NTNU
Fakultet for Naturvitskap og Teknologi
Institutt for Fysikk

Løysingsframlegg kontinuasjonseksamen TFY4215/FY1006 Innføring i Kvantemekanikk august 2013

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

August 6, 2013

Oppgåve 1

a) Hamiltonoperatoren er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right) + V(r) \tag{1}$$

der

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\,.\right) \tag{2}$$

$\mathbf{L}^2$ er uavhengig av r og kommuterer difor med $V(r)$. $\mathbf{L}^2$ er uavhengig av $\frac{\partial}{\partial r}$ og $\frac{\partial^2}{\partial^2 r}$ og kommuterer difor med dei to første ledda i $\hat{H}$. $\mathbf{L}^2$ kommuterer med seg sjøl og difor med alle ledd i $\hat{H}$.
Vi har $\underline{\underline{l = 0, 1, 2, 3, 3..}}$ og $\underline{\underline{m = -l, -l+1.., 0, ..l-1, l}}$.

b) Dette følgjer direkte ved innsetting.

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

$$-\frac{1}{2}\hbar\omega\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx} - \frac{l(l+1)}{x^2}\right]u(x) + \frac{1}{2}\hbar\omega x^2 u(x) \quad = \quad Eu(x) \tag{3}$$

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

$$\begin{aligned} u'(x) &= P'(x)e^{-\frac{1}{2}x^2} - P(x)xe^{-\frac{1}{2}x^2}\ , &(4)\\ u''(x) &= P''(x)e^{-\frac{1}{2}x^2} - 2P'(x)xe^{-\frac{1}{2}x^2} + P(x)\left(x^2-1\right)e^{-\frac{1}{2}x^2}\ . &(5)\end{aligned}$$

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

$$P''(x) + 2\left(\frac{1}{x} - x\right)P'(x) + \left(\epsilon - 3 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right)P(x) \quad = \quad 0\ . \tag{6}$$

d) Vi bruker potensrekkjemetoden og skriv

$$P(x) \quad = \quad \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n\ . \tag{7}$$

Dette gjev

$$P'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-1}\ , \tag{8}$$

$$P''(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} = \sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2}\ . \tag{9}$$

Innsetting gjev da

$$\begin{aligned} &\sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} + 2\sum_{n=1}^{\infty} a_n n x^{n-2} - 2\sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^n \\ &\qquad +(\epsilon-3)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n - l(l+1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n-2} \quad = \quad 0\ . \end{aligned} \tag{10}$$

Dette kan vi skrive som

$$\begin{aligned} &\sum_{n=2}^{\infty} a_n n(n-1)x^{n-2} + \frac{2a_1}{x} + 2\sum_{n=2}^{\infty} a_n n x^{n-2} - 2\sum_{n=0}^{\infty} a_n n x^n \\ &+(\epsilon-3)\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n - l(l+1)\left(\frac{a_0}{x^2} + \frac{a_1}{x}\right) - l(l+1)\sum_{n=2}^{\infty} a_n x^{n-2} \quad = \quad 0 \end{aligned} \tag{11}$$

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

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty}\left[a_{n+2}(n+2)(n+3)-l(l+1)a_{n+2}+(\epsilon-2n-3)\,a_n\right]x^n & \\ +\frac{a_1(2-l(l+1))}{x}-\frac{a_0 l(l+1)}{x^2} &= 0\;. \qquad (12)\end{aligned}$$

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

$$a_{n+2} = \frac{2n+3-\epsilon}{(n+2)(n+3)-l(l+1)}a_n\;. \qquad (13)$$

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

$$\epsilon = 2n+3\;, \qquad (14)$$

eller

$$E = \underline{\underline{\hbar\omega\left(\frac{3}{2}+n\right)}}\;. \qquad (15)$$

e) Dersom $P(x) = A$ er konstant får vi ved innsetting

$$\left(\epsilon-3-\frac{l(l+1)}{x^2}\right)A = 0\;, \qquad (16)$$

som har løysing når $\underline{\underline{\epsilon = 3}}$ og $\underline{\underline{l = 0}}$.

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

$$\frac{1}{x}\left(2-l(l+1)\right)B + x\left(\epsilon-5\right)B = 0\;, \qquad (17)$$

som har løysing $\underline{\underline{\epsilon = 5}}$ og $\underline{\underline{l = 1}}$ ($l = -2$ er og ei løysing men $l < 0$ ikkje tillate).

f) Energien til den isotrope tredimensjonale oscillatoren er

$$E = \hbar\omega\left(\frac{3}{2}+n_x+n_y+m_z\right)\;, \qquad (18)$$

der $n_x = 0, 1, 2...$, $n_y = 0, 1, 2...$ og $n_z = 0, 1, 2....$ Grunntilstanden er for $n_x = n_y = n_z = 0$ og $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ som tilsvarer $\epsilon = 3$.

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

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi r^2 |\psi_0|^2 r^2 \sin\theta \, dr \, d\phi d\theta}{\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi_0|^2 r^2 \sin\theta \, dr \, d\phi d\theta} , \tag{19}$$

der nemnaren er normeringa av $\psi_0(r, \phi, \theta)$. Integralet over ϕ og θ gjev 4π i tellar og nemnar. Ny variabel $x = r\sqrt{\mu\omega/\hbar}$ gjev da

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= \frac{\hbar}{\mu\omega} \frac{\int_0^\infty x^4 e^{-x^2} \, dx}{\int_0^\infty x^2 e^{-x^2} \, dx} \\ &= \underline{\underline{\frac{3}{2} \frac{\hbar}{\mu\omega}}} \end{aligned}$$

Dette gjev

$$\begin{aligned} \langle V(r) \rangle &= \frac{3}{4} \mu\omega^2 \langle r^2 \rangle \\ &= \underline{\underline{\frac{3}{4} \hbar\omega}} . \end{aligned} \tag{20}$$

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

$$\langle E_k \rangle = E - \langle V(r) \rangle . \tag{21}$$

Sidan $E = (\frac{1}{2}\hbar\omega)\epsilon = \frac{3}{2}\hbar\omega$ for grunntilstanden får vi

$$\langle E_k \rangle = \underline{\underline{\frac{3}{4} \hbar\omega}} . \tag{22}$$

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

Oppgåve 2

a) På grunn av faktoren $e^{-\alpha x^2}$ går $\psi(x) \to 0$ når $x \to +\infty$. Vidare er $\psi(x) \equiv 0$ for $x < 0$. $\psi(x)$ er difor lokalisert og beskriv da ein bunden tilstand.

Normeringsintegralet er

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |\psi(x)|^2 &= |A|^2 \int_0^\infty x^2 e^{-2\alpha x^2} \, dx \\ &= |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{128}} \alpha^{-3/2} \\ &\overset{!}{=} 1 . \end{aligned} \tag{23}$$

Dersom ein veljer A reell får vi $A = \left(\frac{128}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \alpha^{\frac{3}{4}}$ og den normerte bølgjefunksjonen blir

$$\psi(x) \quad = \quad \underline{\underline{\left(\frac{128}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \alpha^{\frac{3}{4}} x e^{-\alpha x^2}}} \; . \tag{24}$$

b) Middelverdien til den potensielle energien er

$$\begin{aligned} \langle V(x) \rangle &= F \left(\frac{128}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \alpha^{3/2} \int_0^\infty x^3 e^{-2\alpha x^2} dx \\ &= \underline{\underline{F \sqrt{\frac{2}{\pi\alpha}}}} \; . \end{aligned}$$

c) Middelverdien til den kinetiske energien er

$$\begin{aligned} \langle E_k \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \psi(x) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \, dx \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right]^2 \, dx \end{aligned} \tag{25}$$

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

$$\begin{aligned} \langle E_k \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{128}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \alpha^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \left[1 - 2\alpha x^2\right]^2 e^{-2\alpha x^2} \, dx \\ &= \underline{\underline{\frac{3\hbar^2}{2m}\alpha}} \; . \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} E &= E_k + E_p \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} 3\alpha + F \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha^{-\frac{1}{2}} \; . \end{aligned} \tag{26}$$

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

$$3\frac{\hbar^2}{2m} - F\sqrt{\frac{1}{2\pi}} \alpha_{\min}^{-\frac{3}{2}} \quad = \quad 0 \; , \tag{27}$$

eller

$$\alpha_{\min} \quad = \quad \underline{\underline{\left[\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{F^2}{18\pi}\right]^{\frac{1}{3}}}} \; . \tag{28}$$

Innsett i uttrykket for E får vi da

$$E_{\text{min}} = \underline{\underline{3\left(\frac{3}{2\pi}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{1}{3}}F^{\frac{2}{3}}}}\ . \tag{29}$$

der prefaktoren er $3\left(\frac{3}{2\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \approx 2.34478$. Feilen i grunntilstandsenergien er omlag 3 promille. Ikkje dårleg!

Oppgåve 3

a) Den relative krumning er gjeve ved

$$\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right] \tag{30}$$

Når $E - V(x) > 0$ er den relative krumninga negativ og desse områda er tilletne i klassisk fysikk. når $E - V(x) < 0$ er den relative krumninga positiv og desse områda er forbode i klassisk fysikk. Når $E - V(x) = 0$ er $\psi''(x) = 0$ som tyder at bølgjefunksjonen har eit vendepunkt. Viss $V(x)$ er kontinuerleg, vil $\psi(x)$ vere kontinuerleg og glatt. For eit deltafunksjonspotensial $V(x) = -\alpha\delta(x-a)$, vil $\psi(x)$ vere kontinuerleg men ha ein knekk i $x = a$. I dette tilfellet er ikkje $V(x)$ kontinuerleg.

b) For ein operator $\hat{A}$ har vi

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2\ , \tag{31}$$

som gjev informasjon om spreiinga av måleresultata for observabelen A i tilstanden ψ. Innhaldet er da at produktet av usikkerheita for x og p_x aldri kan bli mindre enn $\frac{1}{2}\hbar$. Dette tyder at ein ikkje kan spesifisere posisjon og impuls til ein partikkel samtidig. Posisjon og impuls kan ikkje vere skarpe samtidig.

c) $|\psi(x)|^2$ gjev sannsynlegheitsfordelinga for målingar av posisjonen på x-aksen.

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.

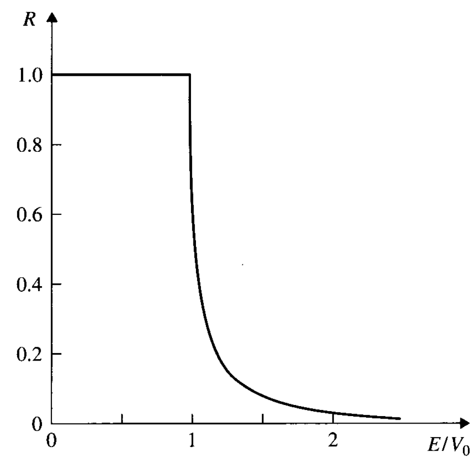

Figure 1: Refleksjonskoeffisient for eit potensialsprang som funksjon av E/V_0.