

Løsningsforslag
Eksamen 27. mai 2011
FY1006/TFY4215 Innføring i kvantefysikk

Oppgave 1

a. ♠ For en energieigenfunksjon med energi $E = V_1$ følger det fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at den i området $x < 0$ må oppfylle ligningen

$$\psi_E'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi_E = \frac{2m}{\hbar^2}[V_1 - V_1]\psi_E = 0.$$

Den generelle løsningen i dette området er da $\psi_E = Ax + B$. Her må A settes lik null for å unngå at ψ_E divergerer i grensen $x \rightarrow -\infty$. Altså må egenfunksjonen ha formen

$$\psi_E = B \quad (\text{en konstant}) \quad \text{for} \quad x < 0.$$

♠ Dette betyr at ψ_E ikke er normerbar i vanlig forstand (dvs ikke er kvadratisk integrerbar og ikke lokalisert). En slik energieigenfunksjon må derfor beskrive en ubunden tilstand.

♠ For $x > b$ er $V(x) = 2V_1$, og vi ser at ψ_E i dette området må oppfylle ligningen

$$\psi_E'' = \frac{2m}{\hbar^2}[2V_1 - V_1]\psi_E = \frac{1}{a_0^2}\psi_E \equiv \kappa^2\psi_E, \quad \text{med} \quad \kappa = \frac{1}{a_0}.$$

Den generelle løsningen i dette området er da $C \exp(-\kappa x) + D \exp(\kappa x)$. Her må D settes lik null for å unngå at ψ_E divergerer i grensen $x \rightarrow \infty$. Vi har altså at

$$\psi_E = C e^{-\kappa x} \quad \text{for} \quad x > b, \quad \text{q.e.d.}$$

b. ♠ For $0 < x < b$ er $V(x) = 0$, og med $E = V_1$ har vi da at

$$\psi_E'' = \frac{2m}{\hbar^2}[-V_1]\psi_E = -\frac{1}{a_0^2}\psi_E \equiv -k^2\psi_E,$$

med den generelle løsningen

$$\psi_E = D \cos kx + F \sin kx, \quad (\text{hvor } k = \frac{1}{a_0} = \kappa),$$

slik at

$$\psi_E' = -kD \sin kx + kF \cos kx.$$

Kontinuiteten av ψ og ψ' i $x = 0$ gir

$$D = B \quad \text{og} \quad kF = 0,$$

slik at

$$\psi_E = B \cos kx \quad \text{for } 0 < x < b, \quad \text{q.e.d.}$$

♠ I dette området er da $\psi_E' = -kB \sin kx$. Kontinuiteten av ψ'/ψ i $x = b$ gir da

$$\frac{-kB \sin kb}{B \cos kb} = -\kappa.$$

For at løsningen ψ_E med energien $E = V_1$ skal eksistere må altså

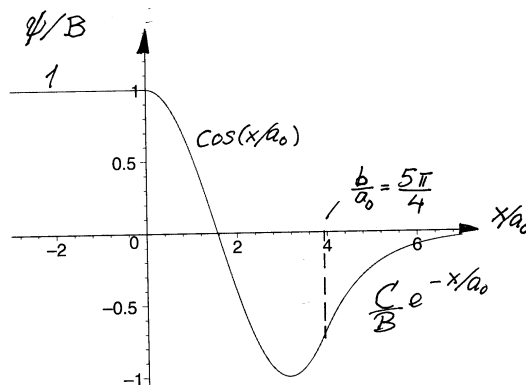
$$\tan kb = \frac{\kappa}{k} = 1 \quad (\text{idet } k = \kappa = 1/a_0),$$

dvs kb må ha en av verdiene $kb = b/a_0 = \pi/4, \pi/4 + \pi, \pi/4 + 2\pi, \dots$. Denne spesielle typen energieigenfunksjon eksisterer altså bare når brønnvidden har en av de diskrete verdiene

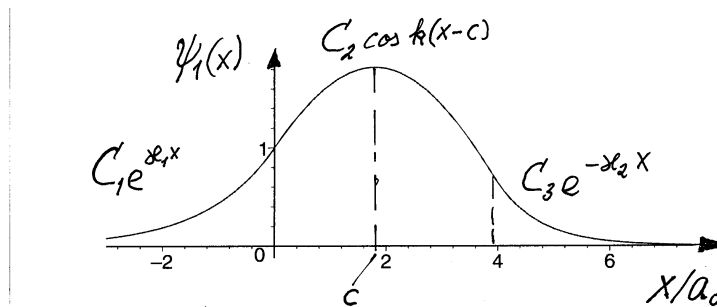
$$b = (1/4 + n)\pi a_0, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \text{ q.e.d.}$$

c. ♠ For $b = \pi a_0/4$ er tilstanden med energien $E = V_1$ grunntilstanden for dette systemet.¹ Når b gjøres større, vil grunntilstandsenergien minke, slik at grunntilstanden blir en bunden tilstand. (Jf kvantevillskap.)

♠ For egenfunksjonen med $E = V_1$ er bølgetallet som vi så $k = 1/a_0$. Med $kb = 5\pi/4$ vil da funksjonen $\cos kx$ i området $0 < x < b$ dekke $5/8$ periode. Denne egenfunksjonen får da ett nullpunkt, og ser slik ut (når vi ser bort fra normeringen):



♠ Grunntilstanden vil ha vesentlig lavere energi, og er fri for nullpunkter. For $x < 0$ er den av typen $C_1 \exp(\kappa_1 x)$. For $0 < x < b$ er den sinusformet, og kan skrives f.eks på formen $C_2 \cos[k(x - c)]$. For $x > b$ er den av typen $C_3 \exp(-\kappa_2 x)$. Prinsippskissen blir som følger:



♠ Ved å kreve kontinuitet av ψ'/ψ for $x = 0$ og $x = b$ finner en betingelsene

$$\kappa_1 = k \tan kc \quad \text{og} \quad -k \tan[k(b - c)] = -\kappa_2,$$

der

$$\kappa_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_1 - E_1)}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_1} \quad \text{og} \quad \kappa_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(2V_1 - E_1)}.$$

De to ligningene ovenfor kan da brukes til å finne de to ukjente, som er c og grunntilstandsenergien E_1 .

¹Dette kan en overbevise seg om ved å se litt på hvordan en tilstand med lavere energi måtte krumme i de tre x -områdene.

Oppgave 2

a. ♠ Egenfunksjonene er ganske enkelt de sfæriske harmoniske:

$$\widehat{H}Y_{lm} = \frac{\widehat{\mathbf{L}}^2}{2I} Y_{lm} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r_0^2} Y_{lm}.$$

Med den reduserte massen

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{1}{2} m$$

blir da energiegenverdiene

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m r_0^2}; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

♠ Grunntilstanden har energien $E_0 = 0$. Første eksiterte nivå har vi for $l = 1$. Differansen mellom disse nivåene er altså

$$\begin{aligned} E_1 - E_0 &= E_1 = \frac{2\hbar^2}{m r_0^2} = \frac{2\hbar^2}{30000 m_e \cdot 16a_0^2} = \frac{1}{120000} \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \\ &= \frac{1}{120000} \cdot 13.6 \text{ eV} = 1.13 \cdot 10^{-4} \text{ eV}. \end{aligned}$$

♠ Fysisk tolkning: Absoluttkvadratet $|Y_{lm}(\theta, \phi)|^2$ av egenfunksjonene gir sannsynlighetsfordelingen for retningsvektoren

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

fra kjerne 2 til kjerne 1.

♠ I grunntilstanden er sannsynlighetstettheten $|Y_{00}|^2 = 1/4\pi$ isotropt fordelt over alle retninger. Intervallet $0 < \theta < \pi/2$ svarer til halvparten av hele vinkelrommet, så sannsynligheten for å finne θ i dette intervallet er femti prosent.

♠ En energiegentilstand har veldefinert dreieimpulskvantetall l og dermed veldefinert paritet $(-1)^l$. Sannsynlighetsfordelingen i vinkelrommet vil derfor være symmetrisk med hensyn på rom-inversjon. Det vil derfor være like stor sannsynlighet for å observere θ i intervallet $0 < \theta < \pi/2$ som i intervallet $\pi/2 < \theta < \pi$.

b. ♠ Med $x = r - r_0$ er kraften i den harmoniske tilnærmelsen $F_h = -kx$. Dette svarer til det harmoniske potensialet $V_h = \frac{1}{2} kx^2$, eventuelt pluss en konstant, som er uten fysisk betydning, og derfor droppes.

♠ Den tidsuavhengige Schrödingerligningen for relativbevegelsen (vibrasjonen) er da

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right] \psi(x) = E\psi(x),$$

der $\mu = m/2$ er den reduserte massen funnet ovenfor. Ved å sammenligne med de oppgitte formlene for den harmoniske oscillatoren finner vi da at (den klassiske vinkelfrekvensen er) $\omega = \sqrt{k/\mu} = \sqrt{2k/m}$, og at energien som skal til for å eksitere til første vibrasjonsnivå er

$$E_1 - E_0 = \hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{2k}{m}} = 6.582 \cdot 10^{-16} \text{ eVs} \sqrt{\frac{2 \cdot 10^3 \text{ N/m}}{2.733 \cdot 10^{-26} \text{ N s}^2/\text{m}}} = 0.178 \text{ eV}.$$

♠Grunntilstanden er

$$\psi_0 = C_0 \exp(-\mu\omega x^2/2\hbar); \quad C_0 = \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}.$$

Kvadratet av usikkerheten er da

$$\begin{aligned} (\Delta r)^2 &= \langle (r - r_0)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = C_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\mu\omega x^2/\hbar) dx = \frac{\hbar}{2\mu\omega} \\ &= \frac{\hbar^2}{m(\hbar\omega)}. \end{aligned}$$

Forholdet mellom usikkerheten i avstanden mellom de to kjernene og forventningsverdien av denne avstanden er altså

$$\frac{\Delta r}{r_0} = \frac{\hbar}{r_0 \sqrt{m(\hbar\omega)}} = \frac{1.055 \cdot 10^{-34}}{4 \cdot 0.529 \cdot 10^{-10} \sqrt{2.733 \cdot 10^{-26} \cdot 0.178 \cdot 1.602 \cdot 10^{-19}}} = 1.79 \cdot 10^{-2}.$$

Oppgave 3

a. ♠ Ved $t = 0$ er forventningsverdien av posisjonen

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) x \Psi(x, 0) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip_0 x/\hbar} f^*(x) x f(x) e^{ip_0 x/\hbar} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x |f(x)|^2 dx = 0, \quad \text{q.e.d.,} \end{aligned}$$

fordi integranden er antisymmetrisk.

♠ Forventningsverdien av impulsen er

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip_0 x/\hbar} f^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} [e^{ip_0 x/\hbar} f(x)] dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip_0 x/\hbar} f^*(x) \frac{\hbar}{i} e^{ip_0 x/\hbar} \left[\frac{ip_0}{\hbar} f(x) + \frac{df}{dx} \right] dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \left[p_0 f(x) + \frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right] dx = p_0 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx}_{=1} + 0 = p_0, \end{aligned}$$

idet produktet av f^* og df/dx er antisymmetrisk.

b. ♠ Ved å derivere den første av de to ligningene i Ehrenfests teorem med hensyn på t og bruke den andre ligningen finner vi at

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \frac{1}{m} \langle -\partial V / \partial x \rangle = -\omega^2 \langle x \rangle.$$

Den generelle løsningen er

$$\langle x_t \rangle = A \sin \omega t + B \cos \omega t \quad \implies \quad \langle p_x \rangle_t = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = m\omega A \cos \omega t - m\omega B \sin \omega t.$$

For $t = 0$ har vi da

$$0 = B \quad \text{og} \quad p_0 = m\omega A,$$

slik at løsningen er

$$\langle x \rangle_t = \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t \quad \text{og} \quad \langle p_x \rangle_t = p_0 \cos \omega t.$$

Oppgave 4

a. ♠ Siden den oppgitte vinkelfunksjonen

$$Y(\theta, \phi) = \frac{1}{2}\sqrt{3}Y_{11} + \frac{1}{2}Y_{1,-1}$$

er en lineærkombinasjon av Y_{11} og $Y_{1,-1}$, begge med $l = 1$, er Y en egenfunksjon til $\hat{\mathbf{L}}^2$ med egenverdi $\hbar^2 l(l+1) = 2\hbar^2$. Ifølge målepostulatet må dette da være måleresultatet.

♠ Observablene E , $\mathbf{L}^2$ og L_z kalles kompatible fordi de kan ha skarpe verdier samtidig når potensialet er kulesymmetrisk som her. Dette henger sammen med at de tre tilhørende *operatorene*, $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ kommuterer.

♠ Fra formelen ovenfor kan vi lese ut at de mulige måleresultatene for L_z i dette tilfellet er $+\hbar$ og $-\hbar$. Sannsynlighetene er absoluttkvadratene av de respektive koeffisientene, dvs

$$P_{L_z=+\hbar} = \frac{3}{4} \quad \text{og} \quad P_{L_z=-\hbar} = \frac{1}{4}.$$

b. ♠ Målingen av L_z vil ifølge målepostulatet etterlate systemet med en vinkelfunksjon som enten er Y_{11} eller $Y_{1,-1}$. Tilstanden til systemet endres altså ved målingen av L_z .

♠ Siden L_z er kompatibel med E og $\mathbf{L}^2$, vil målingen av L_z ikke endre verdiene av disse observablene. (En måte å preparere en tilstand med skarpe verdier av E , $\mathbf{L}^2$ og L_z er f.eks å måle de tre observablene i tur og orden.)

♠ Forventningsverdien av L_z i den opprinnelig preparerte tilstanden er

$$\langle L_z \rangle = P_{L_z=+\hbar} \cdot (+\hbar) + P_{L_z=-\hbar} \cdot (-\hbar) = \frac{1}{2}\hbar,$$

og da forventningsverdien av L_z^2 åpenbart er lik $\hbar^2$, blir usikkerheten i L_z i den preparerte tilstanden

$$\Delta L_z = \left(\langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2 \right)^{1/2} = \frac{1}{2}\sqrt{3}\hbar.$$

c. ♠ Fra figuren ser vi at radialfunksjonen $u(r)$ har to nullpunkter (for $0 < r < \infty$), dvs radialkvantetallet er $n_r = 2$. Følgelig er hovedkvantetallet $n = l + 1 + n_r = 1 + 1 + 2 = 4$, og energien er $E_4 = E_1/16 = -(\alpha Z)^2 m_e c^2 / 32$. Samme konklusjon kan trekkes ved å se på krumningen. I det oppgitte diagrammet ser vi at den relative krumningen til radialfunksjonen u skifter fortegn for Zr/a_0 ca lik 30. Dette viser at $n = 4$, idet figuren også viser at det ytre krysningspunktet (ytte venderadius) mellom energilinjene for energiene E_3 , E_4 og E_5 og det effektive potensialet $V_{\text{eff}}^1(r)$ opptrer ved henholdsvis $Zr/a_0 \approx 16.5, 31$ og 48 .

♠ For hovedkvantetallet $n = 4$ kan dreieimpulskvantetallet l ha verdiene 0, 1, 2 og 3. Antall verdier av det magnetiske kvantetallet m for en gitt l er $2l + 1$. Antallet lineært uavhengige romlige energieigenfunksjoner med $n = 4$ blir derfor

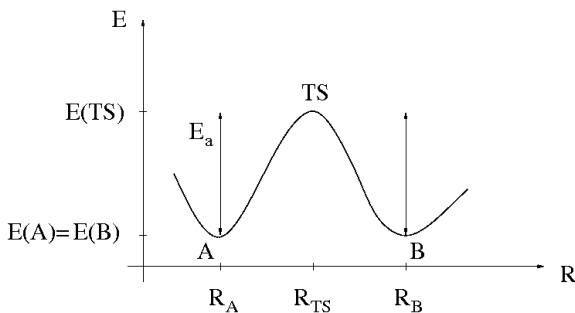
$$\sum_{l=0}^3 (2l + 1) = 1 + 3 + 5 + 7 = 16 (= n^2).$$

[For $n = 5$ er den tilsvarende summen lik 25.]

Oppgave 5

♠ s -, p - og d -orbitaler tilsvarer hhvis $l = 0$, $l = 1$ og $l = 2$. Heltallene i gaussorbitalene er da hhvis $a = b = c = 0$, $a+b+c = 1$ og $a+b+c = 2$. Pariteten er $+1$ for s og d , og -1 for p .

♠



Reaksjonens transisjonstilstand (TS) er angitt i figuren, dvs det lokale maksimum (sadelpunkt) mellom de to minima A og B. Aktivierungsenergien er $E_a = E(TS) - E(A)$, se figuren. Reaksjonens hastighet avhenger eksponentielt av forholdet mellom E_a og termisk energi, dvs $k \sim \exp(-E_a/k_B T)$, der k_B er Boltzmanns konstant.

Oppgave 6

♠ Total bindingsenergi er

$$\Delta E = E(G - C) - E(G) - E(C) = -0.0494084 \text{ au},$$

eller -1.34391 eV . Fordelt på 3 hydrogenbindinger blir dette 448 meV pr hydrogenbinding.

♠ Antall translasjonsfrihetsgrader = Antall rotasjonsfrihetsgrader = 3 for både G, C og baseparet G-C. (Ingen av systemene er lineære.) Da gjenstår 42 vibrasjonsfrihetsgrader for G, 33 for C, og 81 for baseparet G-C. (Siden totalt antall frihetsgrader er 3 ganger antall atomer for et gitt system.)

Oppgave 7

♠ Likevekt tilsvarer energiminimum, så $d = 1.1 \text{ \AA}$. Her er potensialdybden $V_0 = 30 \text{ eV}$.

♠ Det er tilstrekkelig å rekkeutvikle eksponentialfunksjonen til 1. orden i $x - d$:

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

Vi ser da, ved sammenligning med harmonisk oscillator $V_h(x) = \frac{1}{2}k(x - d)^2$ at

$$k = 2\kappa^2 V_0.$$

Vi har tallverdiene $V_0 = 30 \text{ eV}$ og $\kappa = 1.35 \text{ \AA}^{-1}$. Dermed:

$$k = 2 \cdot (1.35 \cdot 10^{10})^2 \cdot 30 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \simeq 1750 \text{ N/m}.$$

Vi har videre $d = 1.1 \text{ \AA}$ og $m = 7m_p$, og dessuten sammenhengen $\omega^2 = k/m$. Dermed:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2} \cdot 1.05 \cdot 10^{-34} \cdot \sqrt{\frac{1750}{7 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}}} \simeq 2.03 \cdot 10^{-20} \text{ J} \simeq 127 \text{ meV}.$$