NTNU
Fakultet for Naturvitskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Løysingsframlegg eksamen TFY4215/FY1006 Innføring i Kvantemekanikk vår 2013

Faglærar: Professor Jens O. Andersen
Institutt for Fysikk, NTNU
Telefon: 73593131

April 29, 2015

Oppgåve 1

a) Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga er

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,\phi)\right]\psi(r,\phi) \quad = \quad E\psi(r,\phi). \tag{1}$$

der

$$\nabla^2 \quad = \quad \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \; . \tag{2}$$

Innsetting av $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$ gjev

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L_z^2}{\hbar^2 r^2}\right) + V(r,\phi)\right]\psi(r,\phi) \quad = \quad E\psi(r,\phi) \; . \tag{3}$$

$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$ kommuterer med $\hat{H}$ fordi L_z kommuterer med $\frac{\partial}{\partial r}$ (partielderiverte kommuterer) fordi L_z kommuterer med r (fordi L_z er uavhengig av r) og difor med ein vilkårleg funksjon $f(r)$.

Dersom vi krev at bølgjefunksjonen skal vere eintydig får vi

$$\psi(r,0) \;=\; \psi(r,2\pi)\;, \tag{4}$$

sidan $\phi = 0$ og $\phi = 2\pi$ er same punkt på sirkelen. (Ein kan sjølsagt velje eit vilkårleg punkt på sirkelen). Etter innsetting i (4) og forkorting med $R(r)$ gjev dette $1 = e^{2\pi i m}$. Denne likninga har løysing

$$m \;=\; \underline{\underline{0, \pm 1, \pm 2, ...}}\;. \tag{5}$$

b) Innsetting av $\psi(r,\phi) = R(r)e^{im\phi}$ i likning (1) og forkorting med $e^{im\phi}$ gjev direkte den oppgjevne likninga.

c) Dersom vi skiftar variabel $x = r\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$ får vi $\frac{d}{dr} = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\frac{d}{dx}$ etc. Ved innsetting av $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega x^2$ gjev dette

$$-\frac{1}{2}\hbar\omega\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{d}{dx} - \frac{m^2}{x^2}\right]u(x) + \frac{1}{2}\hbar\omega x^2 u(x) \;=\; Eu(x) \tag{6}$$

Vi har $R(r) = u(x) = P(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}$. Dette gjev

$$u'(x) \;=\; P'(x)e^{-\frac{1}{2}x^2} - P(x)xe^{-\frac{1}{2}x^2}\;, \tag{7}$$

$$u''(x) \;=\; P''(x)e^{-\frac{1}{2}x^2} - 2P'(x)xe^{-\frac{1}{2}x^2} + P(x)\left(x^2-1\right)e^{-\frac{1}{2}x^2}\;. \tag{8}$$

Innsetting av $u'(x)$ og $u''(x)$ og forkorting med $\frac{1}{2}\hbar\omega$ og $e^{-\frac{1}{2}x^2}$ gjev

$$P''(x) + \left(\frac{1}{x} - 2x\right)P'(x) + \left(\epsilon - 2 - \frac{m^2}{x^2}\right)P(x) \;=\; 0\;. \tag{9}$$

c) Vi bruker potensrekkjemetoden og skriv

$$P(x) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n\;. \tag{10}$$

Dette gjev

$$P'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-1}\;, \tag{11}$$

$$P''(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} = \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2}\;. \tag{12}$$

Innsetting gjev da

$$\sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-2} - 2\sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^n$$
$$+(\epsilon - 2)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n - m^2\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n-2} \;=\; 0\;. \tag{13}$$

Dette kan vi skrive som

$$\sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} + \frac{a_1}{x} + \sum_{n=2}^{\infty} a_n n x^{n-2} - 2\sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^n$$
$$+(\epsilon - 2)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n - m^2\left(\frac{a_0}{x^2} + \frac{a_1}{x}\right) - m^2 \sum_{n=2}^{\infty} a_n x^{n-2} \quad = \quad 0\ . \tag{14}$$

Dersom vi redefinerer $n \to n-2$ i det første, tredje og siste leddet, får vi etter litt opprydding

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[a_{n+2}(n+2)^2 - m^2 a_{n+2} + (\epsilon - 2n - 2)\, a_n\right] x^n$$
$$+\frac{a_1(1-m^2)}{x} - \frac{a_0 m^2}{x^2} \quad = \quad 0\ . \tag{15}$$

Koeffisienten foran kvar potens av x må vere lik null. Dette gjev rekursjonsrelasjonen

$$a_{n+2} \quad = \quad \frac{2n+2-\epsilon}{(n+2)^2 - m^2} a_n\ . \tag{16}$$

I tillegg må $a_0 = 0$ viss $m^2 \neq 0$ og $a_1 = 0$ viss $m^2 \neq 1$. Rekursjonsformelen viser at $a_{n+2}/a_n \sim 2/n$ for store n som er same oppførsel som rekkja for e^{x^2}. Det vil seie at $P(x) \sim e^{x^2}$ for store x og difor at $u(x) \sim e^{\frac{1}{2}x^2}$ for store x. $u(x)$ er såleis ikkje normerbar. Einaste vegen ut er at rekkja terminerer, det vil seie $a_{n+2} = 0$ for passe heiltal n. Dette gjev

$$\epsilon = 2n + 2\ , \tag{17}$$

eller

$$E \quad = \quad \underline{\underline{\hbar\omega(n+1)}}\ . \tag{18}$$

d) Dersom $P(x) = A$ er konstant får vi ved innsetting i (9)

$$\left(\epsilon - 2 - \frac{m^2}{x^2}\right) A \quad = \quad 0\ , \tag{19}$$

som har løysing når $\epsilon = 2$ og $m^2 = 0$.

Dersom $P(x) = Bx$ får vi ved innsetting og litt opprydding

$$\frac{1}{x}\left(1 - m^2\right) B + x\left(\epsilon - 4\right) B \quad = \quad 0\ , \tag{20}$$

som har løysing $\underline{\underline{\epsilon = 4}}$ og $m^2 = 1$, det vil seie $\underline{\underline{m = \pm 1}}$.

e) Energien til den isotrope todimensjonale oscillatoren er

$$E = \hbar\omega(n_x + n_y + 1) \ , \tag{21}$$

der $n_x = 0, 1, 2...$ og $n_y = 0, 1, 2....$ Grunntilstanden er for $n_x = n_y = 0$ og $E = \hbar\omega$ som tilsvarer $\epsilon = 2$.

Middelverdien $\langle r^2 \rangle$ kan skrivast som

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty \int_0^{2\pi} r^2 |\psi_0|^2 r \, dr \, d\phi}{\int_0^\infty \int_0^{2\pi} |\psi_0|^2 r \, dr \, d\phi} \ , \tag{22}$$

der nemnaren er normeringsintegralet av $\psi_0(r, \phi)$. Etter innsetting av $\psi_0(r, \phi)$ gjev vinkelintegralet 2π i tellar og nemnar. Ny variabel $x = r\sqrt{\mu\omega/\hbar}$ gjev da

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= \frac{\hbar}{\mu\omega} \frac{\int_0^\infty x^3 e^{-x^2} \, dx}{\int_0^\infty x e^{-x^2} \, dx} \\ &= \frac{\hbar}{\mu\omega} \frac{\int_0^\infty y e^{-y} \, dx}{\int_0^\infty e^{-y} \, dx} \\ &= \underline{\underline{\frac{\hbar}{\mu\omega}}} \ , \end{aligned}$$

der vi andre linje har skifta variabel, $y = x^2$. Dette gjev

$$\begin{aligned} \langle V(r) \rangle &= \frac{1}{2} \mu\omega^2 \langle r^2 \rangle \\ &= \underline{\underline{\frac{1}{2} \hbar\omega}} \ . \end{aligned} \tag{23}$$

Vi har $\langle H \rangle = \langle E_k \rangle + \langle V(r) \rangle$ og $E = \langle H \rangle$. Dette gjev

$$\langle E_k \rangle = E - \langle V(r) \rangle \ . \tag{24}$$

Sidan $E = (\frac{1}{2}\hbar\omega)\epsilon = \hbar\omega$ for grunntilstanden får vi

$$\langle E_k \rangle = \underline{\underline{\frac{1}{2} \hbar\omega}} \ . \tag{25}$$

Energien E er da i middel likt fordelt mellom potensiell og kinetisk energi. Venderadien er gjeve

$$E - V(r_{\text{vende}}) = 0 \ . \tag{26}$$

Med $E = \frac{1}{2}\hbar\omega\epsilon = 2\hbar\omega$ får vi

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2 r_{\text{vende}}^2 \quad = \quad 2\hbar\omega \ , \tag{27}$$

som har løysing

$$r_{\text{vende}} \quad = \quad \underline{\underline{2\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}}} \ . \tag{28}$$

Oppgåve 2

a) På grunn av faktoren $e^{-\alpha x}$ går $\psi(x) \to 0$ når $x \to +\infty$ og $\psi(x)$ er difor lokalisert. $\psi(x)$ beskriv da ein bunden tilstand.

Normeringsintegralet er

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty |\psi(x)|^2 &= |A|^2 \int_0^\infty x^2 e^{-2\alpha x}\, dx \\
&= \frac{|A|^2}{8\alpha^3} \int_0^\infty y^2 e^{-y}\, dy \\
&= \frac{|A|^2}{4\alpha^3} \\
&\stackrel{!}{=} 1 \ .
\end{aligned} \tag{29}$$

Dersom ein veljer A reell får vi $A = 2\alpha^{\frac{3}{2}}$ og den normerte bølgjefunksjonen blir

$$\psi(x) \quad = \quad \underline{\underline{2\alpha^{\frac{3}{2}} x e^{-\alpha x}}} \ . \tag{30}$$

b) Middelverdien til den potensielle energien er

$$\begin{aligned}
\langle V(x) \rangle &= 4F\alpha^3 \int_0^\infty x^3 e^{-2\alpha x} dx \\
&= \frac{F}{4\alpha} \int_0^\infty y^3 e^{-y}\, dy \\
&= \underline{\underline{\frac{3F}{2\alpha}}} \ .
\end{aligned} \tag{31}$$

c) Middelverdien til den kinetiske energien er

$$\begin{aligned}
\langle E_k \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x)\, dx \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left[\frac{d}{dx} \psi(x) \right]^2 \, dx
\end{aligned} \tag{32}$$

etter delvis integrasjon. Innsetting av $\psi(x)$ gjev

$$\begin{aligned}\langle E_k \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} 4\alpha^3 \int_0^\infty [1-\alpha x]^2 e^{-2\alpha x}\, dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} 2\alpha^2 \int_0^\infty \left(1-\frac{y}{2}\right)^2 e^{-y}\, dy \\ &= \underline{\underline{\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2}}\,.\end{aligned}$$

d) Den totale energien til systemet kan vi da skrive som

$$\begin{aligned}E &= E_k + E_p \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 + \frac{3F}{2\alpha}\,. \end{aligned} \tag{33}$$

Verdien på α som minimaliserer E, α_{min}, finn ein ved å løyse $\frac{dE}{d\alpha} = 0$. Dette gjev

$$\frac{\hbar^2}{m}\alpha_{\text{min}} - \frac{3F}{2\alpha_{\text{min}}^2} = 0\,, \tag{34}$$

eller

$$\alpha_{\text{min}} = \left(\frac{3mF}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\,. \tag{35}$$

Innsett i uttrykket for E får vi da

$$E_{\text{min}} = \underline{\underline{\frac{3}{4}6^{\frac{2}{3}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{3}} F^{\frac{2}{3}}}}\,. \tag{36}$$

der prefaktoren er $\frac{3}{4}6^{\frac{2}{3}} \approx 2.48$. Feilen i grunntilstandsenergien er omlag 6 prosent. Ikkje dårleg. Merk: $\frac{d^2E}{d\alpha^2} = \frac{\hbar^2}{m} + \frac{3F}{\alpha^3} > 0$ for alle $\alpha > 0$ og vi har såleis eit minimum og ikkje eit maksimum.

E_k er gjeve integralet ved $(\frac{d}{dx}\psi)^2$ og blir mindre jo flatare $\psi(x)$ er ($\psi(x) =$ konstant minimerer E_k). Den potensielle energien E_p blir mindre desto meir bølgjefunksjonen er konsentret rundt $x = 0$ (som er minimum til $V(x)$). Verdien på α som minimaliserer E, α_{min}, er da eit kompromiss mellom desse to ledda.

Oppgåve 3

a) Funksjonen r kommuterer opplagt med funksjonen $V(r)$ og også med $\frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}$ fordi $\mathbf{L}$ er uavhengig av $\frac{\partial}{\partial r}$. Vi treng difor berre å rekne ut $[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}, r]$. Vi får da

$$\begin{aligned}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}, r\right]\psi &= \frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\psi) - r\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi - 2\frac{\partial}{\partial r}\psi \\ &= 2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\psi\ ,\end{aligned}$$

der ψ er ein vilkårleg glatt funksjon. Altså er

$$[\hat{H}, r] = \underline{\underline{-\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)}}\ . \tag{37}$$

b) Fouriertranformen i tre dimensjonar er

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int \psi(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\, d^3r\ . \tag{38}$$

Ved innsetting gjev dette

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}(2\pi\hbar a_0)^{\frac{3}{2}}}\int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}e^{-r/a_0}\, d^3r\ . \tag{39}$$

Sidan ψ er uavhengig av vinklane kan vi bruke hintet som er gjeve i oppgåva. Vinkelintegralet blir då

$$\begin{aligned}\int e^{-ipr\cos\theta/\hbar}d\Omega &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} e^{-ipr\cos\theta/\hbar}\sin\theta d\theta \\ &= 2\pi\hbar\left[\frac{e^{-ipr\cos\theta/\hbar}}{ipr}\right]_0^{\pi} \\ &= \frac{2\pi\hbar}{ipr}\left[e^{ipr/\hbar} - e^{-ipr/\hbar}\right]\ .\end{aligned} \tag{40}$$

Innsetting av dette i radialintegralet gjev

$$\begin{aligned}\Phi(p) &= \frac{2\sqrt{\pi}\hbar}{ip}\frac{1}{(2\pi a_0\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int_0^{\infty} re^{-r/a_0}\left[e^{ipr/\hbar} - e^{-ipr/\hbar}\right] dr \\ &= \underline{\underline{\frac{1}{\pi}\left(\frac{2a_0}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{(1+a_0^2p^2/\hbar^2)^2}}}\end{aligned} \tag{41}$$

Vi noterer oss at $\Phi(p)$ er kulesymmetrisk i impulsrommet akkurat som $\psi(r,\theta,\phi)$ er kulesymmetrisk i koordinatrommet. $|\Phi(p)|^2$ gjev impulsfordelinga i gruntilstanden.

c) Klassisk mekanikk er deterministisk. I prinsipp kan vi løyse Newtons bevegelseslikningar dersom vi kjenner kreftene på systemet og initialkrava. I kvantemekanikken gjev ψ som er løysinga av Schrödingerlikninga all informasjon om systemet. Denne informasjonen er av statistisk natur. For eksempel vil $|\psi(x)|^2$ gje sannsynlegheitsfordelinga for posisjonen til ein partikkel på x-aksen. I tillegg vil to observable som ikkje er kompatible (der dei tilhøyrande operatorane ikkje kommuterer) ikkje vere skarpe samtidig. Det vil seie at systemet ikkje kan vere i ein eigentilstand for begge observable samtidig. Eksempel er posisjonen x og impulsen p. Usikkerheita i slike observable er gjevne ved uskarpheitsrelasjonar.

d) Dersom vi bruker *klassisk fysikk* vil partikkelen sprette tilbake viss $E < V_0$ (100%refleksjon). Dersom $E > V_0$ vil partikkelen beveges seg mot høgre med redusert hastighet (100% transmisjon) *Kvantemekanisk* vil refleksjonskoeffisienten, det vil seie sannsynlegheiten for at partikkelen blir reflektert vere lik 1 når $E < V_0$. Dette er klassisk oppførsel. Når $E > V_0$ er refleksjonskoeffisienten ein avtagande funksjon av E, men er positiv. Dette er altså ikkje-klassisk oppførsel. Sjå figur 1.

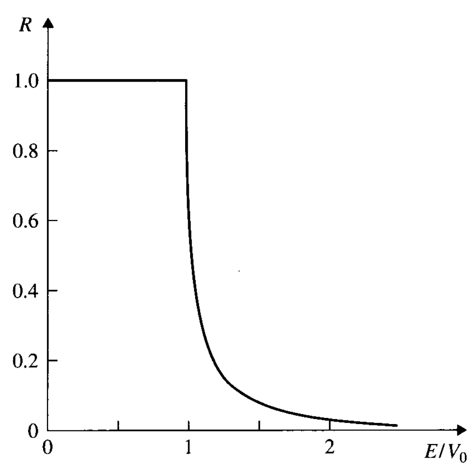

Figure 1: Refleksjonskoeffisient for eit potensialsprang som funksjon av E/V_0.