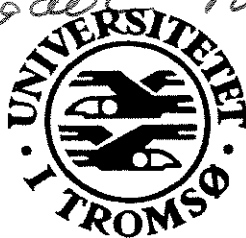


Obligatorisk oppgave nr. 2
i Fys-2000
Høsten 2006



ARKIVKOPI

Innlevering: Onsdag 8. november

EKSAMENSOPPGAVE I FYS-113

Eksamen i : Fys-113 Kvantemekanikk
Eksamensdag : Torsdag 10. desember 1998
Tid for eksamen : Kl. 0900-1500
Sted: : Samvirkegården, 3. et.
Tillatte hjelpemidler: K. Rottmann: Matematishe Formelsammlung,
O. Øgrim: Størrelser, enheter og symboler i fysikken,
S. Barnett and T.M. Cronin: Mathematical Formulae,
C. Nordling/J. Österman: Physics Handbook,
Fysiske og matematiske tabeller, lommekalkulator.

Oppgavesettet er på 8 sider inkl. forside.

Kontaktperson: Noralv Bjørnå, tlf 77 64 51 31.

DET MATEMATISK-NATURVITENSKAPELIGE FAKULTET

Institutt for fysikk, Nordlysobservatoriet

Universitetet i Tromsø, 9037 Tromsø

Telefon 77 64 51 50, Telefax 77 64 55 80

Oppgave 1

En operator $\hat{A}$ sies å være Hermitesk dersom

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (1)$$

og anti-Hermitesk dersom

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = -\langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (2)$$

for alle vektorer ψ_1 og ψ_2 innen en bestemt undermengde i Hilbertrommet. $\langle | \rangle$ betegner skalarprodukt.

- Vis at egenverdiene og middelverdien til en Hermitesk operator er reelle.
- Vis at egenvektorene til en Hermitesk operator er ortogonale når de svarer til forskjellige egenverdier.
- Hvorfor er Hermiteske operatoren en viktig klasse operatoren i kvantemekanikken?

Kommutatoren mellom to operatoren $\hat{A}$ og $\hat{B}$ er definert ved

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (3)$$

- Uttrykk kommutatoren $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$ ved kommutatorene $[\hat{A}, \hat{C}]$ og $[\hat{B}, \hat{C}]$. Uttrykk kommutatoren $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]$ ved kommutatorene $[\hat{A}, \hat{B}]$ og $[\hat{A}, \hat{C}]$. ($\hat{A}$, $\hat{B}$ og $\hat{C}$ er vilkårlige operatoren.)
- La $\hat{A}$, $\hat{B}$ og $\hat{C}$ være Hermiteske operatoren. Bevis følgende påstander:
 - Operatoren $\hat{A}\hat{B}$ er Hermitesk $\Leftrightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$.
 - Operatoren $[\hat{A}, \hat{B}]$ er anti-Hermitesk.
 - $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$ er anti-Hermitesk.

Betrakt mengden av alle kvadratisk integrerbare funksjoner av en reell variabel x i intervallet fra a til b og skalarproduktet

$$\langle f | g \rangle \equiv \int_a^b f^*(x)g(x)dx \quad (4)$$

- Vis at posisjonsoperatoren x er Hermitesk. Vis at momentumoperatoren $\hat{p}_x \equiv -i\hbar \frac{d}{dx}$ er Hermitesk for den klasse funksjoner som har den egenskapen at de forsvinner på randa av intervallet eller er periodiske.
- Hvilke(t) krav må funksjonene tilfredsstille for at operatoren $\hat{p}_x^2$ skal være Hermitesk?

Oppgave 2

Til bruk i denne oppgaven oppgis integralet

$$\int_0^\infty e^{-\lambda r} r^2 dr = \frac{2}{\lambda^3} \quad (\lambda > 0) \quad (5)$$

Vi skal studere bevegelsen av elektronet i et hydrogenatom relativt til kjernen. Vi neglisjerer spinneffekter. Hamiltonoperatoren er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6)$$

hvor ∇^2 -operatoren i sfæriske koordinater (r, θ, φ) er gitt ved

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \hat{\ell}^2 \end{aligned} \quad (7)$$

Symbolene i ligningene (6) og (7) har sin vanlige betydning ($\hat{\ell}$ er den dimensjonsløse operatoren for orbitalt angulært moment).

✓ a) Vis at funksjonen

$$\psi(r) = N e^{-r/a} \quad (8)$$

er en energieigenfunksjon for passende valg av parameteren a . Hva er den tilhørende energieigenverdien? Bestem normeringskonstanten N .

Energieigenfunksjonene for hydrogenatomet kan generelt skrives på formen

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \quad (9)$$

De enkleste radalfunksjonene $R_{n\ell}$ og kulefunksjonene $Y_{\ell m}$ er gitt i tabell 1 og 2. Funksjonene er normert slik at

$$\int_0^\infty |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr = 1, \quad \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \quad (10)$$

b) Gjør rede for de kvantetallene som inngår i beskrivelsen ovenfor og angi hvilke verdier de kan ha. Hva mener vi med at et energinivå er degenerert? Utled degenerasjonsgraden for n -te energinivå i hydrogenatomet.

Tabell 1: De enkleste radialfunksjonene for hydrogenatomet. a_0 er Bohr-radien ($a_0 \equiv 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$).

n	ℓ	$R_{n\ell}(r)$
1	0	$R_{10}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$
2	0	$R_{20}(r) = (2a_0)^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
2	1	$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}} (2a_0)^{-3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$

Tabell 2: De enkleste kulefunksjonene.

ℓ	m	$Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$
0	0	$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	1	$Y_{11}(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$
1	0	$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
1	-1	$Y_{1-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$

- c) Vis at energieigenfunksjonen du bestemte i pkt. a) kan skrives på formen (9). Hva er verdien av kvantetallene i dette tilfellet? Bruk ligning (9) og tabellene 1 og 2 til å sette opp eksplisitte uttrykk for energieigenfunksjonene svarende til første eksiterte energinivå.
- d) Hva er sannsynligheten for at en måling av elektronets posisjon skal gi et resultat i volumelementet dV omkring punktet (r, θ, φ) ? Hva er tolkningen av størrelsen

$$P_{n\ell}(r)dr = r^2 |R_{n\ell}(r)|^2 dr ? \quad (11)$$

Beregn i hvilken avstand fra kjernen det er mest sannsynlig å finne elektronet når tilstanden er (i) grunntilstanden, (ii) en $2p$ -tilstand.

Vi lar nå hydrogenatomet være i et konstant, sterkt ytre magnetfelt $\mathbf{B}$ og velger z -aksen i $\mathbf{B}$ -feltets retning. Dersom vi neglisjerer spinnet, kan Hamiltonoperatoren skrives

$$\hat{H}_B = \hat{H} + \frac{e\hbar}{2m_e} B \hat{l}_z \quad (12)$$

hvor $\hat{H}$ er Hamiltonoperatoren (6) for hydrogenatomet uten magnetfelt. $B = |\mathbf{B}|$. De andre symbolene i (12) har sin vanlige betydning.

- e) Hva blir energieigenverdiene og energieigenfunksjonene til $\hat{H}_B$? Diskuter magnetfeltets virkning på laveste og nest laveste energinivå. Tegn skisse.
- f) Diskuter virkningen av magnetfeltet på laveste og nest laveste energinivå dersom vi også inkluderer spinnet.

Oppgave 3

Vi skal i denne oppgaven studere en éndimensjonal harmonisk oscillator med potensiell energi $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Følgende integraler oppgis:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \quad (13)$$

- a) Vis at ved et variabelskifte av typen $y = \eta x$, hvor η er en reell, positiv konstant, kan den tidsuavhengige Schrödingerlikninga for oscillatoren skrives på formen

$$\left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \psi(y) = \lambda \psi(y) \quad (14)$$

hvor λ er en konstant.

Løsningene av (14) kan skrives som

$$\psi_n(y) = C_n H_n(y) e^{-(1/2)y^2} \quad (15)$$

med tilhørende egenverdier λ_n . C_n er en konstant og $H_n(y)$ er et polynom i y av grad n .

- b) Vis at polynomene H_n tilfredsstiller ligninga

$$\frac{d^2 H_n}{dy^2} - 2y \frac{dH_n}{dy} + (\lambda_n - 1) H_n = 0 \quad (16)$$

De to polynomene av lavest orden er $H_0(y) = a_0$ og $H_1(y) = a_1 + b_1 y$ (a_0 , a_1 og b_1 er konstanter, $a_0 \neq 0$, $b_1 \neq 0$).

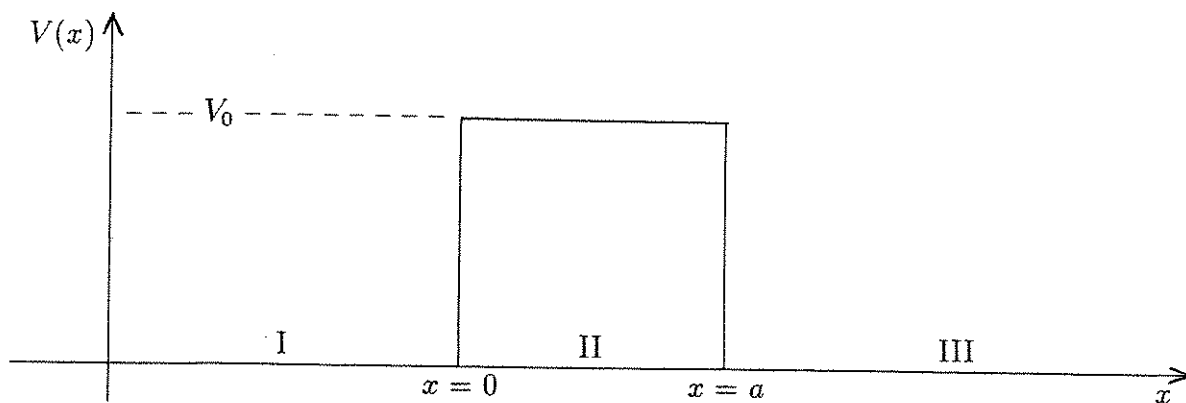
- c) Bestem λ_0 slik at H_0 tilfredsstiller ligning (16). Hva blir den tilsvarende energi for oscillatoren, og hva blir tilstandsvektoren $\psi_0(y)$? ψ_0 skal normeres (i y -rommet). Hvilken tilstand representerer ψ_0 ?
- d) Bestem λ_1 og a_1 slik at H_1 tilfredsstiller ligning (16). Hva blir den tilsvarende energi for oscillatoren, og hva blir den normerte tilstandsvektoren $\psi_1(y)$? Hvilken tilstand representerer ψ_1 ? Vis at ψ_1 og ψ_0 er ortogonale.

Vi definerer et nytt éndimensjonalt kvantemekanisk system som har potensiell energi gitt ved

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, & x \geq 0 \\ V(x) &= \infty, & x < 0 \end{aligned} \quad (17)$$

- e) Gjør kort rede for randbetingelsenes betydning når man skal løse den tidsuavhengige Schrödingerligninga. Redegjør for forskjellen i randbetingelser på det nye systemet definert ved (17) og den harmoniske oscillatoren i første del av oppgaven.
- f) Bruk resultatet fra første del av oppgaven til å betemme tilstandsvektoren og energien til det nye systemet (17) i grunntilstanden.

Oppgave 4



Figur 1.