Løsningsforslag for FYS2140 Kvantemekanikk, Torsdag 16. august 2018

Oppgave 1: Materiens bølgeegenskaper

a) De Broglie fikk Nobelprisen i 1929 for sin hypotese. Beskriv med noen setninger hva den går ut på.

Svar: De Broglie foreslå at partikler (med masse) kunne tillegges bølgenatur. Partikkelens bølgelengde er gitt ved $\lambda = h/p$, hvor p er partikkelens bevegelsesmengde.

b) Sammenhengen mellom energi og bevegelsesmengde for en relativistisk partikkel er $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$. Forklar symbolene og skriv opp uttrykket for partikkelens kinetiske energi E_k.

Svar: Totalenergien er E, bevegelsesmengden er p, partikkelens hvilemasse er m_0 og c er lyshastigheten. Partikkelens kinetiske energi er $E_k = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} - m_0c^2$.

c) Uttrykk de Broglie-bølgelengden λ for en relativistisk partikkel ved hjelp av E_k.

Svar: Fra oppgave b) finner vi $\left(\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}\right)^2 = (E_k + m_0c^2)^2$ som gir $p^2c^2 = E_k^2 + 2E_km_0c^2$. Dette gir

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{pc} = \frac{hc}{\sqrt{E_k^2 + 2E_km_0c^2}}. \tag{1}$$

d) Hvis vi regner ikke-relativistisk, hva blir da λ?

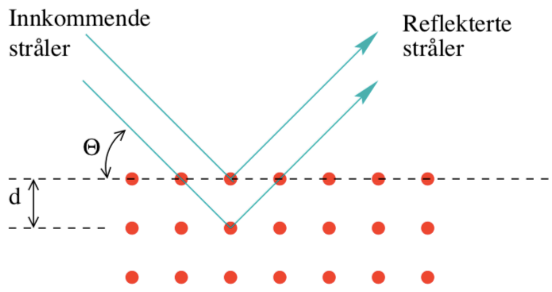
Svar:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2E_km_0}} = \frac{hc}{\sqrt{2E_km_0c^2}}. \tag{2}$$

e) Hvis et elektron skal beskrives ikke-relativistisk, hvilken grensebetingelse vil du sette for E_k da?

Svar: Fra likningene (1) og (2) ser vi at betingelsen kan skrives som $E_k^2 << 2E_km_0c^2$, det vil si $E_k << 2m_0c^2$.

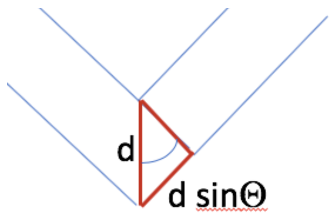
Vi sender en mono-energetisk elektronstråle mot overflaten av en krystall som vist i Fig. 1. Innfallsvinkel og spredningsvinkel er Θ og avstanden mellom atom-lagene i krystallen er d.



Figur 1: Braggdiffraksjon (figuren er hentet fra FYS2140-kompendiet).

f) Vis at vi måler maksimal intensitet for den reflekterte strålingen når Bragg-betingelsen $2d\sin\Theta = n\lambda$ med $n = 1, 2, 3, \ldots$ er oppfylt. Forklar fysikken bak fenomenet med et par setninger.

Svar: Fra Fig. 1 ser vi at den strålen som spres mot et atom i et lag dypere enn overflaten, får lenger veilengde enn strålen som spres øverst i overflaten. Den ekstra veilengden kan regnes ut i Fig. 2 ved $2d\sin\Theta$, hvor vi finner igjen vinkelen Θ. Hvis den ekstra veilengden for partikkelen akkurat tilsvarer en eller flere bølgelengder, vil maksima i intenstiteten oppfylles. Med andre ord er Bragg-betingelsen gitt ved $2d\sin\Theta = n\lambda$ med $n = 1, 2, 3, \ldots$.



Figur 2: Illustrasjonen viser hvordan den ekstra veilengden kan regnes ut geometrisk. Legg merke til hvor vi finner igjen vinkelen Θ fra Fig. 1.

g) Atomlagene i krystallen har en avstand på $d = 0.1$ nm. Begrunn at du kan bruke ikke-relativistiske elektroner for å studere Braggdiffraksjon i dette tilfellet (et grovt overslag er tilstrekkelig for å besvare spørsmålet).

Svar: Bølgelengden bør være av samme størrelsesorden som avstanden mellom atomlagene, det vi si $\lambda \approx d$. Vi antar forsøksvis en ikke-relativistisk løsning med $d \approx hc/\sqrt{2E_k m_0 c^2}$. Dette gir:

$$E_k \approx \frac{(hc)^2}{2m_0c^2d^2} = \frac{(1240 \text{ eVnm})^2}{1.022 \cdot 10^6 \text{ eV}(0.1\text{nm})^2} = 150\text{eV}, \tag{3}$$

som er mye mindre enn $2m_0c^2 = 1.022 \cdot 10^6$ eV for elektroner. Altså kan vi regne ikke-relativistisk på dette problemet.

Oppgave 2: Kvantemekanikk og fri partikkel

a) Anta at vi beskriver en fysisk, klassisk størrelse Q ved hjelp av posisjon $\vec{r}$ og bevegelsesmengde $\vec{p}$. Hvordan kan vi uttrykke $Q(\vec{r}, \vec{p})$ kvantemekanisk? Hvilke verdier observerer vi i enkeltmålinger?

Svar: Den fysiske størrelsen $Q(\vec{r}, \vec{p})$ overføres til en kvantemekanisk operator $Q(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})$, hvor $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$ og $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$. De eneste mulige verdiene vi kan måle er egenverdiene Q_ν gitt ved egenverdilikningen $Q(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})\Phi_\nu = Q_\nu\Phi_\nu$.

b) Skriv ned den tidsavhengige Schrödinger-likningen for en fri partikkel i én dimensjon (bare x-akse og $V(x) = 0$).

Svar:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial^2 x}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t). \tag{4}$$

c) Skriv ned en planbølge som beveger seg i positiv x-retning, og vis at denne er en løsning av den tidsavhengige Schrödinger-likningen i oppgave b). Er det noen formelle krav som den plane bølgen ikke oppfyller?

Svar: Planbølge kan beskrives som

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}, \tag{5}$$

hvor $p = \hbar k$ og $E = \hbar\omega$. Innsetter i likn. (4) og får

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)\Psi(x,t) = i\hbar(-i\omega)\Psi(x,t), \tag{6}$$

som tilfredstiller likningen siden $E = p^2/2m$ for fri partikkel. Vi ser at $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = 1$ for alle x (og t) som gjør at bølgefunksjonen ikke kan normeres.

d) Vi konstruerer en bølgepakke for en partikkel som er begrenset i rom ved

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{i[kx-\omega(k)t]}dk, \tag{7}$$

hvor $\phi(k)$ er vekten på hver enkelt planbølge med gitt k og $\omega(k)$. Vis at også denne bølgefunksjonen er en løsning av den tidsavhengige Schrödinger-likningen.

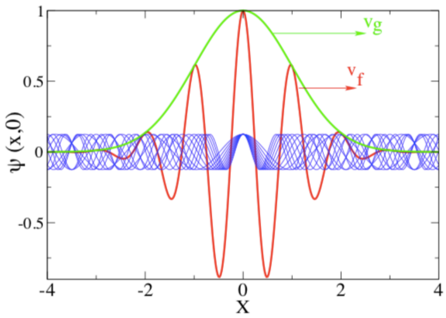
Svar: Vi anvender igjen likn. (4) og observerer at ingen av operatorene virker på $\phi(k)$, behandles altså som en konstant med hensyn på operatorene. Vi får ved innsetning:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)(-k^2)e^{i[kx-\omega(k)t]}dk = i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)(-i\omega(k))e^{i[kx-\omega(k)t]}dk, \tag{8}$$

som er oppfylt siden $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega(k)$.

e) Definer uttrykkene for fase- og gruppehastighet og lag en skisse av bølgepakken med disse hastighetsvektorene inntegnet.

Svar: Fasehastigheten er definert for hver planbølge ved $v_f = \omega(k)/k$. Gruppehastigheten er felles for hele bølgepakken og er definert ved $v_g = d\omega(k)/dk$. Fase- og gruppehastigheter er tegnet inn i Fig. 3



Figur 3: Illustrasjonen av en bølgepakke (figuren er hentet fra FYS2140-kompendiet).

Oppgave 3: Partikkel i boks

En partikkel er plassert i en 1-dimensjonal brønn mellom to uendelige potensial-barrierer:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{hvis} \quad 0 \leq x \leq a, \\ +\infty & \text{ellers.} \end{cases} \tag{9}$$

a) Sett opp opp den tidsuavhengige Schrödinger-likningen, den generelle løsningen av denne og randbetingelsene for bølgefunksjonen.

Svar: Utenfor brønnen er $\psi(x) = 0$. Inne i brønnen er den tidsuavhengige Schrödinger-likningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \tag{10}$$

hvor $E > 0$. Vi skriver derfor likningen på en mer hensiktsmessig måte

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x), \text{hvor } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \tag{11}$$

der den generelle løsningen er $\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$. Randbetingelsene får vi fra kontinuitet ved $x = 0$ og $x = a$, nemlig $\psi(0) = \psi(a) = 0$.

b) Vis at energiegenverdiene og de normerte energiegenfunksjonene er henholdsvis $E_n = E_1 n^2$ og $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x)$, hvor $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2m}$ og $k_n = \frac{n\pi}{a}$ med $n = 1, 2, 3, \ldots$.

Svar: Fra grensebetingelsen $\psi(0) = 0$, må $B = 0$ som gir $\psi(x) = A \sin kx$. Videre krever betingelsen $\psi(a) = 0$ at $k_n = \frac{n\pi}{a}$ med $n = 1, 2, 3, \ldots$.
Vi innsetter $\psi(x) = A \sin kx$ i likn. (10) som gir $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = E_1 n^2$.
Dernest normaliserer vi bølgefunksjonen ved å forlange $\int_0^a A^2 \sin^2(kx)\, dx = A^2 a/2 = 1$, som gir $A = \sqrt{2/a}$. (Strengt tatt kan A ganges med en fasefaktor $\exp(i\delta)$, men vi velger her den enkleste løsningen.)

Anta at partikkelen starter ved tiden $t = 0$ i en superposisjon av de to laveste tilstandene

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(x) - \psi_2(x) \right]. \tag{12}$$

I denne oppgaven kan du få bruk for følgende integraler og relasjon

$$\int u \sin^2 u \, du = \frac{1}{4} u^2 - \frac{1}{4} u \sin 2u - \frac{1}{8} \cos 2u + C \tag{13}$$

$$\int u \sin u \sin 2u \, du = \frac{u \sin^3 u}{3} + \frac{3}{12} \cos u - \frac{\cos 3u}{36} + C \tag{14}$$

$$e^{i\alpha} + e^{-i\alpha} = 2 \cos \alpha \tag{15}$$

c) Skriv ned systemets tilstand $\Psi(x, t)$ ved tiden t. Vis at forventningsverdien av posisjonen i denne tilstanden blir

$$\langle x(t) \rangle = \frac{a}{2} + \frac{8a}{9\pi^2} \cos(3\omega t), \tag{16}$$

hvor vinkelfrekvensen er gitt ved $\omega = E_1/\hbar$. (Du kan gå videre med de 2 siste del-oppgavene, selvom du ikke kan vise likn. (16).)

Svar: Bølgefunksjonen utvikler seg i tiden som

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{1}{a}} \left[\sin(\frac{\pi}{a} x) e^{-i\omega t} - \sin(\frac{2\pi}{a} x) e^{-i4\omega t} \right]. \tag{17}$$

Forventningsverdien av posisjonen blir

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \\
&= \frac{1}{a} \int_0^a x \left[\sin(\frac{\pi}{a} x) e^{i\omega t} - \sin(\frac{2\pi}{a} x) e^{i4\omega t} \right] \left[\sin(\frac{\pi}{a} x) e^{-i\omega t} - \sin(\frac{2\pi}{a} x) e^{-i4\omega t} \right] dx \\
&= \frac{1}{a} \int_0^a (x \sin^2(\frac{\pi}{a} x) + x \sin^2(\frac{2\pi}{a} x) \\
&- x \sin(\frac{\pi}{a} x) \sin(\frac{2\pi}{a} x) e^{-i3\omega t} - x \sin(\frac{\pi}{a} x) \sin(\frac{2\pi}{a} x) e^{i3\omega t}) dx \\
&= \frac{a}{\pi^2} \int_0^\pi u \sin^2 u \, du + \frac{a}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} u \sin^2 u \, du - \cos(3\omega t) \frac{2a}{\pi^2} \int_0^\pi u \sin u \sin 2u \, du \\
&= \frac{a}{\pi^2} \frac{\pi^2}{4} + \frac{a}{4\pi^2} \frac{4\pi^2}{4} - \frac{2a}{\pi^2} \left(\frac{-16}{36} \right) \cos(3\omega t) = \frac{a}{2} + \frac{8a}{9\pi^2} \cos(3\omega t).
\end{aligned} \tag{18}$$

d) Hva er den minste midlere avstand d partikkelen har fra potensialbarrierene?

Svar: Forventningsverdien er størst (minst) når $\cos(3\omega t) = 1$ ($\cos(3\omega t) = -1$). Avstanden til høyre (venstre) barriere blir da $d = a - (\frac{a}{2} + \frac{8a}{9\pi^2}) = 0.41a$ ($d = (\frac{a}{2} - \frac{8a}{9\pi^2}) - 0 = 0.41a$).

e) Beskriv kort Ehrenfests teorem og benytt dette til å finne forventningsverdien av partikkelens hastighet $v(t)$ i tilstanden $\Psi(x,t)$. Ved hvilke tidspunkt snur/reflekteres partikkelen? Når har partikkelen høyest fart og i hvilken posisjon befinner partikkelen seg da?

Svar: Ehrenfests teorem sier at kvantemekaniske forventningsverdier følger de klassiske lovene.

Partikkelens hastighet blir $v(t) = \frac{d}{dt}\langle x \rangle = -\frac{8a\omega}{3\pi^2}\sin(3\omega t)$.

Når partikkelen snur/reflekteres, er hastigheten null som betyr at $\sin(3\omega t) = 0$, og dermed $3\omega t_n = n\pi$. Partikkelen snur altså ved tidspunktene $t_n = \frac{n\pi}{3\omega}$.

Partikkelen har høyest fart når $\frac{d}{dt}v(t) = 0$. Dette skjer når $\cos(3\omega t) = 0$. Innsetter denne betingelsen i likn. (18) og får $x = \frac{a}{2} + \frac{8a}{9\pi^2}\cos(3\omega t) = \frac{a}{2}$. Konklusjon: Partikkelen har høyest fart midt i brønnen (ikke veldig overraskende).