LÖSNINGAR
Deltentamen i kvantformalism, atom och kärnfysik med tillämpningar för F3

08-10-20

Tid: kl 08.00-12.00.

Hjälpmedel: Det för kursen officiella formelbladet samt TeFyMa.

Poäng: Vid varje uppgift anges poängantal. För godkänt krävs minst 15 poäng. Logiskt uppställda, renskrivna och väl motiverade lösningar med tydligt markerade svar krävs.

1. Förenkla så långt som möjligt följande operator (4p)

$$[L_x, L_y L_z] + [L_x, L_z L_y] .$$

Ledning: Använd gärna Jacobis identitet.

Lösning: M.h.a. kommutatorformlerna på formelbladet kan vi skriva

$$[L_x, L_y L_z]+[L_x, L_z L_y] = -\left(L_y [L_z, L_x] + [L_y, L_x] L_z + L_z [L_y, L_x] + [L_z, L_x] L_y\right)$$

$$= -i\hbar \left(L_y L_y - L_z L_z - L_z L_z + L_y L_y\right) = 2i\hbar \left(L_z^2 - L_y^2\right) .$$

2. I klassisk mekanik gäller för rörelsemängden $p_x = mv_x$, där m är massan och hastigheten $v_x = \dot{x}$ är tidsderivatan av läget x. I kvantmekaniken är p_x och x inte definierade som absoluta tal utan med sannolikhetsfördelningar, från vilka vi kan beräkna deras medelvärde $\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$ och $\langle p_x \rangle = \langle \psi | \hat{p}_x | \psi \rangle$ för ett givet tillstånd ψ.

a) Vad gäller för samband mellan $\langle x \rangle$ och $\langle p_x \rangle$ i kvantmekaniken? (2p)

Lösning: Förväntningsvärdena följer klassisk mekanik, $\langle p_x \rangle = m\dot{\langle x \rangle}$

b) Bevisa detta samband för ett godtyckligt tillstånd. (4p)

Lösning: Generellt gäller för en operator $\hat{A}$ och Hamiltonoperatorn $\hat{H}$ (se läroboken sidan 118 eller bevisa själv)

$$\frac{d}{dt} \left\langle \hat{A} \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \left\langle \left[\hat{H}, \hat{A} \right] \right\rangle .$$

Detta ger för operatorn $\hat{A} = x$ sambandet $\langle p_x \rangle = m\langle \dot{x} \rangle$ (oberoende av potential $V(x)$).

3. En partikel befinner sig i en endimensionell oändlig kvantbrunn med bredden a [vars egenfunktioner ges av $\phi_n = \sqrt{2/a}\ \sin(n\pi x/a)$]. Vid tiden $t = 0$ ges dess vågfunktion av (Ledning: rita!)

$$\Psi(x) = \begin{cases} N \sin(2\pi x/a)\,, & 0 \leq x \leq a/2 \\ 0, & x < 0 \ \mathit{eller} \ x > a/2 \end{cases}.$$

Vid denna tidpunkt mäter man partikelns energi. Vad är sannolikheten att man får mätresultatet $E_2 = \hbar^2\pi^2 2^2/\left(2ma^2\right)$? (6p) (För full poäng krävs att man bestämmer N. Ledning: $\sin^2(\theta) = (1 - \cos(2\theta))/2$.)

Lösning: Sannolikheten att erhålla energin E_2 är lika med $|c_2|^2 = |\langle \phi_2 | \Psi \rangle|^2$. Motsvarande skalärprodukt blir

$$\langle \phi_2 | \Psi \rangle = \int_0^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) N \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = \sqrt{\frac{2}{a}} N \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{N}{2} \left(\int_0^{a/2} dx - \int_0^{a/2} \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) dx \right) = \sqrt{\frac{1}{2a}} N \left(\frac{a}{2} - \frac{a}{4\pi} \underbrace{\left[\sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \right]_0^{a/2}}_{0} \right) = \sqrt{\frac{a}{2}} \frac{N}{2}.$$

Vi normerar nu Ψ för att bestämma N

$$1 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \int_0^a \Psi^* \Psi dx = |N|^2 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = |N|^2 \frac{a}{4} \Rightarrow |N|^2 = \frac{4}{a}.$$

Sannolikheten att erhålla energin E_2 är alltså

$$|c_2|^2 = |\langle \phi_2 | \Psi \rangle|^2 = \left| \sqrt{\frac{a}{2}} \frac{N}{2} \right|^2 = a\frac{|N|^2}{8} = \frac{1}{2}.$$

4. Vid en given tidpunkt beskrivs tillståndet för en partikel i ett experiment i sfäriska koordinater av vågfunktionen

$$\Psi = -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin(\theta)\, e^{i\varphi}.$$

a) Skriv om Ψ på formen 'radiell funktion' gånger 'klotytfunktioner' [d.v.s. $\Psi = f(r) \sum_{\ell,m} Y_\ell^m$]. (2p)

Lösning: M.h.a. formelsamlingen identifierar vi (endast) klotytfunktionen svarande mot $\ell = 1$ och $m = 1$, så att $\Psi = f(r) Y_1^1$.

b) Vilka möjliga mätvärden kan erhållas vid experimentet då man mäter de fysikaliska storheter som i kvantmekaniken representeras av operatorerna $\mathbf{L}^2$ och L_z? (2p)

Lösning: De enda möjliga mätvärdena är egenvärdena tillhörande de ingående klotyt(egen-)funktionerna d.v.s. $\hbar^2 1(1+1) = 2\hbar^2$ respektive $1\hbar = \hbar$.

c) Vad är motsvarande sannolikheter? (2p)

Lösning: Då endast ett egenvärde är möjligt för respektive operator är sannolikheten ett i båda fallen.

5. Med utgångspunkt i en endimensionell s.k. harmonisk oscillatorpotential $V_{HO}(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ (där m och ω är reella konstanter) lägger vi till en liten störning $V_\varepsilon(x) = \varepsilon x^4$ ($|\varepsilon| \ll 1$).

Givet nedan är (egen-) grundtillståndet och motsvarande (egen-) energi för den harmoniska oscillatorn (d.v.s. med $V = V_{HO}$)

$$\varphi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}, \;\; E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

a) Visa att φ_0 är normerad. (2p)

Lösning: Vi beräknar följande skalärprodukt m.h.a. formelsamlingen

$$\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0^* \varphi_0 dx = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} 2\int_0^{\infty} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} = 1.$$

b) Genomför en första ordningens störningsräkning för tillståndet φ_0 i potentialen $V(x) = V_{HO} + V_\varepsilon$, och visa att energiskillnaden är $\Delta E_0 = 3\varepsilon/4$ när man sätter $\hbar = \omega = m = 1$ (uträkningarna skall redovisas med stor tydlighet). (4p)

Lösning: Vi beräknar följande skalärprodukt m.h.a. formelsamlingen

$$\Delta E_0 = \langle\varphi_0|V_\varepsilon\varphi_0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0^* V_\varepsilon \varphi_0 dx = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} 2\varepsilon \int_0^{\infty} x^4 e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} 2\varepsilon \frac{3}{8} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} = \frac{3}{4}\varepsilon.$$

c) En ändlig underrumsrepresentation H_ε av motsvarande Hamiltonoperator $\widehat{H}_\varepsilon = \widehat{H}_{kin} + V_{HO} + V_\varepsilon$ är (vi utnyttjar enheter där $\hbar = \omega = m = 1$)

$$\widehat{H}_\varepsilon \leftrightarrow H_\varepsilon = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} + \Delta E_0 & 0 & 3\varepsilon/\sqrt{2} \\ 0 & \frac{3}{2} + \Delta E_1 & 0 \\ 3\varepsilon/\sqrt{2} & 0 & \frac{5}{2} + \Delta E_2 \end{bmatrix}.$$

D.v.s. vi har utnyttjat de 3 lägsta egentillstånden till $\widehat{H}_{HO} = \widehat{H}_{kin} + V_{HO}$ för att ta fram denna $3 \times 3-$matris.

Vad blir det näst lägsta energitillståndet (d.v.s. 1:a exciterade) för $\widehat{H}_\varepsilon$ i denna approximation då $\Delta E_1 = 15\varepsilon/4$ och $\Delta E_2 = 39\varepsilon/4$? (2p)

Lösning: De 3 egenvärdena till matrisen H_ε approximerar de 3 lägsta energierna för $\widehat{H}_\varepsilon$. Egenvärdena till H_ε beräknas enligt $\det(H_\varepsilon - \lambda I) = 0$

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{2} + \Delta E_0 - \lambda & 0 & 3\varepsilon/\sqrt{2} \\ 0 & \frac{3}{2} + \Delta E_1 - \lambda & 0 \\ 3\varepsilon/\sqrt{2} & 0 & \frac{5}{2} + \Delta E_2 - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

$$\left(\frac{1}{2} + \Delta E_0 - \lambda\right)\left(\frac{3}{2} + \Delta E_1 - \lambda\right)\left(\frac{5}{2} + \Delta E_2 - \lambda\right) - \left(\frac{3}{2} + \Delta E_1 - \lambda\right)\frac{9}{2}\varepsilon^2 = 0.$$

Således är ett av egenvärdena $\lambda = \frac{3}{2} + \Delta E_1 = \frac{3}{2} + \frac{15}{4}\varepsilon$, de två övriga är rötter till andragradsekvationen

$$\left(\frac{1}{2} + \Delta E_0 - \lambda\right)\left(\frac{5}{2} + \Delta E_2 - \lambda\right) - \frac{9}{2}\varepsilon^2 = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 - \left(3 + \frac{21}{2}\varepsilon\right)\lambda + \frac{5}{4} + 7\varepsilon + \frac{45}{16}\varepsilon^2 = 0. \tag{1}$$

När $|\varepsilon| \to 0$ kommer de 3 störda egenvärdena λ att anta värdena för de 3 ostörda energinivåerna (betecknade E_0, E_1 och E_2). Andragradsekvationen (1) med $\varepsilon = 0$ ger $\lambda^2 - 3\lambda + \frac{5}{4} = 0$ med rötterna $\lambda = \frac{3}{2} \pm 1$. Det är då klart att $\lambda = \frac{3}{2} + \Delta E_1 = \frac{3}{2} + \frac{15}{4}\varepsilon$ utgör det näst lägsta energitillståndet.