

UNIVERSITETET I OSLO

Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Eksamen i: FYS2140 Kvantefysikk

Dato: Onsdag 5. juni 2024, kl 15:00-19:00 (4 timer)

Oppgavesettet er på: 4 sider

Tillatte hjelpemidler: Rottman: 'Matematisk formelsamling', Øgrim og Lian: 'Fysiske størrelser og enheter', Angell og Lian: 'Fysiske størrelser og enheter'. Godkjent kalkulator. Ett A4-ark med egne notater (begge sider av arket).

Kontroller at oppgavesettet er komplett før du begynner å besvare spørsmålene.

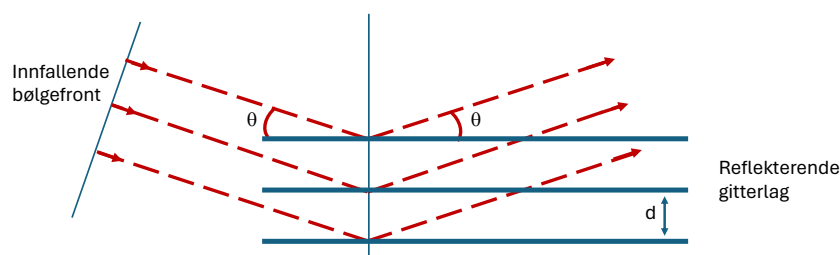
Oppgave 1 Materiens bølgeegenskaper

Fysikeren de Broglie foreslo i sin doktoravhandling i 1924 at partikler med masse også kunne ha bølgenatur. Hans hypotese var i analogi med Plancks antakelse om at lys kan ha partikkelnatur med energi $E = h\nu$ og bevegelsesmengde $p = h/\lambda$.

- a) Skriv ned de Broglie bølgelengden for en partikkel. Hva må du passe på hvis du har relativistiske partikler?

Svar: de Broglie bølgelengden er $\lambda = h/p$, hvor p er bevegelsesmengden. Relasjonen gjelder også for relativistiske partikler, men da må $p = mv$ byttes ut med p fra det relativistiske uttrykket $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$.

I 1927 kunne Davisson og Germer observere elektroners bølgenatur ved å anvende Braggdiffraksjon som tidligere var brukt for röntgenstråler. Figur 1 viser en skisse av elektronenes spredning mot en krystall.

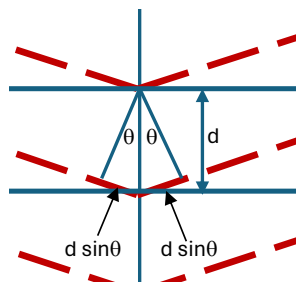


Figur 1: Prinsippskisse av Braggdiffraksjon fra en krystall med gitterplanavstand d . Spredningsvinkelen for innkommende og utgående stråler er θ .

- b) Forklar bakgrunnen for Braggdiffraksjon og vis hvordan du finner Bragg-betingelsen $2d \sin \theta = n\lambda$ (lag gjerne en tegning).

Svar: Fra Fig. 1 ser vi at de strålene som går lenger ned i krystall-laget har lenger veilengde enn de som reflekteres fra øvre krystall-lag. Figur 2 viser de to ekstra veilengdene gitt ved $2d \sin \theta$. Hvis den ekstra veilengden er et helt antall bølgelengder $n\lambda$, vil det bli konstruktiv interferens for utgående stråler. Dette er grunnlaget for Bragg-betingelsen som kan uttrykkes ved $2d \sin \theta = n\lambda$.

(Det kan være noen studenter som har tolket 'bakgrunnen for Bragg-diffraksjon' som historisk bakgrunn og ikke bakgrunn i partiklenes forskjellige veilengder i de forskjellige krystall-lag. Det trekkes ikke poeng for en slik tolkning).



Figur 2: Skisse av de to ekstra veilengdene gitt ved d og θ .

Det er vanlig å bruke termiske nøytroner med lav fart ($v \ll c$) i materialstudier av krystaller. Nøytronene med masse $m_n = 939.6 \text{ MeV}/c^2$ har i dette eksperimentet kinetisk energi $K_n = 0.025 \text{ eV}$. I spredning mot en NaCl krystall med gitterplanavstand $d = 2.82 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ observeres den første konstruktive interferens for vinkelen $\theta = 18.6^\circ$. Det kan være nyttig å bruke relasjonen $hc = 1240 \text{ eV nm}$ i denne oppgaven.

- c) Finn den observerte bølgelengden ut fra Braggbetingelsen for $n = 1$ og sammenlikn med de Broglie bølgelengden.

Svar: Braggbetingelsen gir

$$\lambda = 2d \sin \theta = 2 \cdot 2.82 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cdot 0.31896 = 1.80 \cdot 10^{-10} \text{ m}, \quad (1)$$

som passer godt med de Broglie bølgelengden

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_n K_n}} = \frac{hc}{\sqrt{2m_n c^2 K_n}} \\ &= \frac{1240 \text{ eV nm}}{\sqrt{2 \cdot 939.6 \cdot 10^6 \text{ eV} \cdot 0.025 \text{ eV}}} \\ &= 1.81 \cdot 10^{-10} \text{ m}. \end{aligned} \quad (2)$$

- d) Partiklers bølgenatur avspeiler seg i en uskarphetsrelasjon mellom x og p . Som et eksempel, ser vi her på en partikkel med bølgefunksjon

$$\psi(x) = \begin{cases} C(a^2 - x^2), & -a \leq x \leq +a \\ 0, & \text{ellers,} \end{cases} \quad (3)$$

hvor C er normeringskonstanten. Følgende verdier er oppgitt:

$$C = \sqrt{\frac{15}{16a^5}}, \quad \langle x \rangle = 0, \quad \langle p \rangle = 0 \text{ og } \langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{7}. \quad (4)$$

Argumenter hvorfor $\langle x \rangle = 0$ og $\langle p \rangle = 0$. Regn ut forventningsverdien $\langle p^2 \rangle$, uskarphetene (standardavvikene) σ_x og σ_p , og sammenlikn resultatet med Heisenbergs uskarphetsrelasjon.

Svar: Forventningsverdiene for x og p er null fordi integranden i integrasjonen er en odde funksjon rundt $x = 0$. (Mer presist er integrandene proporsjonale med henholdsvis $x(a^2 - x^2)^2$ og $(a^2 - x^2)x$.)

Vi innsetter $\hat{p}^2 = (\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx})^2$ som gir forventningsverdien

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= -C^2 \hbar^2 \int_{-a}^a (a^2 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} (a^2 - x^2) dx & (5) \\ &= 2C^2 \hbar^2 \int_{-a}^a (a^2 - x^2) dx \\ &= 2C^2 \hbar^2 (a^2 x - \frac{x^3}{3}) \Big|_{-a}^a \\ &= 4C^2 \hbar^2 (a^3 - \frac{a^3}{3}) \\ &= 4C^2 \hbar^2 (a^3 - \frac{a^3}{3}) \\ &= \frac{5 \hbar^2}{2 a^2} \end{aligned}$$

Uskarphetene (standardavvikene) er gitt ved $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = a/\sqrt{7}$ og $\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{5/2} \hbar/a$. Dette gir videre $\sigma_x \sigma_p = \sqrt{5/14} \hbar = \sqrt{10/7} \hbar/2 > \hbar/2$, som tilfredstiller Heisenbergs uskarphetsrelasjon $\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2$.

Oppgave 2 Hydrogenatomet

I denne oppgaven ser vi bort fra egenspinnet til elektronet. Videre lønner det seg *ikke* å innføre spesifikke rom-koordinater, som for eksempel sfæriske eller kartesiske.

Den tidsuavhengige Schrödingerlikningen for hydrogen er gitt ved

$$\hat{H}_0 \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm}, \quad (6)$$

hvor tilstandene ψ_{nlm} er ortonormerte. Energi-egenverdiene er gitt ved $E_n = -E_0/n^2$ der $E_0 = 13.6$ eV.

- a) Hvilke verdier kan kvantetallene n , l og m anta? Hva representerer operatorene \hat{L}^2 og \hat{L}_z og hvilke egenverdier har disse i tilstanden ψ_{nlm} ?

Svar: Kvantetallene n , l og m kan anta verdiene: $n = 1, 2, 3, \dots$, $l = 0, 1, \dots, n - 1$ og $m = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, l$. Operatoren \hat{L}^2 representerer kvadratet av det angulære moment (banespinnet) og \hat{L}_z er projeksjonen av det angulære moment inn på z -aksen. Egenverdiene er henholdsvis $l(l+1)\hbar^2$ og $m\hbar$.

- b) Et hydrogenatom befinner seg ved tiden $t = 0$ i en superponert tilstand

$$\Psi_0(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}} (\psi_{21-1} + \psi_{210} + \psi_{211}), \quad (7)$$

uttrykt ved de romlige egenfunksjonene ψ_{nlm} . Vis at $\Psi_0(\vec{r}, 0)$ er normert.

Svar: Normeringsintegralet blir

$$\begin{aligned} & \int \Psi_0^*(\vec{r}, 0) \Psi_0(\vec{r}, 0) d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{3} \int (\psi_{21-1}^* + \psi_{210}^* + \psi_{211}^*) (\psi_{21-1} + \psi_{210} + \psi_{211}) d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{3} \int (|\psi_{21-1}|^2 + |\psi_{210}|^2 + |\psi_{211}|^2) d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{3} (1 + 1 + 1) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (8)$$

- c) Skriv ned egenverdiene for \hat{H}_0 og \hat{L}^2 i tilstanden $\Psi_0(\vec{r}, 0)$ og de tilhørende verdier for uskarphetene ΔH_0 og ΔL^2 . Gi en kort begrunnelse for verdiene som du oppgir.

Svar: Egenverdiene for \hat{H}_0 og \hat{L}^2 i tilstanden $\Psi_0(\vec{r}, t)$ er henholdsvis $E_2 = -E_0/4$ og $1(1+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$. Siden egenverdiene er skarpe, blir $\Delta H_0 = 0$ og $\Delta L^2 = 0$.

- d) Hvor stor sannsynlighet er det for å måle verdien $-\hbar$ for \hat{L}_z i tilstanden $\Psi_0(\vec{r}, 0)$?

Svar: Bølgefunksjonen kan skrives som

$$\begin{aligned}\Psi_0(\vec{r}, 0) &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\psi_{21-1} + \psi_{210} + \psi_{211}) \\ &= c_{21-1}\psi_{21-1} + c_{210}\psi_{210} + c_{211}\psi_{211},\end{aligned}\quad (9)$$

der kvadratet av koeffesientene c_{nlm} foran de enkelte bølgefunksjonene bestemmer sannsynligheten for å observere tilsvarende kvantetall. Det vil si

$$|c_{21-1}|^2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{1}{3}.\quad (10)$$

Det er derfor $1/3$ sannsynlighet for å måle verdien $-\hbar$.

- e) Bestem forventningsverdien $\langle L_z \rangle$ og uskarpheten ΔL_z i tilstanden $\Psi_0(\vec{r}, 0)$.

Svar: Følgende forventningsverdier kan regnes ut

$$\begin{aligned}\langle L_z \rangle &= \int \Psi_0^*(\vec{r}, 0) \hat{L}_z \Psi_0(\vec{r}, 0) d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{3} \int (\psi_{21-1}^* + \psi_{210}^* + \psi_{211}^*) \hat{L}_z (\psi_{21-1} + \psi_{210} + \psi_{211}) d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{3} \int (-1\hbar|\psi_{21-1}|^2 + 0\hbar|\psi_{210}|^2 + 1\hbar|\psi_{211}|^2) d^3\vec{r} \\ &= \frac{\hbar}{3} (-1 + 0 + 1) \\ &= 0,\end{aligned}\quad (11)$$

og

$$\begin{aligned}\langle L_z^2 \rangle &= \int \Psi_0^*(\vec{r}, 0) \hat{L}_z^2 \Psi_0(\vec{r}, 0) d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{3} \int (\psi_{21-1}^* + \psi_{210}^* + \psi_{211}^*) \hat{L}_z^2 (\psi_{21-1} + \psi_{210} + \psi_{211}) d^3\vec{r} \\ &= \frac{1}{3} \int ((-1)(-1)\hbar^2|\psi_{21-1}|^2 + (0)(0)\hbar^2|\psi_{210}|^2 + (1)(1)\hbar^2|\psi_{211}|^2) d^3\vec{r} \\ &= \frac{\hbar^2}{3} (1 + 0 + 1) \\ &= \frac{2}{3}\hbar^2.\end{aligned}\quad (12)$$

Dermed blir variansen $\Delta L_z^2 = \langle L_z^2 \rangle - \langle L_z \rangle^2 = \frac{2}{3}\hbar^2$ som gir uskarpheten (standardavviket) $\Delta L_z = \sqrt{2/3}\hbar$.

Vi plasserer hydrogenatomet i et homogent magnetfelt langs z -aksen, $\vec{B} = (0, 0, B)$. Hamiltonoperatoren inkluderer nå den normale Zeeman effekten og blir

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m_e} B \hat{L}_z, \quad (13)$$

der e er elektronets ladning og m_e er massen til elektronet. Hydrogenatomet er preparert i den samme tilstanden som vi hadde uten B -felt (Likn. 7). Det vil si at den nye bølgefunksjonen starter som $\Psi(\vec{r}, 0) = \Psi_0(\vec{r}, 0)$ ved tiden $t = 0$.

- f) Hvis du foretar en måling på systemet ved tiden $t = 0$, hvilke energier vil du kunne måle?

Svar: Du vil kunne måle

$$\begin{aligned} E_{21-1} &= -E_0/4 - \frac{e\hbar}{2m_e} B, \\ E_{210} &= -E_0/4, \text{ eller} \\ E_{21+1} &= -E_0/4 + \frac{e\hbar}{2m_e} B. \end{aligned} \quad (14)$$

- g) Vi skal nå la bølgefunksjonen utvikle seg med tiden t og definerer følgende størrelser: $\omega_0 \equiv -E_0/4\hbar$ og $\omega_z \equiv eB/2m_e$. Finn bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r}, t)$ uttrykt ved disse størrelsene.

Svar: Den nye bølgefunksjonen kan uttrykkes som

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\psi_{21-1} e^{-i(-\frac{E_0}{4\hbar} - \frac{e}{2m_e} B)t} \right. \\ &+ \psi_{210} e^{-i(-\frac{E_0}{4\hbar})t} \\ &+ \left. \psi_{211} e^{-i(-\frac{E_0}{4\hbar} + \frac{e}{2m_e} B)t} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\psi_{21-1} e^{-i(\omega_0 - \omega_z)t} + \psi_{210} e^{-i\omega_0 t} + \psi_{211} e^{-i(\omega_0 + \omega_z)t} \right) \\ &= \frac{e^{-i\omega_0 t}}{\sqrt{3}} \left(\psi_{21-1} e^{+i\omega_z t} + \psi_{210} + \psi_{211} e^{-i\omega_z t} \right). \end{aligned} \quad (15)$$

- h) Hvilke(n) av forventningsverdiene $\langle E \rangle$, $\langle L_z \rangle$, $\langle L^2 \rangle$, og $\langle \vec{r} \rangle$ er uavhengige av tiden i tilstanden $\Psi(\vec{r}, t)$? Begrunn svaret.

Svar: Hamiltonoperatoren \hat{H} har energi-eigenverdier for hver av de tre ψ_{nlm} funksjonene i Likn. (15). I uttrykket for $\langle E \rangle$ vil ledd av typen $(\psi_{nlm}e^{-i\omega t}) \cdot (\psi_{nlm}e^{-i\omega t})^*$ bli lik $|\psi_{nlm}|^2$ og er dermed tidsuavhengige. Videre forsvinner alle kryssledd siden ψ_{nlm} -funksjonene er ortogonale. Ettersom \hat{L}_z og \hat{L}^2 kommuterer med \hat{H} , har også disse operatorene egenverdier for de tre ψ_{nlm} funksjonene og tidsavhengigheten i forventningsverdiene forsvinner. Posisjonen \vec{r} kommuterer ikke med \hat{H} og dermed vil $\langle \vec{r} \rangle$ kunne variere med tiden.

Oppgave 3 Fler-elektronsystemer

- a) Den antisymmetriske spinn-eigenfunksjonen for et to-elektronsystem kan skrives som

$$\chi^A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)]. \quad (16)$$

Forklar hva de fire funksjonene på høyre side av likhetstegnet representerer.

Svar: Her representerer $\chi_+(1)$ spinn-eigenfunksjonen for elektron 1 med spinn opp, $\chi_-(2)$ elektron 2 med spinn ned, $\chi_-(1)$ elektron 1 med spinn ned og $\chi_+(2)$ elektron 2 med spinn opp.

- b) Skriv ned de tre andre mulige to-elektron spinn-eigenfunksjonene.

Svar: De tre andre spinn-eigenfunksjonene er

$$\begin{aligned} \chi^S(1, 2) &= \chi_-(1)\chi_-(2), \\ \chi^S(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)], \\ \chi^S(1, 2) &= \chi_+(1)\chi_+(2). \end{aligned} \quad (17)$$

- c) Skriv ned kvantetallene for det totale egenspinnet og dets projeksjon inn på z -aksen for hver av de fire spinn-eigenfunksjonene fra oppgave a) og b). Vis hvilken symmetri disse spinn-eigenfunksjonene har med hensyn på elektronbytte.

Svar: Singlet-tilstanden $\chi^A(1, 2)$ har kvantetall $s = 0$ for det totale egenspinnet, og $m_s = 0$ for totalspinnets z -komponent.

Triplett-tilstandene $\chi^S(1, 2)$ har kvantetall $s = 1$ for det totale egen-spinnet, og $m_s = -1, m_s = 0$ og $m_s = 1$ for totalspinnets z -komponenter. Vi ser enkelt at

$$\begin{aligned}\chi^A(1, 2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)] \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(2)\chi_-(1) - \chi_-(2)\chi_+(1)] \\ &= -\chi^A(2, 1),\end{aligned}\tag{18}$$

som gir antisymmetrisk spinn-egenfunksjon. På samme måte ser vi at de tre andre spinn-egenfunksjonene er symmetriske ved at

$$\chi^S(1, 2) = +\chi^S(2, 1).\tag{19}$$

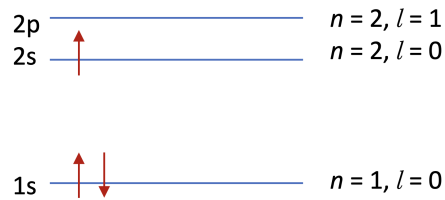
- d) I kurset har vi vist med en enkel modell¹ at to identiske fermioner er nærmere (fjernere) hverandre hvis den romlige bølgefunksjon er symmetrisk (antisymmetrisk). Hva kalles denne kraften og hva er dennes opphav?

Svar: Kraften kalles *exchange force* eller *utvekslingskraft*. Det er egentlig ingen kraft, men skyldes den geometriske fordeling av $|\psi_{\text{rom}}|^2$ på grunn av bølgefunksjonens symmetriegenskaper. Dette er et rent kvantemekanisk fenomen.

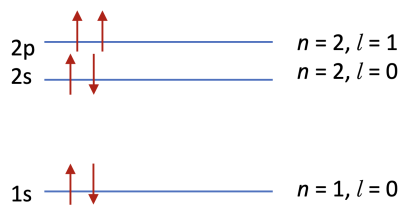
- e) Figur 3 viser grunntilstanden for litium hvor de tre elektronene er plassert i $1s$ - og $2s$ -orbitalene. Tegn av figuren og fyll inn elektroner for grunntilstanden i karbon som har seks elektroner. Hvilke symmetrier har spinn-egenfunksjonen $\chi(1, 2)$ og rom-bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ i $2p$ -orbitalen? Forklar kvalitativt og med få ord hvorfor dette gir laveste grunntilstandsenergi.

Svar: Figur 4 viser plasseringen av de seks elektronene i karbon. Vi legger merke til at de to elektronene i $2p$ -tilstanden har $s = s_1 + s_2 = 1$. Den laveste grunntilstandsenergien oppnås nemlig ved at de to elektronene ikke er for nær hverandre på grunn av frastøtende Coulombkrefter. Dette oppnås best ved en antisymmetrisk rom-bølgefunksjon. Siden elektroner er fermioner, må den totale bølgefunksjon være antisymmetrisk, som betyr at spinn-egenfunksjonen må være symmetrisk. Altså er den totale bølgefunksjonen gitt ved $\Psi^A(1, 2) = \psi^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi^S(1, 2)$.

¹Modellen beskriver forventningsverdien av kvadratet av avstanden mellom to elektroner langs x -aksen, $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$, basert på symmetriegenskapene for elektronenes totale romlige bølgefunksjon.



Figur 3: Enkeltpartikkel-nivåskjema for litium atomet. Vi har her fylt opp elektroner for grunntilstanden i litium med protontall $Z = 3$. Pilene symboliserer spinn opp og ned og de spektroskopiske symbolene s og p tilsvarer kvantetallene for de angulære momentene $l = 0$ og $l = 1$.



Figur 4: Her er seks elektroner fylt inn i enkeltpartikkel-nivåskjemaet for karbon. De to elektronene som er plassert i $2p$ -nivået har totalt egenspinn $s = s_1 + s_2 = 1$.