Løsningsforslag
Eksamen 8. august 2011
FY2045/TFY4250 Kvantemekanikk I

Oppgave 1

a. ♠For $E < V_0$ blir området $x > 0$ klassisk forbudt, og den tidsuavhengige Schrödingerligningen kan i dette området skrives på formen

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - E]\psi \equiv \kappa_+^2\,\psi \qquad \left(\kappa_+ \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\,, \quad x > 0\right).$$

For området $x > 0$ er den generelle løsningen da $\psi = C\,e^{-\kappa_+ x} + D\,e^{\kappa_+ x}$. Her må vi sette $D = 0$ for å få en løsning som ikke går mot uendelig i grensen $x \to \infty$. En egenfunksjon for $E < V_0$ må altså ha formen

$$\psi = C\,e^{-\kappa_+ x} \quad \text{for} \quad x > 0, \quad \text{med} \quad \kappa_+ = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}.$$

♠For $E > 0$ er

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi \equiv -k^2\psi \quad \text{for} \quad x < 0,$$

med $k \equiv \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Den generelle løsningen kan her skrives på formen

$$\psi = C_1\cos kx + C_2\sin kx,$$

og beskriver følgelig en ikke-lokalisert, ubunden tilstand, som ikke kan normeres til 1.

♠Partikler som kommer inn fra venstre med $0 < E < V_0$ vil bli reflektert med 100 % sannsynlighet.

b. ♠Skjøtebetingelsene i origo er at ψ skal være kontinuerlig, mens ψ' har et sprang:

$$\psi(0^+) = \psi(0^-)\,, \qquad \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}\,\psi(0).$$

♠Vi har alt sett at egentilstander med $E > 0$ er ubundne. Dersom det finnes en egenfunksjon med $E = 0$, så må denne oppfylle ligningen

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi = 0 \quad \text{for} \quad x < 0.$$

Den generelle løsningen av denne er

$$\psi = Ax + B,$$

der A må settes lik null for å hindre at $|\psi| \to \infty$ når $x \to -\infty$. En eventuell egenfunksjon med $E = 0$ må altså ha formen $\psi = B$ for $x < 0$. [Her må $B \neq 0$, da skjøtebetingelsen ellers gir den trivielle løsningen som er lik null over alt.] En eventuell egenfunksjon for $E = 0$ beskriver følgelig en ikke-normerbar og ikke-lokalisert og dermed ubunden tilstand.

♠For $E < 0$ har vi for $x < 0$:

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[0 - E]\psi \equiv \kappa_-^2\psi, \qquad \left(\text{med} \quad \kappa_- \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(-E)}\right).$$

Den akseptable løsningen av denne er

$$\psi = C_- \, e^{\kappa_- x} \quad \text{for} \quad x < 0,$$

idet $|D_- \exp(-\kappa_- x)| \to \infty$ for $x \to -\infty$.

<u>**c.**</u> ♠Med

$$\frac{\psi'(0^+)}{\psi(0)} = -\kappa_+ = -\sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}(V_0 - E)} = -\frac{1}{a_0}\sqrt{v_0 - \epsilon} \qquad \text{og} \qquad \frac{\psi'(0^-)}{\psi(0)} = \kappa_- = \frac{1}{a_0}\sqrt{-\epsilon}$$

gir diskontinuitetsbetingelsen

$$-\kappa_+ - \kappa_- = -\frac{2m_e\beta}{\hbar^2} = -\frac{b}{a_0} \qquad (b > 0).$$

Multiplikasjon på begge sider med $-a_0$ gir da (med $-\epsilon = |\epsilon|$) betingelsen

$$\sqrt{v_0 + |\epsilon|} + \sqrt{|\epsilon|} = b, \quad \text{q.e.d.}$$

♠I grensen $v_0 \to 0$ ser vi at betingelsen bestemmer energien entydig, slik at vi (som kjent) får bare én bunden tilstand:

$$2\sqrt{|\epsilon|} = b \quad \Longrightarrow \quad \epsilon = -b^2/4 \quad \Longrightarrow \quad E = -\frac{1}{4}\, b^2 \text{ Ry}.$$

♠Da venstresiden i betingelsen $\sqrt{v_0 + |\epsilon|} + \sqrt{|\epsilon|} = b$ er en strengt stigende funksjon av $|\epsilon|$ og er lik $\sqrt{v_0}$ for $|\epsilon| = 0$, skjønner vi at ligningen bare kan være oppfylt for én energi, forutsatt at

$$b > \sqrt{v_0}\ ,$$

slik at $|\epsilon|$ blir positiv og energien blir negativ. [Ved å kvadrere to ganger kan det vises at løsningen for energien (i Rydberg) er $\epsilon = -[(b^2 - v_0)/(2b)]^2$.]

<u>**d.**</u> ♠Når E nærmer seg V_0 ovenfra (dvs $\epsilon \to v_0$), går $\sqrt{\epsilon - v_0}$ mot null, slik at koeffisienten r nærmer seg grensen

$$\frac{\sqrt{\epsilon} + ib}{\sqrt{\epsilon} - ib} = \frac{\sqrt{v_0} + ib}{\sqrt{v_0} - ib},$$

og slik at refleksjonskoeffisienten $R = |r|^2$ nærmer seg grensen

$$\left|\frac{\sqrt{v_0} + ib}{\sqrt{v_0} - ib}\right|^2 = 1.$$

I denne grensen har vi altså 100 prosent refleksjon, i tråd med resultatet for $0 < E < V_0$ (jf pkt. <u>**a**</u>).

♠For $v_0 = 0$ (enkel δ-brønn) er

$$R = \left|\frac{ib}{2\sqrt{\epsilon} - ib}\right|^2 = \frac{b^2}{4\epsilon + b^2} << 1 \quad \text{dersom} \quad \epsilon >> b^2/4.$$

[Jf grunntilstanden, som hadde $\epsilon = -b^2/4$. Vi ser at $R = 1/2$ for $\epsilon = b^2/4$, så $b^2/4$ "setter på en måte skalaen" for energien i dette tilfellet.]

♠For $b \to 0$ (enkelt potensialsprang) er

$$R = \left|\frac{1 - \sqrt{1 - v_0/\epsilon}}{1 + \sqrt{1 - v_0/\epsilon}}\right|^2.$$

Her oppnås (vha formelen $\sqrt{1-\delta} = 1 - \frac{1}{2}\delta + \cdots$)

$$R \approx \left|\frac{\frac{1}{2}v_0/\epsilon}{2 - \frac{1}{2}v_0/\epsilon}\right|^2 << 1 \quad \text{dersom} \quad \epsilon >> v_0 \;\; (\text{dvs} \;\; E >> V_0).$$

Oppgave 2

a. ♠De mulige egenverdiene til $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ er (som for en vilkårlig komponent av $\mathbf{S}$) $\pm\frac{1}{2}\hbar$, slik at egenverdiene til $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ er ± 1.

♠Ifølge målepostulatet er tilstanden $\chi(0)$ umiddelbart etter energimålingen en av egentilstandene til $\widehat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega\, \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}$, og måleverdien er den tilsvarende egenverdien. Vi regner derfor ut

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}}\,\chi(0) &= (n_x\sigma_x + n_z\sigma_z)\begin{pmatrix}\cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta\end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix}\cos\theta\cos\frac{1}{2}\theta + \sin\theta\sin\frac{1}{2}\theta \\ \sin\theta\cos\frac{1}{2}\theta - \cos\theta\sin\frac{1}{2}\theta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos(\theta - \frac{1}{2}\theta) \\ \sin(\theta - \frac{1}{2}\theta)\end{pmatrix} = 1\cdot\chi(0).
\end{aligned}$$

Dette viser at $\chi(0)$ er en egentilstand til $\widehat{H}$ med egenverdi $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$, som følgelig er den målte energiverdien.

♠Spinnretningen umiddelbart etter målingen er selvsagt $\hat{\mathbf{n}}$, men la oss regne den ut, som en kontroll. Med $a_0 = \cos\frac{1}{2}\theta$ og $b_0 = \sin\frac{1}{2}\theta$ er

$$2a_0^* b_0 = 2\sin\tfrac{1}{2}\theta\cos\tfrac{1}{2}\theta = \sin\theta \qquad \text{og} \qquad |a_0^2| - |b_0|^2 = \cos^2\tfrac{1}{2}\theta - \sin^2\tfrac{1}{2}\theta = \cos\theta,$$

slik at

$$\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle_0 = \hat{\mathbf{x}}\,\Re\mathrm{e}(2a_0^* b_0) + \hat{\mathbf{y}}\,\Im\mathrm{m}(2a_0^* b_0) + \hat{\mathbf{z}}\,(|a_0^2| - |b_0|^2) = \hat{\mathbf{x}}\,\sin\theta + \hat{\mathbf{z}}\,\cos\theta = \hat{\mathbf{n}}, \quad \text{q.e.d.}$$

♠Energimålingen tvinger systemet inn i en av de to stasjonære tilstandene i denne problemstillingen, nemlig

$$\chi_{\hat{\mathbf{n}}}(t) = \chi(0)\,e^{-iEt/\hbar} = \begin{pmatrix}\cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta\end{pmatrix} e^{-i\omega t/2}.$$

Spinnretningen er da konstant:

$$\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle_t = \chi_{\hat{\mathbf{n}}}^\dagger(t)\,\boldsymbol{\sigma}\,\chi_{\hat{\mathbf{n}}}(t) = \chi^\dagger(0)\,\boldsymbol{\sigma}\,\chi(0) = \hat{\mathbf{n}}.$$

b. ♠Med $\chi = \chi(0)$ og $\widehat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega\,\sigma_z$ er sannsynlighetene for måleresultatene $E_+ = \frac{1}{2}\hbar\omega$ og $E_- = -\frac{1}{2}\hbar\omega$ henholdsvis $P_+ = \cos^2\frac{1}{2}\theta$ og $P_- = \sin^2\frac{1}{2}\theta$. Forventningsverdiene av E og E^2 ved tiden t_1^+ er da hhvis

$$\langle\, E \,\rangle = P_+E_+ + P_-E_- = \tfrac{1}{2}\hbar\omega(\cos^2\tfrac{1}{2}\theta - \sin^2\tfrac{1}{2}\theta) = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\,\cos\theta$$

og

$$\left\langle\, E^2 \,\right\rangle = P_+E_+^2 + P_-E_-^2 = (\tfrac{1}{2}\hbar\omega)^2.$$

[Alternativt har vi

$$\langle\, E \,\rangle = \left\langle\, \tfrac{1}{2}\hbar\omega\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{z}} \,\right\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\,\hat{\mathbf{z}}\cdot\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\,\cos\theta \qquad \text{og} \qquad \left\langle\, E^2 \,\right\rangle = (\tfrac{1}{2}\hbar\omega)^2\left\langle\,\sigma_z^2\,\right\rangle = (\tfrac{1}{2}\hbar\omega)^2.]$$

Usikkerheten i energien blir da

$$\Delta E = \sqrt{\langle\, E^2 \,\rangle - \langle\, E \,\rangle^2} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\sin\theta,$$

og er som vi ser lik null for $\theta = 0, \pi$ og maksimal for $\theta = \frac{1}{2}\pi$.

♠For $t > t_1$ er Hamilton-operatoren tidsuavhengig, slik at

$$\frac{d}{dt}\langle\, E \,\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\, [\widehat{H}, \widehat{H}] \,\right\rangle = 0,$$

dvs slik at $\langle\, E \,\rangle$ blir tidsuavhengig. Tilsvarende for $\langle\, E^2 \,\rangle$, og dermed også for ΔE . Det samme innser vi ved å notere oss at for $t > t_1$ er

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta\,\exp(-iE_+t/\hbar) \\ \sin\frac{1}{2}\theta\,\exp(-iE_-t/\hbar) \end{pmatrix},$$

slik at sannsynlighetene P_+ og P_- blir tidsuavhengige.

c. ♠Formelen ovenfor,

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta\,\exp(-iE_+t/\hbar) \\ \sin\frac{1}{2}\theta\,\exp(-iE_-t/\hbar) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta\,\exp(-i\omega t/2) \\ \sin\frac{1}{2}\theta\,\exp(i\omega t/2) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

gjør det enkelt å finne spinnretningen som funksjon av tiden. Med $2a^*b = \sin\theta e^{i\omega t}$ og $|a|^2 - |b|^2 = \cos\theta$ blir spinnretningen

$$\begin{aligned} \langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle_t &= \hat{\mathbf{x}}\,\sin\theta\,\cos\omega t + \hat{\mathbf{y}}\,\sin\theta\,\sin\omega t + \hat{\mathbf{z}}\,\cos\theta \\ &= (\hat{\mathbf{x}}\,\cos\omega t + \hat{\mathbf{y}}\,\sin\omega t)\,\sin\theta + \hat{\mathbf{z}}\,\cos\theta. \end{aligned}$$

Her ser vi at spinnretningen preseserer omkring $\mathbf{B}$-retningen ($\hat{\mathbf{z}}$) med vinkelfrekvensen ω. Det samme gjør da også forventningsverdien av $\mathbf{S}$, som er

$$\langle\,\mathbf{S}\,\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar[(\hat{\mathbf{x}}\,\cos\omega t + \hat{\mathbf{y}}\,\sin\omega t)\,\sin\theta + \hat{\mathbf{z}}\,\cos\theta].$$

[Et alternativ er å bruke formelen for tidsutvikling av forventningsverdier, sammen med dreieimpulsalgebraen.]

Oppgave 3

a. ♠De aktuelle matrise-elementene, mellom begynnelsestilstanden $\psi_i = \psi_{111}$ og slutt-tilstandene $\psi_f = \psi_{11n_z}$, er

$$\begin{aligned} V_{fi}(t) &= -p_0\delta(t)\int \psi_1^*(x)\psi_1^*(y)\psi_{n_z}^*(z)\, z\, \psi_1(x)\psi_1(y)\psi_1(z)dxdydz \\ &= -p_0\delta(t)\int_0^L \psi_{n_z}^*(z)\, z\, \psi_1(z)dz \equiv -p_0\delta(t)I_{n_z,1}, \end{aligned}$$

idet integralene over x og y ganske enkelt er normeringsintegraler (lik 1).

♠Amplitudene for disse overgangene er ifølge 1.-ordens perturbasjonsteori (og de oppgitte integralene) lik null for $n_z = 3, 5, 7$ osv,[1] og lik

$$\begin{aligned} a_{111\to 11n_z} &= \frac{1}{i\hbar}\int V_{fi}(t')e^{i\omega_{fi}t'}dt' = \frac{ip_0}{\hbar}\, I_{n_z,1}\underbrace{\int \delta(t')e^{i\omega_{fi}t'}dt'}_{1} \\ &= -\frac{ip_0L}{\hbar}\,\frac{8n_z}{\pi^2(n_z^2-1)^2} \quad \text{for} \quad n_z = 2, 4, 6, \cdots. \end{aligned}$$

Sannsynlighetene for disse overgangene er

$$P_{111\to 11n_z} = \frac{p_0^2L^2}{\hbar^2}\,\frac{64\, n_z^2}{\pi^4(n_z^2-1)^4}\ ; \quad n_z = 2, 4, \cdots.$$

b. ♠Amplitudene for overganger fra grunntilstanden ψ_{111} til eksiterte tilstander $\psi_{n_xn_yn_z}$ med $n_x \geq 2$ og/eller $n_y \geq 2$ er lik null fordi de er proporsjonale med integralene

$$\int_0^L \psi_{n_x}^*(x)\,\psi_1(x)dx \cdot \int_0^L \psi_{n_y}^*(y)\,\psi_1(y)dy = \delta_{n_x,1}\delta_{n_y,1}.$$

Vi får altså ingen overganger til tilstander med $n_x \geq 2$ og/eller $n_y \geq 2$ med den aktuelle perturbasjonen. [2]

♠Ved innsetting av n_z lik 2 og 4 finner vi at den dominerende overgangssannsynligheten er

$$P_{111\to 112} = \left(\frac{4}{3\pi}\right)^4\frac{p_0^2L^2}{\hbar^2} = 0.0324\,\frac{p_0^2L^2}{\hbar^2},$$

idet

$$P_{111\to 114} = 4\left(\frac{4}{15\pi}\right)^4\frac{p_0^2L^2}{\hbar^2} = 0.00021\,\frac{p_0^2L^2}{\hbar^2}$$

og de påfølgende sannsynlighetene er vesentlig mindre. For at 1.-ordens perturbasjonsteori skal gi nøyaktige resultater, må den samlede overgangssannsynligheten være mye mindre enn 1. Gyldighetskravet blir altså at

$$p_0^2 << 31\,\frac{\hbar^2}{L^2}.$$

[1] I integralet $I_{k,n}$ kan vi godt erstatte faktoren z med faktoren $z - L/2$, siden integralet $\int \psi_k^*\, L/2\, \psi_n dz = 0$. Da faktoren $z - L/2$ er antisymmetrisk mhp midtpunktet, blir integranden antisymmetrisk og integralet lik null for $n - k$ et like tall.

[2] Dette gjelder i virkeligheten ikke bare til første orden, men eksakt, idet den eksakte tidsavhengige bølgefunksjonen kan skrives som produktet av én tidsavhengig bølgefunksjon for hver av de kartesiske retningene. Bevegelsene i x- og y-retning beskrives da av stasjonære grunntilstandsløsninger av typen $\Psi^{(x)}(x,t) = \Psi_1(x,t)$, mens $\Psi^{(z)}(z,t)$ vil avhenge av perturbasjonen.

Til sammenligning er den midlere kvadratiske impulsen i grunntilstanden bestemt av

$$p_{\rm rms}^2 = \left\langle \mathbf{p}^2 \right\rangle_{111} = 2m_e E_{111} = 3\pi^2 \frac{\hbar^2}{L^2} \approx 29.6 \frac{\hbar^2}{L^2}.$$

Kravet er altså (ikke uventet) at impulsoverføringen p_0 må være mye mindre enn den karakteristiske impulsen for grunntilstanden.

c. ♠Ved hjelp av ortonormeringen av bokstilstandene finner vi at x-komponenten d_x av dipolmomentet $\mathbf{d}_{fi}$ ved overgangen fra $\psi_i = \psi_{222}$ til $\psi_f = \psi_{n_x n_y n_z}$ er

$$\begin{aligned} d_x &\equiv \int \psi^*_{n_x n_y n_z}\, x\, \psi_{222} d^3r = \int_0^L \psi^*_{n_x}(x)\, x\, \psi_2(x)dx \int_0^L \psi^*_{n_y}(y)\psi_2(y)dy \int_0^L \psi^*_{n_z}(z)\psi_2(z)dz \\ &= I_{n_x,2}\delta_{n_y,2}\delta_{n_z,2}. \end{aligned}$$

Her ser vi at den eneste spontane overgangen (fra ψ_{222}) med $d_x \neq 0$ er overgangen $\psi_{222} \to \psi_{122}$. For denne overgangen er

$$d_y = \int \psi^*_{122}\, y\, \psi_{222} d^3r = 0 \qquad \text{og} \qquad d_z = \int \psi^*_{122}\, z\, \psi_{222} d^3r = 0$$

fordi $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ er ortogonale.

♠Ut fra dette resultatet skjønner vi at ψ_{222} kan de-eksiteres via tre mulige spontane overganger:

$$\begin{aligned} \psi_{222} &\to \psi_{122}\,, \qquad \text{med} \quad \mathbf{d}_{fi} = \hat{\mathbf{e}}_x\, I_{1,2}, \\ \psi_{222} &\to \psi_{212}\,, \qquad \text{med} \quad \mathbf{d}_{fi} = \hat{\mathbf{e}}_y\, I_{1,2}, \\ \psi_{222} &\to \psi_{221}\,, \qquad \text{med} \quad \mathbf{d}_{fi} = \hat{\mathbf{e}}_z\, I_{1,2}. \end{aligned}$$

♠Bohr-frekvensen for de tre overgangene er

$$\omega = \frac{E_{222} - E_{122}}{\hbar} = \frac{3\pi^2\hbar}{2m_e L^2}.$$

Med $I_{1,2} = -16L/(9\pi^2)$ blir den samlede overgangsraten fra tilstanden ψ_{222} da

$$\begin{aligned} w_{222} &= w_{222\to 122} + w_{222\to 212} + w_{222\to 221} \\ &= 3\,\alpha \frac{4\omega^3}{3c^2}|d_x|^2 = \alpha \frac{4}{c^2}\left(\frac{3\pi^2\hbar}{2m_e L^2}\right)^3 \left(-\frac{16L}{9\pi^2}\right)^2 = \frac{128\pi^2}{3}\,\alpha\,\frac{\hbar^3}{c^2 m_e^3 L^4}. \end{aligned}$$

Her ser vi at den samlede overgangsraten er omvendt proporsjonal med L^4.

d. ♠Med $L = 4\,a_0$ blir størrelsen av dipolmomentet av typisk atomær størrelsesorden:

$$|d_x| = \frac{16}{9\pi^2}\cdot 4a_0 = 0.7205\,a_0 = 0.3811\cdot 10^{-10}\ \text{m}.$$

Det samme gjelder energien $\hbar\omega$ til det emitterte fotonet, som blir

$$\hbar\omega = \frac{E_{222} - E_{122}}{\hbar} = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2m_e L^2} = \frac{3\pi^2}{16}\,\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = \frac{3\pi^2}{16}\cdot 13.6\ \text{eV} = 25.18\ \text{eV},$$

og Bohr-frekvensen, som blir

$$\omega = \frac{25.18 \text{ eV}}{0.6582 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}} = 3.825 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}.$$

Innsetting i formelen for w_{222} gir en overgangsrate fra tilstanden ψ_{222} på

$$w_{222} = \alpha \, \frac{4\omega^3}{c^2} \, |d_x|^2 = 2.64 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}.$$

♠Dipoltilnærmelsen er en god tilnærmelse dersom $kL << 1$. Vi regner derfor ut

$$kL = \frac{\omega}{c} \cdot 4a_0 = \frac{3.85 \cdot 10^{16}}{3 \cdot 10^8} \cdot 4 \cdot 0.529 \cdot 10^{-10} = 0.027.$$

Konklusjonen er at dipoltilnærmelsen er en god tilnærmelse i det aktuelle tilfellet.