# UNIVERSITETET I OSLO
## Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

**Eksamen:** FYS2140 Kvantefysikk
**Dato:** 2. juni 2021, kl. 09:00-13:00

**Definisjoner:**
$m$ = elektronets masse
$c$ = lyshastigheten
$\hbar = h/2\pi$, der $h$ er Plancks konstant
$a = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$ er Bohr-radien, der $e$ er elektronladningen og $\epsilon_0$ er permittiviteten

**Oppgave 1: Begreper [vekt: 6 p]**
I denne oppgaven skal du forklare sentrale begreper i kvantefysikken.

1a) Forklar med noen få setninger hva egenfunksjoner er.
Svar: Funksjon som representerer tilstand med skarpt verdi for den variabelen det er egenfunksjon for: $\hat{Q}\psi = q\psi$.

1b) Forklar med noen få setninger hva stasjonære tilstander er.
Svar: Sannsynlighetesfordelingen deres $|\Psi(x,t)|^2$ endres ikke over tid. Alle fysiske observable til tilstandene er uavhengige av tid.

**Oppgave 2: Elektroner i en delta-funksjonsbrønn [vekt: 20 p]**
I denne oppgaven skal du studere elektroner i delta-funksjonspotensialet $V(x) = -\alpha\delta(x)$, der $\alpha = 2$ eVnm. Dirac-delta-funksjonen er som vanlig

$$\delta(x) = \left\{ \begin{matrix} 0 & \text{når } x \neq 0 \\ \infty & \text{når } x = 0 \end{matrix} \right\} \quad \text{og} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\, dx = 1.$$

Den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen (TUSL)

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\,\psi(x)$$

har løsningen $\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}$ med $E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ for grunntilstanden.

HINT:

Symmetri: $\psi(-x) = \psi(x)$.

Bruk $\int \psi^* \hat{K} \psi\, dx = \frac{1}{2m} \int (\hat{p}\psi)^* (\hat{p}\psi)\, dx$.

Bruk integrasjonsreglene for Dirac-delta-funksjonen.

$\int_0^\infty x^n e^{-\lambda x}\, dx = n!/\lambda^{n+1}$ for $\lambda > 0$ og $n = 0, 1, 2, \ldots$.

2a) Forklar hva det betyr at bølgefunksjonen $\psi(x)$ er normalisert.
Svar: Sannsynligheten for å finne partikkelen på et sted i hele rommet er 1: $\int |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$.

2b) Betrakt et elektron i grunntilstanden. Beregn forventningsverdien $\langle V \rangle$ for den potensielle energien, samt forventningsverdien $\langle K \rangle$ for den kinetiske energien. Oppgi svarene i eV.
Svar: Man kan bruke $\langle V \rangle + \langle K \rangle = E$, og beregne kun $\langle V \rangle$ eller $\langle K \rangle$.

$\langle V \rangle = \int \psi^*(-\alpha\delta(x))\psi dx = -\alpha \int \delta(x)|\psi(x)|^2\, dx =$ /integrasjonsregel/
$= -\alpha|\psi(0)|^2 = -\frac{m\alpha^2}{\hbar^2}e^0 = -\frac{\alpha^2 mc^2}{(\hbar c)^2}$
$= -4(eVnm)^2 \cdot 0.511 \times 10^6(eV)/(197.3\, eVnm)^2 = -52.5$ eV.

$\langle K \rangle =$ /HINT/ $= \frac{1}{2m} 2\int_0^\infty (-i\hbar\frac{d}{dx}\psi)^*(-i\hbar\frac{d}{dx}\psi)dx = \frac{1}{2m}(i\hbar)(-i\hbar)(\frac{-m\alpha}{\hbar^2})(\frac{-m\alpha}{\hbar^2}) \cdot 2\int_0^\infty \psi^*\psi dx = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} = -\frac{1}{2}\langle V \rangle = 26.3$ eV.

2c) Finn standardavvik $\sigma_x$ og $\sigma_p$ for posisjon og bevegelsesmengde.
Er disse konsistente med Heisenbergs uskarphetsrelasjon?
Svar: HINT symmetri: $\langle x \rangle = 0 \Rightarrow \langle p \rangle = m\frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0$. $\langle p^2 \rangle = 2m\langle K \rangle = \frac{m^2\alpha^2}{\hbar^2}$.
$\langle x^2 \rangle = 2\int_0^\infty x^2|\psi|^2\, dx = 2\frac{m\alpha}{\hbar^2}\int_0^\infty x^2 e^{-2m\alpha x/\hbar^2}\, dx = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\frac{2!}{(2m\alpha/\hbar^2)^3} = \frac{\hbar^4}{2m^2\alpha^2}$.

$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}m\alpha}$; $\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{m\alpha}{\hbar}$; $\Rightarrow \sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} > \frac{\hbar}{2}$
Konsistente med uskarphetsrelasjonen.

2d) Anta nå at to elektroner er i en og samme delta-funksjonsbrønn.
Skriv ned TUSL for to-elektron-systemet og bølgefunksjonen for grunntilstanden. Forklar hvorfor bølgefunksjonen har det utseendet den har.

HINT:
Du kan anta at den elektrostatiske elektron-elektron-repulsjonen ikke påvirker bølgefunksjonens utseende.

Svar:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_2^2} + V)\,\psi = E\,\psi$$

$$V = V(x_1, x_2) = -\alpha\delta(x_1) - \alpha\delta(x_2) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{|x_1 - x_2 1}$$

$$\psi = \psi(x_1)\psi(x_2)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Eller uten Dirac-notasjon: $\chi = [\chi(1/2, -1/2) - \chi(-1/2, 1/2)]/\sqrt{2}$.
Da elektroner er fermioner, så må bølgefunksjonen være antisymmetrisk. Det finns kun en bundet tilstand for delta-funksjonsbrønn, så rom-delen $\psi(x_1, x_2)$ er symmetrisk, og da må spinn-delen $\chi(s_1, s_2)$ være antisymmetrisk (singlettilstand); lignende som for de to elektronene i heliumatomet.

**Oppgave 3: Hydrogenatomet [vekt: 15 p]**

Den Schrödinger-ligningen vi bruker i kurset er en approksimasjon. Derfor må vi legge til ekstra ledd i Hamilton-operatoren når vi beskriver for eksempel kobling til ytre magnetfelt (Stern-Gerlach-eksperimentet) og spinn-bane-interaksjon (LS-kobling). I denne oppgaven skal du legge til relativistisk korreksjon til den kinetiske energien, samt beregne hvor mye den påvirker energien til hydrogenatomets grunntilstand.

3a) Den relativistiske energien er $K + mc^2 = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$. Vi har i kurset vist at man får den ikke-relativistiske energien ved hjelp av å rekkeutvikle dette uttrykket for $x = p^2c^2/m^2c^4 \ll 1$.

Bruk rekkeutvikling, og vis at $K \approx K_0 + K'$, der $K_0 = p^2/2m$ er ikke-relativistisk kinetisk energi, og $K' = -p^4/8m^3c^2$ er første grad av korreksjon.

HINT:

Rekkeutvikling: $\sqrt{1+x} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \frac{x^3}{16} -$ ... for små $x$.

Svar: $K + mc^2 = mc^2\sqrt{\frac{p^2c^2}{m^2c^4} + 1} = mc^2\sqrt{1+x} \approx mc^2(1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8})$
$\Rightarrow K \approx mc^2\frac{1}{2}(\frac{p^2c^2}{m^2c^4}) - mc^2\frac{1}{8}(\frac{p^2c^2}{m^2c^4})^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$.

3b) Vi definerer operatoren $\hat{K}' = -\hat{p}^4/8m^3c^2$.
Ved å bruke den radielle ligningen for hydrogenatomet (ligning. 4.53 in Griffiths), så er $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dr}$, og bølgefunksjonen er $u = u_{nl} = rR_{nl}(r)$.

Vis at for grunntilstanden til hydrogenatomet, så er

$$\langle K' \rangle = \frac{-1}{8m^3c^2}\int (\hat{p}^2\, u_{10})^*\, (\hat{p}^2\, u_{10})\, dr = -\frac{5\, E_1^2}{2mc^2}$$

der $E_1 = -\hbar^2/2ma^2 = -13.6$ eV.

HINT:

Bruk integrasjonsformelen i oppgave 2.
Grunntilstanden: $R_{10}(r) = 2a^{-3/2}e^{-r/a}$, der $a$ er Bohr-radien.

Svar: Sett $A^2 \equiv \frac{4}{a^3}$; $C \equiv \frac{-1}{8m^3c^2}A^2((-i\hbar)^2)^*(-i\hbar)^2 = \frac{-\hbar^4}{2m^3c^2a^3}$.
$\langle K' \rangle = C\int(\frac{d^2}{dr^2}\, r\, e^{-r/a})(\frac{d^2}{dr^2}\, r\, e^{-r/a})dr$.

$\frac{d^2}{dr^2}\, re^{-r/a} = \frac{d}{dr}(e^{-r/a} - \frac{r}{a}e^{-r/a}) = -\frac{1}{a}e^{-r/a} - \frac{1}{a}e^{-r/a} + \frac{r}{a^2}e^{-r/a} = (-\frac{2}{a} + \frac{r}{a^2})e^{-r/a}$.
$(\frac{d^2}{dr^2}\, re^{-r/a})^2 = (-2a + r)^2\frac{1}{a^4}e^{-2r/a} = (4a^2 - 4ar + r^2)\frac{1}{a^4}e^{-2r/a}$.

$\langle K' \rangle = \frac{C}{a^4}\int_0^\infty (4a^2 - 4ar + r^2)e^{-2r/a}dr = \frac{C}{a^4}(4a^2\frac{a}{2} - 4a\frac{a^2}{4} + \frac{2a^3}{8}) = \frac{5C}{4a}$
$= \frac{-5}{2mc^2}\frac{\hbar^4}{4m^2a^4} = \frac{-5}{2mc^2}E_1^2$.

3c) Beregn $\langle K' \rangle$ for grunntilstanden til hydrogenatomet, og oppgi svaret i eV.
Svar: $-(5/2) \cdot (13.6^2)/(0.511 \times 10^6) = -0.9 \times 10^{-3}$ eV.

3d) Anta at energien til elektronets $1s$-orbital i et tyngre atom kan beregnes på samme måte som for hydrogenatomet, kun gjennom å øke kjernens ladning fra $1e$ til $Ze$, der $Z$ er atomnummeret. Elektronets ladning er fortsatt $1e$.

Beregn $E_1$ og $\langle K' \rangle$ for $1s$-orbitalen for et gullatom, og oppgi svarene i keV. Hva kan du si om relativistisk korreksjon for forskjellige atomer?

HINT:
$Z = 79$ for gullatom.
For hydrogen: $E_1 = -\hbar^2/2ma^2 = -13.6$ eV, der $a = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$.

Svar: Fra HINT ser man at for hydrogen er $E_1$ proporsjonal med $e^4$. Potensialen fra et kjerne med ladning $Ze$ er $V(r) = -\frac{(Ze)e}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$. Energien er proporsjonal med $(Ze)^2e^2$.

$E_1(\mathrm{Au}) = E_1(\mathrm{H}) \cdot 79^2 = -85$ keV; $\langle K' \rangle(\mathrm{Au}) = \langle K' \rangle(\mathrm{H}) \cdot 79^4 = -35$ keV. Relativistisk korreksjon er viktig for tunge atomer.

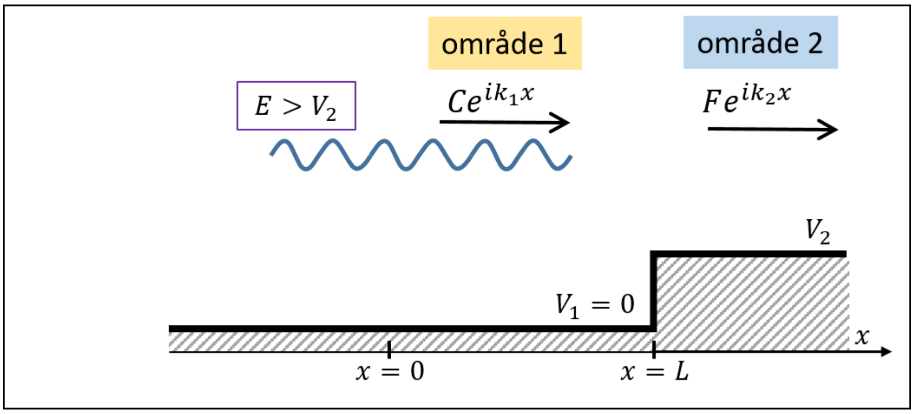
## Oppgave 4: Spredningstilstand [vekt: 20 p]

I denne oppgaven skal du studere når et elektron blir spredt ved potensialsteg som vises i Figur 1 og 2. Potensialene er konstante i hvert område, og i område 1 er $V(x) = V_1 = 0$. Slik som vi er vant til i kurset, skal du bruke planbølger med skarpe bølgetallsverdier, og ikke bygge opp fulle bølgepakker med kontinuerlige bølgetallsverdier. Elektronets bølge starter med å forplante seg fra venstre til høyre, og energien til bølgen er større enn potensialene i alle områdene.

Transmisjonskoeffisienten $T$ for bølgefunksjonen bestemmes direkte ved hjelp av bølgefunksjonens amplituder. (Med andre ord; du skal ikke studere fluks av elektroner.)

4a) Forklar hva en spredningstilstand er, og hva som skiller den fra en bundet tilstand.
Svar: Energien for en spredningstilstand er større enn potensialen når $x \to \infty$ eller når $x \to -\infty$, mens energien for en bundet tilstand er mindre enn potensialen både når $x \to \infty$ og $x \to -\infty$.

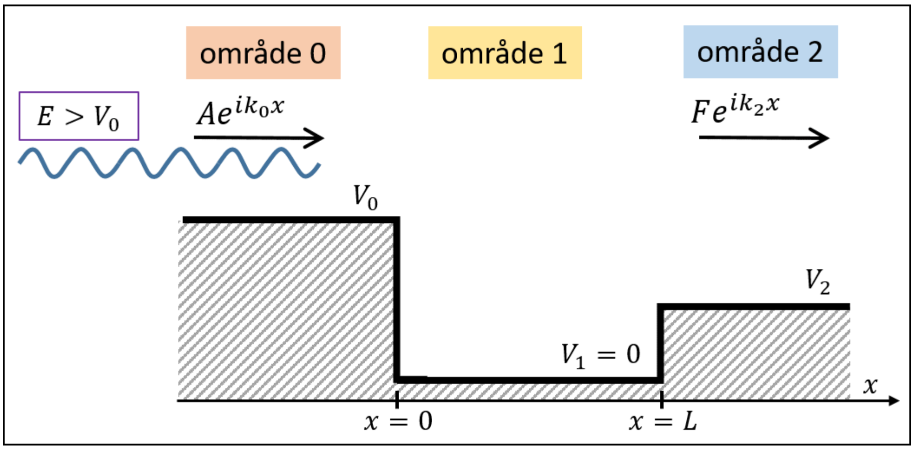
4b) Betrakt bølgefunksjonen og spredningspotensialet i Figur 1. Finn forholdet mellom amplitudene $C$ og $F$, samt forholdet mellom amplitudene $D$ og $F$, der $D$ er amplituden til den reflekterte bølgen.
Svar: Man kan bruke $\psi = Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x}$ eller $C \sin k_1x + D \cos kx$ .
Kontinuerlig bølge ved $x = L$: (1) $Ce^{ik_1L} + De^{-ik_1L} = Fe^{ik_2L}$.
Kont. derivert bølge ved $x = L$: (2) $ik_1(Ce^{ik_1L} - De^{-ik_1L}) = ik_2Fe^{ik_2L}$.




Figur 1: Spredningspotensial i oppgave 4b) og 4c): $V_1 = 0$ og $V_2 > V_1$.

Divider (2) med $ik_1$, og deretter adder/subtraher (1) og (2):
$2Ce^{ik_1L} \ = (1 + \frac{k_2}{k_1})Fe^{ik_2L} \Rightarrow C = (\frac{k_1+k_2}{2_1})e^{i(k_2-k_1)L}F.$
$2De^{-ik_1L} = (1 - \frac{k_2}{k_1})Fe^{ik_2L} \Rightarrow D = (\frac{k_1-k_2}{2k_1})e^{i(k_2+k_1)L}F.$

4c) Finn transmisjonskoeffisienten $T = |F|^2/|C|^2$ fra oppgave 4b).
Uttrykk svaret ved $E$ og $V_2$.
Svar: $T = (\frac{2k_1}{k_1+k_2})^2|e^{-i(k_2-k_1)L}|^2 = (\frac{2k_1}{k_1+k_2})^2$, der $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ og $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_2)}}{\hbar}$
$\Rightarrow T = 4E/(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_2})^2.$




Figur 2: Spredningspotensial i oppgave 4d): $V_1 = 0$ og $V_0 > V_2 > V_1$.

4d) Finn transmisjonskoeffisienten $T = |F|^2/|A|^2$ for bølgen i Figur 2.
Uttrykk svaret ved $k_0$, $k_1$, $k_2$, og $L$. Forenkle løsningen slik at uttrykket bare inneholder bølgetallene og den trigonometriske funksjonen $\sin^2(k_1L)$.

HINT:

$e^{ix} - e^{-ix} = 2i \sin x$.

$e^{ix} + e^{-ix} = 2 \cos x$.

$\cos^2 x + \sin^2 x = 1$.

Når $k_0 = k_2$ får vi samme uttrykk som i Griffiths (spredning mot potensialbrønn) og for potensialbarriere i oblig 8.

Svar: La $Be^{-ik_0 x}$ være den reflekterte bølgen i område 0.
Som i 4b), kontinuitet ved $x = 0$: $A + B = C + D$ og $ik_0(A - B) = ik_1(C - D)$.
$\Rightarrow A = (\frac{k_0+k_1}{2k_0})C + (\frac{k_0-k_1}{2k_0})D$.

$A = F[(\frac{k_0+k_1}{2k_0})(\frac{k_1+k_2}{2_1})e^{i(k_2-k_1)L} + (\frac{k_0-k_1}{2k_0})(\frac{k_1-k_2}{2k_1})e^{i(k_2+k_1)L}]$
$= \frac{Fe^{ik_2 x}}{4k_0 k_1}[(k_0 k_1 + k_0 k_2 + k_1^2 + k_1 k_2)e^{-ik_1 L} + (k_0 k_1 - k_0 k_2 - k_1^2 + k_1 k_2)e^{ik_1 L}]$.

$= /\mathrm{HINT}/ = \frac{Fe^{ik_2 x}}{4k_0 k_1}[H_1(e^{ik_1 L} + e^{-ik_1 L}) - H_2(e^{ik_1 L} - e^{-ik_1 L})]$
$= \frac{Fe^{ik_2 x}}{2k_0 k_1}[H_1 \cos(k_1 L) - iH_1 \sin(k_1 L)]$, der $H_1 \equiv (k_0 k_1 + k_1 k_2)$; $H_2 \equiv (k_1^2 + k_0 k_2)$.

$|A|^2 = \frac{|F|^2}{4k_0^2 k_1^2}[H_1^2 \cos^2(k_1 L) + H_2^2 \sin^2(k_1 L)] = \frac{|F|^2}{4k_0^2 k_1^2}[H_1^2 + (H_2^2 - H_1^2)\sin^2(k_1 L)]$
$T = 4k_0^2 k_1^2 / [H_1^2 + (H_2^2 - H_1^2)\sin^2(k_1 L)]$

Sensorveiledning for avsluttende hjemmeeksamen
FYS2140 Vår 2021

Til denne sensurveiledning er det laget et detaljert løsningsforslag som utgjør en viktig del av poengsettingen. Alle oppgaver blir rettet av to lærere/fagpersoner.

Oppgavene rettes med disse maksimale poeng per deloppgave:

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **1a** | **3** | **2a** | **2** | **3a** | **3** | **4a** | **2** |
| **1b** | **3** | **2b** | **6** | **3b** | **6** | **4b** | **6** |
| | | **2c** | **6** | **3c** | **2** | **4c** | **4** |
| | | **2d** | **6** | **3d** | **4** | **4d** | **8** |

Totalt er dette 61 poeng som skal tilsvare 80% av totalkarakter på kurset (midttermineksamen teller 20%). Vi vil derfor gange poengene som gis med faktoren 80/61.

- <u>Det gis null poeng</u> på deloppgaver hvis den ikke er besvart eller at besvarelsen ikke er relevant.
- <u>Det gis fullt poeng</u> på deloppgaver hvis det er i henhold til løsningsforslaget eller løst på annen fornuftig måte. Det skal ikke trekkes poeng hvis besvarelsen er besvart ved hjelp av matematisk/numerisk bevis, selv om det er uttrykt i oppgaveteksten «vis (uten regning) at så og så…» eller liknende.
- <u>Det gis 1/3 ≈ 30% av fullt poeng</u> hvis kandidaten er noe på vei mot riktig svar.
- <u>Det gis 2/3 ≈ 70% av fullt poeng</u> hvis kandidaten er nesten helt framme eller slurvefeil.
- <u>Det gis 1/2 = 50% av fullt poeng</u> hvis deloppgaven er halvferdig besvart.
- <u>Det gis tilnærmet fullt poeng</u> hvis tankemåten er riktig, men følgefeil.
- Det gis <u>ikke tilleggspoeng</u> for tilleggstekst som ikke er relevant for spørsmålet, selv om tekstens innhold er riktig isolert sett.
- Hvis det leveres tilleggstekst som det ikke ble spurt om og som avslører manglene innsikt, gis <u>90% av foreslått poeng</u>.