Fakultet for Naturvitskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Fasit TFY4215/FY1006 Innføring i kvantefysikk Vår 2015

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

Mandag 27. mai 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

Oppgåve 1

a) For ein symmetrisk bølgjefunksjon har vi $\psi(x) = \psi(-x)$. I området $-a < x < 0$ er den generelle løysinga difor gjeve ved

$$\psi(x) = \underline{\underline{-A \sin kx + B \cos kx}} \ . \tag{1}$$

b) Randkravet $\psi(a) = 0$ gjev $A \sin ka + B \cos ka = 0$ og difor $\tan ka = -\frac{B}{A}$. Vidare har vi

$$\psi'(x) = \begin{cases} -Ak \cos kx - Bk \sin kx & -a < x < 0 \\ Ak \cos kx - Bk \sin kx & 0 < x < a \end{cases} , \tag{2}$$

Dette gjev $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = 2Ak$ og difor $2Ak = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}B$. Dersom vi definerer $\underline{\underline{\beta = \frac{\hbar^2}{m\alpha}}}$ kan vi skrive $\frac{B}{A} = \beta k$. Dette gjev tilslutt

$$\underline{\underline{\tan ka = -\beta(ka)}} \tag{3}$$

Den grafiske løysinga for eit par verdiar av β er plotta i figur. 1

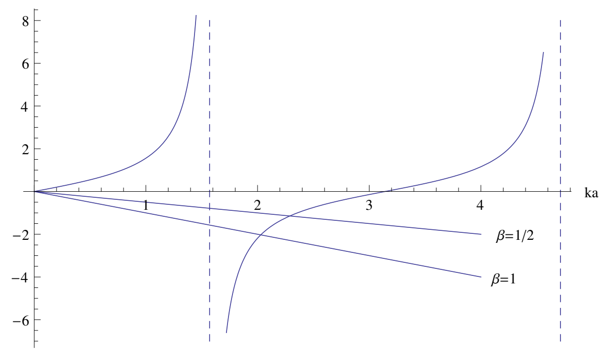

Figure 1: $\tan ka$ som funksjon av ka og den rette linja $-\beta ka$ for $\beta = \frac{1}{2}$ og $\beta = 1$.

c) I grensa $\beta \to 0$ ($\alpha \to \infty$) får ein

$$\tan ka \quad = \quad 0\,, \tag{4}$$

eller $\sin ka = 0$. Dette gjev

$$\underline{\underline{k = \frac{n\pi}{a}}} \qquad 1, 2, 3... \,. \tag{5}$$

Merknad: Ein kan og ha $n = -1, 2, 3...$, men dette gjev dei same løysingane som over opp til eit forteikn. Dette tilsvarer at ein vel fasen lik $-1 = e^{i\pi}$.

Bølgjetalet for ein partikkel i boks med breidde $2a$ er $k = \frac{n\pi}{2a}$ ($n = 1, 2, 3...$). Effekten av eit uendeleg sterkt δ-funksjonspotensial er såleis a halvere breidda til boksen: Når δ-funksjonspotensialet er uendeleg sterkt, blir $B = \beta = 0$ (for $k \neq 0$) og difor $\psi(0) = 0$. Systemet er nå to boksar med breidde a og ein skillevegg i $x = 0$ (med randkravet $\psi(0) = 0$).

I grensa $\beta \to \infty$ ($\alpha \to 0$) får vi

$$\tan ka \quad = \quad -\infty\,, \tag{6}$$

eller $\cos ka = 0$. Dette gjev

$$\begin{aligned} k &= \frac{(n+\frac{1}{2})\pi}{a} \qquad n = 0, 1, 2... \\ &= \underline{\underline{\frac{(2n+1)\pi}{2a}}}\,, \end{aligned} \tag{7}$$

Dette tilsvarer energinivåa til dei symmetriske tilstandane til ein partikkel i boks med breidde $L = 2a$. Dette er naturleg sidan $\beta = \infty$ tilsvarer $\alpha = 0$ slik at vi i denne grensa har ein partikkel i boks.

d) Dei antisymmetriske bølgjefunksjonane er på forma

$$\psi(x) = \begin{cases} A\sin kx - B\cos kx & -a < x < 0 \\ A\sin kx + B\cos kx & 0 < x < a \end{cases}, \tag{8}$$

e) Kontinuitet til $\psi(x)$ i $x = 0$ gjev $B = 0$. Randkravet $\psi(a) = 0$ gjev $A\sin ka = 0$ og difor

$$\begin{aligned} k &= \frac{n\pi}{a} \qquad n = 1, 2... \\ &= \underline{\underline{\frac{m\pi}{2a}}} \qquad m = 2, 4, 6.... \end{aligned} \tag{9}$$

Dette er dei kjende energinivåa til dei antisymmetriske tilstandane til ein partikkel i boks med breidde $L = 2a$, uavhengig av styrken på δ-funksjonspotensialet.

f) Vi skal nå sjå på spesialtilfellet $E = 0$. Schrodingerliknkinga for $x \neq 0$ er då

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_0''(x) = 0 . \tag{10}$$

Den symmetriske løysinga er

$$\psi_0(x) = A|x| + B , \qquad x \neq 0 , \tag{11}$$

der A og B er konstantar. Randkravet $\psi_0(a) = 0$ gjev $B = -Aa$. Vidare har vi $\psi_0'(0^+) - \psi_0'(0^-) = 2A$ og difor $A = \frac{m\alpha}{\hbar^2}B$. Konstanten A kansellerer og vi får $a\frac{m\alpha}{\hbar^2} = -1$ eller

$$\alpha = \underline{\underline{-\frac{\hbar^2}{ma}}} . \tag{12}$$

Dette svarer til $\beta = -1$. Bølgjefunksjonen er nå på forma $\psi_0(x) = A(|x| - a)$. Normeringsintegralet er

$$|A|^2 \int_{-a}^{a} (|x| - a)^2 \, dx = \frac{2}{3}|A|^2 a^3 . \tag{13}$$

Dersom vi vel A reell, får vi tilslutt den normerte bølgjefunksjonen

$$\underline{\underline{\psi_0(x) = \sqrt{\frac{3}{2a^3}}(|x| - a)}} . \tag{14}$$

g) Vi veit at grunntilstanden er symmetrisk og kan skrivast på forma

$$\psi(x) = \begin{cases} -A\sinh Kx + B\cosh Kx & -a < x < 0 , \\ A\sinh Kx + B\cosh Kx & 0 < x < a , \end{cases} \tag{15}$$

der $K = \sqrt{-\frac{2mE_0}{\hbar^2}}$.

Merknad: Det er mange som har brukt lineærkombinasjonar av e^{Kx} og e^{-Kx}. Det er sjølvsagt like godt viss koeffisentane er slik at $\psi(x)$ er symmetrisk.

h) Randkravet $\psi(a) = 0$ gjev $A \sinh Ka + B \cosh Ka = 0$ og difor $\tanh Ka = -\frac{B}{A}$. Vidare har vi

$$\psi'(x) = \begin{cases} -AK \cosh Kx + BK \sinh Kx & -a < x < 0 \\ AK \cosh Kx + BK \sinh Kx & 0 < x < a \end{cases} , \tag{16}$$

Dette gjev $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = 2AK$ og difor $2AK = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} B$. Altså er $\frac{B}{A} = \frac{\hbar^2 K}{m\alpha}$. Kombinerer ein dette med randkravet ser vi at

$$\begin{aligned} \tanh Ka &= -\frac{\hbar^2 K}{m\alpha} \\ &= \underline{\underline{-\beta Ka}} , \end{aligned} \tag{17}$$

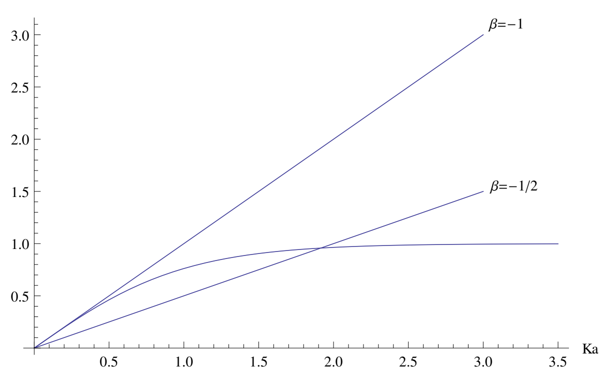

Figure 2: $\tanh Ka$ som funksjon av Ka og den rette linja βKa for $\beta = -\frac{1}{2}$ og $\beta = -1$.

i) Den lågaste eksiterte tilstand er antisymmetrisk. Anta at det finst ein antisymmetrisk tilstand med $E < 0$. Denne tilstanden kan skrivast som

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sinh Kx - B \cosh Kx & -a < x < 0 \\ A \sinh Kx + B \cosh Kx & 0 < x < a \end{cases} , \tag{18}$$

der $K = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Sidan $\psi(x)$ er kontinuerleg i $x = 0$ er $B = 0$ og ein får

$$\psi(x) = A \sinh Kx . \tag{19}$$

Randkravet $\psi(a) = 0$ gjev $A \sinh Ka = 0$ eller $A = 0$ som impliserer $\psi(x) \equiv 0$. Dette viser at det ikkje finst antisymmetriske tilstandar med $E < 0$. Difor finst det ingen eksiterte tilstandar med $E < 0$.

Oppgåve 2

a) Ved innsetting får ein

$$\hat{L}_z f(\phi,\theta) = 0 \ , \qquad (20)$$
$$\hat{\mathbf{L}}^2 f(\phi,\theta) = 2\hbar^2 f(\phi,\theta) \ , \qquad (21)$$

Dersom vi bruker eigenverdilikningane $\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar Y_{lm}(\theta,\phi)$ og $\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\phi)$, finn vi eigenverdiane $\underline{\underline{m=0}}$ og $\underline{\underline{l=1}}$.

b) Ved rotasjon ein vinkel $\frac{\pi}{2}$ rundt y-aksen har vi transformasjonane

$$x \to -z \ , \qquad (22)$$
$$y \to y \ , \qquad (23)$$
$$z \to x \ . \qquad (24)$$

Dette impliserer

$$\begin{aligned} \cos\theta &= \frac{z}{r} \\ &\to \frac{x}{r} \\ &= \cos\phi\sin\theta \ . \end{aligned} \qquad (25)$$

Dette gjev

$$g(\theta,\phi) = \underline{\underline{\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\phi\sin\theta}} \ . \qquad (26)$$

c) Ved innsetting får ein at $g(\theta,\phi)$ er ein eigentilstand til $\hat{L}_x$ med eigenverdi 0. Altså er $\underline{\underline{m=0}}$. Sidan vi har rotert ein eigentilstand til $\hat{L}_z$ med eigenverdi $m=0$ rundt ein vinkel $\frac{\pi}{2}$ rundt y-aksen får ein eigentilstand til $\hat{L}_x$ med eigenverdi $m=0$.

d) Vi kan skrive

$$\begin{aligned} g(\phi,\theta) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\phi\sin\theta \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{1}{2}\sin\theta\left[e^{i\phi}+e^{-i\phi}\right] \ . \end{aligned} \qquad (27)$$

Det første leddet er ein eigenfunksjon til $\hat{L}_z$ med eigenverdi $\hbar$. Det vil seie $m=1$. Det andre leddet er ein eigenfunksjon til $\hat{L}_z$ med eigenverdi $-\hbar$. Det vil seie $m=-1$. Moglege måleresultat er såleis $\underline{\underline{m=\pm 1}}$ og $g(\theta,\phi)$ er ikkje ein eigenfunksjon til $\hat{L}_z$. L_z er difor **ikkje skarp** i denne tilstanden.

Merknad: Det er mange som argumenterer med at L_z ikkje er skarp i tilstanden $g(\phi, \theta)$ sidan dette er ein eigentilstand til $\hat{L}_x$ og $\hat{L}_x$ og $\hat{L}_z$ ikkje kommuterer. Dette er ikkje rett. Tilstanden $f(\phi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ er ein eigentilstand til $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ og $\hat{\mathbf{L}}^2$. Teoremet seier at viss to operatorar kommuterer eksisterer det eit **felles fullstendig sett av eigenfunksjonar** og vice versa. To operatorar som ikkje kommuterer kan godt ha ein eller fleire simultane eigenfunksjonar, men altså ikkje eit felles fullstendig sett av slike.

Merknad: Sidan koeffisienten foran dei to ledda har same absolutverdi, er sannsynlegheiten for å måle $m = 1$ og $m = -1$ like store, nemleg $\frac{1}{2}$. Middelverdien er difor $\langle \hat{L}_z \rangle = 0$.

Oppgåve 3

a) Energien til den klassiske oscillatoren i ein dimensjon er er

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \ . \tag{28}$$

Grunntilstanden har $E = 0$, det vil seie at partikkelen ligg i ro i $x = 0$. Kvantemekanisk er Hamiltonoperatoren til oscillatoren

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \ . \tag{29}$$

Grunntilstandsenergien for ein kvantemekanisk oscillator er

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \ , \tag{30}$$

og grunntilstanden til ein kvantemekanisk oscillator er gjeven ved bølgjefunksjonen

$$\psi(x) = \underline{\underline{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2\hbar}m\omega x^2}}} \ . \tag{31}$$

Merknad: I oppgåva var dimensjonen til oscillatoren ikkje spesifisert, slik at her må ein godta svar med $d = 1, 2, 3$.

b) Viss F og G er kompatible har dei tilhøyrande operatorane $\hat{F}$ og $\hat{G}$ eit *felles sett av eigenfunksjonar* som er ekvivalent med at dei kommuterer, $[\hat{F}, \hat{G}] = 0$.

c) Operatoren $\hat{A} = -\frac{d}{dx}$ er **ikkje hermitesk**. Vi veit at operatoren $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$ er hermitesk. Då er $\hat{B} = -i\frac{d}{dx}$ og hermitesk. Dersom vi bruker reknereglane for adjungering finn vi $\hat{A}^\dagger = (iB)^\dagger = i^*\hat{B}^\dagger = -i\hat{B} = -\hat{A}$.

Merknad: Dei fleste har vist dette direkte ved delvis integrasjon som sjølvsagt er fullgodt. Vi har

$$\begin{aligned}\int \psi_1(x)^* A^\dagger \psi_2(x) d\tau &= \int (A\psi_1)^* \psi_2(x) d\tau \\ &= \int \left(-\frac{d\psi_1}{dx}\right)^* \psi_2(x) d\tau \\ &= -\psi_1(x)^*\psi_2(x)\Big|_{\infty}^{\infty} + \int \psi_1(x)^* \frac{d\psi_2}{dx} d\tau \\ &= -\int \psi_1(x)^* A\psi_2(x) d\tau\end{aligned}$$

der vi har brukt at $\psi_{1,2}(x)$ er null på randa sidan dei er normerbare. Altså er $A^\dagger = -A$ og ikkje hermitesk.

d) Ein bunden tilstand er lokalisert og bølgjefunksjonen ψ er normerbar, det vil seie kvadratisk integrerbar. Dette tyder at $\psi \to 0$ når $x \to \pm\infty$ (ein dimensjon) eller $r \to \infty$ (to eller tre dimensjonar) raskt nok slik at normeringsintegralet er konvergent.

e) I potensrekkjemetoden skriv vi løysinga til ei differensiallikning som ei rekkje

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^{n+s} , \tag{32}$$

der s er eit heiltal. Ein finn uttrykke for dei ulike deriverte av $f(x)$ ved å derivere kvart ledd i rekkja. Til dømes er

$$f'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n (n+s) x^{n+s-1} , \tag{33}$$

Ein sett nå inn for dei ulike ledda i differensiallikninga og samlar ledd med same potens x^k for alle k. Koeffisienten foran må då vere identisk lik null og dette gjev ein *rekursjonsformel* der a_n er uttrykt ved hjelp av lågare koeffisientar, vanlegvis a_{n-1} og a_{n-2}. Ofte må ein krevje at rekkja bryt av, det vil seie at $a_k = 0$ for $k \geq n$ for passe n (bundne tilstandar). Døme på bruk av potensrekkjemetoden er harmonisk oscillator, Legendres differensiallikning og radiallikninga for hydrogenatomet.