

Løsningsforslag
Eksamen 6. august 2012
FY1006/TFY4215 Innføring i kvantefysikk

Oppgave 1

a. ♠ Siden $\psi = C$ (en konstant $\neq 0$) for $x > b_1$, følger det fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at

$$\psi'' = 0 = \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} - E \right] C, \quad \text{dvs } E = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}, \quad \text{q.e.d.}$$

♠ For $0 < x < b_1$ har vi at

$$\psi'' = \frac{2m_e}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi = -\frac{1}{a_0^2}\psi \equiv -k^2\psi, \quad \text{med } k = \frac{1}{a_0}.$$

Den generelle løsningen er

$$\psi = A \sin kx + B \cos kx.$$

Da $\psi(0) = 0$ (fordi $\psi = 0$ for $x < 0$) må vi her sette $B = 0$, slik at

$$\psi = A \sin \frac{x}{a_0} \quad \text{for } 0 < x < b_1, \quad \text{q.e.d.}$$

♠ Kontinuiteten av den logaritmisk deriverte i punktet $x = b_1$ gir kravet

$$\frac{1}{a_0} \cot \frac{b_1}{a_0} = 0 \quad \implies \quad \frac{b_1}{a_0} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$$

Som illustrert i figuren i oppgaven, oppnås ett nullpunkt når fasebeløpet b_1/a_0 er lik $3\pi/2$:

$$\frac{b_1}{a_0} = \frac{3\pi}{2}.$$

b. ♠ Grunntilstandsenergien E_1 må være lavere enn $\hbar^2/(2m_e a_0^2)$ (som var energien til 1. eksiterte tilstand). Derfor blir området utenfor brønnen klassisk forbudt. Den generelle løsningen av

$$\psi_1'' = \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} - E_1 \right] \psi_1 \equiv \kappa_1^2 \psi_1$$

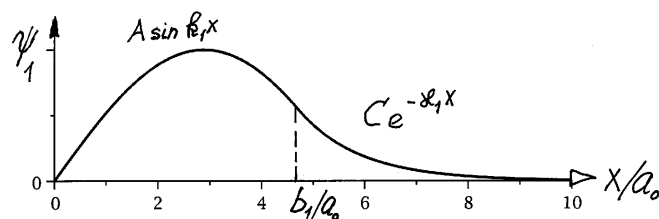
for $x > b_1$ er da

$$\psi_1 = C e^{-\kappa_1 x} + D e^{\kappa_1 x}, \quad \text{med } \kappa_1 = \sqrt{1/a_0^2 - 2m_e E_1/\hbar^2} \quad (x > b_1),$$

hvor D må settes lik null for å unngå divergens. Inne i brønnen blir (som i pkt. **a**) løsningen sinusformet:

$$\psi_1 = A \sin k_1 x, \quad \text{med } k_1 = \sqrt{2m_e E_1/\hbar^2} \quad (0 < x < b_1).$$

Skissen blir da slik:



c. ♠ Ut fra skissen ser vi uten videre at fasebeløpet $k_1 b_1$ må være større enn $\pi/2$, som da er en nedre skranke, og mindre enn π , som derfor er en øvre skranke. [Kommentar: Ved å “forlenge” sinusen til skjæring med x -aksen kan vi kanskje også fornemme at $k_1 b_1$ ligger noe nærmere π enn $\pi/2$.]

♠ Kontinuitet av den logaritmisk deriverte i $x = b_1$ gir betingelsen $k_1 \cot k_1 b_1 = -\kappa_1$, som vi (med et fortegnsskifte på begge sider) kan skrive f.eks på formen

$$-k_1 b_1 \tan(\frac{1}{2}\pi - k_1 b_1) = \underline{k_1 b_1 \tan(k_1 b_1 - \frac{1}{2}\pi)} = \kappa_1 b_1 = \sqrt{(b_1/a_0)^2 - (k_1 b_1)^2}.$$

Fra pkt. **a** har vi at $b_1/a_0 = 3\pi/2$. Løsningen av denne ligningen kan finnes numerisk, f.eks ved å prøve seg fram med kalkulatoren i området mellom de to skrankene. [Kommentar: Forholdet mellom grunntilstandsenergien og brønndybden blir $(k_1 b_1/(b_1/a_0))^2 = (k_1 b_1/(3\pi/2))^2$.]

♠ Funksjonen ψ i pkt. **a** har ett nullpunkt, og må derfor som nevnt være første eksiterte tilstand. Fordi $\psi = C \neq 0$ for $b_1 < x < \infty$, vil normeringsintegralet ikke eksistere, og tilstanden er ikke-lokalisert. Derfor er dette en ubunden tilstand. For $b = b_1$ har denne brønnen bare én bunden tilstand, grunntilstanden.

♠ Fra figuren under pkt. **a** i oppgaveteksten skjønner vi at for $b = b_1/3 = \pi a_0/2$ vil systemet ha en energieigenfunksjon med formen

$$\psi = \begin{cases} A \sin x/a_0 & \text{for } 0 < x < b \quad (b = \pi a_0/2), \\ A & \text{for } x > b. \end{cases}$$

Denne ubundne tilstanden har energien $E = \hbar^2/(2ma_0^2)$, og er grunntilstanden. Prøver vi å finne en løsning med lavere energi, vil denne få mindre krumning i brønnumrådet. Da vil ψ'/ψ bli positiv for $x = b$, og da vil løsningen krumme utover og divergere når x går fra b mot uendelig. Ut fra dette skjønner vi at kravet for å ha minst én bunden tilstand er at

$$b > \pi a_0/2.$$

Oppgave 2

a. ♠ Integralene

$$\int_0^L \psi_n^*(x) \psi_k(x) dx = \delta_{nk} = \begin{cases} 1 & \text{for } n = k \\ 0 & \text{for } n \neq k \end{cases}$$

forteller at energieigenfunksjonene ψ_1 osv er normerte ($n = k$) og ortogonale ($n \neq k$).

♠ Fra denne ortonormaliteten har vi [med $\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$, og med koeffisientene i den oppgitte formelen]

$$\begin{aligned} \int \Psi^*(x, 0) \Psi(x, 0) dx &= \int_0^L \left(\sum_n c_n \psi_n \right)^* \left(\sum_k c_k \psi_k \right) dx = \sum_n \sum_k c_n^* c_k \delta_{nk} = \sum_n |c_n|^2 \\ &= |c_1|^2 + |c_3|^2 + |c_5|^2 = \frac{100}{126} + \frac{25}{126} + \frac{1}{126} = 1, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

♠ Da sannsynlighetstettheten $|\Psi(x, 0)|^2 \propto \sin^{10} \frac{\pi x}{L}$ er symmetrisk med hensyn på midtpunktet i boksen, er forventningsverdien av posisjonen ved $t = 0$

$$\langle x \rangle_0 = L/2.$$

♠ Kurven som er mest direkte relevant er selvsagt sannsynlighetstettheten $|\Psi(x, 0)|^2$.

♠ $(\Delta x)^2$ er det midlere kvadratiske avviket fra $\langle x \rangle$. Ut fra kurven kan vi vel da anslå at $(\Delta x)_0$ er ca $0.1 L$.

b. ♠ Begynnelsestilstanden har formen

$$\Psi(x, 0) = c_1\psi_1 + c_3\psi_3 + c_5\psi_5,$$

med $c_1 = 10/\sqrt{126}$, $c_3 = -5/\sqrt{126}$ og $c_5 = 1/\sqrt{126}$. Disse er sannsynlighetsamplitudene for å måle hhvis

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}, \quad E_3 = 9E_1 \quad \text{og} \quad E_5 = 25E_1.$$

Sannsynlighetene for disse resultatene er da hhvis

$$P_1 = |c_1|^2 = \frac{100}{126}, \quad P_3 = \frac{25}{126} \quad \text{og} \quad P_5 = \frac{1}{126}.$$

♠ Forventningsverdien av energien ved $t = 0^+$ er etter dette

$$\langle E \rangle_0 = P_1E_1 + P_3E_3 + P_5E_5 = E_1 \left(\frac{100}{126} + \frac{25}{126} \cdot 9 + \frac{1}{126} \cdot 25 \right) = \frac{350}{126}E_1 = \frac{25}{9}E_1.$$

♠ For $t > 0$ erstattes sannsynlighetsamplitudene c_1 osv med $c_1e^{-iE_1t/\hbar}$ osv, slik at sannsynlighetene og dermed forventningsverdien av energien blir de samme som umiddelbart etter prepareringen. Samme resultat følger fra formelen for tidsutvikling av forventningsverdier, som gir

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \langle [\widehat{H}, \widehat{H}] \rangle = 0; \quad \implies \quad \langle E \rangle_t = \langle E \rangle_0 = \frac{25}{9}E_1.$$

c. ♠ Da både $\psi_1(x)$, $\psi_3(x)$ og $\psi_5(x)$ er symmetriske med hensyn på midtpunktet av boksen, ser vi at også bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ har denne symmetrien, hele tiden. Den deriverte av en symmetrisk funksjon er antisymmetrisk, så $\partial\Psi(x, t)/\partial x$ er hele tiden antisymmetrisk med hensyn på midtpunktet av boksen.

Forventningsverdien av impulsen er

$$\langle p_x \rangle = \int_0^L \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial\Psi}{\partial x} dx.$$

Da Ψ hele tiden er symmetrisk med hensyn på midtpunktet av integrasjonsintervallet og den deriverte er antisymmetrisk, følger det at

$$\langle p_x \rangle_t = 0.$$

♠ Videre har vi fra resultatene ovenfor at

$$\langle p_x^2 \rangle_t = 2m \langle K \rangle_t = 2m \langle E \rangle_0 = \frac{25}{9} \frac{\hbar^2\pi^2}{L^2}.$$

Usikkerheten i impulsen er altså (konstant og) lik

$$(\Delta p_x)_t = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} = \frac{5\hbar\pi}{3L}.$$

d. ♠ Med overslaget $(\Delta x)_0 \approx 0.1 L$ fra pkt. **a** blir uskarphetsproduktet

$$(\Delta x)_0(\Delta p_x)_t \approx 0.1 L \cdot \frac{5\pi\hbar}{3L} = \frac{\pi}{6}\hbar = 0.5235\hbar,$$

som med nok så liten margin oppfyller uskarphetsrelasjonen, $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$.

♠ Ved å innføre $y = x/L$ som ny integrasjonsvariabel har vi

$$\begin{aligned} \frac{(\Delta x)_0^2}{L^2} &= \frac{1}{L^2} \langle (x - \langle x \rangle_0)^2 \rangle_0 = \langle (x/L - 1/2)^2 \rangle_0 \\ &= \int_0^1 \Psi^*(x, 0)(y - \frac{1}{2})^2 \Psi(x, 0) L dy = \frac{256}{63} \int_0^1 \sin^{10} \pi y (y - \frac{1}{2})^2 dy, \end{aligned}$$

hvor den ettersøkte faktoren er 256/63.

♠ Det eksakte uttrykket for uskarphetsproduktet for $t = 0$ blir

$$(\Delta x)_0(\Delta p_x)_t = \sqrt{0.0091859283} L \cdot \frac{5\pi\hbar}{3L} = 0.5018341\hbar,$$

som jo er svært nær den nedre grensen på $\frac{1}{2}\hbar$.

♠ Bølgefunksjonen $\Psi(x, t)$ vil bortsett fra en fasefaktor “gjenskapes” ved tidspunktene $t = \pi/\omega, 2\pi/\omega$ osv, og det samme vil da også (Δx) . Mellom disse tidspunktene vil usikkerheten blåse noe opp. Det er bare for $t = 0$ osv at bidragene til Ψ “konspirerer” for å etterligne en normalfordeling.

Oppgave 3

a. ♠ Vha formel-arket kan grunntilstanden skrives på formen

$$\begin{aligned} \psi_{n_x=0, n_y=0, n_z=0} &= \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z) = C_0^3 e^{-m\omega(x^2+y^2+z^2)/2\hbar} \\ &= C_0^3 e^{-m\omega r^2/2\hbar} = \sqrt{4\pi} C_0^3 e^{-m\omega r^2/2\hbar} \cdot Y_{00}, \end{aligned}$$

der $C_0^3 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4}$. Denne kulesymmetriske egenfunksjonen har null dreieimpuls,

$$l = m = 0,$$

og radialfunksjonen er

$$R = \sqrt{4\pi} C_0^3 e^{-m\omega r^2/2\hbar}.$$

Denne har ingen noder (for $0 < r < \infty$), så radialekvantetallet er

$$n_r = 0.$$

♠ Tilstanden $\psi_{001} \equiv (001)$ kan, med $z = r \cos \theta = r\sqrt{4\pi/3} Y_{10} = r\sqrt{4\pi/3} Y_{p_z}$ skrives på formen

$$\begin{aligned} \psi_{001} &= C_0^3 \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} e^{-m\omega(x^2+y^2+z^2)/2\hbar} z \\ &= C_0^3 \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} e^{-m\omega r^2/2\hbar} \cdot r\sqrt{4\pi/3} \cdot Y_{10} \equiv R_{l=1, n_r=0} \cdot Y_{p_z}. \end{aligned}$$

Denne har altså $l = 1$, og vi ser at uavhengigheten av ϕ gjør at $m = 0$. Igjen ser vi at radialekvantetallet er $n_r = 0$. Radialfunksjonen er

$$R_{l=1, n_r=0} = \sqrt{\frac{8\pi m\omega}{3\hbar}} C_0^3 r e^{-m\omega r^2/2\hbar}.$$

b. ♠ Analogt med omskrivingen ovenfor kan de to egentilstandene (100) og (010) skrives på formen

$$(100) = C_0^3 \sqrt{\frac{8\pi m\omega}{3\hbar}} r e^{-m\omega r^2/2\hbar} \cdot \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x}{r} \equiv R_{l=1, n_r=0} \cdot Y_{p_x}$$

og

$$(010) = C_0^3 \sqrt{\frac{8\pi m\omega}{3\hbar}} r e^{-m\omega r^2/2\hbar} \cdot \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{y}{r} \equiv R_{l=1, n_r=0} \cdot Y_{p_y}.$$

Disse er lineærkombinasjoner av Y_{11} og $Y_{1,-1}$, og har følgelig $l = 1$, i likhet med tilstanden (001). Fra formel-arket kan vi uttrykke disse som lineærkombinasjoner av tilstander av typen $\psi_{ln_r m}$, med $l = 1$, $n_r = 0$ og $m = \pm 1$:

$$(100) = R_{l=1, n_r=0} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{1,-1} - Y_{11}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{l=1, n_r=0, m=-1} - \psi_{l=1, n_r=0, m=1}),$$

$$(010) = R_{l=1, n_r=0} \cdot \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_{1,-1} + Y_{11}) = \frac{i}{\sqrt{2}} (\psi_{l=1, n_r=0, m=-1} + \psi_{l=1, n_r=0, m=1}).$$

♠ Omvendt har vi fra disse relasjonene at

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\sqrt{2}} [(100) + i(010)] &= \psi_{l=1, n_r=0, m=1} = R_{l=1, n_r=0} \cdot Y_{11}, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [(100) - i(010)] &= \psi_{l=1, n_r=0, m=-1} = R_{l=1, n_r=0} \cdot Y_{1,-1}. \end{aligned}$$

c. ♠ For $N = 2$ er de mulige kombinasjonene av n_x, n_y og n_z :

$$(200), (020), (002), (011), (101) \text{ og } (110).$$

Degenerasjonsgraden er altså lik 6 for dette nivået.

♠ Vha formel-arket har vi for den oppgitte tilstanden:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [(101) - i(011)] \propto r^2 e^{-m\omega r^2/2\hbar} \frac{xz - iyz}{r^2} = r^2 e^{-m\omega r^2/2\hbar} \sin\theta \cos\theta e^{-i\phi} \propto Y_{2,-1}.$$

Vi ser også at $n_r = 0$. Denne tilstanden er altså av typen $Y_{ln_r m}$, med

$$l = 2, \quad n_r = 0, \quad m = -1.$$

♠ Med $l = 2$ vet vi at det da må eksistere fire andre lineærkombinasjoner av $N = 2$ -tilstandene, slik at vi totalt har fem slike tilstander, med $l = 2$ og $m = 0, \pm 1, \pm 2$.

♠ Vha formel-arket finner vi (for den sjette lineærkombinasjonen) at

$$\frac{1}{\sqrt{3}} [(200) + (020) + (002)] = \frac{C_0^3}{2\sqrt{3}} \left[\frac{2m\omega}{\hbar} (x^2 + y^2 + z^2) - 3 \right] e^{-m\omega r^2/2\hbar} \propto \left[\frac{2m\omega}{\hbar} r^2 - 3 \right] e^{-m\omega r^2/2\hbar}.$$

Denne er kulesymmetrisk, slik at $l = 0$ og $m = 0$. Den har (for $0 < r < \infty$) ett nullpunkt, for $r = \sqrt{3\hbar/(2m\omega)}$, så radialkvantetallet er $n_r = 1$.

♠ Med resultatene for $N = 2$ innsatt i formelen $N = al + bn_r$ har vi at

$$2 = a \cdot 2 + b \cdot 0 \implies a = 1,$$

$$2 = a \cdot 0 + b \cdot 1 \implies b = 2.$$

Sammenhengen mellom disse kvantetallene er etter dette

$$N = l + 2n_r.$$

[Resultatene for $l = 0$ og $l = 1$ stemmer også med denne formelen.]

Oppgave 4

♠ Atomkjernene er mye tyngre enn elektronene: $M_A \gg m$. Kjernene vil da typisk bevege seg mye langsommere enn elektronene: $v_A \ll v_e$. Det vil da være en brukbar tilnærming å anta at kjernene ligger i ro når elektronenes bevegelse skal bestemmes. Born-Oppenheimer-tilnærmelsen innebærer at vi løser Schrödingerligningen med faste verdier for kjernekoordinatene \mathbf{R}_A .

♠ Hartree-metoden baserer seg på følgende ide: Beskriv mangepartikkelsystemet som et system av *uavhengige* elektroner som beveger seg i et *effektivt potensial* $V(\mathbf{r})$, der $V(\mathbf{r})$ inneholder både tiltrekningen fra kjernene og frastøtningen fra alle de andre elektronene.

♠ I Hartree-Fock-metoden sørger man for at mangepartikkeltilstanden Ψ er *antisymmetrisk* med hensyn på ombytte av koordinatene til to elektroner. Pauliprinsippet er da automatisk ivaretatt.

♠ I følge Pauliprinsippet er det maksimalt ett elektron i hver enpartikkeltilstand.

♠ Ulik form nær $r = 0$, samt at Gauss-orbitaler avtar raskere (for raskt!) mot null for store avstander.

Gauss-orbitaler:

$$\phi(\mathbf{r}) \sim e^{-\alpha r^2}$$

Slater-orbitaler:

$$\phi(\mathbf{r}) \sim e^{-\alpha r}$$

♠ Stasjonære punkter innebærer at $dE/dx = 0$. Her er $dE/dx \sim 4x^3 - 2x$, som er lik null for $x = 0$ og for $x = \pm 1/\sqrt{2}$. Den 2. deriverte er $d^2E/dx^2 \sim 12x^2 - 2$, som er negativ i $x = 0$ og positiv i $x = \pm 1/\sqrt{2}$. Følgelig er $x = 0$ en transisjonstilstand (et lokalt maksimum, sadelpunkt), mens de to andre er energiminima, med samme energiverdi $E(\pm 1/\sqrt{2}) = -0.25E_0$.

Skisse av $E(x)/E_0$:

