

FYS2140 Kvantefysikk - Vår 2021

Løsningsforslag for Oblig 11

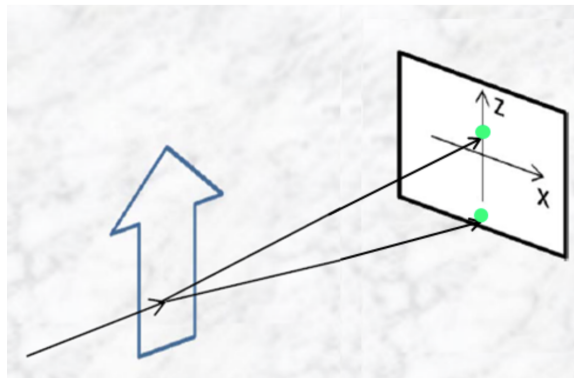
(Versjon 19. mai 2021)

Her er løsninger på A Diskusjonsoppgaver, B Regneoppgaver og C Tilleggsoppgaver (ikke obligatorisk).

A Diskusjonsoppgaver

Oppgave 1 Stern-Gerlach-eksperimentet og elektronets egenspinn

Stern-Gerlach-eksperimentet var viktig i oppdagelsen av elektronets egenspinn (se kapittel 6 i kompendiet). En forenklet skisse av eksperimentet er vist i Fig. 1. De svarte pilene representerer stråler av sølvatomer og den brede blå pilen illustrerer et inhomogent magnetfelt $B_z(z)$ med gradient i pilens retning. Bakerst har vi en fluorescerende skjerm som får lysende prikker der atomer treffer. Sølvatomene sendes ett og ett mot skjermen, og det ytterste (siste) elektronet er i en tilstand med kvantetallet $l = 0$, såkalt s -orbital (brukes i hele oppgaven).

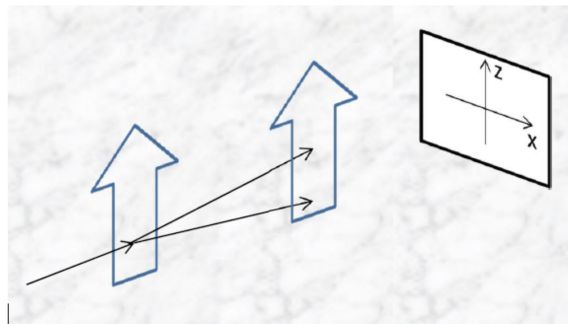


Figur 1: Stråleavbøyning med ett B -felt.

- a) Eksperimentet vist i Fig. 1 gir to vertikale lysende prikker på skjermen. Forklar kort med egne ord hvordan elektronets egenspinn fører til et slikt resultat.

Svar: Et inhomogent magnetfelt utøver en kraft på magnetiske dipoler. Stern og Gerlach forventet at sølvatomer (her ansett som forvokste hydrogenatomer) ville avbøyes i et inhomogent magnetfelt hvis angulærmomentet til det ytterste elektronet er $L^2 \neq 0$, fordi et slikt angulærmoment setter opp et magnetisk dipolmoment. Hvis derimot $L^2 = 0$

(altså med kvantetallet $l = 0$), forventet de ingen avbøying. Da de likevel fikk to prikker, altså at strålen delte seg i to i retningen til gradienten i magnetfeltet, bidro det til oppdagelsen av elektronets egenspin. Det viste seg nemlig at egenspinnet også gir magnetisk dipolmoment til elektronet, slik at elektronet (hele sølvatomet) blir påvirket av en kraft i et inhomogent magnetfelt. Retningen på kraften avhenger av fortegnet på spinnet i z -retning (langs gradienten til magnetfeltet), altså av om $m_s = +1/2$ eller $m_s = -1/2$. Halvparten av atomene ble derfor avbøyd oppover og halvparten nedover, slik at resultatet ble to prikker i vertikal retning.



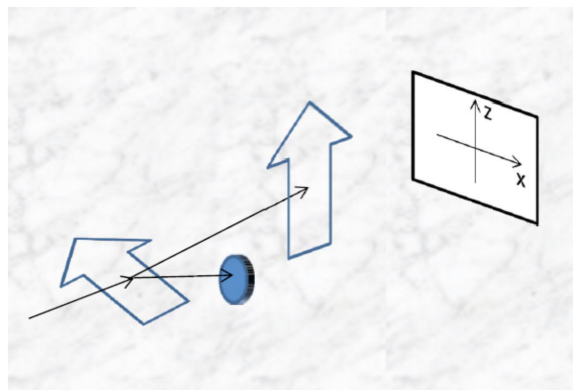
Figur 2: Stråleavbøying med to paralelle B -felt.

- b) Figur 2 viser en variant av eksperimentet der sølvatomene passerer to inhomogene magnetfelt, begge med gradient i z -retning. Hva er riktig om mønsteret på skjermen? Begrunn svaret.

- A: Vi får fire punkter på en vertikal linje
- B: Vi får to punkter på en horisontal linje
- C: Vi får ett punkt
- D: Vi får to punkter på en vertikal linje

Svar: Riktig svar er D, vi får fortsatt to punkter på en vertikal linje. Punktene vil være lenger fra hverandre enn i oppgave a) (gitt at styrken på magnetfeltet og avstanden til skjermen er den samme), siden atomene blir ytterligere avbøyd i magnetfelt nr. 2.

- c) I eksperimentet i Fig. 3 har det første inhomogene magnetfeltet nå gradient i x -retning, mens det andre fortsatt har gradient i z -retning. Ved det første feltet er det også satt opp en mekanisme som stopper alle atomene som bøyes av mot høyre, mens de som bøyes mot venstre sendes videre. Lag en tegning av mønstret vi nå får på skjermen. Forklar hvordan du kom fram til mønsteret.



Figur 3: Stråleavbøyning med to B -felt vinkelrett på hverandre og med stoppe-anordning.

Svar: Her får vi fortsatt to prikker vertikalt, men nå ligger de litt til venstre på skjermen. Det skyldes at bare atomer som ble avbøyd til venstre i det første magnetfeltet (med gradient i x -retning) fikk slippe igjennom. Atomene som nådde magnetfelt nr. 2 var altså i en tilstand med negativt spinn i x -retning. Men tilstanden var fortsatt en superposisjon av spinn opp og ned i z -retning! I magnetfelt nr. 2, der gradienten er i z -retning, vil altså halvparten bli avbøyd oppover og halvparten nedover igjen. Dette gir to prikker vertikalt til venstre.



Figur 4: Stråleavbøyning med to B -felt vinkelrett på hverandre og uten stoppe-anordning.

- d) Oppsettet i Fig. 4 ligner forrige oppgave, men nå får alle atomene passere forbi både første og andre magnetfelt. Hva er nå riktig om mønsteret på skjermen? Begrunn svaret.

- A: Vi får to punkter på en vertikal linje
- B: Vi får to punkter på en horisontal linje

- C: Vi får to punkter på diagonalen
D: Vi får fire punkter i et boks-mønster

Svar: Riktig svar er D, vi får fire punkter i et boksmønster. Første magnetfelt deler strålen i to i x -retning (horisontalt), mens magnetfelt nr. 2 deler hver av disse i to igjen, nå i z -retning (vertikalt), slik at resultatet blir et boksmønster.

Oppgave 2 Identiske partikler i singlet-tilstand

Vi bruker i det følgende notasjonen $|\uparrow\downarrow\rangle$ for spinn-bølgefunksjonen for to elektroner hvor det første har spinn opp og det andre har spinn ned. Anta at vi har et system der to elektroner er i en spinn-singlet-tilstand gitt ved $\chi(1, 2) = \sqrt{\frac{1}{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle)$. Den totale bølgefunksjonen for systemet $\Psi(1, 2)$ vil da være et produkt av en rom-del $\psi_{\text{rom}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ og en spinn-del $\chi(1, 2)$.

- a) Er rom-delen av bølgefunksjonen til systemet symmetrisk eller antisymmetrisk? Begrunn svaret. Hint: Den totale bølgefunksjonen til fermioner må være antisymmetrisk mhp ombytte-operatoren.

Svar: Den totale bølgefunksjonen for fermioner (som elektroner er) må være antisymmetrisk. For vår singlet-tilstand er spinn-delen av bølgefunksjonen antisymmetrisk. Det ser vi ved at uttrykket skifter fortegn hvis vi bytter plass på partiklene i uttrykket, altså bytter ut alle spinn ned med spinn opp og omvendt:

$$\begin{aligned}\chi(1, 2) &= \sqrt{\frac{1}{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle) \\ &= -\sqrt{\frac{1}{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &= -\chi(2, 1).\end{aligned}\tag{1}$$

Derfor må rom-delen av bølgefunksjonen være symmetrisk ved at $\psi_{\text{rom}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = +\psi_{\text{rom}}(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$. Dette sikrer at den totale bølgefunksjonen blir antisymmetrisk ved at $\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1)$.

- b) Vi gjør en måling av spinnet S_z til det ene elektronet i z -retning og får egenverdien $\hbar/2$. Hva er sannsynligheten for at en måling av S_z på den andre partikkelen gir $\hbar/2$?

Svar: Sannsynligheten er 0. Siden vi vet at disse elektronene er i en antisymmetrisk singlet-tilstand $\chi(1, 2) = \sqrt{\frac{1}{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle)$, vet vi at

de må ha motsatte egenverdier for spinn S_z (hvis den ene har spinn opp, må den andre ha spinn ned). Det betyr at det andre elektronet må ha $S_z = -\hbar/2$.

- c) Hvilke verdier for m_{s_z} har hhv. det første og det andre elektronet etter målingene i oppgave b) (altså ikke superposisjonen)?

Svar: Siden egenverdiene til S_z er $\hbar m_{s_z}$, må det første elektronet ha $m_{s_z} = 1/2$ og det andre elektronet ha $m_{s_z} = -1/2$.

- d) Vi har nå et nytt elektronpar i en tilsvarende spinn-singlet-tilstand. Vi måler nå spinnet på det ene elektronet i y -retning og finner $S_y = \hbar/2$. Hva er sannsynligheten for at en måling av det andre elektronets spinn i x -retning gir $S_x = -\hbar/2$?

Svar: Sannsynligheten for å måle $S_x = -\hbar/2$ er lik $1/2$. Selv om vi har målt det første elektronets spinn i y -retning, er spinnet i x -retning fortsatt ubestemt (i en superposisjon av spinn opp og ned) - for begge elektronene. Det er lik sannsynlighet for å måle de to egentilstandene i superposisjonen, slik at sannsynligheten blir $1/2$ for begge to.

B Regneoppgaver

Oppgave 3 Litt av hvert fra eksamen 2010

- a) Skriv ned dispersjonsrelasjonen $\omega(k)$ til en fri, ikke-relativistisk partikkel. Regn ut gruppe- og fasehastigheten og vis at det er gruppehastigheten som svarer til partikkelens hastighet.

Svar: For en fri, ikke-relativistisk partikkel er energien gitt ved $E = \frac{1}{2}mv^2 = p^2/2m$ (kun kinetisk energi). Setter vi inn for energien og bevegelsesmengden til en fri partikkel uttrykt ved hjelp av vinkelfrekvens og bølgetall, $E = \hbar\omega$ og $p = \hbar k$, så får vi at

$$\omega(k) = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2/2m}{\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (2)$$

Dette gir fra definisjonen en gruppehastighet v_g på

$$v_g \equiv \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}, \quad (3)$$

og en fasehastighet v_f på

$$v_f \equiv \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}. \quad (4)$$

Siden den ikke-relativistiske hastigheten til partikkelen er $v = p/m = \hbar k/m$ ser vi at det er gruppehastigheten som kan identifiseres med denne.

- b) Anta at vi har et sett med bølgefunksjoner ψ_{s,m_s} som er egenfunksjoner for det totale spinnet og dets z -komponent, det vil si

$$\hat{S}^2 \psi_{s,m_s} = \hbar^2 s(s+1) \psi_{s,m_s}, \quad (5)$$

$$\hat{S}_z \psi_{s,m_s} = \hbar m_s \psi_{s,m_s}, \quad (6)$$

der $s = 1/2$. Vi ser på superposisjonen

$$\psi(x) = A \sum_{m_s} m_s \psi_{s,m_s}, \quad (7)$$

hvor A er en normeringskonstant. Hva er de tillatte verdiene for m_s ? Er $\psi(x)$ en egenfunksjon for henholdsvis \hat{S}^2 og \hat{S}_z ? Begrunn svaret.

Svar: Siden $s = 1/2$ er $m_s = \pm 1/2$. $\psi(x)$ er en sum (superposisjon) av to tilstander med samme egenverdi for \hat{S}^2 , men med forskjellige egenverdier for \hat{S}_z . Den er derfor en egentilstand for \hat{S}^2 men ikke \hat{S}_z :

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 \psi(x) &= A \sum_{m_s} m_s \hat{S}^2 \psi_{s,m_s} = A \sum_{m_s} m_s \hbar^2 s(s+1) \psi_{s,m_s} \\ &= \hbar^2 s(s+1) \psi(x), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\hat{S}_z \psi(x) = A \sum_{m_s} m_s \hat{S}_z \psi_{s,m_s} = A \sum_{m_s} \hbar m_s^2 \psi_{s,m_s} \neq k \cdot \psi(x). \quad (9)$$

- c) Et nøytron i en atomkjerne kan befinne seg i et område med en utstrekning på omlag 5 fm. Bruk uskarphetsrelasjonen til å estimere hvilke hastigheter man kan forvente å måle for dette nøytronet.

Svar: Her er vi ute etter *estimator* og det er lov å gjøre approksimasjoner. Dette betyr også at mange varianter av svaret gir full uttelling så lenge det som er gjort er rimelig. Vi regner i en dimensjon og vi antar at systemet i beste fall har minimal uskarphet

$$\sigma_p = \frac{\hbar}{2\sigma_x}. \quad (10)$$

Vi kan velge å se for oss en uskarphet for posisjonen på $\sigma_x = 5$ fm (det er avgrensningen av området vi vet partikkelen befinner seg på). Da er uskarpheten på bevegelsesmengden

$$\sigma_p = \frac{\hbar c}{2\sigma_x c} = \frac{197.3 \text{ eV nm}}{2 \cdot 5 \cdot 10^{-6} \text{ nm} \cdot c} = 19.7 \text{ MeV}/c. \quad (11)$$

Siden $\sigma_p = m\sigma_v$ fordi $p = mv$,¹ og massen til et nøytron er 939.6 MeV/c², så er uskarpheten i hastighet på $\sigma_v = \sigma_p/m = 0.021c$. Selv om forventningsverdien til hastigheten skulle ligge rundt 0 (den stikker jo ikke av noe sted) så kan vi altså forvente oss å måle hastigheter med spredning opp mot $0.021c = 6.3 \cdot 10^6$ m/s selv ved minimal uskarphet. Dette er forårsaket av at vi kjenner posisjonen til nøytronet så nøyaktig.

I utregningen over valgte vi $\sigma_x = 5$ fm. Det kan vi tenke oss tilsvarende en gaussisk fordelt ψ der ganske mye av partikkelens posisjonsfordeling faktisk havner utenfor avgrensningen på 5 fm. Ved å velge en flat fordeling i stedet, for eksempel $\psi(x) = 1/5$ for $0 < x < 5$, og 0 ellers (ferdig normalisert), kan vi "maksimere uskarpheten innenfor området". Da kan vi regne ut σ_x ved hjelp av $\sigma_x = \sqrt{(\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2)}$, og finne at $\sigma_x = 1.19$ fm, altså omtrent en fjerdedel av 5 fm! Dette vil gi en hastighet som er omtrent fire ganger så stor som vi fant over. Dette illustrerer at slike approksimasjoner avhenger mye av hvilke antakelser vi gjør undervegs.

- d) En partikkel med masse m beveger seg fritt i tre dimensjoner. Skriv ned Hamiltonoperatoren for partikkelen og forklar hvorfor de stasjonære tilstandene har skarpt angulærmoment (L^2 og L_z).

Svar: Hamiltonoperatoren i tre dimensjoner er (fri partikkel slik at det ikke finnes noen potensiell energi):

$$\hat{H} = \hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2. \quad (13)$$

Vi har altså at $V = 0$, hvilket er et sentralsymmetrisk potensial. For alle sentralsymmetriske potensial kan vi finne egenfunksjoner til \hat{H} (de stasjonære tilstandene) som samtidig er egenfunksjoner til \hat{L}^2 og \hat{L}_z . Dette fordi operatorene \hat{H} , \hat{L}^2 og \hat{L}_z kommuterer. Disse egenfunksjonene er proporsjonale med de sfæriske harmoniske. At de er egenfunksjoner til \hat{L}^2 og \hat{L}_z betyr i sin tur at de tilsvarende observable L^2 og L_z er skarpe.

Oppgave 4 Partikkel i boks (fra eksamen 2007)

I denne oppgaven skal vi nok en gang bruke det uendelige bokspotensialet ($V(x) = 0$ for $0 < x < L$, ∞ ellers), som et eksempel på et enkelt, endimensjonalt kvantemekanisk system. Som kjent er energispekteret for en partikkel

¹Vi kan enkelt vise dette ved å se på definisjonen av σ_p hvor massen, som er konstant, kan trekkes utenfor forventningsverdiene:

$$\sigma_p \equiv \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\langle m^2 v^2 \rangle - \langle mv \rangle^2} = m \sqrt{\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2} = m\sigma_v. \quad (12)$$

med masse m gitt ved

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (14)$$

med tilhørende egenfunksjoner

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (15)$$

- a) Forklar hva som menes med en egenfunksjon og egenverdi for en operator. Vis at funksjonene ψ_n i (15) *ikke* er egenfunksjoner for bevegelsesmengden, det vil si at bevegelsesmengden ikke har en skarp verdi i disse tilstandene. Gi en enkel kvalitativ forklaring på hvorfor tilstandene i boksen ikke kan ha skarp bevegelsesmengde.

Svar: En egenfunksjon $f(x)$ og en egenverdi a til en operator \hat{A} oppfyller ligningen

$$\hat{A}f(x) = af(x). \quad (16)$$

For operatoren til bevegelsesmengde, $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$, er

$$\hat{p}\psi_n = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_n = -i\hbar \frac{n\pi}{L} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad (17)$$

som ikke er proporsjonal med ψ_n , slik at dette ikke er en egenfunksjon for bevegelsesmengden. En kvalitativ forklaring på at tilstandene i boksen ikke kan ha skarp bevegelsesmengde er at vi *vet* at partikkelen er inne i boksen, det vil si lokalisert i $0 < x < L$. Dette gir en endelig uskarphet i posisjon ($\sigma_x \leq L$). Siden uskarphetsrelasjonen krever at

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (18)$$

må da $\sigma_p > 0$, noe som ikke stemmer med en skarp bevegelsesmengde som må ha $\sigma_p = 0$. Tilstander med skarp bevegelsesmengde må ha $\sigma_x = \infty$ for å oppfylle uskarphetsrelasjonen.

La oss nå generalisere til en situasjon der det befinner seg to partikler i boksen, henholdsvis med $n = a$ og $n = b$. Vi antar at disse er identiske fermioner og at de befinner seg i en symmetrisk spinntilstand. Vi ser bort fra vekselvirkningen mellom dem.

- b) Vis at romdelen til to-partikkelbølgefunksjonen da kan uttrykkes som en 2×2 determinant,

$$\psi_{\text{rom}}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_a(x_1) & \psi_a(x_2) \\ \psi_b(x_1) & \psi_b(x_2) \end{vmatrix}. \quad (19)$$

Svar: For fermioner må den totale bølgefunksjonen være anti-symmetrisk. Med en symmetrisk spinn-del må rom-delen da være anti-symmetrisk. Uten vekselvirkninger kan bølgefunksjonen for to identiske partikler skrives på formen $\psi_{\text{rom}}(x_1, x_2) = A[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \pm \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)]$, hvor vi nå velger den anti-symmetriske utgaven. Normeringskonstanten A bestemmes av normeringbetingelsen

$$\begin{aligned}
& \int \int |\psi_{\text{rom}}(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 \\
&= |A|^2 \int |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 \\
&\pm |A|^2 \int \psi_a^*(x_1)\psi_b(x_1) dx_1 \int \psi_b^*(x_2)\psi_a(x_2) dx_2 \\
&\pm |A|^2 \int \psi_b^*(x_1)\psi_a(x_1) dx_1 \int \psi_a^*(x_2)\psi_b(x_2) dx_2 \\
&+ |A|^2 \int |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 \\
&= 2|A|^2 = 1.
\end{aligned} \tag{20}$$

hvor vi har brukt ortonomaliteten til ψ_n for å løse integralene. Dette gir $A = 1/\sqrt{2}$ når vi velger en positiv reell normeringskonstant. Den anti-symmetriske versjonen av rom-delen er da

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{rom}}(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_a(x_1) & \psi_a(x_2) \\ \psi_b(x_1) & \psi_b(x_2) \end{vmatrix}.
\end{aligned} \tag{21}$$

Uttrykket (19) kan generaliseres til flere partikler. Antar at vi nå har tre identiske fermioner i boksen, med $n = a, b$ og c , og at spinndelen av bølgefunksjonen igjen er symmetrisk. Da kan vi skrive

$$\psi_{\text{rom}}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_a(x_1) & \psi_a(x_2) & \psi_a(x_3) \\ \psi_b(x_1) & \psi_b(x_2) & \psi_b(x_3) \\ \psi_c(x_1) & \psi_c(x_2) & \psi_c(x_3) \end{vmatrix}. \tag{22}$$

- c) Vis at denne bølgefunksjonen er antisymmetrisk under ombytte av et hvilket som helst par av koordinater, og at den oppfyller Pauliprinsippet. (*Hint:* Direkte bruk av determinanters generelle matematiske egenskaper forenkler regningen betraktelig.)

Svar: Et ombytte av to koordinater i (22) vil utgjøre et ombytte av to søyler i determinanten. Ombytte av to søyler i en determinant gir et fortegnssbytte for determinanten, slik at for $x_1 \leftrightarrow x_2$ er $\psi_{\text{rom}}(x_1, x_2, x_3) = -\psi_{\text{rom}}(x_2, x_1, x_3)$, og tilsvarende for andre koordinatbytter, altså er

bølgefunksjonen antisymmetrisk. Pauliprinsippet sier at to partikler ikke kan være i samme tilstand. Dersom vi setter f.eks. $a = b$ i (22), slik at to av partiklene er i samme tilstand, så vet vi at en determinant med to identiske rader er null, altså er den totale bølgefunksjonen null. Pauliprinsippet er derfor oppfylt.

C Tilleggsoppgave (ikke obligatorisk)

Oppgave 5 Rigid rotor (fra Griffiths Kap.4)

To partikler med masse m er festet til endene på en masseløs stang med lengde a . Systemet kan fritt rotere i tre dimensjoner om dets senter.

- a) Vis at de tillatte energier for denne rigide rotoren er

$$E_n = \frac{\hbar^2 n(n+1)}{ma^2}, \quad (23)$$

for $n = 0, 1, 2, \dots$

Hint: Uttrykk først den klassiske energien ved hjelp av det totale angulærmoment.

Svar: Klassisk er lengden av det angulære moment generelt $L = rp$. Radiusen er her $a/2$ og det er to masser. Vi legger derfor sammen og får $L = (a/2)mv + (a/2)mv = amv$. Nå vet vi at energien er $H = 2(\frac{1}{2}mv^2) = mv^2$ som innsatt $v = L/am$, gir $H = \frac{L^2}{ma^2}$. Det er kjent at egenverdiene til L^2 er $\hbar^2 l(l+1)$, eller ved å bruke energikvantetallet n , får vi

$$E_n = \frac{\hbar^2 n(n+1)}{ma^2}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (24)$$

- b) Hva er den normerte egenfunksjonen for dette systemet? Hva er degenerasjonen of the n te energinivået?

Svar: Bølgefunksjonen er de vanlige sfærisk harmoniske gitt ved Y_n^m , der m antar verdier $m = -n, -n+1, \dots, 0, \dots, n-1, n$. Degenerasjonsgraden for det n te energinivå er $d(n) = 2n+1$.