

Løsningsforslag
Eksamen 11. august 2010
FY1006/TFY4215 Innføring i kvantefysikk

Oppgave 1

a. •Siden potensialet $V(x)$ er symmetrisk med hensyn på midtpunktet ($x = L$), vil grunntilstanden ψ_1 og 1. eksiterte tilstand ψ_2 være henholdsvis symmetrisk og antisymmetrisk med hensyn på dette punkt. Grunntilstanden ψ_1 har ingen nullpunkter; ψ_2 har ett.

•For en energieigenfunksjon med energi E er områder hvor $V(x) < E$ klassisk tillatte. Områder hvor $V(x) > E$ er selvsagt klassisk forbudte, og de klassiske vendepunktene er de punktene hvor $V(x) = E$, hvor en partikkel ifølge klassisk mekanikk vil snu.

•Den relative krumningen til en energieigenfunksjon ψ med energi E er ifølge den tidsuavhengige Schrödingerligningen

$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m_e}{\hbar^2} [V(x) - E].$$

I klassisk tillatte områder er denne negativ, slik at ψ krummer mot akse. I klassisk forbudte områder er den positiv, slik at ψ krummer bort fra akse. I de klassiske vendepunktene, hvor $E = V(x)$, er den relative krumningen $\psi''/\psi = 0$. Her skifter den relative krumningen fortegn.

b. •Tilstandene identifiseres enkelt ut fra antall nullpunkter i intervallet $0 < x < 2L$:

Grunntilstanden ψ_1 (ingen nullp.) er kurve b.

1. eksiterte tilstand ψ_2 (ett nullp.) er kurve c.

2. eksiterte tilstand ψ_3 (to nullp.) er kurve d.

3. eksiterte tilstand ψ_4 (tre nullp.) er kurve a.

•Fra diagrammet ser vi at de fire bølgefunksjonene alle krummer utover fra akse nær origo, og også nær $x = L$ og $x = 2L$, altså der hvor potensialet har sine høyeste verdier. Ut fra dette kan vi slå fast at energiene E_1, E_2, E_3 og E_4 alle må være lavere enn $2V_0 (= 10 \text{ eV})$.

•Hver av energilinjene vil da skjære potensialkurven i fire punkter, dvs vi har for hver av tilstandene fire klassiske vendepunkter.

•De klassiske vendepunktene er for hver egenfunksjon der hvor den relative krumningen skifter fortegn. Ved å lese av hvor dette skjer, samt den tilhørende potensialverdien, får vi bestemt energien til denne egenfunksjonen. Vi legger merke til at høyre del av ψ_1 og ψ_2 er praktisk talt helt sammenfallende, og det samme gjelder da vendepunktene, og dermed også energiene, som vi kan anslå til ca $0.2 \cdot 2V_0 = 2 \text{ eV}$. Vi har altså

$$E_1 \approx E_2 \approx 2 \text{ eV} \quad (E_1 \text{ ørlite grann mindre enn } E_2).$$

ψ_3 og ψ_4 er ikke *fullt* så sammenfallende, men også E_3 og E_4 er nokså nær hverandre, og ser ut til å være ca 5–6 eV. [Kommentar: De nøyaktige verdiene, beregnet numerisk, er $E_1 = 1.854 \text{ eV}$, $E_2 = 1.859 \text{ eV}$, $E_3 = 5.229 \text{ eV}$ og $E_4 = 5.340 \text{ eV}$.]

c. •Første eksiterte tilstand ψ_1 i det opprinnelige potensialet $V(x)$ er som vi ser lik null både for $x = 0$ og $x = L$, har ingen nullpunkter for $0 < x < L$, og oppfyller den tidsuavhengige Schrödingerligningen for potensialet $V^{(c)}(x)$ i dette området. Dette er akkurat de kravene som stilles til grunntilstanden for potensialet $V^{(c)}(x)$. Så $\psi_1^{(c)} = \psi_2$ (for $0 \leq x \leq L$) og $E_1^{(c)} = E_2$.

•Første eksiterte tilstand i potensialet $V^{(c)}(x)$ oppfyller de samme kriteriene som nevnt, bortsett fra at den skal ha ett nullpunkt i intervallet $0 < x < L$. Den eneste av løsningene i pkt. **b** som oppfyller disse kriteriene er ψ_4 . Så vi har at $\psi_2^{(c)} = \psi_4$ (for $0 \leq x \leq L$) og $E_2^{(c)} = E_4$.

•Potensialet $V^{(c)}(x) = V_0[1 + \cos(2\pi x/L)]$ er lik null i punktet $x = L/2$, i likhet med dets første- og tredjederiverte. Den andrederiverte er

$$V''(L/2) = -\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 V_0 \cos \pi = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 V_0.$$

Til laveste ikke-forsvinnende orden gir altså Taylor-utviklingen

$$V(x) \approx \frac{1}{2}(x - L/2)^2 V''(L/2) = \frac{2\pi^2 V_0}{L^2} (x - L/2)^2 \equiv \frac{1}{2} m_e \omega^2 (x - L/2)^2.$$

Neste ledd i utviklingen er av orden $(x - L/2)^4$. For små utsving omkring likevektspunktet $x = L/2$ er altså potensialet tilnærmet harmonisk, med klassisk svingefrekvens

$$\omega = \sqrt{\frac{2\pi^2 V_0}{L^2} \frac{2}{m_e}} = \frac{2\pi}{L} \sqrt{\frac{V_0}{m_e}}.$$

Grunntilstandsenergien for potensialet $V^{(c)}$ er følgelig tilnærmet gitt ved

$$E_1^{(c)} \approx \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{\pi}{L} \sqrt{\frac{\hbar^2 V_0}{m_e}}.$$

Ved å bruke den anslåtte verdien fra pkt. **b** har vi $E_1^{(c)} = E_2 \approx 2$ eV, og finner slik følgende estimat for L/a_0 :

$$\frac{L}{a_0} \approx \frac{\pi}{E_2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} V_0} \approx \frac{\pi}{2} \sqrt{2 \cdot 13.6 \cdot 5} \approx 18.3.$$

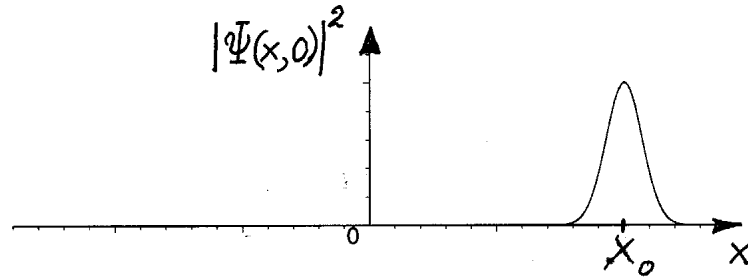
[Kommentar: Den virkelige verdien for L/a_0 var egentlig 14.75. Avviket skyldes at den harmoniske tilnærmelsen ovenfor er et trangere potensial enn $V^{(c)}(x)$, som med $L = 14.75 a_0$ i den harmoniske tilnærmelsen gir en grunntilstandsenergi $E_1^h \approx 2.484$ eV. Med $E_2 \approx 2$ eV i formelen over får vi derfor en L -verdi som er for høy.]

Oppgave 2

a. •Sannsynlighetstettheten i begynnelsestilstanden,

$$|\Psi(x, 0)|^2 = \beta^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp[-\beta m\omega(x - x_0)^2/\hbar],$$

er symmetrisk mhp punktet $x = x_0$.



Forventningsverdien av posisjonen er følgelig

$$\langle x \rangle_0 = x_0.$$

• Forventningsverdien av impulsen er

$$\langle p_x \rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,0) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,0) dx = 0,$$

idet $\langle p_x \rangle$ generelt er reell og realdelen av integranden er lik null. [Samme konklusjon følger av at $\Psi(x,0)$ og $\partial\Psi(x,0)/\partial x$ er henholdsvis symmetrisk og antisymmetrisk med hensyn på punktet $x = x_0$, slik at integranden er antisymmetrisk.]

b. • Koeffisienten c_n er sannsynlighetsamplituden, og $|c_n|^2$ er sannsynligheten, for å måle energien $E_n = n\hbar\omega$ (og etterlate oscilatoren i egentilstanden ψ_n).

• Fra definisjonen av usikkerhet har vi ved $t = 0$:

$$\langle K \rangle_0 = \frac{1}{2m} \langle p_x^2 \rangle_0 = \frac{1}{2m} [(\Delta p_x)_0^2 + \langle p_x \rangle_0^2] = \beta \cdot \frac{1}{4} \hbar\omega.$$

For den potensielle energien finner vi tilsvarende

$$\langle V \rangle_0 = \left\langle \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega \right\rangle_0 = \frac{1}{2}m\omega^2 \left(\frac{\hbar}{2\beta m\omega} + x_0^2 \right) - \frac{1}{2}\hbar\omega,$$

og for den totale energien:

$$\langle E \rangle_t = \langle E \rangle_0 = \frac{1}{4} \hbar\omega \left(\beta + \frac{1}{\beta} - 2 \right) + \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2, \quad \text{q.e.d.}$$

• Med $\beta = 400$ og $x_0 \approx \sqrt{\hbar/m\omega}$ er

$$\langle E \rangle = \frac{1}{4} \hbar\omega (400 + 1/400 - 2) + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} \approx 100\hbar\omega,$$

som svarer til et gjennomsnittskvantetall på

$$\langle n \rangle = \frac{\langle E \rangle}{\hbar\omega} \approx 100.$$

c. • For $t = NT = 2\pi N/\omega$ er

$$(e^{-i\omega t})^n = (e^{-i2\pi N})^n = 1,$$

slik at bølgefunksjonen (1) er

$$\Psi(x, NT) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \Psi(x, 0), \quad \text{q.e.d.}$$

Etter et helt antall klassiske perioder har vi altså en gjenskapelse (engelsk: “revival”) av begynnelsestilstanden.

• Midt mellom disse tidspunktene, dvs for $t = NT + T/2$, har vi

$$(e^{-i\omega t})^n = (e^{-i2\pi N} e^{-i\pi})^n = (-1)^n,$$

slik at

$$\Psi(x, NT + T/2) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) (-1)^n.$$

Speilbildet av denne er (siden $\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$)

$$\Psi(-x, NT + T/2) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(-x) (-1)^n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \Psi(x, 0).$$

Ved disse tidspunktene er altså $\Psi(x, t)$ speilbildet av begynnelsestilstanden. Dette er også en form for gjenskapelse.

Oppgave 3

a. • Den oppgitte bølgefunksjonen er uavhengig av vinklene. Da dreieimpulsoperatorene bare inneholder vinkelderiverte har vi (som vanlig for en kulesymmetrisk tilstand)

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \psi = 0,$$

dvs $\psi = C \exp(-r/a_\mu)$ er en s -bølge, med null dreieimpuls ($l = 0$ og $m = 0$).

• Vi regner ut

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = -\frac{1}{a_\mu} \psi \quad \text{og} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} = \frac{1}{a_\mu^2} \psi.$$

Innsetting i den tidsuavhengige Schrödingerligningen (se formelarket) gir da

$$\begin{aligned} 0 &= (\hat{H} - E_\mu) \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_\mu} \left(\frac{1}{a_\mu^2} - \frac{2}{a_\mu r} \right) + \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E_\mu \right] \psi \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_\mu a_\mu^2} - E_\mu + \frac{1}{r} \left(\frac{\hbar^2}{m_\mu a_\mu} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \right] \psi. \end{aligned}$$

Denne ligningen må være oppfylt potens for potens. Vi må altså ha

$$a_\mu = \frac{\hbar^2/m_\mu}{Ze^2/(4\pi\epsilon_0)} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \frac{m_e}{m_\mu} \frac{1}{Z} \equiv a_0 \frac{m_e}{m} \frac{1}{Z}, \quad \text{dvs} \quad \frac{a_\mu}{a_0} = \frac{m_e}{m_\mu} \frac{1}{Z},$$

og

$$E_\mu = -\frac{\hbar^2}{2ma_\mu^2}, \quad \text{dvs} \quad \frac{E_\mu}{\hbar^2/(2m_e a_0^2)} = -\frac{m_e}{m_\mu} \left(\frac{a_0}{a}\right)^2 = -\frac{m_\mu}{m_e} Z^2.$$

[Her ser vi at radien skalerer omvendt proporsjonalt med massen og Z , mens energien skalerer proporsjonalt med massen og Z^2 .]

• Tallverdiene er, for $Z = 92$ og $m_\mu \approx 206.8$,

$$\frac{a_\mu}{a_0} = 5.26 \cdot 10^{-5} \quad \text{og} \quad \frac{E_\mu}{\hbar^2/(2m_e a_0^2)} = -1.75 \cdot 10^6.$$

b. • Siden orbitalradien a_μ er av størrelsesorden 10^{-15}m , befinner myonet seg praktisk talt inne i kjernen. Elektronet vil derfor med svært god tilnærming "se en effektiv" ladning på $(Z-1)e = 91e$. Fra skaleringsformelen under pkt. **a** følger det da at elektronet får en hydrogenlignende grunntilstandsorbital

$$\psi_e = C_e \exp(-r/a_e),$$

med

$$a_e = \frac{a_0}{91}.$$

• Fra skaleringsformelen for energien følger det at elektronets energi er bestemt av

$$\frac{E_e}{\hbar^2/(2m_e a_0^2)} = -91^2 = -8281.$$

c. • I området der myonet beveger seg er $|\mathbf{r}| \ll a_e$. I dette $\mathbf{r}$ -området er da integralet i den oppgitte formelen for potensialet med svært god tilnærming

$$\int \frac{|\psi_e|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_e|} d^3 r_e \approx \int \frac{1}{r_e} |\psi_e(r_e)|^2 d^3 r_e \equiv \langle 1/r \rangle_{\psi_e}.$$

Tilleggsleddet i potensialet er altså med god tilnærming konstant i det området hvor myonet befinner seg. Et konstant tillegg til potensialet endrer som kjent ikke bølgefunksjonen, bare energien (med det samme beløpet). Så myonets orbital er med veldig god tilnærming identisk med den vi hadde uten elektronet til stede.

• Med

$$\langle 1/r \rangle_{\psi_e} = C_e^2 \int d\Omega \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{r} |\psi_e|^2 = \frac{1}{\pi a_e^3} 4\pi \int_0^\infty r e^{-2r/a_e} dr = \frac{4}{a_0^3} \frac{1}{(2/a_e)^2} = \frac{1}{a_e}$$

blir tillegget til myonets energi

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_e} = \frac{e^2 m_e}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{\hbar^2}{m_e a_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{2a_0}{a_e} = 182 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}.$$

[Kommentar: Dette er jo et veldig beskjedent tillegg i forhold til energien funnet i pkt. **a**, men selve prinsippet er viktig: Vi kan bruke samme tankegang til å estimere hvilken effekt de ytre elektronene i et atom har på f.eks K-elektronene.]

Oppgave 4 (Teller 12%)

- De fem summene representerer: 1. Elektronenes kinetiske energi. 2. Kjernenenes kinetiske energi. 3. Potensiell energi pga elektron–elektron frastøtning. 4. Potensiell energi pga kjerne–kjerne frastøtning. 5. Potensiell energi pga elektron–kjerne tiltrekning.
- Sum nr 2 neglisjeres, kjernenenes kinetiske energi. Begrunnelse: Deres masse er mye større enn elektronenes masse. Kjernerne beveger seg dermed så langsomt i forhold til elektronene at vi med god tilnærmelse kan regne som om kjernerne ligger i ro.
- Kun ett elektron (evt ingen!) i hver enkelt enpartikkeltilstand.
- Med 4 ulike substituenten bundet til det sp^3 -hybridiserte karbonatomet kan vi bytte plassering på 2 av dem og dermed få et molekyl som er speilbildet av det første, men slik at det nye molekylet ikke er identisk med det første. (Det kan ikke orienteres i rommet slik at det overlapper eksakt med det første.) De to variantene av molekylet vil nå vekselvirke ulikt med linearpolariserte elektromagnetiske bølger: Det ene vil dreie polarisasjonsretningen mot høyre, det andre vil dreie det mot venstre.

Oppgave 5 (Teller 13%)

- Kinetikken, dvs hastigheten til reaksjonen $A \rightarrow B$, evt $B \rightarrow A$, bestemmes av energibarrieren $E_a = E_{TS} - E_A$, evt $E_{TS} - E_B$. Reaksjonsraten k avhenger eksponensielt av forholdet mellom E_a og termisk energi $k_B T$: $k \sim \exp(-E_a/k_B T)$.

Den termodynamiske likevekten mellom A og B avhenger av energidifferansen $\Delta E = E_A - E_B$. Forholdet mellom antall molekyler som er i tilstand A og antall molekyler som er i tilstand B er bestemt av faktoren $\exp(-\Delta E/k_B T)$.

- I de tre tilstandene A, TS og B er $dE/dx = 0$. De tre x -verdiene bestemmes derfor av at

$$4x^3 + 9x^2 + 2x = 0.$$

Dermed:

$$x_A = -2 \quad , \quad x_{TS} = -1/4 \quad , \quad x_B = 0.$$

Den andrederiverte av E er

$$d^2E/dx^2 \sim 12x^2 + 18x + 2,$$

og setter vi inn x_{TS} i dette uttrykket, finner vi at $d^2E/dx^2 = -7E_0/4$ er negativ i TS. Dette er dermed et lokalt energimaksimum.

- Vi bestemmer de tre interessante energiverdiene:

$$E_A = -4E_0 \quad , \quad E_{TS} = 5E_0/256 \quad , \quad E_B = 0.$$

Dette gir, for reaksjonen $B \rightarrow A$:

$$E_a = E_{TS} - E_B = 5E_0/256 \quad , \quad \Delta E = E_A - E_B = -4E_0.$$