FY1006/TFY4215 Innføring i kvantefysikk Eksamen 2. juni 2016

LØSNINGSFORSLAG

I. FLERVALGSOPPGAVER (Teller 2.5% $\times$ 30 = 75%)

1) B: Siden $\widehat{p}\exp(ikx) = (\hbar/i)d\exp(ikx)/dx = \hbar k\exp(ikx)$, er $p = \hbar k$.

2) E: $\widehat{H}\exp(ikx) = (-\hbar^2/2m)d^2\exp(ikx)/dx^2 = \hbar^2k^2/2m$.

3) A: Skarpt definert impuls betyr at $\Delta p = 0$.

4) B: Med skarpt definert impuls p blir x fullstendig ubestemt.

5) D: Fra formelarket har vi

$$j = \text{Re}\left[\Psi^*\left(\frac{\hbar}{mi}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi\right].$$

Tidsavhengige faktorer faller bort, og vi står igjen med

$$j = \text{Re}\left[\exp(-ikx)\frac{\hbar}{mi}(ik)\exp(ikx)\right] = \hbar k/m.$$

6) E: I det klassisk tillatte området er $E \geq V$, og i grunntilstanden er $E = \hbar\omega/2$. Dermed: $\hbar\omega/2 \geq m\omega^2x^2/2$, som gir $|x| \leq \sqrt{\hbar/m\omega}$.

7) B: Absoluttkvadratet av koeffisientene c_n gir sannsynligheten for at en måling av energien skal resultere i verdien $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Dermed er

$$\langle E\rangle = (1/2)\cdot\hbar\omega/2 + (1/4)\cdot 3\hbar\omega/2 + (1/6)\cdot 5\hbar\omega/2 + (1/12)\cdot 7\hbar\omega/2 = 32\hbar\omega/24 = 4\hbar\omega/3.$$

8) A: Målingen påvirker den kvantemekaniske tilstanden: Partikkelen havner i egentilstanden med energi $3\hbar\omega/2$, og etter målingen vet vi med sikkerhet at en ny måling vil gi samme verdi.

9) A: I $\rho(x,t)$ får vi to tidsuavhengige ledd, fra absoluttkvadratet av hver av de to stasjonære tilstandene for seg. "Kryssleddene" blir til sammen proporsjonale med faktoren $\sin((E_3 - E_2)t/\hbar)$. Her er

$$E_3 - E_2 = \frac{9\hbar^2\pi^2}{2mL^2} - \frac{4\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2},$$

slik at

$$T = 2\pi/\omega = 2\pi\hbar/(E_3 - E_2) = 4mL^2/5\pi\hbar = 8mL^2/5h.$$

10) D: Kvantetallene må være en "variant" av (123) for at kvadratsummen skal bli 14. Det er 6 mulige kombinasjoner: (123), (231), (312), (132), (213) og (321).

11) A: Operatoren for y-komponenten av impulsen inneholder derivert med hensyn på y, som kommuterer med x.

12) **E**: Dreieimpulsens y-komponent er $L_y = zp_x - xp_z$, dvs $\widehat{L}_y = z\widehat{p}_x - x\widehat{p}_z$. Her kommuterer det siste leddet med x, men ikke det første:

$$[x, z\widehat{p}_x] = xz(\hbar/i)\partial/\partial x - (\hbar/i)\partial/\partial x(xz) = -\hbar z/i = i\hbar z.$$

13) **D**: Hamiltonoperatoren inneholder ∇^2, og her vil de tre (kartesiske) leddene i $\widehat{H}$ påvirke ψ helt likt: trekke ut en faktor k^2 og skifte fortegn. Dermed blir $\widehat{H}\psi = (\hbar^2k^2/2m)\psi$, som viser at ψ er en egenfunksjon til $\widehat{H}$. De ulike impulsoperatorene inneholder *en* partiell derivasjon og vil gjøre om sinus til cosinus, og omvendt. Dermed kan ψ ikke være egenfunksjon til noen av disse.

14) **B**: Tilstand A har to nullpunkter, tilstand C har ett nullpunkt, og tilstand B har ingen nullpunkter. Dermed B, C, A fra lavest til høyest energi. (Vi ser at B og C har omtrent overlappende sannsynlighetstetthet i hele området. Disse tilstandene har derfor nesten lik energi, men bare nesten.)

15) **C**: Tilstand A er konstant i det midterste barriereområdet, dvs at $\psi_A'' = 0$ (og $\psi_A' = 0$), og dermed gir Schrödingerligningen at $E_A \simeq V_0$.

16) **B**: Fra figuren ser vi at det er plass til ca 5 kvarte bølgelengder på 1 nm der $V = 0$, mens bølgelengden er ca 1 nm der $V = V_0$. Partikkelens kinetiske energi er proporsjonal med k^2, dvs omvendt proporsjonal med λ^2. Dermed har vi $E/(E - V_0) = 1/(4/5)^2 = 25/16$, dvs $E = 25E/16 - 25V_0/16$, dvs $9E/16 = 25V_0/16$, dvs $E = 25V_0/9 \simeq 2.8V_0$.

17) **B**: Tilstanden $\psi(x)$ har tre nullpunkter og er (i et endimensjonalt potensial som her) følgelig 3. eksiterte tilstand, dvs 3 tilstander med lavere energi.

18) **D**: Siden $\psi(x)$ er (praktisk talt) lineær i området $L < x < 2L$, er $\psi''(x) = 0$ her, og energien er $E = V_0$. Vi ser videre at det går 7 kvarte bølgelengder på intervallet $0 < x < L$ for denne tilstanden. Dermed har vi $V_0 = E = \hbar^2k^2/2m = \hbar^2 \cdot 4\pi^2/2m\lambda^2$, som med $L = 7\lambda/4$, dvs $\lambda = 4L/7$, dvs $\lambda^2 = 16L^2/49$, gir resultatet $V_0 = 49\hbar^2\pi^2/8mL^2$.

19) **E**: Klassisk venderadius r_1 når $E_1 = V(r_1) = -e^2/4\pi\varepsilon_0 r_1$. Fra formelarket har vi $E_1 = -\hbar^2/2ma_0^2$, slik at

$$r_1 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{2ma_0^2}{\hbar^2} = \frac{\hbar^2}{ma_0} \cdot \frac{2ma_0^2}{\hbar^2} = 2a_0.$$

20) **A**: Siden $\psi(r) \sim \exp(-r/a_0)$, er $\rho = |\psi|^2$ maksimal i origo, $r = 0$.

21) **C**: Radialtettheten går som $r^2 \exp(-2r/a_0)$. Vi finner ut hvor denne er maksimal ved å derivere mhp r og sette lik null:

$$\frac{d}{dr} r^2 \exp(-2r/a_0) = 2r \exp(-2r/a_0) - (2r^2/a_0) \exp(-2r/a_0) = 0,$$

som gir $r = a_0$.

22) **D**: Vi får et bidrag $(n + 1/2)\hbar\omega$ til energien for hver av de tre dimensjonene. Total energi blir dermed $E = (N + 3/2)\hbar\omega$, med $N = n_x + n_y + n_z = 0, 1, 2, 3, \ldots$. Med 3 like kvantetall (f eks (111)) er det kun 1 mulighet. Med 2 like kvantetall (f eks (110)) er det 3 muligheter. Med 3 ulike kvantetall (f eks (210)) er det 6 muligheter. Vi skal finne ut hvor mange ulike tilstander vi har for $N \leq 4$. Vi teller opp:
$N = 0$: (000).

$N = 1$: (100), (010), (001).
$N = 2$: (110), (101), (011), (200), (020), (002).
$N = 3$: (111), (210), (201), (120), (102), (012), (021), (300), (030), (003).
$N = 4$: (211), (121), (112), (310), (301), (130), (103), (031), (013), (220), (202), (022),(400), (040), (004).
I alt $1 + 3 + 6 + 10 + 15 = 35$. (Generelt, for en isotrop tredimensjonal harmonisk oscillator er degenerasjonsgraden $g_N = (N + 1)(N + 2)/2$.)

23) **A**: Vi bruker formelarket og finner at

$$\rho_{110} \sim x^2 y^2 \exp(-m\omega r^2/\hbar) = x^2 \exp(-m\omega x^2/\hbar) y^2 \exp(-m\omega y^2/\hbar) \exp(-m\omega z^2/\hbar).$$

Da er det strengt tatt ikke nødvendig å regne: Vi ser umiddelbart at vi må velge $z = 0$, slik at B) og C) er utelukket. Vi innser videre at x og y må opptre likt når det gjelder maksimalpunktene, siden ρ_{110} avhenger på samme måte av x og y. Dermed er D) og E) også utelukket, og vi står igjen med alternativ A). Med regning: Sett den deriverte lik null. I to eller tre dimensjoner: Sett gradienten lik null.

24) **E**: Lavest mulig total energi med 10 elektroner har vi når 2 elektroner okkuperer tilstanden (000) (et med spinn opp, et med spinn ned), 2 elektroner okkuperer hver av de tre tilstandene (100), (010) og (001), mens de 2 resterende elektronene okkuperer tilstander som tilsvarer $N = 2$. Total energi: $2 \cdot 3/2 + 6 \cdot 5/2 + 2 \cdot 7/2 = 3 + 15 + 7 = 25$ dvs $25\hbar\omega$.

25) **B**: Her har vi en flate med areal 10^{-12} m^2, så med den oppgitte antallstettheten 10^{16} pr m^2, betyr det at vi har 10^4 elektroner. Vi trenger da 5000 romlige tilstander (to elektroner i hver romlig tilstand, et med spinn opp og et med spinn ned). Lager vi oss et koordinatsystem med n_x og n_y langs de to aksene, innser vi at hver mulige kombinasjon av n_x og n_y, dvs hver enkelt romlige tilstand, opptar et areal lik 1 i den positive kvadranten ($n_x > 0$ og $n_y > 0$). Det betyr at vi med 10000 elektroner vil okkupere samtlige tilstander på kvartsirkelen med radius $n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$, dvs med areal $\pi n^2/4$. Med areal 1 pr romlig tilstand har vi dermed $\pi n^2/4 = 5000$. Denne verdien av n^2 tilsvarer nettopp den maksimale energien som vi er på jakt etter her: $E_F = n^2\pi^2\hbar^2/2m_eL^2$, som med $n^2 = 20000/\pi$ blir $E_F = 20000\pi \cdot (1.05 \cdot 10^{-34})^2/2 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-12} = 3.8 \cdot 10^{-22}\,\mathrm{J} = 2.4\,\mathrm{meV}$.
(Hvis en innser at maksimalverdien av $n_x^2 + n_y^2$ må være av størrelsesorden antall elektroner, eller antall romlige tilstander, finner en raskt ut at E_F må bli noen meV.)

26) **B**: Egenverdiene til $\widehat{\boldsymbol{L}}^2$ er $l(l+1)\hbar^2$, $l = 0, 1, 2, \ldots$. Jodmolekylets treghetsmoment er

$$I = 2m_{\mathrm{I}}(d/2)^2 = 253.8 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \cdot (0.135 \cdot 10^{-9})^2 = 7.68 \cdot 10^{-45}\,\mathrm{kg\,m^2}.$$

Da blir $\Delta K = K_1 - K_0 = 2\hbar^2/2I = 1.44 \cdot 10^{-24}$ J $= 9.0$ μeV.

27) **C**: Nær bunnen (ved $x = d$) er Morse–potensialet tilnærmet harmonisk:

$$V_M(x) \simeq V_0\,(1 - 1 + \kappa(x - d))^2 = \kappa^2 V_0 (x - d)^2.$$

Setter vi dette lik $(1/2)m\omega^2(x - d)^2$ (der m er molekylets reduserte masse, $m = m_{\mathrm{I}}/2$), har vi sammenhengen

$$\hbar\omega = \hbar\kappa\sqrt{2V_0/m} = 1.05\cdot 10^{-34}\cdot 17.1\cdot 10^9\cdot\sqrt{2 \cdot 1.7 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}/63.45 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27}} = 4.12\cdot 10^{-21}\,\mathrm{J} = 26\,\mathrm{meV}.$$

28) **A**: De tre stasjonære punktene (dvs to energiminima samt transisjonstilstanden) finner vi ved å derivere $E(x)$ og sette lik null: $dE/dx = E_0(2x^3 - 3x^2 - 2x) = 0$, der den mest åpenbare løsningen er

$x = 0$. Den andrederiverte i $x = 0$ er -2, som betyr negativ krumning, og dermed er dette reaksjonens transisjonstilstand.

29) **B**: De to andre løsningene er gitt ved $2x^2 - 3x - 2 = 0$, dvs $x = -1/2$ og $x = 2$. Vi har $E''(x) = E_0(6x^2 - 6x - 2)$, og innsetting av disse to løsningene gir begge positiv verdi for E'', med andre ord er dette energiminima. Vi finner at $E(-1/2) = -3E_0/32 = -0.3$ eV og $E(2) = -4E_0 = -12.8$ eV. Siden starttilstanden er oppgitt å være et lokalt energiminimum, må dette tilsvare $x = -1/2$, med energi -0.3 eV. Siden transisjonstilstanden har energi $E = 0$, blir aktiveringsenergien 0.3 eV.

30) **E**: Frigitt energi pr reaksjon er $-0.3 - (-12.8) = 12.5$ eV.

II. ENDIMENSJONAL SPREDNING (Teller 25%)

a) To ganger derivasjon mhp x gir i hvert tilfelle en faktor $(ik)^2 = -k^2$ og samme funksjon som vi startet med. Det viser at den gitte bølgefunksjonen er en egenfunksjon til $\widehat{H}$, med energiegenverdi $E(k) = \hbar^2 k^2/2m$.

b) (i): Hvis $E > V_0$, er også barriereområdet et klassisk tillatt område, med trigonometriske funksjoner som generell løsning: $\psi_b(x) = a \sin qx + b \cos qx$, med $q = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$.
(ii): Hvis $E < V_0$, er barriereområdet et klassisk forbudt område, med eksponentialfunksjoner (evt hyperbolske funksjoner) som generell løsning: $\psi_b(x) = a \exp(\kappa x) + b \exp(-\kappa x)$, med $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$.

c) Vi bruker uttrykket for j i formelarket og finner $j_i = \hbar k/m$, $j_r = -|r|^2 \hbar k/m$ og $j_t = |t|^2 \hbar k/m$. Basert på kravet om sannsynlighetsbevarelse tolkes dermed $R = |j_r/j_i| = |r|^2$ og $T = |j_t/j_i| = |t|^2$ som sannsynligheten for henholdsvis refleksjon og transmisjon, slik at $R + T = 1$.

d) Kravet om kontinuerlig ψ og $d\psi/dx$ overalt, og spesifikt i $x = 0$ og $x = L$, gir oss fire ligninger, for fastleggelse av r, t, a og b.

e)

- Med $E = V_0$ er $q = 0$ og $\sin qL = 0$, men slik at $\sin^2(qL)/q^2 = (qL)^2/q^2 = L^2$. Dermed er $T(V_0) = (1 + k^2L^2/4)^{-1}$.
- $T = 1$ når $\sin qL = 0$ (med $q > 0$), dvs $qL = n\pi$ og $\lambda = 2\pi/q = 2\pi L/n\pi = 2L/n$. Dvs, et helt antall halve bølgelengder på barriereområdets utstrekning L. Se forøvrig oppgave g).
- Hvis $E \gg V_0$, er $q \simeq k$, og $T \simeq 1$. Det samme som med klassisk fysikk!

f)

- Med $E \ll V_0$ er $k \ll \kappa$, slik at faktoren $(k/\kappa + \kappa/k)^2 \simeq \kappa^2/k^2 \gg 1$. Videre, med $\kappa L \gg 1$, er $\sinh^2 \kappa L \simeq \exp(2\kappa L)/4$. Dermed er $T \simeq (16k^2/\kappa^2) \exp(-2\kappa L)$, og inntrengningsdybden blir $\xi = 1/2\kappa$.
- I grensen $L \to 0$, $V_0 \to \infty$ med endelig $\beta = V_0 L$, blir $\kappa \gg k$, slik at $(k/\kappa + \kappa/k)^2 \simeq \kappa^2/k^2$, som i forrige kulepunkt. Men her vil $\kappa L \to 0$, siden $\kappa \sim \sqrt{V_0}$, med den følge at $\sinh^2 \kappa L \simeq \kappa^2 L^2$. Dermed er $T \simeq (1 + \kappa^4 L^2/4k^2)^{-1}$. Her er $\kappa^4 L^2 = (2mV_0L/\hbar^2)^2 = (2m\beta/\hbar^2)^2$, og med $k^2 = 2mE/\hbar^2$ får vi endelig at $T = (1 + E_\delta/E)^{-1}$, med $E_\delta = m\beta^2/2\hbar^2$.

g)

- De fire bølgelengdene som tilsvarer de oppgitte energiene er 103, 52, 35 og 27 Å.

- Dette er litt mer enn det som tilsvarer stående bølger inne mellom de to barrierene, på brønnbredden 45 Å, hhv 90, 45, 30 og 22.5 Å, dvs med 1/2, 2/2, 3/2 og 4/2 bølgelengder på brønnens bredde.
  Diskusjon: Både her og i 2. kulepunkt i oppgave e) ser det ut til at elektronet interfererer med seg selv på en slik måte at det oppstår destruktiv interferens i bakoverretning og konstruktiv interferens i foroverretning. Det er rimelig at dette inntreffer når partikkelens bølgelengde tillater stående bølger, over enkeltbarrierens utstrekning L i oppgave e) og over brønnens utstrekning på 45 Å i denne oppgaven. Med slike bølgelengder kan vi se for oss bølger som reflekteres gjentatte ganger ved endene av nevnte områder før de til slutt slipper ut den ene eller andre veien, og da med en fase som gir utslokning bakover ($R = 0$) og forsterkning framover ($T = 1$). Vi kan betrakte dette som en endimensjonal variant av retningsavhengig interferens når en bølge passerer en dobbeltspalte eller et diffraksjonsgitter.