Fakultet for Naturvitskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Kontinuasjonseksamen TFY4215/FY1006 Innføring i kvantefysikk sommar 2015

Faglærar: Professor Jens O. Andersen
Institutt for Fysikk, NTNU
Kontakt på eksamen: Jens O. Andersen
Telefon: 73 59 31 31 eller 46 47 87 47

Mandag 10. August 2015
kl. 09.00-13.00

Tillatne hjelpemiddel:
Godkjend kalkulator
Rottmann: Matematisk Formelsamling
Rottmann: Matematische Formelsammlung
Barnett & Cronin: Mathematical Formulae
Angell og Lian: Fysiske størrelser og enheter: navn og symboler

Oppgåvesettet er på fire sider. Les oppgåvene nøye. Spør dersom noko er uklart. Lykke til.

Oppgåve 1

I dei fleste tilfella i kvantemekanikk kan ein ikkje løyse Schrödingerlikninga eksakt. Ein kan da løyse problemet numerisk. Eit alternativ er å bruke *variasjonsmetoden*. Ein gjettar på ei rimeleg form på bølgjefunksjonen ψ. Denne bølgjefunksjonen ψ kallar ein da ein *prøvebølgjefunksjon*. ψ inneheld ein eller fleire parametre som ein kan variere. Ideen er å minimalisere energien til ψ som funksjon av desse parametrane. Ein kan da vise at energien $E_{\rm min}$ som ein får med denne prosedyra alltid er høgare enn den verkelege grunntilstandsenergien til systemet. Egil Hylleraas (1898-1965) var ein norsk fysikar som i tida rett før 1930 brukte variasjonsmetoden til å rekne ut $E_{\rm min}$ for Helium. Han brukte svært mange parametre i prøvebølgjefunksjonen sin, men han hadde ikkje PC eller matlab tilgjengeleg. Han fekk eit resultat som berre var eit par prosent høgare enn den eksperimentelle verdien for grunntilstanden i Helium. Hylleraas var ein framifrå fysikar som gav store bidrag til å forstå to-elektron atom. Vi skal gå i Hylleraas' fotefar og bruke variasjonsmetoden på eit enkelt problem.

Vi har ein partikkel med masse m som bevegar seg i eit tredimensjonal kulesymmetrisk potensial $V(r)$ som er gjeve ved

$$V(r) = ar\ , \qquad r \geq 0\ , \tag{1}$$

der a er ein positiv konstant. Bølgjefunksjonane til dette systemet kan då skrivast som $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$, der $Y_{lm}(\theta,\phi)$ er ein kulefunksjon og $R(r)$ er ein radialfunksjon. Vi skal nå bruke ein prøvebølgjefunksjon $\psi_0(r,\theta,\phi)$ der radialfunksjonen er på forma

$$R(r) = Ae^{-\alpha r}\ , \tag{2}$$

der α er ein reell parameter. Vi kan då skrive

$$\psi_0(r,\theta,\phi) = Ae^{-\alpha r}Y_{lm}(\theta,\phi)\ . \tag{3}$$

a) Kva er dimensjonen til konstanten a og parameteren α?

b) Skisser radialfunksjonen for $\alpha = -1$, $\alpha = 0$ og $\alpha = 1$. Kva verdiar av α gjev ein fysisk akseptabel prøvebølgjefunksjon?

c) Vis at normeringskonstanten A (opp til ein fasefaktor) er

$$A = 2\alpha^{\frac{3}{2}}\ . \tag{4}$$

d) Sidan parameteren α inngår i $\psi_0(r,\theta,\phi)$, er middelverdien til ein observabel F i tilstanden $\psi_0(r,\theta,\phi)$ ein funksjon av α. Vi skriv dette som $\langle F\rangle(\alpha)$. Vis at midlere potensiell energi $\langle V\rangle(\alpha)$ er gjeven ved

$$\langle V\rangle(\alpha) = \frac{3a}{2\alpha}\ . \tag{5}$$

e) Vis at midlere kinetisk energi $\langle K\rangle(\alpha)$ er gjeven ved

$$\langle K\rangle(\alpha) = B\alpha^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m}2\alpha^2\ , \tag{6}$$

og finn konstanten B.

f) Finn verdien α_0 som minimaliserer energien i tilstanden ψ_0 og finn den tilhøyrande energien E_0. Kva verdi av l minimaliserer energien E_0? Gje ei fysisk forklaring på dette resultatatet.

Oppgåve 2

a) Bølgjefunksjonen $f(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi}$ er ein normert eigentilstand til operatorane $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{L}_z$. Finn dei tilhøyrande eigenverdiane.

b) Dersom vi roterer denne bølgjefunksjonen ein vinkel $\frac{\pi}{2}$ rundt y-aksen, får vi ein ny bølgjefunksjon $g(\theta, \phi)$. Finn $g(\theta, \phi)$.

c) Vis at $g(\theta, \phi)$ er ein eigentilstand til $\hat{L}_x$ og finn den tilhøyrande eigenverdien. Forklar resultatet.

d) Kva er dei moglege måleverdiane viss ein målar z-komponenten av dreieimpulsen i tilstanden $g(\theta, \phi)$? Er L_z skarp i tilstanden $g(\theta, \phi)$?

Oppgåve 3

Her kjem litt blanda drops.

a) Vis at eigenverdiane til ein hermitesk operator $\hat{F}$ er reelle. La $\mathcal{H}$ vere Hilbertrommet av kvadratisk integrerbare funksjonar på x-aksen. Er operatoren $\hat{F} = \frac{d^2}{dx^2}$ hermitesk på dette vektorrommet? Grunngjev svaret.

b) Vis at bundne tilstandar $\psi(x)$ i ein romleg dimensjon er ikkje-degenererte.

c) Forklar forskjellen mellom klassisk mekanikk og kvantemekanikk. Du treng ikkje skrive ei lærebok, men nemne eit par viktige skilnader.

d) Figur 1 viser eit potensialsprang der potensialet er gjeve ved

$$V(x) = \begin{cases} 0\,, & x < 0 \\ V_0\,, & x \geq 0 \end{cases}\,, \tag{7}$$

der $V_0 > 0$ er ein konstant.

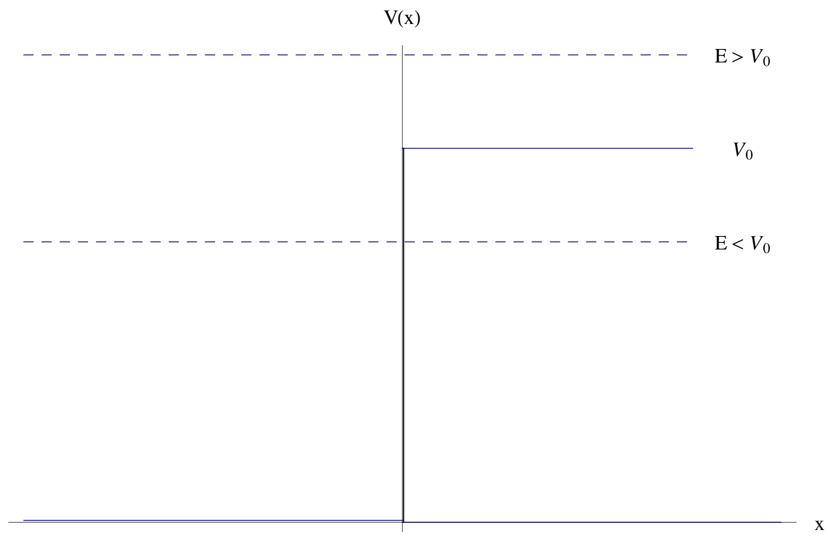

Figure 1: Potensialet $V(x)$ i oppgåve 3d.

Vi sender ein partikkel med masse m og energi E inn frå venstre mot potensialspranget. I det eine tilfellet er $E > V_0$ og i det andre tilfellet er $E < V_0$. Kva skjer med partikkelen i dei to tilfella viss vi bruker klassisk fysikk? Og viss vi bruker kvantemekanikk?

e) Forklar potensrekkjemetoden for differensiallikningar.

Nyttige formlar:

Rotasjon vinkel $\frac{\pi}{2}$ rundt y-aksen:

$$x \rightarrow -z \tag{8}$$

$$y \rightarrow y \tag{9}$$

$$z \rightarrow x \tag{10}$$

$$\tag{11}$$

Dreieimpulsoperatorar

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right] , \tag{12}$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left[\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right] , \tag{13}$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} , \tag{14}$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] . \tag{15}$$