

LÖSNINGAR TILL

Deltentamen i kvantformalism, atom och kärnfysik med tillämpningar för F3

09-01-15

Tid: kl 08.00-12.00 (MA9A).

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. Ett kvantmekaniskt endimensionellt system beskrivs av vågfunktionen

$$\phi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ Cx(x-a) & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases} .$$

Bestäm normeringskonstanten C och beräkna förväntningsvärdet av operatorerna x och p_x . (6p)

Lösning: Normering ger

$$1 = |C|^2 \int_0^a (x^4 + a^2x^2 - 2ax^3) dx = |C|^2 a^5 \left(\frac{1}{5} + \frac{1}{3} - \frac{1}{2} \right) \Rightarrow |C| = \sqrt{\frac{30}{a^5}}.$$

Förväntningsvärdet av x bör ligga vid $a/2$ då $\phi(x)$ är symmetrisk där, en uträkning bekräftar detta

$$\langle \phi | x | \phi \rangle = |C|^2 \int_0^a (x^5 + a^2x^3 - 2ax^4) dx = \frac{30}{a^5} a^6 \left(\frac{1}{6} + \frac{1}{4} - \frac{2}{5} \right) = \frac{a}{2}.$$

Operatorn p_x uttrycks enligt $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, så att $p_x \phi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [Cx(x-a)] = -i\hbar(2Cx - Ca)$. Vi får då

$$\begin{aligned} \langle \phi | p_x | \phi \rangle &= -i\hbar |C|^2 \int_0^a x(x-a)(2x-a) dx = \\ &= -i\hbar |C|^2 \int_0^a (2x^3 - 3ax^2 + a^2x) dx = -i\hbar |C|^2 a^4 \left(\frac{1}{2} - 1 + \frac{1}{2} \right) = 0. \end{aligned}$$

2. Betrakta en partikel med massan m i en oändligt djup kvantbrunn med bredden a . Egenfunktioner och egenenergies ges då av

$$\phi_k^0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right), \quad E_k^0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} k^2, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

En störning V_1 i mitten av brunnen modelleras med en deltafunktion enligt $V_1(x) = \epsilon a \delta(x - a/2)$

a) Visa att energin för grundtillståndet i första ordningens störningsräkning blir $E_1 = E_1^0 + \Delta E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} + 2\epsilon$ (du behöver inte härleda själva formalismen utan bara i detalj redovisa beräkningen av ΔE_1). (2p)

b) Visa att första ordningens störningsräkning inte ger något energibidrag ΔE_k för ostörda tillstånd av jämn ordning (dvs $k = 2, 4, 6, \dots$) vilka har udda paritet. (2p)

c) Då vi enligt **b)** inte får något bidrag från störningen för det första exciterade tillståndet måste vi inkludera åtminstone det andra exciterade tillståndet i en ändlig underrumsutveckling för att få en bättre approximation till grundtillståndet än den som ges av första ordningens störningsräkning i **a)**. Vad blir således det störda grundtillståndet i den underrumsrepresentation av Hamiltonoperatoren som beskrivs av följande 3×3 -matris? (2p)

$$H = \begin{bmatrix} E_1 + 2\epsilon & 0 & -2\epsilon \\ 0 & E_2 & 0 \\ -2\epsilon & 0 & E_3 + 2\epsilon \end{bmatrix}$$

Lösning a): Vi får (precis som i kap. 6 i läroboken)

$$\Delta E_1 = \langle \phi_1^0 | V_1 | \phi_1^0 \rangle = \frac{2}{a} \epsilon a \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \delta(x - a/2) dx = 2\epsilon \sin^2\left(\frac{\pi}{2}\right) = 2\epsilon.$$

Lösning b): För tillstånd med $n = 2k$ gäller

$$\Delta E_n = \frac{2}{a} \epsilon a \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \delta(x - a/2) dx = 2\epsilon \sin^2(k\pi) = 0.$$

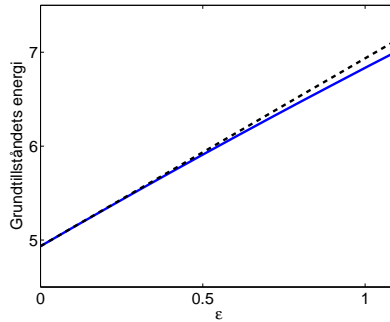
Lösning c): De tre egenvärdena till H approximerar de tre lägsta energierna för det störda systemet. Ur sekularekvationen $\det(H - \lambda I) = 0$ ser man direkt att $\lambda_2 = E_2$ (d.v.s. inte heller nu ändras energin för $k = 2$ tillståndet). De två kvarvarande energierna uppfyller andragsradsekvationen

$$\lambda^2 - (E_1 + E_3 + 4\epsilon)\lambda + E_1 E_3 + 2\epsilon(E_1 + E_3) = 0.$$

Efter förenklingar inses att det störda grundtillståndet då approximeras av

$$\lambda_1 = \frac{E_1 + E_3}{2} + 2\epsilon - \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - E_3)^2 + 16\epsilon^2}.$$

Figuren nedan visar att skillnaden är liten mellan λ_1 (heldragen) och första ordningens störningsräkning (streckad) i detta exempel (enheter där $\hbar = m = a = 1$ har använts).



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

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

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

Lösning: Vi har $\sin(\varphi) = \frac{\exp(i\varphi) - \exp(-i\varphi)}{2i}$ så att vi m.h.a. formelsamlingen kan identifiera klotyfefunktionerna svarande mot $\ell = 1$ och $m = \pm 1$, d.v.s. $\Psi = f(r) (Y_1^1 + Y_1^{-1})$. (Observera att en faktor $\exp(i\alpha)$, $\alpha \in \mathbb{R}$ inte förändrar ett tillstånd.)

- 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)

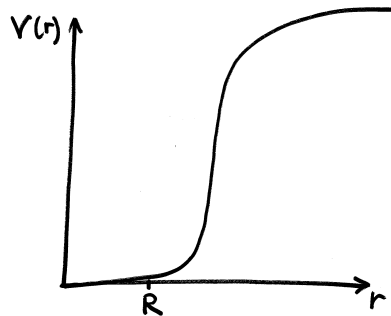
Lösning: De enda möjliga mätvärdena är egenvärdena tillhörande de ingående klotyte(egen-)funktionerna d.v.s. $\hbar^2 1(1+1) = 2\hbar^2$ respektive $\pm 1\hbar = \pm\hbar$.

- c) Vad är motsvarande sannolikheter? (2p)

Lösning: Då endast ett egenvärde (svarande mot kvanttalet $\ell = 1$) är möjligt

för \mathbf{L}^2 operator är sannolikheten ett. För L_z operatoren är sannolikheten 50% för \hbar och 50% för $-\hbar$ eftersom motsvarande två tillstånd har lika stora absolutkvadratvärde av deras koefficienter d.v.s. $\Psi \propto \underbrace{-i}_{\exp(-i\frac{\pi}{2})} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \exp(i\varphi) - \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-i\varphi) \right)$.

4. Potentialen nedan är en bra (medelfälts-) modell för en tung atomkärna med sfärisk symmetri.



För ett visst (bundet) tillstånd $\phi_{N_r, \ell=0, m}$ (N_r betecknar här antalet radiella noder) gäller att det s.k. *root mean square* avståndet $\sqrt{\langle \phi_{N_r, \ell=0, m} | r^2 | \phi_{N_r, \ell=0, m} \rangle}$ är lika med R (se figuren ovan).

a) Är *root mean square* avståndet för tillståndet $\phi_{N_r, \ell=1, m}$ (d.v.s. $\sqrt{\langle \phi_{N_r, \ell=1, m} | r^2 | \phi_{N_r, \ell=1, m} \rangle}$) större eller mindre än R ? (2p)

Lösning: Inga uträkningar behöver göras!

b) Hur många/vilka m -tillstånd finns det för $\phi_{N_r, \ell=1, m}$? (2p)

c) Hur beror energin $\langle \phi_{N_r, \ell=1, m} | \hat{H} | \phi_{N_r, \ell=1, m} \rangle$ för just detta sfäriska system på m -kvanttalet? (2p)

Lösning: a) Den effektiva potentialen är $V_{effektiv}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r)$ där den första termen i $V_{effektiv}$ är noll för $\phi_{N_r, \ell=0, m}$. För $\phi_{N_r, \ell=1, m}$ har vi ett positivt bidrag som är större för små värden på r , vilket leder till att vågfunktionen 'trycks ut' så att $\sqrt{\langle \phi_{N_r, \ell=1, m} | r^2 | \phi_{N_r, \ell=1, m} \rangle} > R$.

Lösning: b) Det gäller att $m = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, 1, \ell-1, \ell$, så att $\phi_{N_r, \ell=1, m}$ innefattar tre tillstånd $m = -1, 0, 1$.

Lösning: c) Det gäller för alla sfäriskt symmetriska system $V(\mathbf{r}) = V(r)$ att energierna är oberoende av m -kvanttalet dvs $E = E_{N_r, \ell}$.

5. Det visas i avsnittet om variationsmetoden i läroboken att en Gaussisk vågfunktion $\varphi = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-\alpha x^2)$ med $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$ minimerar energin för den harmoniska oscillator (HO-) potentialen $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ (för denna potential råder t.o.m. likhet med grundtillståndet!). Den totala energin bestod då av en kinetisk och en potentiell del

$$E_{tot} = E_{kin} + E_{pot} = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{1}{8}m\omega^2 \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Under 1990-talet har man i flera laboratorier i världen lyckats framställa s.k. Bose-Einstein-kondensat (BEC). Som en första approximation för att beskriva vågfunktionen för ett BEC med N st atomer fångade i en HO-potential kan man använda den s.k. Gross-Pitaevskii-ekvationen (GPE) (som påminner om den mera bekanta Schrödingerekvationen)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + gN |\Psi|^2 \Psi + V_{HO} \Psi = \mu \Psi.$$

Den totala energin (per partikel) får då istället tre termer

$$E_{tot} = E_{kin} + \frac{gN}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^4 dx + E_{pot},$$

där den mittersta termen modellerar energin p.g.a. växelverkan mellan atomerna.

a) Ställ upp den ekvation i parametern α som behöver lösas för att minimera energin för kondensatet om $\Psi = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-\alpha x^2)$ används som variationsvågfunktion. (2p)

b) Vad blir energin (per partikel) om atomerna inte växelverkar alls d.v.s. då $g = 0$? (2p)

c) Ekvationen som ställdes upp i a) kan vara svår att lösa. Låt oss därför anta att inverkan från växelverkan är så svag att vi kan använda resultatet $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$. Vad blir energin (per partikel) för kondensatet i denna approximation? (2p)

Lösning a) : Med den givna vågfunktionen får vi

$$E_{tot} = E_{kin} + \frac{g}{2} N \frac{2\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-4\alpha x^2) dx + E_{pot},$$

$$E_{tot} = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{g}{2} N \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\pi}} + \frac{1}{8}m\omega^2 \frac{1}{\alpha}. \quad (1)$$

Vi finner det optimala värdet på α då energin har en stationär punkt d.v.s. då

$$\frac{\partial E_{tot}}{\partial \alpha} = \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{g}{2} N \frac{1}{2\sqrt{\pi\alpha}} - \frac{1}{8}m\omega^2 \frac{1}{\alpha^2} = 0.$$

Lösning b) : För $g = 0$ (ingen växelverkan mellan atomerna) ger detta det välkända resultatet $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$ så att enligt tidigare energin (per partikel) blir $E_{tot} = \frac{\hbar\omega}{2}$.

Lösning c) : Med det approximativa (för t.ex. $g > 0$) valet $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$ så ger (1) ovan att

$$E_{tot} = E_{kin} + \frac{g}{2} N \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\pi}} + E_{pot} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} Ng.$$

Observera att g har dimensionen *energi* \times *längd*.