Løsningsforslag
Eksamen 14.desember 2011
FY2045/TFY4250 Kvantemekanikk I

Oppgave 1

a. ♠For $E < 3V_0/4$ er området $x > a$ klassisk forbudt, og den tidsuavhengige Schrödingerligningen tar i dette området formen

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}\left[\frac{3}{4}V_0 - E\right]\psi \equiv \kappa^2\psi, \qquad \text{med} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(3V_0/4 - E)}.$$

Denne har de to uavhengige løsningene $\exp(-\kappa x)$ og $\exp(\kappa x)$. Da energiegenfunksjonen ψ ikke får lov å divergere for $x \to \infty$, må den siste forkastes, slik at en energiegenfunksjon for $E < 3V_0/4$ må ha formen

$$\psi = Ce^{-\kappa x} \qquad \text{for} \qquad x > a.$$

♠En partikkel som kommer inn fra venstre med en energi $0 < E < 3V_0/4$, vil med sikkerhet bli reflektert, dvs refleksjonskoeffisienten er $R = 1$. Forklaring: I området $x > a$ finner vi at sannsynlighets-strømtettheten er lik null:

$$j_x = \Re\text{e}\left[\psi^*\frac{\hbar}{im}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right] = \Re\text{e}\left[C^* e^{-\kappa x}\frac{\hbar}{im}(-\kappa)Ce^{-\kappa x}\right] = 0.$$

Fordi j_x er uavhengig av x for den stasjonære løsningen $\psi(x)\exp(-iEt/\hbar)$, må da j_x være lik null over alt, også for $x < 0$, hvor altså den innkommende og den reflekterte strømtettheten må oppheve hverandre, slik at $j_r = -j_i$, og slik at

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = 1.$$

b. ♠Ved innsetting i den tidsuavhengige Schrödingerligningen har vi for $x < 0$ at

$$\psi'' = -k^2\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi, \quad \text{dvs} \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}.$$

For $x > a$ finner vi et mindre bølgetall:

$$\psi'' = -(k')^2\psi = \frac{2m}{\hbar^2}[3V_0/4 - E]\psi \quad \Longrightarrow \quad k' = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - 3V_0/4)}.$$

♠For $x > a$ finner vi den transmitterte strømtettheten

$$j_t = \Re\text{e}\left[t^* e^{-ik'x}\frac{\hbar}{im}\,ik'\,te^{ik'x}\right] = \frac{\hbar k'}{m}|t|^2.$$

For $x < 0$ er strømtettheten

$$\begin{aligned} j &= \Re\text{e}\left[(e^{-ikx} + r^* e^{ikx})\frac{\hbar}{im}\,ik(e^{ikx} - re^{-ikx})\right] = \frac{\hbar k}{m}\left[1 - |r|^2 + \Re\text{e}\left(r^* e^{2ikx} - re^{-2ikx}\right)\right] \\ &= \frac{\hbar k}{m} - \frac{\hbar k}{m}|r|^2 \equiv j_i + j_r \end{aligned}$$

[idet parentesen ( ) $= 2i\Im\mathrm{m}(r^* e^{2ikx})$ er rent imaginær]. Transmisjonskoeffisienten er da

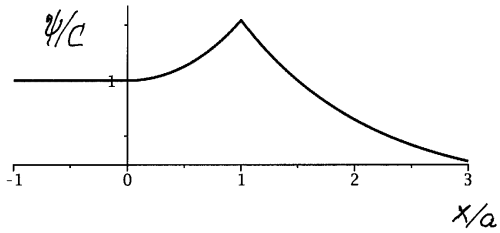
$$T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{|t|^2 \hbar k'/m}{\hbar k/m} = |t|^2 \frac{k'}{k} = |t|^2 \sqrt{\frac{3V_0/4 - E}{E}}.$$

♠Siden (det kan vises at) koeffisienten t er endelig, ser vi at T går mot null når E nærmer seg $3V_0/4$ ovenfra, slik at R går mot 1. Dette harmonerer med at $R = 1$ for $0 < E < 3V_0/4$.

c. ♠Fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen ser vi at en energiegenfunksjon med formen $\psi = C$ for $x < 0$ må ha energien

$$E = \frac{-(\hbar^2/2m)\psi''}{\psi} = 0.$$

Denne egenfunksjonen må krumme utover fra aksen i de klassisk forbudte områdene for $x > 0$, være glatt i $x = 0$ og ha en passe stor knekk i $x = a$ hvor deltabrønnen sitter, slik at den går over i den korrekte $\exp(-\kappa x)$-oppførselen for $x > a$:



♠For $0 < x < a$ er

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - 0]\psi = \frac{1}{a^2}\,\psi,$$

med generell løsning

$$\psi = Ae^{-x/a} + Be^{x/a} \qquad \text{og} \qquad \psi' = \frac{1}{a}(-Ae^{-x/a} + Be^{x/a}).$$

Kontinuitet av ψ og ψ' for $x = a$ gir da

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

For $0 < x < a$ har altså egenfunksjonen formen

$$\psi = C(e^{x/a} + e^{-x/a})/2 = C\cosh(x/a).$$

d. ♠Med $E = 0$ har vi for $x > a$ fra pkt. **a** at

$$\psi = C'e^{-\kappa x}, \quad \text{med} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(3V_0/4 - E)} = \frac{\sqrt{3}}{2a}.$$

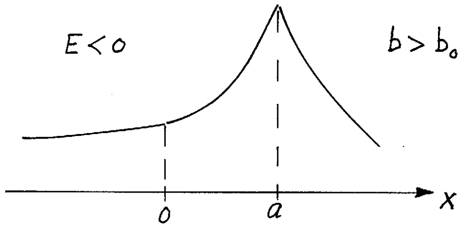
Fra den oppgitte diskontinuitetsbetingelsen (for ψ'/ψ i $x = a$) har vi da

$$-\kappa - \frac{(1/a)\sinh 1}{\cosh 1} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} = -\frac{2b_0}{a},$$

dvs

$$b_0 = \tfrac{1}{2}(\kappa a + \tanh 1) = 0.814.$$

♠Denne egentilstanden for $E = 0$ er *ikke* bunden, fordi den ikke er lokalisert og ikke kvadratisk integrerbar. For at systemet skal ha en bunden tilstand, må energien være negativ. Dette krever en deltabrønn som er dypere enn den vi nettopp har sett på, dvs $b > b_0$, idet knekken i $x = a$ må være "skarpere" for en bunden tilstand.



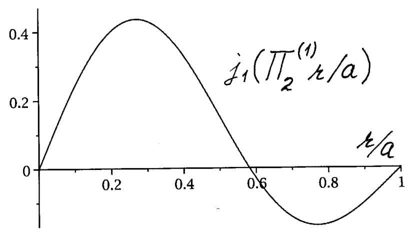
♠Som figuren viser, må en bunden tilstand krumme utover fra aksen over alt unntatt i punktet $x = a$, hvor den har en kraftigere knekk enn for $b = b_0$ og $E = 0$. Denne figuren illustrerer også at den bundne tilstanden ikke kan ha nullpunkter. Vi kan altså maksimalt ha én bunden tilstand.

Oppgave 2

a. ♠Da $V = \infty$ for $r > a$, må vi ha $\psi = 0$ for $r = a$. Derfor må argumentet $a\sqrt{2mE/\hbar^2}$ være et av nullpunktene i den sfæriske Bessel-funksjonen j_l. For et gitt dreieimpulskvantetall l er da radialfunksjonene og de tilhørende energiene bestemt av betingelsen

$$a\sqrt{2mE_n^{(l)}/\hbar^2} = \Pi_n^{(l)}, \quad \Longrightarrow \quad E_n^{(l)} = \frac{(\hbar\Pi_n^{(l)})^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \cdots.$$

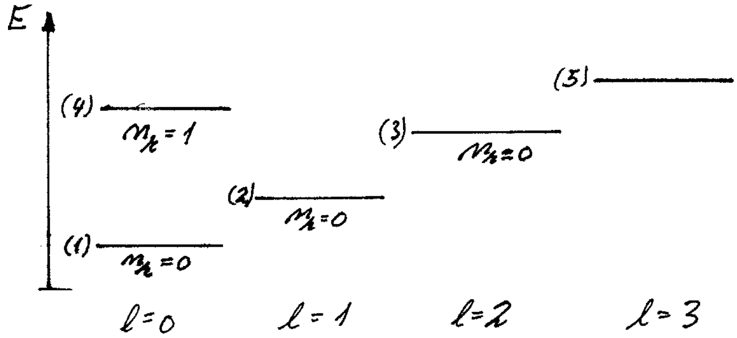
♠Radialkvantetall $n_r = 1$ innebærer ett nullpunkt inne i intervallet $0 < r < a$, slik at det er nullpunkt nr 2 i Bessel-funksjonen j_1, dvs $\Pi_2^{(1)}$, som sørger for at radialfunksjonen er lik null i $r = a$. Radialfunksjonen blir da $j_1(r\sqrt{2mE_2^{(1)}}) = j_1(\Pi_2^{(1)} r/a)$. Denne har som nevnt ett nullpunkt, og ser kvalitativt slik ut (lineær for små r fordi $l = 1$):



♠Energirekkefølgen bestemmes av nullpunktsverdiene $\Pi_n^{(l)}$ i tabellen. I enheter av $\pi^2\hbar^2/(2ma^2)$ blir energiene $(\Pi_n^{(l)}/\pi)^2$. I stigende rekkefølge har vi da for de fire laveste energinivåene:

l	n_r	$n = n_r + 1$	$(\Pi_n^{(l)}/\pi)^2 = E_n^{(l)}/[\pi^2\hbar^2/(2ma^2)]$
0	0	1	1
1	0	1	2.05
2	0	1	3.37
0	1	2	4

b. ♠Nivåskjemaet (med de fem laveste nivåene inntegnet) ser slik ut:



♠I dipoltilnærmelsen er utvalgsreglene $\Delta l = \pm 1$ og $\Delta m = 0, \pm 1$. Med $l = 0$ og $n_r = 1$ i begynnelsestilstanden på nivå nr 4 ser vi at de eneste overgangene som er tillatt i dipoltilnærmelsen er til de tre slutt-tilstandene på nivå nr 2, med $l = 1$, $n_r = 0$ og $m = 0, \pm 1$.

♠Bohr-frekvensen for disse overgangene er

$$\begin{aligned} \omega_{if} &= \frac{E_i - E_f}{\hbar} = (4 - 2.05)\frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2} \approx 1.95 \frac{\pi^2 \cdot 1.055 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \cdot 9 \cdot 10^{-30}} \mathrm{s}^{-1} \\ &\approx 6.7 \cdot 10^{22} \mathrm{s}^{-1}. \end{aligned}$$

Det emitterte fotonet får da energien

$$\hbar\omega_{if} = 6.58 \cdot 10^{-16} \mathrm{eVs} \cdot 6.7 \cdot 10^{22} \mathrm{s}^{-1} \approx 44.1 \text{ MeV}.$$

♠For hver av de tre overgangene kan vi anta at matrise-elementet $|\mathbf{d}_{fi}|$ er av *størrelsesorden* a, så dette blir bare et omtrentlig overslag. Innsetting i formelen for overgangsraten gir

$$w_{i\to f} \sim \frac{1}{137} \cdot \frac{4(6.7 \cdot 10^{22})^3}{3(3 \cdot 10^8)^2} (3 \cdot 10^{-15})^2 \mathrm{s}^{-1} \approx 3 \cdot 10^{20} \mathrm{s}^{-1}.$$

Med tre slike bidrag er den samlede overgangsraten w_i fra ψ_i av størrelsesorden 10^{21} s^{-1}, slik at levetiden blir av størrelsesorden

$$\tau_i = 1/w_i \sim 10^{-21} \mathrm{s}.$$

Oppgave 3

a. ♠Med $x\psi_0 = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}\,\psi_1$ blir matrise-elementene av det perturberende leddet $-xF(t)$

$$(V_1)_{n0}(t) = \langle \psi_n | V_1(t) | \psi_0 \rangle = -F(t)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int \psi_n^* \psi_1 dx = -F(t)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\delta_{n1}.$$

♠Ifølge førsteordens perturbasjonsteori får vi altså bare overgang til første eksiterte tilstand, som svarer til Bohr-frekvensen $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar = \omega$:

$$\begin{aligned} a_{0\to n}(\tau) &= -\delta_{n1}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{1}{i\hbar} \int_0^\tau F(t) e^{i\omega t} dt \\ &= -\delta_{n1} F_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \frac{1}{i\hbar} \frac{e^{i\omega\tau} - 1}{i\omega} \qquad (\omega\tau = \pi) \\ &= -\delta_{n1} \frac{\sqrt{2}\,F_0}{\sqrt{m\omega^3\hbar}}. \end{aligned}$$

Den eneste overgangssannsynligheten som er forskjellig fra null til første orden er altså

$$P_{0\to 1}(\tau) = \frac{2F_0^2}{m\omega^3\hbar}.$$

b. ♠Vi bruker operatoren $a_{\text{p.r.}}$ på bølgefunksjonen ved tiden $t = \tau$:

$$\begin{aligned} a_{\text{p.r.}}\Psi(x,\tau) &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right) C_0 e^{ig(\tau)} e^{-m\omega(x-2x_0)^2/2\hbar} \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left[x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{-m\omega}{\hbar}(x-2x_0)\right]\Psi(x,\tau) \\ &= \frac{\sqrt{2}F_0}{\sqrt{m\omega^3\hbar}}\,\Psi(x,\tau). \end{aligned}$$

Så konstanten som skulle bestemmes er $\sqrt{2}$, og egenverdien er

$$\alpha_\tau = \frac{\sqrt{2}F_0}{\sqrt{m\omega^3\hbar}}.$$

♠Koeffisienten $A_n(t)$ er sannsynlighetsamplituden — og $|A_n(t)|^2$ er sannsynligheten — for at en energimåling gir resultatet E_n og etterlater systemet i oscillatortilstand nr n.

♠Koeffisientene $A_n(t)$ endrer seg *under* perturbasjonen, men ikke etterpå; jf de oppgitte ligningene, som for $t > \tau$ gir

$$i\hbar\frac{dA_k(t)}{dt} = \sum_n e^{i\omega_{kn}t}(V_1)_{kn}A_n(t) = 0.$$

c. ♠Ved å bruke den oppgitte relasjonen finner vi ved innsetting i egenverdiligningen for annihilasjonsoperatoren at

$$\begin{aligned} \alpha_\tau\Psi(x,\tau) &= \underline{\sum_{n=0}^{\infty}\alpha_\tau A_n\Psi_n^{(0)}(x,\tau)} \qquad (A_n \equiv A_n(\tau)) \\ &= a_{\text{p.r.}}\Psi(x,\tau) = \sum_{n=0} A_n a_{\text{p.r.}}\Psi_n^{(0)}(x,\tau) \\ &= -\sum_{n=1}\sqrt{n}A_n\Psi_{n-1}^{(0)}(x,\tau) = \underline{-\sum_{n=0}\sqrt{n+1}A_{n+1}\Psi_n^{(0)}(x,\tau)}. \end{aligned}$$

Det følger at

$$A_{n+1} = -\frac{\alpha_\tau}{\sqrt{n+1}}A_n, \qquad \text{slik at}$$

$$A_1 = \frac{-\alpha_\tau}{\sqrt{1}}A_0, \qquad A_2 = \frac{-\alpha_\tau}{\sqrt{2}}A_1 = \frac{(-\alpha_\tau)^2}{\sqrt{1\cdot 2}}, \qquad \text{etc},$$

slik at

$$A_n = \frac{(-\alpha_\tau)^n}{\sqrt{n!}}A_0, \quad \text{q.e.d.}$$

d. ♠Sannsynligheten for å finne oscillatoren i tilstand nr n etter perturbasjonen er altså

$$P_n = |A_n|^2 = \frac{(-\alpha_\tau)^2}{n!}|A_0|^2 = \frac{(\alpha_\tau)^2}{n!}P_0.$$

Ved å summere fra null til uendelig finner vi at

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = \underline{1} = P_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha_\tau)^2}{n!} = \underline{P_0 \exp(\alpha_\tau^2)}, \quad \Longrightarrow \quad P_0 = \exp(-\alpha_\tau^2) \quad \Longrightarrow$$

$$P_n = \frac{\alpha_\tau^{2n}}{n!}\exp(-\alpha_\tau^2) = \frac{1}{n!}\left(\frac{2F_0^2}{m\omega^3\hbar}\right)^n \exp\left(-\frac{2F_0^2}{m\omega^3\hbar}\right).$$

♠Mens vi ifølge 1.-ordens perturbasjonsteori bare får overgang til 1. eksiterte nivå, ser vi at de eksakte overgangs-sannsynlighetene i prinsippet alle er forskjellige fra null. For en *svak* perturbasjon, dvs når

$$F_0^2 << m\omega^3\hbar,$$

er

$$P_1 \approx \frac{2F_0^2}{m\omega^3\hbar},$$

i overensstemmelse med resultatet i pkt. **a**, mens P_2 osv er enda mindre (og mens $P_0 \approx 1$). I denne grensen fungerer altså 1.-ordens perturbasjonsteori bra. Når kraften *ikke* er liten, ser vi at 1.-ordens p.t. fungerer dårlig. [Merk ellers at $\sqrt{m\omega^3\hbar}$ er størrelsen av den harmoniske kraften ved det klassiske vendepunktet for grunntilstanden.]