

UNIVERSITETET I OSLO

Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Eksamen i: FYS2140 Kvantefysikk

Eksamensdag: 10. juni

Tid for eksamen: 09.00 (4 timer)

Oppgavesettet er på fem (5) sider

Vedlegg: Ingen

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 Hydrogenatom for kjemikere

I denne oppgaven skal vi se på hydrogenatomet. Vrien i år er at vi skal skrive løsningen av Schrödingerligningen på en måte som kjemikere liker bedre. Vi ser bort fra spinn i denne oppgaven.

Løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for hydrogenatomet er som kjent

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi), \quad (1)$$

hvor $R_{nl}(r)$ er løsningene av den tilhørende radialligningen og $Y_l^m(\theta, \phi)$ er de sfæriske harmoniske. Her bruker vi sfæriske koordinater

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad (2)$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi, \quad (3)$$

$$z = r \cos \theta. \quad (4)$$

Vi gir de eksplisitte uttrykkene for de enkleste av disse funksjonene i Tabell 1.

$R_{nl}(r)$	$Y_l^m(\theta, \phi)$
$R_{10}(r) = Ae^{-r/a}$	$Y_0^0(\theta, \phi) = B$
$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{8}}A \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$	$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{3}B \cos \theta$
$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}}A \frac{r}{2a} e^{-r/2a}$	$Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{2}}B \sin \theta e^{\pm i\phi}$

Tabell 1: Oversikt over de enkleste radialfunksjonene for hydrogenatomet, R_{nl} , samt de sfæriske harmoniske, Y_l^m . A og B er to normeringskonstanter og a er Bohrradien.

Vi begynner med litt generelle spørsmål.

- a) Hva slags verdier kan kvantetallene n , l og m ta for hydrogenatomet? [3 poeng]
- b) Gi normeringsbetingelsen for bølgefunksjonen ψ_{nlm} . Vi antar separat normering av R og Y . Vis at normeringsbetingelsen for R er gitt ved

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = 1. \quad (5)$$

[4 poeng]

- c) Hva er enheten til $R(r)$? Gi en begrunnelse. [4 poeng]
- d) Finn normeringskonstantene A og B . *Hint*: Du kan få bruk for følgende integral

$$\int_0^\infty x^n e^{-\lambda x} dx = n! \lambda^{-(n+1)}. \quad (6)$$

[4 poeng]

- e) Forklar hva vi mener med degenerasjon. Bestem degenerasjonsgraden til hydrogen som funksjon av n . *Hint*: Fra kombinatorikken har vi at (se for eksempel Rottmann)

$$\sum_{l=1}^n l = \frac{n(n+1)}{2}. \quad (7)$$

[6 poeng]

Vi definerer så en ny type funksjon $X_{lm}(\theta, \phi)$ som er lineærkombinasjoner av de sfæriske harmoniske:

$$X_{lm} = \begin{cases} \frac{i}{\sqrt{2}}[Y_l^m - (-1)^m Y_l^{-m}] & \text{hvis } m < 0 \\ Y_l^0 & \text{hvis } m = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[Y_l^{-m} + (-1)^m Y_l^m] & \text{hvis } m > 0 \end{cases}. \quad (8)$$

- f) Vis at

$$X_{11}(\theta, \phi) = \sqrt{3}B \sin \theta \cos \phi \quad \text{og} \quad X_{1,-1}(\theta, \phi) = \sqrt{3}B \sin \theta \sin \phi. \quad (9)$$

[4 poeng]

- g) Forklar hvorfor $R_{21}X_{11}$, $R_{21}X_{10}$ og $R_{21}X_{1,-1}$ er egentilstander til Hamiltonoperatoren til hydrogenatomet. [3 poeng]
- h) Hva slags verdier for (kvadratet av) angulærmomentet, L^2 , kan du få dersom du måler et hydrogenatom i tilstanden $R_{21}X_{11}$? [3 poeng]
- i) Er $R_{21}X_{11}$ en egentilstand til \hat{L}_z ? Hva med \hat{L}_x ? Begrunn svaret. [4 poeng]
- j) Hva er sannsynligheten for at du måler verdien $-\hbar$ for z -komponenten til angulærmomentet til et hydrogenatom som er preparert i tilstanden $\Psi(\vec{r}, 0) = R_{21}(r)X_{11}(\theta, \phi)$? [2 poeng]
- k) De sfæriske harmoniske kan skrives som

$$Y_l^m(\theta, \phi) = N_l^m P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (10)$$

hvor N_l^m er normeringskonstanter, og hvor $P_l^m(x)$ er de assosierte Legendrepolynomene som er reelle funksjoner av x . Vi har også at $N_l^m = N_l^{-m}$ og $P_l^m = (-1)^m P_l^{-m}$. Bruk dette til å vise at dersom man skriver løsningene for hydrogenatomet på formen $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)X_{lm}(\theta, \phi)$, så er bølgefunksjonen alltid en reell funksjon. [5 poeng]

Oppgave 2 Opprullet dimensjon

I denne oppgaven skal vi se på kvantemekanikk i to romdimensjoner, men hvor en av de to dimensjonene er en sluttet sirkel med omkrets L . Vi bruker koordinatene (x, u) hvor $x \in \mathbb{R}$ og $u \in [0, L]$. Vi vil i denne oppgaven bruke et vanlig uendelig brønn potensial

$$V(x, u) = \begin{cases} 0 & \text{dersom } 0 < x < a \\ \infty & \text{ellers} \end{cases}. \quad (11)$$

- a) Forklar hvorfor Schrödingerligningen i to dimensjoner da skrives som

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial u^2} \right) \Psi(x, u, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, u, t). \quad (12)$$

når $0 < x < a$. [3 poeng]

- b) Hva slags grensebetingelse må vi bruke for bølgefunksjonen i u -retningen? [2 poeng]

Vi antar nå separasjon av variable, altså at løsningene $\psi(x, u)$ av den tidsuavhengige Schrödingerligningen kan skrives som produktet $\psi(x, u) = X(x)U(u)$.

- c) Vis at de følgende uttrykkene for funksjonene X og U gir oss løsninger av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for $0 < x < a$:

$$X(x) = A \sin(k_x x) + B \cos(k_x x) \quad \text{og} \quad U(u) = C e^{ik_u u}. \quad (13)$$

[4 poeng]

- d) Bruk grensebetingelsene for $\psi(x, u)$ til å vise at $B = 0$,

$$k_x = \frac{\pi n_x}{a}, \quad (14)$$

hvor $n_x = 1, 2, 3, \dots$, og

$$k_u = \frac{2\pi n_u}{L}, \quad (15)$$

hvor $n_u = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ [6 poeng]

- e) Vis at energien kan skrives ved hjelp av kvantetallene n_x og n_u som

$$E_{n_x n_u} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left[n_x^2 + \left(\frac{2a}{L} \right)^2 n_u^2 \right]. \quad (16)$$

[4 poeng]

- f) Hva er energien til grunntilstanden i dette potensialet, og hvor mange elektroner kan befinne seg i den? Hvor mange kan finnes i tilstanden(e) med nest lavest energi? Anta at bredden av brønnen er $a = 1 \text{ nm}$. Massen til et elektron er $m = 0.511 \text{ MeV}/c^2$. [6 poeng]

- g) Bruk normeringskravet til $\psi(x, u)$ for å vise at $AC = \sqrt{2/aL}$ slik at den fullstendige løsningen blir

$$\psi_{n_x n_u}(x, u) = \sqrt{\frac{2}{aL}} \sin(k_x x) e^{ik_u u}. \quad (17)$$

[4 poeng]

- h) Finn forventningsverdien til p_x^2 for tilstanden $\psi_{n_x n_u}(x, u)$. [3 poeng]
- i) I grensen $L \ll a$ viser ligning (16) hva som skjer dersom det eksisterer små ekstra opprullede dimensjoner i verden. Vi minner om at energien for en uendelig brønn i en vanlig dimensjon er

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n_x^2. \quad (18)$$

Gitt at størrelsen på denne ekstra dimensjonen er $L = 10^{-3}$ nm, hvor mye energi trenger jeg for å eksitere et elektron i den nye dimensjonen? [3 poeng]

- j) Hvor mye ekstra effektiv masse (hvileenergi) ser det ut som et elektron som er eksitert i den ekstra dimensjonen har? *Hint:* Ta utgangspunkt i Einsteins formel for relativistisk energi i en vanlig dimensjon $E^2 = p_x^2 c^2 + m^2 c^4$. [3 poeng]