UNIVERSITETET I OSLO
Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Eksamen i: FYS2140, Kvantefysikk

Eksamensdag: 17. august 2017 (4 timer)

Lovlige hjelpemidler: Rottmann: "Matematisk formelsamling", Øgrim og Lian: "Fysiske størrelser og enheter" eller Angell og Lian: "Fysiske størrelser og enheter". Godkjent kalkulator. Ett A4 ark med egne notater (begge sider av arket).

Oppgave 1: Blandede, kvalitative spørsmål

a) Paulis eksklusjonsprinsipp legger restriksjoner på hvordan en vilkårlig mange-fermion-bølgefunksjon (for identiske fermioner) kan bygges opp som en superposisjon av produkter av en-fermion-tilstander. Pauli-prinsippet sier at hvert produkt kun kan inneholde én kopi av hver én-fermion-tilstand, "to fermioner kan ikke være i samme tilstand". Pauli-prinsippet er en konsekvens av at bølgefunksjonen til identiske fermioner må være antisymmetrisk under ombytte av to fermioner.

b) Foto-elektrisk effekt: Lys mot metall-plate. Elektroner kommer ut fra metallet dersom frekvensen på lyset er høy nok. Se kompendium 2.1. Brudd med klassisk bølgeteori:

- Elektronenes maksimale energi avhenger kun av frekvensen og ikke av lys-intensiteten.
- Eksistens av en minste frekvens.
- Prosessen skjer instantant.

c) Compton-spredning: Spredning av lys på på et fritt elektron. Se kompendium 2.3. Bidrag til lys som partikler: Compton-eksperimentet stemmer bra med det man får dersom man antar at lys er en masseløs partikkel med energi hc/λ og bevegelsesmengde h/λ.

d) Schrödinger tok den ikke-relativistiske grensa av Klein-Gordon-ligningen. Altså er Schrödinger-ligningen gyldig når partiklene har hastigheter mye mindre enn lyshastigheten.

e) Tilstanden med totalspinn $s = 0$ og $m = 0$ er

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}\right)$$

Kvadratet av totalspinn-operatoren kan skrives som

$$\begin{aligned} S^2 &= \left(S_x^{(1)} + S_x^{(2)}\right)^2 + \left(S_y^{(1)} + S_y^{(2)}\right)^2 + \left(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}\right)^2 \\ &= \frac{1}{2}\left(\left(S_+^{(1)} + S_+^{(2)}\right)\left(S_-^{(1)} + S_-^{(2)}\right) + \left(S_-^{(1)} + S_-^{(2)}\right)\left(S_+^{(1)} + S_+^{(2)}\right)\right) + \left(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}\right)^2 \end{aligned}$$

For å regne ut $S^2\chi_{00}$ prøver vi først

$$\left(S_-^{(1)} + S_-^{(2)}\right)\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\left(\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)}\right) = 0$$

Tilsvarende er $\left(S_+^{(1)} + S_+^{(2)}\right)\chi_{00} = 0$. Og

$$\left(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}\right)\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\left(\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right)\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}\right) = 0$$

Derfor er $S^2\chi_{00} = 0$. Egenverdien til S^2 er generelt lik $\hbar^2 s(s+1)$, så en null egenverdi betyr at $s = 0$. q.e.d.

Oppgave 2: Partikkel i sylindrisk potensial

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2\right) + V(z)$$

a) Tidsuavhengig Schrödinger-ligning:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2\right) + V(z)\right]\psi = E\psi$$

Separasjon av variable: $\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$. Setter inn og deler på $\psi(x,y,z)$ på begge sider. Dette gir

$$\underbrace{\frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi_1(x)}{\psi_1(x)}}_{\text{kun avh. av } x} + \underbrace{\frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2\right)\psi_2(y)}{\psi_2(y)}}_{\text{kun avh. av } y} + \underbrace{\frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z)\right)\psi_3(z)}{\psi_3(z)}}_{\text{kun avh. av } z} = E$$

Siden denne ligningen må holde for alle x,y og z, så må hvert ledd på venstre side være konstant. La oss kalle konstantene E_1,E_2 og E_3. Vi har derfor

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\psi_1(x) &= E_1\psi_1(x) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2\right]\psi_2(y) &= E_2\psi_2(y) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z)\right]\psi_3(z) &= E_3\psi_3(z) \\ E_1 + E_2 + E_3 &= E, \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

De to første av disse ligningene beskriver en én-dimensjonal harmonisk oscillator, mens den tredje beskriver en fri partikkel i en én-dimensjonal boks med uendelige potensialvegger. Den siste ligningen sier bare at energien for 3D problemet finnes ved å addere energiene til de tre én-dimensjonale problemene.

b) Som beskrevet i oppgaveteksten a) beskriver to av ligningene hver for seg en én-dimensjonal harmonisk oscillator med vinkelfrekvens ω. Vi har derfor $E_1 = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right)$ og $E_2 = \hbar\omega\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)$, der $n_1, n_2 \in \{0, 1, 2, \ldots\}$. Videre er ligningen for z-retningen er som for en fri partikkel i en boks med uendelige potensialvegger. Energien for en slik partikkel er $E_3 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ med bølgefunksjon $\psi_3(z) = A\sin kz + B\cos kz$. Siden potensialet er uendelig ved $z = 0$ og $z = L$ må $\psi_3(0) = 0 \implies B = 0$ og $\psi_3(L) = 0 \implies kL = \pi j$ hvor $j \in \{1, 2, \ldots\}$. ($j = 0$ er ikke tillatt fordi da blir bølgefunksjonen 0, og negativ j er samme tilstand som positiv j siden bølgefunksjonen kun endrer fortegn. Derfor er $k_j = \frac{\pi j}{L}$ med $j \in \{1, 2, \ldots\}$. Med $E = E_1 + E_2 + E_3$ finner vi altså at energi-egenverdiene er

$$E_{nj} = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2} + n_2 + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m} = \hbar\omega\left(\underbrace{n_1 + n_2}_{n} + 1\right) + \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m}, \qquad \text{q.e.d.}$$

c) Degenerasjon: At flere ortogonale egentilstander har samme egenverdi, –brukes som oftest om energiegenverdier. Degenerasjonsgraden angir *hvor mange* slike tilstander det er. For vårt problem vil det for en gitt verdi av n være $n + 1$ mulige verdier for n_1 ($n_1 \in \{0, 1, \ldots, n\}$). Når verdien for n_1 er valgt finnes n_2 entydig ved $n - n_1$. Derfor er degenerasjonsgraden for energinivå E_{nj} lik $\underline{n + 1}$.

d) Egenfunksjonen med $n = 0$ har $n_1 = 0$ og $n_2 = 0$, altså er de to én-dimensjonale oscillatorene begge i grunntilstanden: $\psi_1(x) \propto e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ og $\psi_2(y) \propto e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2}$. Ved å løse ligningen i z-retningen fås $\psi_3(z) \propto \sin(k_j z)$ som vist i c). Altså kan ψ_{0j} skrives som

$$\psi_{0j} = be^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2} \sin(k_j z) = be^{-\alpha r^2} \sin(k_j z)$$

der vi har innført $r^2 = x^2 + y^2$ og satt $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$. b er en normaliseringskonstant.

Bestemmelse av normaliseringskonstanten b:

$$1 = \int_0^\infty drr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^L dz \psi_{0j}^* \psi_{0j} = |b|^2 \underbrace{\int_0^\infty drre^{-2\alpha r^2}}_{-\frac{1}{4\alpha}e^{-2\alpha r^2}|_0^\infty} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi}_{2\pi} \underbrace{\int_0^L dz \sin^2 \frac{\pi j z}{L}}_{\frac{L}{2}}$$

$$= |b|^2 \frac{1}{4\alpha} 2\pi \frac{L}{2} = |b|^2 \frac{\pi L}{4\alpha}$$

$$\implies |b|^2 = \frac{4\alpha}{\pi L} \implies \underline{b = 2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi L}}}$$

e) Bølgefunksjonen ψ_I er

$$\psi_I = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi R^2 L}}, & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

Sannsynligheten for å måle energien E_{0j} er gitt ved absolutt-kvadratet av følgende integral

$$\begin{aligned} I_j &= \int_0^\infty drr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^L dz \psi_{0j}^*(r,\phi,z)\psi_I(r,\phi,z) \\ &= \int_0^R drr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^L dz b^* e^{-\alpha r^2} \sin(k_j z) \frac{1}{\sqrt{\pi R^2 L}} \\ &= \frac{b^*}{\sqrt{\pi R^2 L}} 2\pi \underbrace{\int_0^R drre^{-\alpha r^2}}_{\frac{1}{2\alpha}\left(1-e^{-\alpha R^2}\right)} \underbrace{\int_0^L dz \sin(\frac{\pi j z}{L})}_{\frac{L}{\pi j}(1-(-1)^j)} \\ &= \frac{b^*}{\sqrt{\pi R^2 L}} 2\pi \frac{1}{2\alpha}\left(1 - e^{-\alpha R^2}\right) \frac{L}{\pi j}\left(1-(-1)^j\right) \\ &= \frac{b^*}{\sqrt{\pi R^2 L}} \frac{L}{\alpha j}\left(1 - e^{-\alpha R^2}\right)\left(1-(-1)^j\right) \end{aligned}$$

Merk at den siste faktoren gir 2(0) for j et odde(like) tall. Vi setter inn for b fra e). Da blir sannsynligheten

$$\begin{aligned} P_j(R) = |I_j|^2 &= \frac{1}{\pi R^2 L} \frac{4\alpha}{\pi L} \frac{L^2}{\alpha^2 j^2} \left(1 - e^{-\alpha R^2}\right)^2 \left(1-(-1)^j\right)^2 = \frac{4}{\alpha R^2 \pi^2 j^2}\left(1 - e^{-\alpha R^2}\right)^2 \left(1-(-1)^j\right)^2 \\ &= \underline{\frac{16}{\alpha R^2 \pi^2 j^2}\left(1 - e^{-\alpha R^2}\right)^2} \end{aligned}$$

der den siste overgangen gjelder når j er odde. For j et like tall er $P_j = 0$.

R-avhengighet: For $R \to 0$ rekkeutvikler vi $e^{-\alpha R^2} \approx 1 - \alpha R^2$ som gir $P_j(R) \approx \frac{16}{\pi^2 j^2}\alpha R^2 \to 0$. Sannsynligheten går derfor kvadratisk mot null i grensa $R \to 0$. For $R \to \infty$ neglisjerer vi eksponensialfunksjonen og får $P_j(R \to \infty) \approx \frac{16}{\alpha R^2 \pi^2 j^2} \to 0$. Så for store R går sannsynligheten mot null som R^{-2}. For $\alpha R^2 = 1$ fås

$$\underline{P_j(\alpha R^2 = 1) = \frac{16}{\pi^2 j^2}\left(1 - e^{-1}\right)^2}$$

for j odde. For j like fås 0.

f) Nei, forventingsverdien til energien vil ikke endre seg. Det kan ses fra

$$\frac{d\langle H\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\underbrace{\langle[H,H]\rangle}_{0} + \underbrace{\langle\frac{\partial H}{\partial t}\rangle}_{0} = 0$$

g) Hamiltonoperatoren i sylinderkoordinater er:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] + \frac{1}{2}m\omega r^2 + V(z)$$

Kommutatoren

$$\begin{aligned}[L_z, H] &= \frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial}{\partial\phi}, -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega r^2 + V(z)\right] \\ &= \frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial}{\partial\phi}, -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] = 0\end{aligned}$$

Dette betyr at det er mulig å finne et komplett sett av simultane egentilstander for L_z og H. Ettersom det er degenerasjon så er ikke ethvert sett av egentilstander for H nødvendigvis egentilstander for L_z, men det at kommutatoren er null impliserer at det er mulig å konstruere (ved å lage lineær-kombinasjoner av degenererte tilstander) et slikt sett av simultane egenfunksjoner.

h) Egenverdiligning:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = \lambda\psi \implies \psi \propto e^{i\frac{\lambda}{\hbar}\phi}$$

Entydighet under en full rotasjon om z-aksen gir:

$$\psi(\phi + 2\pi) = \psi(\phi) \implies e^{i\frac{\lambda}{\hbar}2\pi} = 1 \implies \lambda = \hbar m, \qquad m \in \{0, \pm1, \pm2, \ldots\}$$

og normering gir $\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$.

ψ_{0j} har ingen ϕ-avhengighet. Derfor gir den kun overlapp med $m = 0$ tilstanden, og $m = 0$ måles derfor med sikkerhet, altså sannsynligheten er 1.

Integralet er

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\phi e^{im\phi} = \delta_{m,0}$$

i) For $n = 1$ har vi to orthogonale tilstander siden degenerasjonsgraden er $n + 1 = 2$.I oppgaveteksten er tilstanden $cxe^{-\alpha r^2}\sin(k_j z)$ valgt. Dette er bølgefunksjonen til første eksiterte nivå til den første én-dimensjonale oscillatoren multiplisert med grunntilstanden til den andre oscillatoren (den i y-retning) og fri-partikkel-boks-bølgefunksjonen. (De eksiterte tilstandene til en én-dimensjonal harmonisk oscillator er proporsjonal med Hermite-polynomene som finnes i Rottmann.) Denne tilstanden kan skrives

$$cxe^{-\alpha r^2}\sin(k_j z) = cr\cos\phi e^{-\alpha r^2}\sin(k_j z)$$

slik at ϕ-avhengigheten er $\cos\phi \propto e^{i\phi} + e^{-i\phi}$. De mulige måleverdiene for L_z er derfor $\pm\hbar$, og sannsynlighetene for hver av dem er like store, altså 1/2, siden koeffisientene som multipliserer $e^{i\phi}$ og $e^{-i\phi}$ er like.

Vi kunne også valgt å sette den første oscillatoren i grunntilstanden og den andre i første eksiterte nivå. Det gir bølgefunksjonen: $cye^{-\alpha r^2}\sin(k_j z) = cr\sin\phi e^{-\alpha r^2}\sin(k_j z)$. Fordi $\sin\phi \propto e^{i\phi} - e^{-i\phi}$ vil vi også kunne måle verdiene $\pm\hbar$ i denne tilstanden. Også her er sannsynlighetene for hvert alternativ 1/2, siden amplitudene er like store (de har motsatt fortegn, men det "kvadreres bort"). Merk at ingen av disse to tilstandene er egentilstander for L_z.

Vi kunne også valgt lineær-kombinasjoner av disse to. En slik lineær-kombinasjon

$$(\alpha x + \beta y)\, ce^{-\alpha r^2}\sin k_j z$$

vil generelt også gi at de mulige måleverdiene for L_z er $\pm\hbar$. Men sannsynlighetene for hvert alternativ avhenger av α og β. For $\beta = \pm i\alpha$ er denne lineær-kombinasjonen en egentilstand for L_z med egenverdi $\pm\hbar$, som betyr at verdien $\pm\hbar$ måles med sikkerhet.