Løsningsforslag
Eksamen 27. mai 2005
FY2045 Kvantefysikk

Oppgave 1

a. Ifølge den tidsuavhengige Schrödingerligningen, $\hat{H}\psi = E\psi$, har vi for $x < 0$:

$$E = \frac{\hat{H}\psi}{\psi} = \frac{(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0)\psi}{\psi} = V_0.$$

For området $0 < x < a$, hvor $E - V = V_0 > 0$, er den relative krumningen negativ,

$$\frac{\psi''}{\psi} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv -k^2 < 0, \qquad (\text{med} \quad k \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV_0}),$$

og $\psi_E(x)$ må krumme mot x-aksen. Området $a < x < \infty$, hvor $E - V = -3V_0$, er klassisk forbudt, med positiv relativ krumning. $\psi_E(x)$ må da krumme utover fra aksen.

For området $-\infty < x < 0$, hvor $E = V$, er den generelle løsningen av $\psi'' = (2m/\hbar^2)(V - E)\psi = 0$ egentlig $\psi = Bx + C$. Her må B settes lik null, fordi en energiegenfunksjon ikke tillates å gå mot uendelig, slik Bx vil gjøre når $x \to -\infty$, dersom B er forskjellig fra null.

b. For $0 < x < a$ og $E = V_0$ er den generelle løsningen av $\psi'' = -k^2\psi$ (og dens deriverte)

$$\psi = A\cos kx + B\sin kx \qquad \text{og} \qquad \psi' = -kA\sin kx + kB\cos kx.$$

Kontinuitet for $x = 0$ krever at

$$A = C \qquad \text{og} \qquad kB = 0.$$

Løsningen er altså

$$\psi_E(x) = C\cos kx, \qquad (\text{med} \quad k \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV_0}) \qquad \text{for} \quad 0 < x < a, \quad \text{q.e.d.}$$

For $x > a$ tar den tidsuavhengige Schrödingerligningen formen

$$\psi'' = \frac{2m \cdot 3V_0}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi \quad (\text{med} \quad \kappa \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m \cdot 3V_0} = k\sqrt{3}),$$

med den generelle løsningen

$$\psi_E = De^{-\kappa x} + D'e^{\kappa x}, \qquad x > a.$$

Da en energiegenfunksjon ikke får lov å divergere (for $x \to \infty$ i dette tilfellet), må vi sette D' lik null, og har altså

$$\psi_E(x) = De^{-\kappa x} \qquad \text{og} \qquad \psi_E'(x) = -\kappa De^{-\kappa x} \qquad \text{for} \quad x > a.$$

Kontinuitet av ψ'/ψ for $x = a$ gir

$$\frac{-kC\sin ka}{C\cos ka} = \frac{-\kappa De^{-\kappa a}}{De^{-\kappa a}},$$

altså

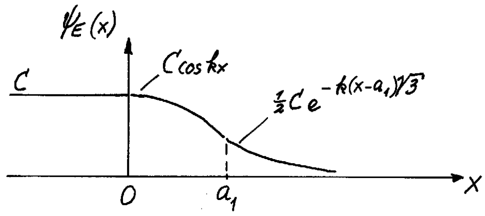
$$\tan ka = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{3}, \quad \text{q.e.d.}$$

c. Den minste (positive) a-verdien som oppfyller betingelsen $\tan ka = \sqrt{3}$ er

$$a_1 = \frac{1}{k}\arctan\sqrt{3} = \frac{\pi}{3k} = \frac{\pi\hbar}{3\sqrt{2mV_0}} = \frac{h}{6\sqrt{2mV_0}}.$$

Betingelsen oppfylles også av

$$ka = \pi/3 + n\pi, \quad \text{for} \quad n = 0, 1, 2, \cdots.$$



Fordi løsningen ovenfor er konstant lik C for alle $x < 0$, er den ikke normerbar (til 1) og ikke "lokalisert". Den beskriver derfor en ubundet tilstand.

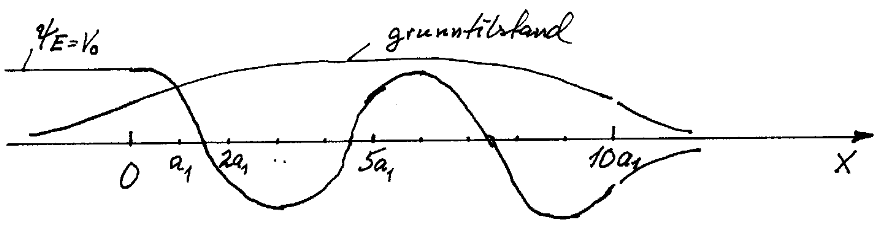
At energiegenfunksjonen ovenfor er fri for nullpunkter indikerer at det er grunntilstanden. Vi kan også argumentere for at det er umulig å ha en løsning med lavere energi, når $a = a_1$. En slik løsning måtte for $x < 0$ gå som $e^{\kappa_1 x}$, med en <u>positiv</u> relativ helning $\psi'(0)/\psi(0) = \kappa_1$ for $x = 0$. For $x > a$ måtte den relative helningen tilsvarende være $\psi'/\psi = -\kappa_2$, mer <u>negativ</u> enn for løsningen i skissen ovenfor. Dette gjør det umulig å få til en glatt løsning, for med $E < V_0$ er jo den relative krumningen i brønn-området <u>mindre</u> enn i skissen ovenfor. En glatt løsning ville kreve større relativ krumning mot aksen i dette området enn i skissen ovenfor.

d. For $a = 10\,a_1$ er $ka = 10\pi/3 = 3\pi + \pi/3$. Dette betyr for det første at betingelsen $\tan ka = \sqrt{3}$ er oppfylt, slik at vi har en energiegenfunksjon $\psi_E(x)$ med $E = V_0$. Dette er den fjerde i rekken av a-verdier som oppfyller betingelsen $\tan ka = \sqrt{3}$:

$$ka = \pi/3,\ 4\pi/3,\ 7\pi/3,\ 10\pi/3,\ 13\pi/3, \quad \text{osv.}$$

Da må vi vente at $ka = 10\pi/3 \equiv ka_4$ gir tre energiegentilstander med energi mindre enn V_0, dvs tre bundne tilstander. Dette støttes (for det andre) av at løsningen med $E = V_0$ har tre nullpunkter, i intervallet $0 < x < a$, siden $ka = 10\pi/3$. (Se skissen nedenfor.) De tre bundne tilstandene har hhvis 0,1 og 2 nullpunkter.

[Med $a = 10\,a_1$ vil grunntilstanden få en energi som er liten i forhold til V_0. For $x < 0$ og $x > a$ vil løsningen gå som hhvis $Ce^{\kappa_1 x}$ og $De^{-\kappa_2 x}$, der $\kappa_1 \approx \frac{1}{2}\kappa_2 \lesssim \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$.] Kvalitativt ser løsningen for grunntilstanden ut som i skissen nedenfor:



Den groveste tilnærmelsen vi kan gjøre for å finne energien til grunntilstanden er å betrakte brønnen som en boks. I denne tilnærmelsen er $k \cdot 10a_1 \approx \pi$, dvs bølgetallet er

$$k \approx \frac{\pi}{10a_1} = \frac{3}{10}\sqrt{2mV_0/\hbar^2},$$

og energien til grunntilstanden er

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{9}{100}\,V_0.$$

e. For $V_0 < E < 4V_0$ er området for $x > a$ fortsatt klassisk forbudt. Løsningen må da ha formen

$$\psi_E(x) = De^{-\kappa x}, \qquad \text{med} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(4V_0 - E)}, \quad \text{for} \quad x > a.$$

Uansett om vi velger D reell eller ikke, så er sannsynlighets-strømtettheten for $x > a$,

$$j(x) = \Re\text{e}\left[\psi_E^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi_E(x)\right] = \Re\text{e}\left[|D|^2 e^{-\kappa x}\frac{\hbar(-\kappa)}{i}e^{-\kappa x}\right]$$

lik null for denne tilstanden, idet uttrykket i hakeparantesen er rent imaginært. For en stasjonær tilstand i én dimensjon er strømtettheten uavhengig av x, dvs lik null for alle x for dette tilfellet. Dette er også lett å se eksplisitt: Med D reell blir $\psi_E(x)$ reell for alle x, slik at den for $x < 0$ må ha formen $\psi_E(x) = A\cos(kx + \alpha)$, der k er bølgetallet i dette området. For denne reelle bølgefunksjonen er $j(x)$ lik null. Ved å skrive denne bølgefunksjonen som en sum av en innkommende og en reflektert bølge,

$$\psi_E(x) = \tfrac{1}{2}Ae^{i\alpha}e^{ikx} + \tfrac{1}{2}Ae^{-i\alpha}e^{-ikx},$$

kan vi tolke dette slik at den innkommende strømtettheten er like stor som den reflekterte, slik at sannsynligheten for refleksjon er lik 1.

Oppgave 2

a. For den frie rotatoren er Hamilton-operatoren $\hat{H} = \hat{\mathbf{L}}^2/(2ma_0^2)$. Dermed er de sfæriske harmoniske, $Y_{lm}(\theta,\phi)$, energiegenfunksjoner, og energiegenverdiene er

$$\begin{aligned} E_l &= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma_0^2}, \qquad (l = 0, 1, 2, \cdots), \\ &= 0,\ \frac{\hbar^2}{ma_0^2},\ \frac{3\hbar^2}{ma_0^2},\ \frac{6\hbar^2}{ma_0^2},\ \text{osv.} \end{aligned}$$

For en gitt verdi av l finnes det $2l+1$ sfæriske harmoniske Y_{lm}, dvs $2l+1$ uavhengige energiegenfunksjoner. Degenerasjonsgraden for energinivået E_l er altså

$$g_l = 2l + 1.$$

b. Ved paritetsoperasjonen ($\mathbf{r} \to -\mathbf{r},\ \theta \to \pi - \theta,\ \phi \to \phi + \pi$) ser vi at

$$Y_i = Y_{20} = \sqrt{5/16\pi}\,(3\cos^2\theta - 1)$$

beholder fortegnet. Pariteten er altså positiv, i tråd med den generelle formelen $(-1)^l$ for pariteten til Y_{lm}. Da både Y_{00} og Y_{20} har positiv paritet, mens faktoren $\mathbf{r}$ har negativ paritet, ser vi at integranden i

$$\mathbf{d}_{fi} = \int Y_{00}^*\,\mathbf{r}\,Y_{20}d\Omega$$

er antisymmetrisk mhp origo. Integralet er derfor lik null, og overgangen fra Y_{20} til Y_{00} er forbudt i dipoltilnærmelsen [i tråd med den generelle utvalgsregelen $\Delta l = \pm 1$ for strålingsoverganger i dipoltilnærmelsen.]

c. For overgangen fra Y_{20} til tilstanden Y_{10} finner vi matrise-elementet

$$\mathbf{d}_{fi} = \sqrt{\frac{5\cdot 3}{16\pi\cdot 4\pi}}\int \cos\theta\, a_0(\hat{\mathbf{e}}_x\sin\theta\cos\phi + \hat{\mathbf{e}}_y\sin\theta\sin\phi + \hat{\mathbf{e}}_z\cos\theta)(3\cos^2\theta - 1)d(\cos\theta)d\phi.$$

Her er x- og y-komponentene lik null, hhvis pga faktorene $\cos\phi$ og $\sin\phi$. Dermed blir

$$\mathbf{d}_{fi} = \hat{\mathbf{e}}_z\frac{\sqrt{15}}{8\pi}\,a_0\underbrace{\int_0^{2\pi}d\phi}_{2\pi}\underbrace{\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)(3\cos^4\theta - \cos^2\theta)}_{2(3/5-1/3)} = \hat{\mathbf{e}}_z\frac{2a_0}{\sqrt{15}.}$$

Med

$$Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{3/8\pi}\,\sin\theta(\cos\phi \pm i\sin\phi) = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\,(Y_{p_x} \pm iY_{p_y})$$

har vi

$$\begin{aligned}\langle\, Y_{1,\pm1}, \mathbf{r}Y_{20}\,\rangle &= \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\langle\, Y_{p_x}, \mathbf{r}Y_{20}\,\rangle \pm i\,\Big\langle\, Y_{p_y}, \mathbf{r}Y_{20}\,\Big\rangle\Big)\\ &= \pm\frac{a_0}{\sqrt{15}}\,(\hat{\mathbf{e}}_x \pm i\hat{\mathbf{e}}_y)\,/\sqrt{2}.\end{aligned}$$

d. Med de tre slutt-tilstandene Y_{p_x}, Y_{p_y} og $Y_{10} \equiv Y_{p_z}$ (alternativt $Y_{1,\pm1}$ og Y_{10}), og med $|\mathbf{d}_{fi}|^2 = a_0^2/15$ for de to første og $4a_0^2/15$ for den siste, er den samlede overgangssannsynligheten pr tidsenhet

$$w_i = \sum_f w_{fi} = \alpha\,\frac{4\omega^3}{3c^2}\sum_f|\mathbf{d}_{fi}|^2 = \frac{8\alpha}{15}\,\omega\left(\frac{\omega a_0}{c}\right)^2.$$

Den etterlyste tallfaktoren er altså $8/15$.

Her er $\omega = (E_i - E_f)/\hbar = (E_2 - E_1)/\hbar = 2\hbar^2/(ma_0^2)$, slik at

$$\frac{\omega a_0}{c} = \frac{2\hbar}{mca_0} = 2\,\frac{\hbar/(m_e c)}{a_0}\,\frac{m_e}{m} = 2\alpha\,\frac{m_e}{m}.$$

For $m = 100m_e$ er tallverdien av denne litenhetsparameteren

$$\frac{\omega a_0}{c} = 2\alpha/1000 \approx 1.46\cdot 10^{-5}.$$

Fotonenergien er

$$\hbar\omega = \frac{2\hbar^2}{ma_0^2} = 4\,\frac{m_e}{m}\,\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = \frac{4}{1000}\cdot 13.6\ \text{eV} = 0.0544\ \text{eV}.$$

For overgangssannsynligheten finner vi

$$w_i = \frac{8\alpha}{15}\,\frac{\hbar\omega}{\hbar}\left(\frac{\omega a_0}{c}\right)^2 = \frac{4}{15\cdot 137.036}\cdot\frac{0.0544\,\text{eV}}{6.582\cdot 10^{-16}\,\text{eVs}}\,(1.46\cdot 10^{-5})^2 \approx 68.6\ \text{s}^{-1}.$$

Oppgave 3

a. Fra relasjonene $\hat{L}_z\,Y_{11} = \hbar\,Y_{11}$ og $\hat{S}_z\,|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\hbar\,|\uparrow\rangle$ følger det at

$$\hat{J}_z\,\psi_{211}^{\uparrow} = (\hat{L}_z + \hat{S}_z)\psi_{211}^{\uparrow} = \frac{3}{2}\,\hbar\,\psi_{211}^{\uparrow}.$$

Egenverdien er altså $\frac{3}{2}\hbar$.

b. Da

$$\hat{J}_+\,\psi_{211}^{\uparrow} = (\hat{L}_+ + \hat{S}_+)\psi_{211}^{\uparrow} = 0 + 0,$$

følger det fra relasjonen $\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z + \hat{J}_-\hat{J}_+$ at

$$\hat{\mathbf{J}}^2\,\psi_{211}^{\uparrow} = \left[(\frac{3}{2}\hbar)^2 + \hbar\,\frac{3}{2}\hbar\right]\psi_{211}^{\uparrow} = \hbar^2\frac{3}{2}(\frac{3}{2}+1)\,\psi_{211}^{\uparrow}, \quad \text{q.e.d.}$$

c. De to rotfaktorene i uttrykket $\left(\sqrt{2/3}\,Y_{10}\,|\uparrow\rangle + \sqrt{1/3}\,Y_{11}\,|\downarrow\rangle\right)$ i oppgaveteksten er sannsynlighetsamplitudene for å måle hhvis spinn opp og spinn ned. Sannsynligheten for å måle spinn opp er altså $2/3 = 66.7\,\%$. En måling med dette resultatet (spinn opp) vil etterlate atomet i en tilstand beskrevet ved $R_{21}(r)\,Y_{10}\,|\uparrow\rangle$.