En partikkel med masse m befinner seg i en uendelig dyp endimensjonal potensialbrønn (boks) med vidde L:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad 0 < x < L, \\ \infty & \text{ellers.} \end{cases}$$

Ved $t = 0$ prepareres dette systemet i en tilstand beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\Psi(x,0) = \frac{16}{\sqrt{63L}} \left(\sin \frac{\pi x}{L} \right)^5 \overset{(*)}{=} \frac{1}{\sqrt{126}} \left[10\, \psi_1(x) - 5\, \psi_3(x) + \psi_5(x) \right].$$

Her er ψ_1 osv energiegenfunksjoner for dette systemet. (Se formelarket.) Overgangen merket med $(*)$ følger fra identiteten $16 \sin^5 y = 10 \sin y - 5 \sin 3y + \sin 5y$. Figuren viser $\sqrt{L}\Psi(x,0)$ og $L|\Psi(x,0)|^2$ som funksjoner av x/L.



a. ♠Forklar hva vi mener med å si at energiegenfunksjonene ψ_1 osv er ortonormerte. ♠Bruk dette til å vise at begynnelsestilstanden $\Psi(x,0)$ er normert. [Hint: Normeringsintegralet kan skrives på formen $\int(c_1\psi_1+\cdots)^*(c_1\psi_1+\cdots)dx$.] ♠Finn (ut fra diagrammet, og uten regning) forventningsverdien $\langle\, x\,\rangle_0$ av posisjonen ved $t=0$. ♠Hvilken av de to kurvene i diagrammet er mest direkte relevant når du skal anslå omtrent hvor stor *usikkerheten* $(\Delta x)_0$ i posisjonen er ved $t=0$? ♠Hva er ditt anslag?

b. ♠Angi de mulige måleresultatene ved en måling av energien til dette systemet ved $t=0^+$, dvs umiddelbart etter prepareringen, og finn sannsynlighetene for disse måleresultatene. ♠Vis at forventningsverdien $\langle\, E\,\rangle_0$ av energien ved $t=0^+$ er $\frac{25}{9}E_1$.

Etter prepareringen (dvs for $t>0$) er bølgefunksjonen

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{126}}\left[10\,\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}-5\,\psi_3(x)e^{-iE_3t/\hbar}+\psi_5(x)e^{-iE_5t/\hbar}\right],$$

forutsatt at den nevnte målingen ved $t=0^+$ *ikke* utføres. ♠Forklar hvorfor forventningsverdien av energien i denne tilstanden hele tiden er den samme som for $t=0^+$.

c. Etter overslaget i pkt. **a** av usikkerheten $(\Delta x)_0$ ved $t=0$ kan det være interessant å undersøke usikkerheten i impulsen. ♠Forklar først hvorfor $\Psi(x,t)$ er symmetrisk (med hensyn på midtpunktet i boksen) for alle $t\geq 0$, og hvilken symmetriegenskap dette medfører for $\partial\Psi(x,t)/\partial x$? ♠Bruk dette til å vise at forventningsverdien $\langle\, p_x\,\rangle_t$ av impulsen er lik null (for alle $t\geq 0$). ♠Finn deretter $\langle\, p_x^2\,\rangle_t$, f.eks ved å bruke at $\langle\, K\,\rangle_t=\langle\, E\,\rangle_t$, og bruk dette til å beregne usikkerheten $(\Delta p_x)_t$.

d. ♠Avgjør om overslaget (i pkt. **a**) av usikkerheten $(\Delta x)_0$ ved $t=0$ er i overensstemmelse med uskarphetsrelasjonen. Usikkerheten $(\Delta x)_0$ oppfyller relasjonen

$$\frac{(\Delta x)_0^2}{L^2}=\frac{1}{L^2}\left\langle\,(x-\langle\, x\,\rangle_0)^2\,\right\rangle_0=f\int_0^1(y-\tfrac{1}{2})^2\sin^{10}(\pi y)\,dy.$$

♠Vis den siste overgangen i denne relasjonen, der tallfaktoren f skal bestemmes. Det oppgis at uttrykket på høyresiden (inklusive faktoren f) er lik

$$\frac{1}{12}-\frac{5269}{7200\,\pi^2}=0.0091859283.$$

♠Finn herav en nøyaktig verdi for $(\Delta x)_0/L$, og avgjør om det resulterende produktet $(\Delta x)_0(\Delta p_x)_t$ stemmer med uskarphetsrelasjonen.

♠Dersom du har tid til overs: Spekulér litt over hva som vil skje med $(\Delta x)_t$ for $t>0$.

Oppgave 3 (Teller 22.5 %)

Denne oppgaven dreier seg om energiegenfunksjoner til en partikkel med masse m som befinner seg i et tredimensjonalt isotropt harmonisk oscillatorpotensial, $V = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$. *Ett* valg av egenfunksjoner for dette systemet er å bruke produkt-tilstander av typen

$$\psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \equiv \psi_{n_x n_y n_z} \equiv (n_x n_y n_z),$$

der $\psi_{n_x}(x)$ oppfyller den endimensjonale ligningen

$$\widehat{H}^{(x)}\psi_{n_x}(x) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\psi_{n_x}(x) = \hbar\omega(n_x + \tfrac{1}{2})\psi_{n_x}(x),$$

og tilsvarende for de andre faktorene. (Se formel-arket.) Produkt-tilstanden ovenfor er en egentilstand til Hamilton-operatoren $\widehat{H} = \widehat{H}^{(x)} + \widehat{H}^{(y)} + \widehat{H}^{(z)}$ for den tredimensjonale oscillatoren, med egenverdien

$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \equiv \hbar\omega(N + \frac{3}{2}) \equiv E_N.$$

Et alternativ til egenfunksjonssettet ovenfor er de simultane egenfunksjonene

$$\psi_{l n_r m} = R_{l n_r}(r)Y_{lm}(\theta,\phi) \equiv \frac{u_{l n_r}(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\phi)$$

til dreieimpulsoperatorene $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $\widehat{L}_z$ og Hamilton-operatoren $\widehat{H}$. Disse operatorene kommuterer når potensialet er kulesymmetrisk som her. Her må $u(r)$ være lik null i origo og oppfylle radialligningen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]u_{l n_r} = E\,u_{l n_r},$$

der de to siste leddene i hakeparentesen fungerer som et "effektivt potensial" $V^l_{\text{eff}}(r)$. Vi har valgt å karakterisere radialfunksjonene ved l og radialkvantetallet n_r, som er antall nullpunkter i $u_{l n_r} = rR_{l n_r}$ for $0 < r < \infty$.

a. ♠Vis at grunntilstanden $\psi_{n_x=0,n_y=0,n_z=0} \equiv (000)$ (også) er en tilstand av typen $\psi_{l n_r m}$, og bestem dreieimpulskvantetallene l og m samt radialfunksjonen $R_{l n_r}$ og radialkvantetallet n_r for denne tilstanden (ved hjelp av formlene på formel-arket). ♠Vis at også egenfunksjonen $\psi_{n_x=0,n_y=0,n_z=1} \equiv (001)$ kan skrives på formen ovenfor, og bestem l, m, $R_{l n_r}(r)$ og n_r for *denne* tilstanden.

b. ♠Vis at tilstandene

$$\psi_{n_x=1,n_y=0,n_z=0} \equiv (100) \qquad \text{og} \qquad \psi_{n_x=0,n_y=1,n_z=0} \equiv (010)$$

har samme l-kvantetall som tilstanden $\psi_{n_x=0,n_y=0,n_z=1} \equiv (001)$, og at de er lineærkombinasjoner av to tilstander av typen $\psi_{l n_r m}$. ♠Invertér disse lineærkombinasjonene. [Hint: Se på de to lineærkombinasjonene $\mp[(100) \pm i(010)]/\sqrt{2}$.]

c. ♠Finn antall tilstander av typen $\psi_{n_x n_y n_z} \equiv (n_x n_y n_z)$ for $N = 2$, dvs degenerasjonsgraden for dette nivået.

Også disse tilstandene kan lineærkombineres til tilstander av typen $\psi_{l n_r m}$. Én slik lineærkombinasjon er

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[(101) - i(011)].$$

♠Finn l- og m-verdiene ved innsetting fra formel-arket, og bestem også radialkvantetallet n_r, for denne tilstanden. ♠Hvor mange slike uavhengige lineærkombinasjoner har vi for denne l-verdien?

En annen lineærkombinasjon av $N = 2$-tilstander er

$$\frac{1}{\sqrt{3}}[(200) + (020) + (002)].$$

♠Vis at denne har $l = 0$, og bestem n_r.

I realiteten kan sammenhengen mellom N, l og n_r for denne oscillatoren skrives på formen

$$N = al + bn_r,$$

der tallfaktorene a og b er konstanter. ♠Finn a og b ved hjelp av resultatene i denne oppgaven.

Oppgave 4 (Teller 25%)

♠ Forklar kort hva som ligger i Born-Oppenheimer-tilnærmelsen. (3.5%)
♠ Forklar kort hva som ligger i Hartree-tilnærmelsen. (3.5%)
♠ Forklar kort hva som er forskjellen mellom Hartree- og Hartree-Fock-tilnærmelsen. (3.5%)
♠ Forklar kort hva som ligger i Pauliprinsippet. (3.5%)
♠ Forklar kort hva som er forskjellen mellom gauss-orbitaler og slater-orbitaler. (3.5%)
♠ En kjemisk likevekt beskrives av energifunksjonen

$$E(x) = E_0 \left(x^4 - x^2\right),$$

der E_0 er en konstant (energi), mens x er en dimensjonsløs reaksjonskoordinat (som her kan være både positiv og negativ). Bestem likevektens stasjonære punkter. Avgjør hva som er energiminima og hva som er transisjonstilstander (ved å betrakte d^2E/dx^2). Skisser $E(x)/E_0$ for $-1/\sqrt{2} < x < 1/\sqrt{2}$. (7.5%)

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

Uendelig dyp potensialbrønn (boks), $V(x) = 0$ for $0 < x < L$, uendelig ellers

Normerte energiegenfunksjoner og tilhørende energier er

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x, \quad k_n = \frac{\pi n}{L}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}; \quad n = 1, 2, \cdots; \quad \int_0^L \psi_n^*(x)\psi_k(x)dx = \delta_{nk}.$$

Endimensjonal harmonisk oscillator, $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

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

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

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

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

Laplace-operatoren og dreieimpulsoperatorer i kulekoordinater

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\widehat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2};$$

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right), \qquad \widehat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi};$$

$$\widehat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\,\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \qquad \widehat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\,\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right);$$

$$[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{L}_z] = 0, \qquad [\widehat{L}_x, \widehat{L}_y] = i\hbar\widehat{L}_z, \quad \text{osv.}$$

Hydrogenlignende system

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Z\hbar^2}{m_e a_0 r}; \qquad E_n = -\tfrac{1}{2}(\alpha Z)^2\frac{mc^2}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\frac{m}{m_e}\frac{Z^2}{(l+1+n_r)^2}.$$

[$m = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ er den reduserte massen; n_r er antall nullpunkter i radialfunksjonen, for $0 < r < \infty$.]

Tidsutvikling av forventningsverdier

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

Vinkelfunksjoner

$$\left\{\begin{array}{c}\widehat{\mathbf{L}}^2\\ \widehat{L}_z\end{array}\right\}Y_{lm}=\left\{\begin{array}{l}\hbar^2 l(l+1)\\ \hbar m\end{array}\right\}Y_{lm}\ ,\quad l=0,1,2,...;\qquad \int_0^{2\pi}d\phi\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)Y^*_{l'm'}Y_{lm}=\delta_{l'l}\delta_{m'm};$$

$$Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}},\qquad Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}\equiv Y_{p_z},\qquad Y_{1\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi};$$

$$Y_{p_x}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r}=\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1,-1}-Y_{11}),\qquad Y_{p_y}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{y}{r}=\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11}+Y_{1,-1});$$

$$Y_{20}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1),\qquad Y_{2,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi},\qquad Y_{2,\pm2}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}.$$

$$\widehat{\mathcal{P}}Y_{lm}=(-1)^l Y_{lm}.$$

Noen konstanter

$$\hbar=1.054\,571\,68(18)\cdot10^{-34}\text{ Js}=6.582\,119\,15(56)\cdot10^{-16}\text{eVs};$$

$$1\text{ eV}=1.602\,176\,53(14)\cdot10^{-19}\text{ J}\ \approx 0.03676\text{ hartree}\ \approx 23.07\text{ kcal/mol};$$

$$a_0=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}\approx 0.529177\cdot10^{-10}\text{ m}\qquad\text{(Bohr-radien)};$$

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

$$\tfrac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2=\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\approx 13.6057\text{ eV}\qquad\text{(Rydberg-energien)};$$

$$k_B=1.381\cdot10^{-23}\text{ J/K}=8.625\cdot10^{-5}\text{ eV/K}\qquad\text{(Boltzmanns konstant)};$$

$$u=1.661\cdot10^{-27}\text{ kg}\qquad\text{(atomær masse-enhet)};$$

$$1\text{ atm}=1.013\cdot10^5\text{ N/m}^2;\qquad 1\text{ Å}=10^{-10}\text{ m}.$$

Noen formler

$$x=r\sin\theta\cos\phi,\quad y=r\sin\theta\sin\phi,\quad z=r\cos\theta;$$

$$\sin(a+b)=\sin a\,\cos b+\cos a\,\sin b;\qquad \sin 2a=2\sin a\,\cos a;$$

$$\cos(a+b)=\cos a\,\cos b-\sin a\,\sin b;\qquad \cos(2a)=\cos^2 a-\sin^2 a=2\cos^2 a-1=1-2\sin^2 a.$$

$$\sin a=(e^{ia}-e^{-ia})/2i\ ,\qquad \cos a=(e^{ia}+e^{-ia})/2;$$

$$\tan y=\frac{1}{\cot y}=\tan(y+n\pi),\quad n=0,\pm1,\cdots;$$

$$\sinh y=\tfrac{1}{2}(e^y-e^{-y});\qquad \cosh y=\tfrac{1}{2}(e^y+e^{-y});\qquad \tanh y=\frac{1}{\coth y}=\frac{\sinh y}{\cosh y};$$

$$\cosh^2 y-\sinh^2 y=1;\qquad \frac{d}{dy}\sinh y=\cosh y;\qquad \frac{d}{dy}\cosh y=\sinh y.$$

Uskarphetsrelasjonen

$$\Delta x\cdot\Delta p_x\geq\tfrac{1}{2}\hbar.$$