FYS2140 Kvantefysikk, Oblig 10

Mikkel Killingmoe Christensen, gruppe 2

4. september 2017

Dette er nok en oblig som dreier seg om hydrogenatomet og er en del av en tidligere eksamensoppgave.

Oppgave 1

I denne oppgaven ser vi bort fra elektronets egenspinn. H-atomet kan da beskrives ved tilstandsfunksjonene $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ som har følgende egenskaper:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0\psi_{nlm_l}(\vec{r}) &= E_n\psi_{nlm_l}(\vec{r}), && (1)\\
\hat{L}^2\psi_{nlm_l}(\vec{r}) &= \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm_l}(\vec{r}), && (2)\\
\hat{L}_z\psi_{nlm_l}(\vec{r}) &= \hbar m_l\psi_{nlm_l}(\vec{r}), && (3)\\
\int \psi^*_{nlm_l}(\vec{r})\psi_{n'l'm'_l}(\vec{r})\, d^3\vec{r} &= \delta_{n,n'}\delta_{l,l'}\delta_{m_l,m'_l}, && (4)
\end{aligned}$$

hvor

$$\delta_{k,k'} = \begin{cases} 1 & \text{for } k = k' \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases}$$

a) Hva kaller vi disse (to) typene ligninger?

Svar:
De tre første likningene kalles egenverdiligninger, og den siste er et ortonormalitetsintegral.

Operatoren $\hat{H}_0$ er tidsuavhengig. Kvantetallet n kan anta verdiene $1, 2, \ldots$. For en gitt verdi av n kan l anta verdiene $0, 1, \ldots, n-1$, og m_l kan for en gitt verdi av l anta verdiene $-l, -l+1, \ldots, l-1, l$.

I denne oppgaven trengs ingen andre opplysninger enn de som er gitt ovenfor. Det er ikke nødvendig å kjenne de eksplisitte uttrykkene for operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$. Det skal ikke tas hensyn til elektronets egenspinn.

b) Hvilke fysiske størrelser er representert ved operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$?

Svar:
$\hat{H}_0$ representerer energien, $\hat{L}^2$ representerer kvadratet av angulærmomentet og $\hat{L}_z$ representerer z-komponenten til angulærmomentet.

c) Hvilke fysiske størrelser har skarpe verdier i tilstanden $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$?

Svar:
Det kan vises at operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$ kommuterer. Det medfører at de har de skarpe verdiene E, L^2 og L_z

Ved tiden $t = 0$ er H-atomets tilstand beskrevet ved tilstandsfunksjonen $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$. Tidsutviklingen av tilstandsfunksjonen er bestemt av den tidsavhengige Schrödingerligningen

$$\hat{H}_0\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t). \tag{5}$$

d) Bestem tilstandsfunksjonen som beskriver H-atomets tilstand ved tiden t.

Svar:
Tilstandsfunksjonen er gitt som:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_k c_k \psi_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \tag{6}$$

hvor c_k er gitt som:

$$c_k = \int \psi_k^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d\vec{r} \tag{7}$$

Dette gir (ved å utnytte ortonormalitetsintegralet (4)) den endelige tilstandsfunksjonen:

$$\mathbf{\Psi(\tilde{r}, t) = \psi_{nlm_l}(\tilde{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}} \tag{8}$$

La H-atomets tilstand ved tiden $t = 0$ nå være gitt ved tilstandsfunksjonen

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l=-l}^{l} \psi_{nlm_l}(\vec{r}). \tag{9}$$

e) Vis at $\Phi(\vec{r})$ er normert.

Svar:

$$\int\int\int \Phi^*(\vec{r})\Phi(\vec{r})d^3\vec{r} \tag{10}$$

$$= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m_l=-l}^{l} \psi_{nlm_l}^*(\vec{r}) \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \psi_{n'l'm_l'}(\vec{r}) d\phi d\theta dr \tag{11}$$

(utnytter ortonormalitetsintegralet (4) og ser at noen integraler = 0)

$$= \frac{1}{2l+1} \sum_{m_l=-l}^{l} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi_{nlm_l}^*(\vec{r}) \psi_{n'l'm_l'}(\vec{r}) d^3\vec{r} \tag{12}$$

(integralet i (12) blir antall m_l som er lik $2l+1$)

$$= \frac{2l+1}{2l+1} = \mathbf{1} \tag{13}$$

f) Vis at tilstandsfunksjonen ved tiden t er

$$\Psi(\vec{r},t) = \Phi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right). \tag{14}$$

Svar:
Har fra likning (6) at tilstandsfunksjonen er gitt ved:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_k c_k \psi_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \tag{15}$$

hvor

$$|c_k|^2 = \langle \psi_k^* | \Phi \rangle \tag{16}$$

Dette gir at:

$$c_{nlm_l} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \tag{17}$$

som insatt i (15) gir:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{m_l=-l}^{l} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \psi_{nlm_l}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{18}$$

Setter inn for Φ fra likning (9) og får:

$$\mathbf{\Psi(\tilde{r},t) = \Phi(\tilde{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}} \tag{19}$$

g) Bestem forventningsverdien for operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$ i tilstanden som er beskrevet ved tilstandsfunksjonen $\Psi(\vec{r},t)$ i ligning (**??**).

Svar:
Når en går fra $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ til $\Phi(\vec{r})$ endres kun m_l. Dette påvirker kun operatoren $\hat{L}_z$.

$$\langle \hat{H}_0 \rangle = \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle = E_n \tag{20}$$

$$\langle \hat{L}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{L}^2 \psi \rangle = \mathbf{\hbar^2 l(l+1)} \tag{21}$$

$$\langle \hat{L}_z \rangle = \langle \psi | \hat{L}_z \psi | \rangle = \frac{\hbar}{2l+1} \sum_{m_l=-l}^{l} m_l = \mathbf{0} \tag{22}$$

(fordi $\sum_{m_l=-l}^{l} m_l = 0$)

En størrelse A er representert ved operatoren $\hat{A}$. Spredningen σ_A i tilstanden Ψ er definert slik:

$$\sigma_A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}. \tag{23}$$

h) Finn spredningen av størrelsene representert ved operatorene $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$ i tilstanden som er beskrevet ved tilstandsfunksjonen $\Psi(\vec{r},t)$ i ligning (**??**).

Svar:

$$\sigma_{H_0} = \sqrt{\langle \hat{H_0}^2 \rangle - \langle \hat{H}_0 \rangle^2} = \sqrt{E_n - E_n} = \mathbf{0} \tag{24}$$

$$\sigma_{L^2} = \sqrt{\langle \hat{L}^{2^2} \rangle - \langle \hat{L}^2 \rangle^2} = \sqrt{\hbar^4 l^2 (l+1)^2 - \hbar^4 l^2 (l+1)^2} = \mathbf{0} \tag{25}$$

$$\sigma_{L_z} = \sqrt{\langle \hat{L}^2{}_z \rangle - \langle \hat{L}_z \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2l+1} \sum_{m_l=l}^{l} m_l^2 - 0} \tag{26}$$

$$= \frac{\hbar}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{\sum_{m_l=l}^{l} m_l^2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2 \sum_{m_l=0}^{l} m_l^2} \tag{27}$$

$$= \frac{\hbar}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2 \frac{l(l+1)(2l+1)}{6}} = \boldsymbol{\hbar \frac{l(l+1)}{3}} \tag{28}$$

hvor det har blitt brukt at $\sum_{m_l=0}^{l} m_l^2$ kan skrives som $\frac{l(l+1)(2l+1)}{6}$ fra Rottmann s.111.

La H-atomets tilstand ved tiden $t = 0$ være gitt ved tilstandsfunksjonen $\Phi(\vec{r})$ i ligning (**??**) og la oss tenke oss at vi foretar en idéell måling av L_z.

i) Hvor stor er sannsynligheten for å observere den bestemte verdien $\hbar m_l$ for L_z ved tiden $t = 0$?

Svar:
Sannsynligheten er gitt ved formelen $|c_k|^2$.
Dette gir at:

$$|c_{m_l}|^2 = |\frac{1}{\sqrt{2l+1}}|^2 = \mathbf{\frac{1}{2l+1}} \tag{29}$$

j) Vil denne sannsynligheten være avhengig av ved hvilken tid $t > 0$ målingen utføres?

Svar:
Vi kan se at formelen $\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k c_k \psi_k(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}$ gjelder for alle t. Dette medfører at sannsynligheten ikke vil være avhengig av hvilken tid vi måler den ved.

Vi lar nå H-atomet befinne seg i et homogent magnetfelt B og velger z-aksen langs magnetfeltet. Hamilton operatoren for systemet er da

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{2m} B \hat{L}_z, \tag{30}$$

der $-e$ er elektronets ladning og m er elektronets masse.

k) Bestem H-atomets energi i tilstanden $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$.

Svar:

$$\hat{H}\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = E_{tot}\psi_{nlm_l} \tag{31}$$

$$E_{tot}\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = \left[\hat{H}_0 + \frac{e}{2m}B\hat{L}_z\right]\psi_{nlm_l} = E_n\psi_{nlm_l} + \frac{e}{2m}B\hat{L}_z\psi_{nlm_l} \tag{32}$$

Deler så på ψ_{nlm_l} og får:

$$\Rightarrow \mathbf{E_{tot}} = \mathbf{E_n} + \frac{\mathbf{e}}{\mathbf{2m}}\mathbf{B}\hat{\mathbf{L}}_\mathbf{z} \tag{33}$$

l) Er tilstanden $\Phi(\vec{r})$ i ligning (**??**) en energi-egentilstand for $\hat{H}$? Begrunn svaret.

Svar:
Fordi $\Phi(\vec{r})$ er en lineærkombinasjon av ψ_{nlm_l} som igjen er energi-egentilstander for $\hat{H}$, er også $\Phi(\vec{r})$ dette.

m) Bestem forventningsverdien til $\hat{H}$ i tilstanden $\Phi(\vec{r})$.

Svar:

$$\langle\hat{H}\rangle = \langle\Phi|\hat{H}\Phi\rangle = \langle\Phi|(\hat{H}_0 + \frac{e}{2m}B\hat{L}_z)\Phi\rangle = \langle\Phi|\hat{H}_0\Phi\rangle + \langle\Phi|\frac{e}{2m}B\hat{L}_z\Phi\rangle \tag{34}$$

$$= E_n + \frac{eB\hbar}{2m(2l+1)}\sum_{m_l=-l}^{l} m_l = \mathbf{E_n} \tag{35}$$