Løsningsforslag
Eksamen 4. desember 2007
TFY4250 Atom- og molekylfysikk/FY2045 Kvantefysikk

Oppgave 1

a. • For tilfellet $\alpha = 0$ har vi et ordinært bokspotensial med vidde $2a$. Inne i boksen tar den tidsuavhengige Schrödingerligningen (TUSL) formen

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi \equiv -k^2\psi, \qquad \text{med} \qquad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \qquad \left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right).$$

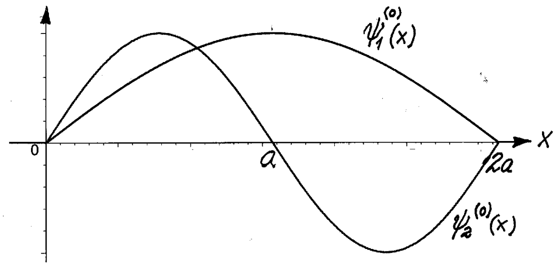
For $x < 0$ og for $x > 2a$ skal vi ha $\psi = 0$. Løsningen $\psi = C \sin kx$ oppfyller kontinuitetskravet i $x = 0$. Kravet $\psi(2a) = 0$ gir

$$\sin(k_n \cdot 2a) = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad k_n = \frac{n\pi}{2a}; \qquad n = 1, 2, \cdots.$$

Bølgetallene og energiene for grunntilstanden og 1. eksiterte tilstand er hhvis

$$k_1^{(0)} = \frac{\pi}{2a}, \quad E_1^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(2a)^2}, \qquad k_2 = 2k_1^{(0)} = \frac{\pi}{a}, \quad E_2^{(0)} = 4E_1^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}.$$

De to sinusformede energiegenfunksjonene utgjør hhvis en halvbølge og en helbølge:



[Kommentar: Løsningene for $\alpha = 0$, $\psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}$, er også normerte, siden middelverdien av $|\psi_n^{(0)}|^2$ over et helt antall halve bølgelengder er lik $1/2a$.]

•Resultatene for k_2, $E_2^{(0)}$ og $\psi_2^{(0)}$ er gyldige også for $\alpha \neq 0$: Vi har nettopp sett at $\psi_2^{(0)}(x)$ oppfyller TUSL for $x < a$ og for $x > a$. Dessuten er den antisymmetrisk (med hensyn på "symmetripunktet" for potensialet $V(x)$), slik 1. eksiterte tilstand skal være. Den oppgitte diskontinuitetsbetingelsen er også oppfylt, idet $\psi_2'(a_+) - \psi_2'(a_-) = 0$ og $\psi_2(a) = 0$.

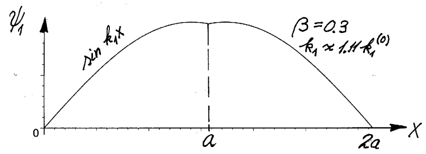
b. •Med potensialleddet $\alpha\delta(x-a) = \beta\hbar^2/(ma)\delta(x-a)$ som perturbasjon er førsteordens korreksjon til energien $E_1^{(0)}$ gitt ved forventningsverdien av perturbasjonen, beregnet vha den uperturberte bølgefunksjonen $\psi_1^{(0)}$:

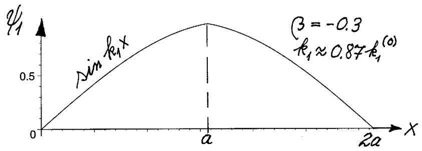
$$E_1^{(1)} = \int_0^{2a} \left|\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{\pi x}{2a}\right|^2 \frac{\beta\hbar^2}{ma}\,\delta(x-a)dx = \beta\,\frac{\hbar^2}{ma^2}.$$

Til første orden er altså grunntilstandsenergien

$$E_1 \approx E_1^{(0)} + E_1^{(1)} = \frac{\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{\pi^2}{8} + \beta\right).$$

•Vi ser av resultatet ovenfor at korreksjonen til $E_1^{(0)}$ og dermed til $k_1^{(0)}$ er positiv for en svakt frastøtende δ-barriere ($\beta > 0$) og negativ for en svakt tiltrekkende δ-brønn ($\beta < 0$). Prinsippskissene (som her egentlig er ganske nøyaktige skisser for $\beta = \pm 0.3$) blir da som følger:





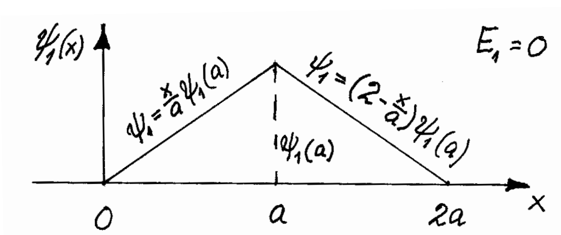
Dette harmonerer med diskontinuitetsbetingelsen, som sier at spranget i den deriverte skal være positivt (negativt) for $\alpha > 0$ ($\alpha < 0$).

•Bølgetallet k_1 og energien E_1 for grunntilstanden må alltid være mindre enn de tilsvarende størrelsene for 1. eksiterte tilstand, som dermed blir øvre skranker:

$$k_1 < k_2 = \frac{\pi}{a}; \qquad E_1 < E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}.$$

[Kommentar: Når β blir mye større enn 1, vil k_1 og E_1 *nærme seg* disse skrankene. Dette ser vi fra diskontinuitetsbetingelsen: Når α vokser seg skikkelig stor, må $\psi_1(a)$ nærme seg null, slik at bølgetallet k_1 nærmer seg $k_2 = \pi/a$.]

c. •For $E_1 = 0$ ser vi fra TUSL at $\psi_1'' = 0$ for $0 < x < a$ og for $a < x < 2a$. Bølgefunksjonen er altså lineær i disse områdene. Da den samtidig skal være kontinuerlig og lik null for $x = 0$ og $x = 2a$, må formen bli som følger:



•Fra figuren ser vi at

$$\psi_1'(a_-) = -\psi_1'(a_+) = \psi_1(a)/a.$$

β-verdien β_0 (som gir $E_1 = 0$) finner vi da ved å sette inn i diskontinuitetsbetingelsen:

$$\psi_1'(a_+) - \psi_1'(a_-) = -2\frac{\psi_1(a)}{a} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\,\psi_1(a) = \frac{2\beta_0}{a}\,\psi_1(a) \qquad \Longrightarrow \qquad \beta_0 = -1.$$

[Kommentar: Det kan være fristende å bruke tilnærmingsformelen fra 1.-ordens perturbasjonsteori (pkt. **b**) til å finne β_0. Denne formelen gir

$$\beta_0 \approx -\frac{\pi^2}{8} \approx -1.23,$$

og vi ser at resultatet ganske riktig blir noe unøyaktig, men kanskje ikke så mye som en kunne frykte.]

d. •For $E_1 < 0$ $(-\infty < \beta < \beta_0)$ er den generelle løsningen av TUSL for området $0 < x < a$,

$$\psi_1'' = \frac{2m(-E_1)}{\hbar^2}\psi_1 \equiv \kappa^2\psi_1; \qquad E_1 = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m},$$

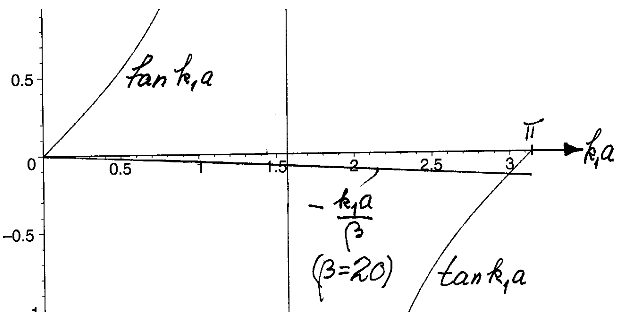
en lineærkombinasjon av $e^{\kappa x}$ og $e^{-\kappa x}$, eller om vi vil av $\sinh\kappa x = \frac{1}{2}(e^{\kappa x} - e^{-\kappa x})$ og $\cosh\kappa x = \frac{1}{2}(e^{\kappa x} + e^{-\kappa x})$. Da bare den første av disse er lik null for $x = 0$, er altså løsningen i dette området $\psi_1 = A\sinh\kappa x$. Med $\psi_1(a) = A\sinh\kappa a$ og $\psi_1'(a_+) = -\psi_1'(a_-) = -\kappa A\cosh\kappa a$ innsatt i diskontinuitetsbetingelsen har vi da

$$-2\kappa A\cosh\kappa a = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\beta\hbar^2}{ma}A\sinh\kappa a \qquad \Longrightarrow \qquad \tanh\kappa a = -\frac{\kappa a}{\beta}, \quad \text{q.e.d.}$$

•For $E_1 > 0$ $(\beta_0 < \beta < \infty)$ kan vi tilsvarende sette $\psi_1 = B\sin k_1 x$ for $0 < x < a$. Med $\psi_1(a) = B\sin k_1 a$ og $\psi_1'(a_+) = -\psi_1'(a_-) = -k_1 B\cos k_1 a$ innsatt i diskontinuitetsbetingelsen har vi da

$$-2k_1 B\cos k_1 a = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\beta\hbar^2}{ma}B\sin k_1 a \qquad \Longrightarrow \qquad \tan k_1 a = -\frac{k_1 a}{\beta}, \quad \text{q.e.d.}$$

e.



•Når β nærmer seg uendelig, blir linjen $-k_1a/\beta$ veldig flat, og vi ser fra skjæringspunktet med $\tan k_1 a$ at $k_1 a$ nærmer seg π. I denne grensen vil altså k_1 nærme seg k_2 og E_1 nærme seg E_2, slik vi var inne på i pkt. **b**.[1]

•Når $-\beta >> 1$, vil den rette linjen $-\kappa a/\beta$ skjære kurven $\tanh\kappa a$ for en stor verdi av κa, hvor $\tanh\kappa a \approx 1$. Betingelsen blir da $-\kappa a/\beta = \tanh\kappa a \approx 1$, slik at

$$\kappa \approx -\frac{\beta}{a} \qquad \text{og} \qquad E_1 = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \approx -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\beta^2.$$

[Dette er samme resultat som for et rent deltafunksjonspotensial $V = \beta\hbar^2/(ma)\delta(x-a)$; for store negative β spiller det ingen rolle om vi har boksen der eller ikke.]

[1]Rent teknisk har vi også et skjæringspunkt for $k_1 a = 0$, men det vil jo gi den trivielle ikkenormerbare løsningen $\psi_1 = B\sin k_1 x = 0$, som selvsagt ikke er fysisk akseptabel. Tilsvarende kommentar gjelder også for tilfellet $-\beta >> 1$.

Oppgave 2

a. • Ved en endring av høyden L er det bare energibeløpet

$$E_{n_z} \equiv \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu}\frac{n_z^2}{L^2}$$

knyttet til bevegelsen i z-retningen som endrer seg. I grunntilstanden (med $n_z = 1$) er dette energibeløpet

$$E_{n_z=1}(L) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu}\frac{1}{L^2}.$$

Når høyden reduseres fra L til $L/2$ må det utføres et arbeid som svarer til energiøkningen:

$$W = E_{n_z=1}(L/2) - E_{n_z=1}(L) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu L^2}\cdot 3.$$

•Ved høyden L vil partikkelen ved en infinitesimal økning dL av L utføre et arbeid på stempelet som går på bekostning av energien:

$$dW = F\,dL = E_{n_z=1}(L) - E_{n_z=1}(L+dL).$$

Kraften fra partikkelen på stempelet er altså uavhengig av sylinderradien;

$$F = -\frac{\partial E_{n_z=1}(L)}{\partial L} = -\frac{\partial}{\partial L}\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu L^2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{\mu L^3}.$$

b. •I grunntilstanden vil de 8 fermionene okkupere de fire romlige én-partikkel-tilstandene med lavest energi. Vha energiformelen i oppgaveteksten og Bessel-nullpunktene på formelarket kan vi sette opp en oversikt over én-partikkel-energiene for de laveste kvantetallene (for $L = 2a$):

$E = 8.25(\hbar^2/(2\mu a^2))$	$n = 1$	$m = 0$	$n_z = 1$	(grunntilstanden)
$E = 15.65(\hbar^2/(2\mu a^2))$	$n = 1$	$m = 0$	$n_z = 2$	(1. eksiterte nivå)
$E = 17.15(\hbar^2/(2\mu a^2))$	$n = 1$	$m = \pm 1$	$n_z = 1$	(2. eksiterte nivå)
$E = 24.55(\hbar^2/(2\mu a^2))$	$n = 1$	$m = \pm 1$	$n_z = 2$	(3. eksiterte nivå)
$E = 27.99(\hbar^2/(2\mu a^2))$	$n = 1$	$m = 0$	$n_z = 3$	(4. eksiterte nivå)

Her ser vi at de tre laveste energinivåene inneholder fire romlige tilstander. [2] Tre av disse har $n_z = 1$, én har $n_z = 2$. Ved en liten bevegelse av stempelet er det bare energibeløpene knyttet til bevegelsen i z-retningen som endrer seg. Summen av disse beløpene for de 8 partiklene er

$$E_z(L) \equiv 6E_{n_z=1}(L) + 2E_{n_z=2}(L) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu L^2}(6 + 2\cdot 4) = 14\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu L^2},$$

dvs 14 ganger større enn for den ene partikkelen i pkt. **a**. Dette gir en kraft

$$F = -\left.\frac{\partial E_z(L)}{\partial L}\right|_{L=2a} = 14\left.\frac{\hbar^2\pi^2}{\mu L^3}\right|_{L=2a} = \frac{7}{4}\frac{\hbar^2\pi^2}{\mu a^3}.$$

[2] I oppgaveteksten skal det egentlig stå $\Pi_n^{(|m|)}$, $E_{nn_z}^{(|m|)}$ og $J_{|m|}$. Derfor har de fleste regnet med bare ikke-negative m-verdier. Dette er det ikke trukket for ved sensuren.

c. •Arbeidet utført under bevegelsen fra $L = 2a$ til $L = 10^6 a$ er gitt ved differansen mellom systemets energier i begynnelses- og slutt-tilstandene. I slutt-tilstanden vil de 8 partiklene okkupere de fire romlige én-partikkel-tilstandene som har de laveste energiene. Siden L er så stor, vil dette være fire tilstander med $n_z = 1, 2, 3$ og 4, mens det ikke er noen eksitasjon transversalt (hverken radielt eller i ϕ-retningen). Alle disse fire tilstandene har altså $n = 1$ (som før) og $m = 0$. Siden L er så stor som $10^6 a$, kan vi for slutt-tilstanden neglisjere energien knyttet til bevegelsen i z-retningen. Dette betyr at det opprinnelige beløpet

$$E_z = 14\,\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu(2a)^2} = \frac{\hbar^2}{\mu a^2}\cdot\frac{7\pi^2}{4}$$

er gått tapt. Dessuten har rotasjonsenergien til de fire partiklene som opprinnelig hadde $m = \pm 1$ gått tapt. Dette beløpet er

$$4\,\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[(\Pi_1^{(1)})^2 - (\Pi_1^{(0)})^2\right] = \frac{2\hbar^2}{\mu a^2}(3.8317^2 - 2.4048^2) = 17.8\,\frac{\hbar^2}{\mu a^2}.$$

Arbeidet (lik det totale energitapet) er altså

$$W = \left(\frac{7\pi^2}{4} + 17.8\right)\frac{\hbar^2}{\mu a^2} = 35.1\,\frac{\hbar^2}{\mu a^2}.$$

Oppgave 3

a. •Vha Eulers formler finner vi at

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma} &= n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z \\
&= \sin\theta\cos\phi\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin\theta\sin\phi\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos\theta\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}, \quad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$

•Vha de trigonometriske formlene finner vi at

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\,\chi_{\hat{\mathbf{n}}} &= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta\, e^{i\phi} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\frac{1}{2}\theta + \sin\theta\sin\frac{1}{2}\theta \\ (\sin\theta\cos\frac{1}{2}\theta - \cos\theta\sin\frac{1}{2}\theta)e^{i\phi} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta\, e^{i\phi} \end{pmatrix} = 1\cdot\chi_{\hat{\mathbf{n}}}.
\end{aligned}$$

Følgelig er $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$ en egenspinor til $\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\mathbf{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ med egenverdi $+\frac{1}{2}\hbar$, slik vi skulle vise.

b. •En måling av $\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{S}$ med resultatet $\frac{1}{2}\hbar$ vil etterlate spinnet i tilstanden $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$. En måling umiddelbart etterpå av S_x med resultatet $\frac{1}{2}\hbar$ vil etterlate spinnet i egentilstanden

$$\chi_{\hat{\mathbf{x}}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix};$$

denne svarer ifølge formelen for $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$ til "spinn opp i x-retningen". Sannsynlighetsamplituden for dette er projeksjonen av tilstanden før den siste målingen på tilstanden etter målingen:

$$A = \chi_{\hat{\mathbf{x}}}^\dagger \chi_{\hat{\mathbf{n}}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\tfrac{1}{2}\theta + \sin\tfrac{1}{2}\theta\, e^{i\phi}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\tfrac{1}{2}\theta + \sin\tfrac{1}{2}\theta\cos\phi + i\sin\tfrac{1}{2}\theta\sin\phi\right).$$

Sannsynligheten for denne tildragelsen er absoluttkvadratet av denne amplituden,

$$\begin{aligned}
P &= |A|^2 = \tfrac{1}{2}\left[(\cos\tfrac{1}{2}\theta + \sin\tfrac{1}{2}\theta\cos\phi)^2 + (\sin\tfrac{1}{2}\theta\sin\phi)^2\right] \\
&= \tfrac{1}{2}\left[\cos^2\tfrac{1}{2}\theta + \sin^2\tfrac{1}{2}\theta(\cos^2\phi + \sin^2\phi) + 2\cos\tfrac{1}{2}\theta\sin\tfrac{1}{2}\theta\cos\phi\right] \\
&= \tfrac{1}{2}(1 + \sin\theta\cos\phi) = \tfrac{1}{2}(1 + \hat{\mathbf{x}}\cdot\hat{\mathbf{n}}).
\end{aligned}$$

[Vi ser at denne sannsynligheten er lik 1 for $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}}$ og lik null for $\hat{\mathbf{n}} = -\hat{\mathbf{x}}$, slik det bør være. Et alternativ til utledningen ovenfor er å bruke at

$$\begin{aligned}
\langle S_x \rangle &= \tfrac{1}{2}\hbar \cdot P(S_x = \tfrac{1}{2}\hbar) + (-\tfrac{1}{2}\hbar)\cdot P(S_x = -\tfrac{1}{2}\hbar) = \tfrac{1}{2}\hbar[2P(S_x = \tfrac{1}{2}\hbar) - 1] \\
&= \tfrac{1}{2}\hbar\,\langle \sigma_x \rangle = \cdots = \tfrac{1}{2}\hbar\sin\theta\cos\phi. \quad]
\end{aligned}$$

c. •Det er minst to *enkle* metoder vi kan bruke (i tillegg til å løse egenverdiproblemet på den vanlige måten):

(i) Egenverdien $-\frac{1}{2}\hbar$ for $\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{S}$ svarer til "spinn ned" i forhold til $\hat{\mathbf{n}}$-retningen, dvs "spinn opp" i forhold til retningen $-\hat{\mathbf{n}}$. Retningsvinklene for $-\hat{\mathbf{n}}$ finner vi ved å erstatte θ og ϕ med $\pi - \theta$ og $\phi + \pi$. Vha formelen for $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$ har vi da

$$\chi_{-\hat{\mathbf{n}}} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{1}{2}\pi - \frac{1}{2}\theta) \\ \sin(\frac{1}{2}\pi - \frac{1}{2}\theta)e^{i(\phi+\pi)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\frac{1}{2}\theta \\ -\cos\frac{1}{2}\theta\, e^{i\phi} \end{pmatrix} = -e^{i\phi}\begin{pmatrix} -\sin\frac{1}{2}\theta\, e^{-i\phi} \\ \cos\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}.$$

(ii) Den søkte spinoren $\chi_{-\hat{\mathbf{n}}} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, som svarer til motsatt egenverdi, skal være ortogonal på $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$:

$$0 = (a^* \;\; b^*)\begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta\, e^{i\phi} \end{pmatrix} = a^*\cos\tfrac{1}{2}\theta + b^*\sin\tfrac{1}{2}\theta\, e^{i\phi} \qquad \Longrightarrow \qquad a = -b\tan\tfrac{1}{2}\theta\, e^{-i\phi}.$$

Normeringsbetingelsen,

$$1 = |a|^2 + |b|^2 = |b|^2(\tan^2\tfrac{1}{2}\theta + 1) = \frac{|b|^2}{\cos^2\frac{1}{2}\theta},$$

gir da

$$b = e^{i\beta}\cos\tfrac{1}{2}\theta \qquad \text{og} \qquad a = -e^{i\beta}\sin\tfrac{1}{2}\theta\, e^{-i\phi},$$

dvs

$$\chi_{-\hat{\mathbf{n}}} = e^{i\beta}\begin{pmatrix} -\sin\frac{1}{2}\theta\, e^{-i\phi} \\ \cos\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}.$$

Nærmere enn dette kan vi ikke komme; fasen β er ubestemt.