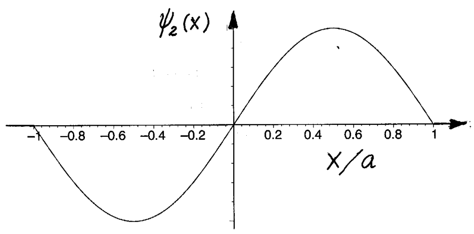
Løsningsforslag
Eksamen 10. august 2010
FY2045/TFY4250 Kvantemekanikk I

Oppgave 1

a. • Bølgefunksjonen ψ_2 for første eksiterte tilstand er (i likhet med ψ_4, ψ_6 osv) antisymmetrisk, og har følgelig et nullpunkt i origo, hvor deltabarrieren sitter. Ifølge diskontinuitetsbetingelsen skal da ψ_2 være glatt i dette punktet, i likhet med ψ_2 for tilfellet med $\beta = 0$ (vanlig boks). Også *utenom* origo skal ψ_2 oppfylle akkurat de samme betingelsene som for $\beta = 0$: dvs oppfylle Schrödingerligningen, være lik null for $x = \pm a$, og ikke ha flere nullpunkter. Følgelig er ψ_2 for $\beta \neq 0$ identisk med ψ_2 for tilfellet $\beta = 0$.

•Første eksiterte tilstand blir da ganske enkelt en helbølge-sinus, med nullpunkt i origo:



Bølgefunksjonen for denne tilstanden er

$$\psi_2 = A \sin k_2 x, \qquad \text{med} \quad k_2 = \pi/a.$$

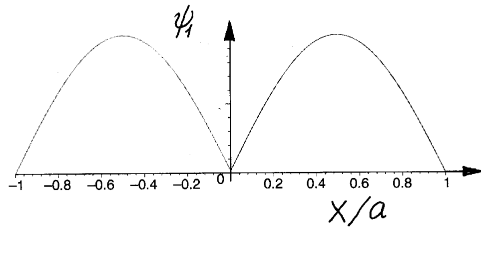
Dette kan vi kontrollere ved innsetting i den TUSL, som sammen med den oppgitte energien gir

$$\underline{0.01\,\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}} \overset{\text{oppgitt}}{=} E_2 \overset{\text{TUSL}}{=} \frac{-(\hbar^2/2m_e)\psi_2''}{\psi_2} = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_e} = \underline{\frac{\hbar^2\pi^2}{2m_e a^2}}.$$

Av dette ser vi at

$$a = 10\,\pi\, a_0 = 31.4\, a_0.$$

b. •Det nødvendige prinsippet er at grunntilstanden ganske enkelt er symmetrisk, så venstre halvdel av ψ_1 er speilbildet av høyre halvdel. Skissen ser da slik ut:



•Begge halvdelene av grunntilstanden er sinusformet, og kontinuitetskravet i $x = a$ innebærer at den for $0 < x < a$ kan skrives f.eks på formen $\psi_1 = -B\sin[k_1(x-a)]$ (med $B > 0$). Venstre del (speilbildet) finner vi ved å skifte fortegn på x, så for $-a < x < 0$ er $\psi_1 = B\sin[k_1(x+a)]$.

•Bølgetallet k_1 (og dermed energien $E_1 = \hbar^2 k_1^2/2m_e$) bestemmes ved hjelp av diskontinuitetsbetingelsen. Den logaritmisk deriverte er for $x = 0^+$

$$\psi_1'/\psi_1|_{0^+} = \frac{-k_1 B\cos[-k_1 a]}{-B\sin[-k_1 a]} = -k_1\cot k_1 a,$$

og er for $x = 0^-$ motsatt like stor (pga symmetrien til ψ_1). Innsetting gir da

$$\underline{-k_1 a\cot k_1 a} = \frac{2m_e\beta}{\hbar^2}\,\frac{a}{2} = \underline{200}.$$

[Vha denne kan en vise at $k_2 a - k_1 a \approx \pi/200$, og at energidifferansen $E_2 - E_1$ blir som oppgitt i oppgaveteksten.]

c. •For $t > 0$ blir bølgefunksjonen

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}\right].$$

[Denne oppfyller Schrödingerligningen, fordi den er en superposisjon av stasjonære løsninger, og den er lik den oppgitte tilstanden for $t = 0$.]

•Ved å spalte av en faktor $\exp(-iE_1t/\hbar)$ har vi

$$\Psi(x,t) = e^{-iE_1t/\hbar}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x) + \psi_2(x)e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}\right].$$

Med $\psi_2 = A\sin\pi x/a$ og $\psi_1 = B\sin[k_1(a-x)]$, der k_1 bare er ørlite grann mindre enn π/a og B av normeringsgrunner er bare ørlite grann mindre enn A, skjønner vi at ψ_1 og ψ_2 er praktisk talt like for $x > 0$, og praktisk talt motsatt like for $x < 0$. Sannsynligheten for å finne elektronet i høyre halvdel av potensialet ved $t = 0$ er derfor svært nær 1. Etter tiden $t = \pi\hbar/(E_2 - E_1) \equiv T/2$ er bølgefunksjonen

$$\Psi(x,T/2) = e^{-iE_1T/2\hbar}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x) - \psi_2(x)\right],$$

så ved dette tidspunktet er det like sannsynlig å finne elektronet på venstresiden. Etter tiden

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1}$$

er sannsynlighetstettheten den samme som for $t = 0$, så dette er periodetiden for oscillasjonen. Innsetting av $E_2 - E_1 = 10^{-4}\,\hbar^2/(2m_e a_0^2)$ gir

$$T = \frac{2\pi\hbar}{10^{-4}\hbar^2/(2m_e a_0^2)} = \frac{4.136\cdot 10^{-15}\text{eVs}}{10^{-4}\cdot 13.6\text{ eV}} = 3.04\cdot 10^{-12}\text{ s}.$$

d. •Med farten

$$v = \sqrt{\frac{2\langle E\rangle}{m_e}} = \frac{\hbar\pi}{m_e a}$$

blir tidsintervallet mellom hver kollisjon med barrieren

$$t_1 = \frac{2a}{v} = \frac{2m_e}{\hbar\pi}\cdot(10\pi a_0)^2 = 100\left(\frac{2m_e a_0^2}{\hbar^2}\right)\pi\hbar = 100\,\frac{4.136\cdot 10^{-15}\text{eVs}/2}{13.6\text{ eV}} = 1.52\cdot 10^{-14}\text{ s}.$$

•Med en transmittert strømtetthet

$$j_t = \Re\text{e}\left[C^* e^{-ikx}\,\frac{\hbar}{im_e}\,ik\,Ce^{ikx}\right] = |C|^2\,\frac{\hbar k}{m_e}$$

og en innkommende strømtetthet $j_i = \hbar k/m_e$ er transmisjonskoeffisienten $T_{\text{tr}} = j_t/j_i = |C|^2$. Med $ka = \pi$ og

$$C^{-1} = 1 + \frac{im_e\beta}{\hbar^2 k} = 1 + \frac{im_e}{\hbar^2 k}\,\frac{200\,\hbar^2}{m_e a} = 1 + i\,\frac{200}{\pi}$$

har vi da

$$T_{\text{tr}} = |C|^2 = [1 + (200/\pi)^2]^{-1} \approx (\pi/200)^2 = 2.47 \cdot 10^{-4}.$$

•Sannsynligheten for å finne elektronet til venstre for barrieren reduseres med en faktor $1 - T_{\text{tr}}$ for hver kollisjon. Ved tiden t er antall kollisjoner $\approx t/t_1$, slik at sannsynligheten er redusert til

$$(1 - T_{\text{tr}})^{t/t_1} \approx (\exp(-T_{\text{tr}}))^{t/t_1} = \exp(-tT_{\text{tr}}/t_1).$$

Denne er lik $1/e$ for $tT_{\text{tr}}/t_1 = 1$. "Levetiden" er altså

$$\tau = \frac{t_1}{T_{\text{tr}}} = 6.15 \cdot 10^{-11}\,\text{s}.$$

Vi ser at denne er omlag en faktor 20 ganger større enn periodetiden under pkt. **b**.

Oppgave 2

a. • Med spinnkvantetallene $s_1 = 1$ og $s_2 = 1$ for partikkel 1 og 2, begrenses de mulige verdiene av kvantetallet s for totalspinnet til topartikkelsystemet av trekant-ulikheten

$$|s_1 - s_2| \le s \le s_1 + s_2, \qquad \text{dvs} \quad 0 \le s \le 2.$$

De mulige verdiene for s og m er altså

$$\begin{aligned} s &= 0, \quad \text{med} \quad m = 0, \\ s &= 1, \quad \text{med} \quad m = 0,\ \pm 1, \\ s &= 2, \quad \text{med} \quad m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2. \end{aligned}$$

Antallet tilstander av typen $|s, m\rangle$ er altså ganske riktig $1 + 3 + 5 = 9$.

•Tilstandene $|s, m\rangle$ kan skrives som lineærkombinasjoner av de 9 tilstandene $|m_1\rangle|m_2\rangle$ fordi de sistnevnte danner en (9-dimensjonal) basis for dette spinnsystemet.

•Da $\widehat{S}_{1z}|m_1\rangle = \hbar m_1|m_1\rangle$ og $\widehat{S}_{2z}|m_2\rangle = \hbar m_2|m_2\rangle$, følger det at

$$\begin{aligned} \widehat{S}_z\,|m_1\rangle|m_2\rangle &= (\widehat{S}_{1z} + \widehat{S}_{2z})|m_1\rangle|m_2\rangle = (\widehat{S}_{1z}|m_1\rangle)|m_2\rangle + |m_1\rangle\widehat{S}_{2z}|m_2\rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2)\,|m_1\rangle|m_2\rangle. \end{aligned}$$

Tilstanden $|m_1\rangle|m_2\rangle$ er altså også en egentilstand til $\widehat{S}_z = \widehat{S}_{1z} + \widehat{S}_{2z}$, med egenverdien

$$\hbar m = \hbar(m_1 + m_2).$$

b. •Tilstandene $|s=0,m=0\rangle$, $|s=1,m=0\rangle$ og $|s=2,m=0\rangle$ har alle $m=0$, og kan da være lineærkombinasjoner av tilstandene $|1\rangle|-1\rangle$, $|0\rangle|0\rangle$ og $|-1\rangle|1\rangle$, som alle har $m=0$. Alle de øvrige tilstandene av typen $|m_1\rangle|m_2\rangle$ har $m=m_1+m_2\neq 0$, og kan følgelig ikke inngå i de aktuelle lineærkombinasjonene.

•Singlett-tilstanden $|0,0\rangle$ har egenverdien $\mathbf{S}^2 = \hbar^2 s(s+1) = 0$. Fra den oppgitte formelen følger det da at

$$B=-A \qquad \text{og} \qquad C=-B=A,$$

Vi har altså

$$|0,0\rangle = A(\,|1\rangle|-1\rangle - |0\rangle|0\rangle + |-1\rangle|1\rangle\,).$$

Da tilstandene i dette uttrykket er ortonormerte, får vi en normert singlett-tilstand ved å velge (f.eks) $A=1/\sqrt{3}$.

•Da den aktuelle lineærkombinasjonen har $m=0$, har vi

$$\begin{aligned}
&\widehat{\mathbf{S}}^2\,(\,A\,|1\rangle|-1\rangle + B\,|0\rangle|0\rangle + C\,|-1\rangle|1\rangle\,)\\
&= (\widehat{S}_z^2 + \hbar^2\widehat{S}_z + \widehat{S}_-\widehat{S}_+)\,(\,A\,|1\rangle|-1\rangle + B\,|0\rangle|0\rangle + C\,|-1\rangle|1\rangle\,)\\
&= (\widehat{S}_{1-} + \widehat{S}_{2-})(\widehat{S}_{1+} + \widehat{S}_{2+})\,(\,A\,|1\rangle|-1\rangle + B\,|0\rangle|0\rangle + C\,|-1\rangle|1\rangle\,)\\
&= (\widehat{S}_{1-} + \widehat{S}_{2-})\hbar\sqrt{2}\,[A(0+|1\rangle|0\rangle) + B(|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle) + C(|0\rangle|1\rangle + 0)]\\
&= (\widehat{S}_{1-} + \widehat{S}_{2-})\hbar\sqrt{2}\,[\,(A+B)\,|1\rangle|0\rangle + (B+C)\,|0\rangle|1\rangle\,]\\
&= \hbar\sqrt{2}\cdot\hbar\sqrt{2}\,[\,(A+B)\,(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|-1\rangle) + (B+C)\,(|-1\rangle|1\rangle + |0\rangle|0\rangle)\,]\\
&= 2\hbar^2\,\{\,(A+B)\,|1\rangle|-1\rangle + (A+2B+C)\,|0\rangle|0\rangle + (B+C)\,|-1\rangle|1\rangle\,\}\,.
\end{aligned}$$

Dermed har vi bevist den oppgitte formelen og funnet at konstanten er $K=2\hbar^2$.

c. For $s=1$ skal $\widehat{\mathbf{S}}^2$ ha egenverdien $2\hbar^2$, så vi må ha

$$A+B=A\,, \qquad A+2B+C=B \qquad \text{og} \qquad B+C=C.$$

Dette krever at $B=0$ og $C=-A$, så løsningen er

$$|1,0\rangle = A(\ |1\rangle|-1\rangle\ -\ |-1\rangle|1\rangle\ ).$$

Normering oppnås ved å velge (f.eks) $A=1/\sqrt{2}$. Kontroll av ortogonaliteten:

$$\langle 0,0|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\cdot 3}}(1+0-1) = 0, \quad \text{q.e.d.}$$

For $s=2$ skal $\widehat{\mathbf{S}}^2$ ha egenverdien $\hbar^2\cdot 2\cdot(2+1) = 6\hbar^2$. Vi må da ha

$$A+B=3A\,, \qquad A+2B+C=3B \qquad \text{og} \qquad B+C=3C,$$

dvs $B=2A$ og $C=B/2=A$, slik at

$$|2,0\rangle = A(\ |1\rangle|-1\rangle\ +\ 2|0\rangle|0\rangle\ +\ |-1\rangle|1\rangle\ ).$$

Normering oppnås ved å sette (f.eks) $A=1/\sqrt{6}$. Kontroll av ortogonalitet:

$$\begin{aligned}
\langle 0,0|2,0\rangle &\propto 1-2+1=0, \quad \text{q.e.d.},\\
\langle 1,0|2,0\rangle &\propto 1+0-1=0, \quad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$

Oppgave 3

a. •Matrise-elementene av perturbasjonen, tatt mellom grunntilstanden ($n = 0$) og eksitert tilstand nr n, er

$$\begin{aligned}(V_1)_{n0}(t) &= \langle n|\widehat{V}_1(t)|0\rangle = -p_0\delta(t)\langle n|\widehat{x}|0\rangle = -p_0\delta(t)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\langle n|(a+a^\dagger)|0\rangle \\ &= -p_0\delta(t)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\delta_{n1},\end{aligned}$$

idet $(a+a^\dagger)|0\rangle = a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$.

•Ifølge 1.-ordens perturbasjonsteori er da overgangsamplituden(e)

$$\begin{aligned}a_{0\to n}(t) &= -p_0\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\delta_{n1}\,\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\delta(t')\exp(i\omega_{n0}t')dt' \qquad \left(\omega_{n0} = \frac{E_n - E_0}{\hbar} = n\hbar\omega\right) \\ &= \frac{ip_0}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,\delta_{n1} \equiv i\alpha_0\,\delta_{n1} \qquad (t_0 < 0,\ t > 0)\,.\end{aligned}$$

Ifølge 1.-ordens perturbasjonsteori har vi altså bare overgang fra grunntilstanden til 1. eksiterte tilstand, og overgangssannsynligheten er

$$P_{0\to 1} = |a_{0\to 1}|^2 = \frac{p_0^2}{2\hbar m\omega} \equiv \alpha_0^2.$$

•Ifølge disse resultatene er sannsynligheten for å finne oscillatoren i den opprinnelige (grunn-)tilstanden

$$P_0 = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} P_{0\to n} = 1 - \alpha_0^2.$$

•Førsteordens perturbasjonsteori er bare gyldig så lenge amplitudene er tilnærmet lik de verdiene de hadde i begynnelsestilstanden, $\Psi(x, 0^-) = \psi_0(x)$. Resultatene ovenfor er derfor en god tilnærmelse dersom

$$p_0^2 << 2\hbar m\omega, \quad \text{dvs dersom} \quad \alpha_0^2 << 1.$$

b. •Den *eksakte* amplituden for å finne oscillatoren i grunntilstanden etter perturbasjonen er projeksjonen av $\Psi(x, 0^+)$ på $\psi_0(x)$. Vha det oppgitte integralet, med $A = m\omega/\hbar$ og $B = ip_0/\hbar$, finner vi at den er

$$\begin{aligned}a_0^{\text{eks}} &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*(x)\,\Psi(x,0^+)\,dx = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-m\omega x^2/\hbar)\exp(ip_0x/\hbar)dx \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}(\pi/A)^{1/2}\exp(B^2/4A) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{p_0^2}{\hbar^2}\frac{\hbar}{4m\omega}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{p_0^2}{4m\hbar\omega}\right) \equiv \exp(-\alpha_0^2/2).\end{aligned}$$

Sannsynligheten for å finne oscillatoren i grunntilstanden er altså

$$P_0^{\text{eks}} = |a_0^{\text{eks}}|^2 = \exp\left(-\frac{p_0^2}{2m\hbar\omega}\right) \equiv \exp(-\alpha_0^2), \quad \text{q.e.d.}$$

•Vi rekkeutvikler

$$P_0^{\rm eks} = \exp(-\alpha_0^2) = 1 - \alpha_0^2 + \mathcal{O}(\alpha_0^4).$$

Gyldighetsområdet for 1.-ordens perturbasjonsteori var $\alpha_0^2 << 1$, og vi ser at i dette området stemmer resultatet fra pkt. **a** med det eksakte. Utenfor gyldighetsområdet ser vi at feilen i 1.-ordensresultatet øker med α_0, og det måtte vi også vente.

•Det eksakte resultatet, $P_0^{\rm eks} = \exp(-\alpha_0^2)$, viser at sannsynligheten for å finne oscillatoren i grunntilstanden går mot null for store α_0, dvs når "δ-sparket" blir tilstrekkelig kraftig ($p_0 >> \sqrt{2m\hbar\omega}$). For et slikt kraftig spark må vi vente at også sannsynligheten $P_1^{\rm eks}$ for å finne oscillatoren i 1. eksiterte tilstand blir liten. Oscillatoren vil få tilført mye energi av sparket, og det vil være mest sannsynlig å observere tilsvarende høye energiegenverdier.

c. •Det er lett å vise eksplisitt at $\Psi(x, 0^+)$ er en egenfunksjon til annihilasjonsoperatoren (noe som er typisk for koherente tilstander). Vi holder normeringsfaktoren utenfor, og finner at

$$\begin{aligned}
& a_{\rm pr}\, \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0x/\hbar) \\
&= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right) \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0x/\hbar) \\
&= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(-m\omega x/\hbar + ip_0/\hbar)\right] \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0x/\hbar) \\
&= \frac{ip_0}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\, \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0x/\hbar) \\
&\equiv i\alpha_0\, \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0x/\hbar), \quad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$

•Ved å sette inn utviklingsformelen i egenverdiligningen

$$\Psi(x, 0^+) = \frac{a_{\rm pr}}{i\alpha_0}\, \Psi(x, 0^+)$$

finner vi at

$$\begin{aligned}
\sum_{k=0} a_k^{\rm eks}\, \psi_k(x) &= \sum_{n=0} \frac{a_n^{\rm eks}}{i\alpha_0}\, a_{\rm pr}\, \psi_n(x) = \sum_{n=1} \frac{a_n^{\rm eks}}{i\alpha_0}\, \sqrt{n}\, \psi_{n-1}(x) \\
&= \sum_{k=0} \frac{a_{k+1}^{\rm eks}}{i\alpha_0}\, \sqrt{k+1}\, \psi_k(x).
\end{aligned}$$

For at denne skal være oppfylt må koeffisientene oppfylle følgende rekursjonsformel:

$$a_{k+1}^{\rm eks} = \frac{i\alpha_0}{\sqrt{k+1}}\, a_k^{\rm eks}, \qquad \text{eller} \qquad a_n^{\rm eks} = \frac{i\alpha_0}{\sqrt{n}}\, a_{n-1}^{\rm eks} \qquad (n = 1, 2, \cdots), \quad \text{q.e.d.}$$

Så konstanten som det var spørsmål om i oppgaveteksten er altså i.

d. •Fra formelen ovenfor finner vi at den eksakte sannsynlighetsamplituden for å finne oscillatoren i 1. eksiterte tilstand er

$$a_1^{\text{eks}} = i\alpha_0\, a_0^{\text{eks}} = i\alpha_0 \,\exp(-\alpha_0^2/2) = i\alpha_0(1-\alpha_0^2+\cdots),$$

og vi ser at denne til 1. orden er identisk med den vi fant i pkt. **a** vha 1.-ordens perturbasjonsteori. Som ventet er altså sistnevnte en god tilnærmelse for $\alpha_0^2 << 1$. Det samme gjelder $P_1 = \alpha_0^2$, som stemmer bra med det eksakte resultatet

$$P_1^{\text{eks}} = \alpha_0^2 \exp(-\alpha_0^2) = \alpha_0^2(1-\alpha_0^2+\cdots)$$

for $\alpha_0^2 << 1$. For økende α_0 blir feilen i førsteordensresultatet gradvis større, som vi måtte vente. Vi ser også at P_1^{eks} går eksponensielt mot null for store α_0, i tråd med formodningen på slutten av pkt. **b**.

•Fra rekusjonsformelen ser vi at

$$P_2^{\text{eks}} = \frac{\alpha_0^2}{2}\,P_1^{\text{eks}} = \frac{(\alpha_0^2)^2}{1\cdot 2}\,\exp(-\alpha_0^2) \qquad \text{og} \qquad P_3^{\text{eks}} = \frac{\alpha_0^2}{3}\,P_2^{\text{eks}} = \frac{(\alpha_0^2)^3}{1\cdot 2\cdot 3}\,\exp(-\alpha_0^2).$$

Generelt er åpenbart sannsynligheten for å observere energien $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

$$P_n^{\text{eks}} = \frac{(\alpha_0^2)^n}{n!}\,\exp(-\alpha_0^2).$$

•Med

$$\frac{P_n^{\text{eks}}}{P_{n-1}^{\text{eks}}} = \frac{\alpha_0^2}{n}$$

ser vi at den maksimale sannsynligheten opptrer for

$$n \approx \alpha_0^2.$$

Som vi var inne på i pkt. **b**, er det altså for store α_0^2 (kraftige spark) mest sannsynlig å observere høye energier.