FY2045 Kvantefysikk
Løsningsforslag – Eksamen 2. juni 2008

Oppgave 1

a. •Fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x),$$

finner vi at den relative krumningen er

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

•Med $\psi_2 = C$ for $-\infty < x < 0$ er $\psi_2'' = 0$ i dette området. Siden $V(x) = V_0$ i dette området, må da energien for 1. eksiterte tilstand ifølge ligningen ovenfor være

$$E_2 = V_0.$$

•I brønnområdet $0 < x < a$ finner vi en negativ relativ krumning, $\psi_2''/\psi_2 = -2mV_0/\hbar^2 < 0$. Her krummer altså ψ_2 mot aksen. For barriereområdet til høyre for brønnen er

$$\frac{\psi_2''}{\psi_2}=\frac{2m}{\hbar^2}(2V_0-V_0)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}>0,$$

så her krummer ψ_2 bort fra aksen.

•Første eksiterte tilstand ψ_2 har som vanlig ett nullpunkt.

•En løsning på formen $\psi_2 = Bx + C$ for området $-\infty < x < 0$ vil divergere i grensen $x \to -\infty$, dersom $B \neq 0$. Dette er ikke akseptabelt for en energiegenfunksjon. Følgelig må vi ha $B = 0$.

b. •ψ_2 må (i likhet med alle andre energiegenfunksjoner for dette potensialet) være kontinuerlig over alt, inklusive i punktene $x = 0$ og $x = a$, og det samme gjelder for den deriverte, ψ_2'. Energiegenfunksjone er altså sammenhengende og glatte over alt.

•I brønnområdet fant vi at $\psi_2'' = -(2mV_0/\hbar^2)\,\psi_2 \equiv -k^2\,\psi_2$. Den generelle løsningen i dette området er da

$$\psi_2 = A\cos kx + B\sin kx, \qquad \psi_2' = -kA\sin kx + kB\cos kx, \qquad k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV_0}.$$

Kontinuitet for $x = 0$ krever at $A = C$ og $B = 0$. Løsningen er altså

$$\psi_2 = C\cos kx \qquad (\text{for } 0<x<a),\quad \text{q.e.d.,} \qquad \text{med } k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV_0}.$$

Her merker vi oss at det er bare kosinusen som kan gå glatt over i den flate løsningen for $x < 0$.

•For $x > a$ fant vi at $\psi_2'' = (2mV_0/\hbar^2)\,\psi_2 \equiv \kappa^2\,\psi_2$. Her er

$$\kappa=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV_0}=k.$$

Den generelle løsningen er da

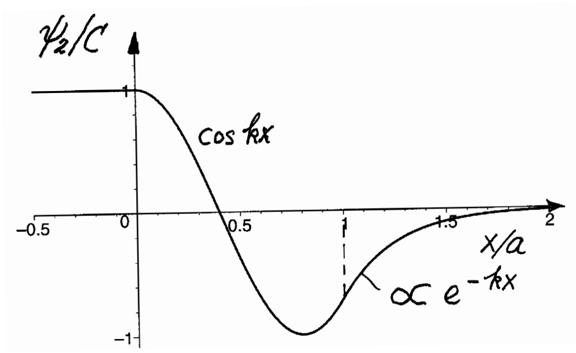
$$\psi_2 = De^{-kx} + D'e^{kx}.$$

Da en energiegenfunksjon som nevnt ikke får lov å divergere (for $x \to \infty$ i dette tilfellet), må vi sette $D' = 0$, og har altså at

$$\psi_2 = De^{-kx}, \qquad \psi_2' = -kDe^{-kx} \qquad \text{for } x > a.$$

c. •Det ene nullpunktet for 1. eksiterte tilstand ψ_2 må ligge i brønnområdet, da $\psi_2 = C$ i venstre barriere og funksjonen De^{-kx} i høyre barriere ikke har noe nullpunkt.

•Skissen blir da omtrent slik:



•Her legger vi merke til at kosinusen i brønnområdet utgjør litt mer enn en halvbølge, men mindre enn 3/4 av en helbølge. Dette betyr at ka ligger mellom π og $3\pi/2$. For å bestemme brønnvidden a kan vi nå bruke kontinuiteten av den logaritmisk deriverte ψ_2''/ψ_2 i punktet $x = a$. Fra resultatene ovenfor har vi:

$$-k \tan ka = -k, \qquad \text{dvs} \quad \tan ka = 1.$$

Denne har flere løsninger for ka, men den eneste som ligger mellom π og $3\pi/2$ er

$$ka = \pi + \pi/4 \qquad \Longrightarrow \qquad a = \frac{5\pi}{4k} = \frac{5\pi\hbar}{4\sqrt{2mV_0}}.$$

d. •Innsetting av $\psi_1 = A\cos[k_1(x-b)]$ i den tidsuavhengige Schrödingerligningen $\psi_1'' = -(2mE_1/\hbar^2)\psi_1$ for brønnområdet gir

$$-k_1^2\psi_1 = -\frac{2mE_1}{\hbar^2}\psi_1, \qquad \text{dvs} \quad k_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_1}.$$

•For $x < 0$ er den tidsuavhengige Schrödingerligningen

$$\psi_1'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E_1)\psi_1 \equiv \kappa_1^2\psi_1; \qquad \kappa_1 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E_1)}.$$

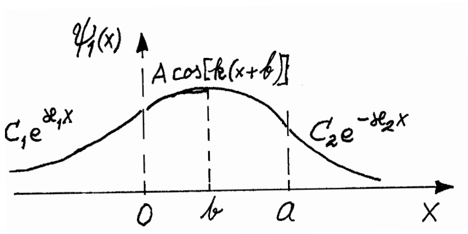
Den akseptable løsningen av denne er

$$\psi_1 = C_1 e^{\kappa_1 x} \qquad (-\infty < x < 0).$$

For $x > a$ er tilsvarende $\psi_1'' = (2m/\hbar^2)(2V_0 - E_1)\psi_1$, med den akseptable løsningen

$$\psi_1 = C_2 e^{-\kappa_2 x} \quad \text{for} \quad x > a; \qquad \kappa_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(2V_0 - E_1)}.$$

•Grunntilstanden er fri for nullpunkter. Kvalitativt kan vi da skissere ψ_1 slik:



•Energien bestemmes av kontinuitetsbetingelsene for $x = 0$ og $x = a$. Den logaritmisk deriverte i de tre områdene er

$$(x < 0:) \quad \frac{\psi_1''}{\psi_1} = \kappa_1; \qquad (0 < x < a:) \quad \frac{\psi_1''}{\psi_1} = -k_1 \tan[k_1(x-b)]; \qquad (x > a:) \quad \frac{\psi_1''}{\psi_1} = -\kappa_2.$$

Kontinuitet i $x = 0$ og $x = a$ gir da hhvis

$$\kappa_1 = -k_1 \tan(-k_1 b) = k_1 \tan k_1 b \qquad \text{og} \qquad -k_1 \tan[k_1(a-b)] = -\kappa_2.$$

Med uttrykkene for κ_1, k_1 og κ_2 innsatt har vi her to ligninger for de to ukjente, b og E_1.

Oppgave 2

a. •Radialligningen for funksjonen $u_{ln_r}(r) = rR_{ln_r}(r)$ er som nevnt i teksten "endimensjonal":

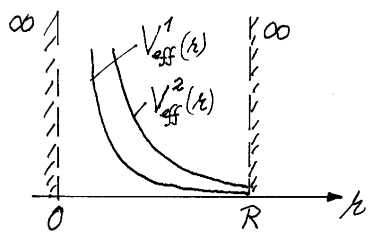
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right] u(r) = Eu(r), \qquad 0 < r < R, \qquad u(0) = 0,$$

og beskriver formelt en endimensjonal bevegelse i et effektivt potensial

$$V_{\text{eff}}^l(r) = \begin{cases} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} & \text{for} \quad 0 < r < R, \\ \infty & \text{for} \quad r < 0 \text{ og for } r > R. \end{cases}$$

(Her fanger betingelsen $V = \infty$ for $r < 0$ opp at $u(0) = 0$ og at $r > 0$.) Vi må også ha $u(R) = 0$, da $V = \infty$ for $r > R$ og bølgefunksjonen skal være kontinuerlig.

For $l = 0$ er dette et rent bokspotensial. For $l \geq 1$ har vi i tillegg et positivt frastøtende ledd som øker i størrelse med økende l:



"Bunnen" av boksen heves altså med økende l. Den laveste energien må vi derfor vente å finne for $l = 0$, dvs for en s-bølge. For en gitt l, deriblant $l = 0$, vil vi ha flere energiegenfunksjoner. Disse skiller seg fra hverandre ved antall nullpunkter (n_r) i intervallet $0 < r < R$. Da ligningen ovenfor er endimensjonal, vet vi at energiegenverdien vil øke med økende n_r. Konklusjonen er at grunntilstanden for denne kuleformede boksen må ha $l = 0$ og $n_r = 0$.

•For $l = 0$ beskriver radialligningen som nevnt en ordinær endimensjonal boks med vidde bestemt av $0 < r < R$. Grunntilstanden er derfor en boksløsning uten nullpunkter inne i boksen,

$$\psi = \frac{u_{l=0,n_r=0}}{r} Y_{00}, \qquad \text{med} \qquad u_{00}(r) = A \sin kr = A \sin \frac{\pi r}{R}.$$

Grunntilstandsenergien er da

$$E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu R^2}.$$

b. •For en kubisk boks med sidekant L kan grunntilstanden skrives på formen

$$\psi_{111} = A \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{\pi y}{L} \sin \frac{\pi z}{L} \qquad \left(k_x = k_y = k_z = \frac{\pi}{L} \right),$$

og har energien

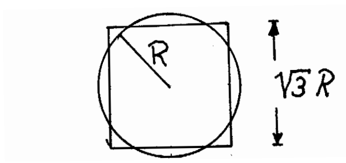
$$E_R = \frac{\hbar^2}{2\mu}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = 3\,\frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu L^2}.$$

•For at de to grunntilstandsenergiene skal være like store ($E_R = E_L$), må

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu R^2} = 3\,\frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu L^2}, \qquad \text{dvs} \qquad \frac{L}{R} = \sqrt{3} \approx 1.732.$$

Forholdet mellom det kubiske volumet og kulevolumet er da

$$\frac{V_L}{V_R} = \frac{L^3}{4\pi R^3/3} = \frac{3^{5/2}}{4\pi} = 1.24.$$



Om vi tenker på grunntilstandsenergien som "kvantevillskap", så er altså denne like liten for den kuleformede boksen som for en kubisk boks med 24 % større volum. (Gjør vi de to volumene like store, vil da villskapen bli størst i den kubiske boksen.)

c. • I grunntilstanden vil de N nøytronene med spinn $\frac{1}{2}$ okkupere $N/2$ romlige én-partikkel-tilstander, med impulser innenfor en kuleflate i impulsrommet. Radien av denne kuleflata er den maksimale én-partikkel-impulsen p_F. Volumet av denne kula i impulsrommet er $\frac{4}{3}\pi p_F^3$. Denne såkalte Fermi-impulsen p_F er da ifølge den oppgitte formelen bestemt av relasjonen

$$\frac{N}{2} = \frac{V_R \cdot \frac{4}{3}\pi p_F^3}{h^3} == \frac{\frac{4}{3}\pi R^3 \cdot \frac{4}{3}\pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \qquad \Longrightarrow \qquad p_F = \frac{\hbar}{R}\left(\frac{9\pi}{4} N\right)^{1/3}.$$

Den maksimale én-partikkel-energien (Fermienergien) er da

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_n} = \left(\frac{9\pi}{4} N\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_n R^2} = f\,\frac{\hbar^2}{2m_n R^2}; \qquad f = \left(\frac{9\pi}{4} N\right)^{2/3}.$$

•Med $m_n = 1840\, m_e$, $R = 7 \cdot 10^{-15}\,\text{m}$, $N = 150$ og $a_0 = 0.53 \cdot 10^{-10} m$ finner vi en Fermi-energi

$$E_F = \left(\frac{9\pi}{4} N\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \frac{m_e}{m_n} \left(\frac{a_0}{R}\right)^2 = 104 \cdot 13.6\,\text{eV}\, \frac{1}{1840} \left(\frac{0.53 \cdot 10^{-10}}{7 \cdot 10^{-15}}\right)^2 = 44\ \text{MeV}.$$

Oppgave 3

a. •Da Pauli-spinorene $\chi_\pm$ er egenspinorer til $S_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z$ med egenverdiene $\pm\frac{1}{2}\hbar$, har vi

$$\widehat{H}\,\chi_\pm = \omega S_z\,\chi_\pm = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z\,\chi_\pm = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\omega\,\chi_\pm.$$

$\chi_\pm$ er altså her energiegentilstandene, med egenverdiene

$$E_\pm = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\omega.$$

•For et B-felt på 2 Tesla blir de to energiene

$$E_\pm = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\omega = \pm\tfrac{1}{2}gB\,\frac{e\hbar}{2m_e} = \pm\tfrac{1}{2}gB \cdot 1\mu_B \approx \pm\tfrac{1}{2}{\cdot}2.00232{\cdot}2{\cdot}5.788{\cdot}10^{-5}\text{eV} \approx \pm.16{\cdot}10^{-4}\text{eV}.$$

•Ved overganger mellom de to tilstandene utveksles det da fotoner med en energi $\hbar\omega = h\nu = E_+ - E_- = 2.32 \cdot 10^{-4}\text{eV}$, som svarer til en bølgelengde i mikrobølgeområdet,

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} = \frac{4.136 \cdot 10^{-15}\text{eVs} \cdot 2.998 \cdot 10^8\text{m/s}}{2.32 \cdot 10^{-4}\text{eV}} = 0.53\ \text{cm}.$$

b. •Ved å sette $t = 0$ i utviklingsformelen har vi

$$\chi(0) = c_+\chi_+ + c_-\chi_- = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Koeffisientene er altså

$$c_+ = \tfrac{1}{2}\sqrt{3}, \qquad c_- = \tfrac{1}{2}.$$

•For $t > 0$ kan vi da skrive tilstanden på formen

$$\chi(t) = \tfrac{1}{2}\sqrt{3}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\omega t/2} + \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega t/2} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\sqrt{3}\,e^{-i\omega t/2} \\ \frac{1}{2}\,e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}.$$

Her er nå $2a^*b = \frac{1}{2}\sqrt{3}\,e^{i\omega t}$ og $|a|^2 - |b|^2 = \frac{1}{2}$, slik at spinnretningen blir

$$\begin{aligned} \langle\, \boldsymbol{\sigma}\,\rangle_t &= \chi^\dagger(t)\boldsymbol{\sigma}\chi(t) = \hat{\mathbf{e}}_x\,\Re\text{e}(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_y\,\Im\text{m}(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_z\,(|a|^2 - |b|^2) \\ &= \hat{\mathbf{e}}_x \cdot \tfrac{1}{2}\sqrt{3}\,\cos\omega t + \hat{\mathbf{e}}_y \cdot \tfrac{1}{2}\sqrt{3}\,\sin\omega t + \hat{\mathbf{e}}_z \cdot \tfrac{1}{2}. \end{aligned}$$

•Som en kontroll legger vi merke til at lengden av vektoren $\langle\, \boldsymbol{\sigma}\,\rangle_t$ er lik 1:

$$|\,\langle\, \boldsymbol{\sigma}\,\rangle_t\,|^2 = |\,\langle\, \sigma_x\,\rangle\,|^2 + |\,\langle\, \sigma_y\,\rangle\,|^2 + |\,\langle\, \sigma_z\,\rangle\,|^2 = \frac{3}{4}(\cos^2\omega t + \sin^2\omega t) + \frac{1}{4} = 1.$$

Vinkelen θ mellom den preseserende vektoren $\langle\, \boldsymbol{\sigma}\,\rangle_t$ og z-aksen er derfor gitt av

$$\cos\theta = \frac{1/2}{1} \qquad \Longrightarrow \qquad \theta = 60^\circ.$$

•Presesjonsfrekvensen er ω, så spinnretningen er tilbake til begynnelsesverdien etter tiden

$$T = \frac{2\pi}{\omega}.$$

<u>**c.**</u> •Ved tiden $t = T = 2\pi/\omega$ er $e^{\pm i\omega t/2} = e^{\pm i\pi} = -1$, så spinoren er

$$\chi(T) = -\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = -\chi(0).$$

Fortegnsskiftet spiller selvsagt ingen rolle fysisk, derfor er bl.a forventningsverdien $\langle\, \boldsymbol{\sigma}\,\rangle_T$ den samme som for $t = 0$.

•Sannsynlighetene for å måle $S_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$ er absoluttkvadratene av projeksjonene av spinoren $\chi(0)$ på Pauli-spinorene $\chi_\pm$, altså kvadratet av hhvis øvre og nedre komponent:

$$P_{S_z=+\hbar/2} = \frac{3}{4}, \qquad P_{S_z=-\hbar/2} = \frac{1}{4}.$$

•Egentilstanden til S_x med egenverdi $+\frac{1}{2}\hbar$ er ifølge den generelle formelen på formelarket $\chi_{\hat{\mathbf{x}}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Sannsynligheten for å måle $S_x = +\frac{1}{2}\hbar$ og etterlate spinnet i den nevnte egentilstanden er da

$$P_{S_x=\hbar/2} = \left|\chi_{\hat{\mathbf{x}}}^\dagger \chi(0)\right|^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ 1)\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\tfrac{1}{2}\sqrt{3} + \tfrac{1}{2})\right)^2 = 0.933.$$