Løsningsforslag
Eksamen 20. desember 2012
FY2045/TFY4250 Kvantemekanikk I

Oppgave 1

a. ♠For $x < 0$ er potensialet lik null.

(i) For $E > 0$ er da $\psi_E'' = -(2m_eE/\hbar^2)\psi_E \equiv -k^2\psi_E$. Da må ψ_E for $x < 0$ være en lineærkombinasjon av $\sin kx$ og $\cos kx$, eller alternativt av $\exp(ikx)$ og $\exp(-ikx)$.

(ii) For $E = 0$ er tilsvarende $\psi_E'' = 0$, med generell løsning $\psi_E = A + Bx$. Her må B settes lik null for å unngå divergens når $x \to -\infty$. For negative x er altså ψ_E i dette tilfellet lik en konstant.

♠(iii) Dersom ψ_E er en energiegenfunksjon med negativ energi, har vi for $x < 0$ at $\psi_E'' = [2m_e(-E)/\hbar^2]\psi_E \equiv \kappa^2\psi_E$. Med $\kappa = \sqrt{2m_e(-E)/\hbar^2}$ må løsningen for $x < 0$ da ha formen $\psi_E \propto \exp(\kappa x)$, idet løsningen $\exp(-\kappa x)$ divergerer i grensen $x \to -\infty$.

En bunden tilstand skal være kvadratisk integrerbar og lokalisert. Dette er ikke oppfylt for tilfellene (i) og (ii). Følgelig må en eventuell bunden tilstand i dette potensialet ha negativ energi.

♠For $x > b$ har vi at

$$\psi_E'' = \frac{2m_e}{\hbar^2}[V_0 - E]\psi_E \equiv \kappa_1^2\psi_E \ ; \qquad \kappa_1 \equiv \sqrt{\frac{2m_eV_0}{\hbar^2} + \frac{2m_e(-E)}{\hbar^2}} = \sqrt{1/a_0^2 + \kappa^2}.$$

Av de to løsningene $\exp(-\kappa_1 x)$ og $\exp(\kappa_1 x)$ er bare den første akseptabel, fordi ψ_E ikke får lov å divergere i grensen $x \to \infty$.

b. ♠Siden den bundne tilstanden har $E < 0$, ser vi at den relative krumningen

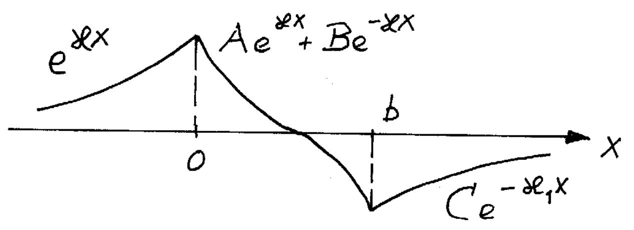
$$\frac{\psi''}{\psi} = \frac{2m_e}{\hbar^2}[V(x) - E] = \begin{cases} \kappa^2 & \text{for} \quad x < 0 \ \text{og} \ 0 < x < b, \\ \kappa_1^2 & \text{for} \quad x > b \end{cases}$$

er positiv over alt (unntatt i origo, hvor deltafunksjonsbrønnen gjør at den er $-\infty$). Egenfunksjonen $\psi(x)$ må altså krumme utover fra aksen unntatt i origo, hvor den "knekker mot aksen".

♠Med valget $\psi(0) = 1$ er $\psi = \exp(\kappa x)$ for $x < 0$. I dette området har vi derfor ingen nullpunkter. For $x > b$ har vi tilsvarende at

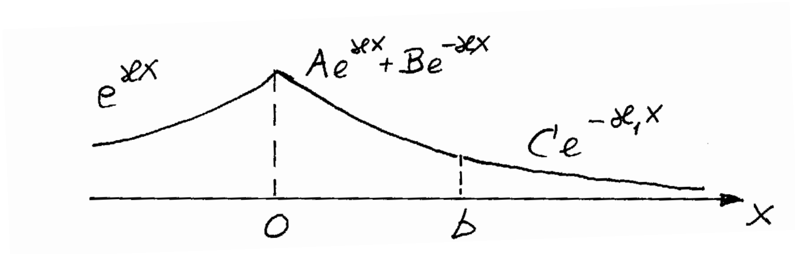
$$\psi = Ce^{-\kappa_1 x},$$

så det er ingen nullpunkter i dette området heller. Om vi nå prøver oss med et nullpunkt i intervallet $0 < x < b$, blir skissen seende slik ut:



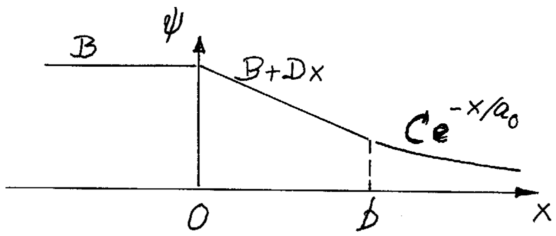
Fordi ψ skal krumme utover over alt (unntatt i origo), ser vi at nullpunktet framtvinger en knekk i $x = b$. Siden egenfunksjonen ψ skal være glatt i dette punktet, kan en egenfunksjon ikke se slik ut. (Den bundne tilstanden har derfor ikke noe nullpunkt.)

♠Egenfunksjonen for den bundne tilstanden må altså se slik ut:



Her har vi fire ukjente, de tre reelle konstantene A, B og C samt energien E (som inngår i uttrykkene for κ og κ_1). Disse fire ukjente bestemmes entydig av de fire betingelsene som vi tilsammen har i punktene $x = 0$ og $x = b$. Følgelig er denne egenfunksjonen unik; vi har bare én bunden tilstand i dette potensialet, forutsatt at $g > g_0$ (slik at knekken i origo blir tilstrekkelig kraftig).

c. ♠Vi har alt sett at en tilstand med $E = 0$ må være lik en konstant (som vi kan kalle B) for $x < 0$. Siden $\psi'' = 0$ også for $0 < x < b$, følger det videre at den må være lineær i dette området, $\psi = B + Dx$. For $x > b$, hvor vi nå har $\psi'' = (1/a_0^2)\psi$, må løsningen ha formen $\psi = C\exp(-x/a_0)$. Siden ψ "knekker" *mot* aksen i origo, blir skissen da som følger:



♠I $x = 0$ gir diskontinuitetsbetingelsen (for ψ'/ψ)

$$\frac{\psi'(0^+)}{\psi(0)} - \frac{\psi'(0^-)}{\psi(0)} = \frac{D}{B} - 0 = \frac{2m_e}{\hbar^2} \cdot \frac{-g_0\hbar^2}{m_e a_0} = -\frac{2g_0}{a_0} \qquad \Longrightarrow \qquad g_0 = -\tfrac{1}{2}a_0\frac{D}{B}.$$

I $x = b$ er ψ'/ψ kontinuerlig:

$$-\frac{1}{a_0} = \frac{D}{B + Db} = \frac{1}{b + B/D} \qquad \Longrightarrow \qquad -\frac{B}{D} = b + a_0.$$

I grensetilfellet er altså

$$g_0 = -\tfrac{1}{2}a_0\frac{D}{B} = \tfrac{1}{2}\frac{a_0}{b + a_0} = \tfrac{1}{2}\frac{1}{1 + b/a_0}.$$

♠I grensen $b \to \infty$ finner vi altså $g_0 = 0$. Så her finner vi ganske riktig at systemet har en bunden tilstand forutsatt at $g > 0$, dvs uansett hvor "svak" brønnen er.

Oppgave 2

a. ♠Da $\sigma_z \chi_\pm = \pm\, \chi_\pm$, har vi at

$$\widehat{H}_0 \chi_\pm = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0\, \sigma_z \chi_\pm = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\omega_0\, \chi_\pm \equiv E_\pm\, \chi_\pm.$$

Energiegenverdiene er altså $E_- = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ for grunntilstanden χ_- og $E_+ = +\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ for den (eneste) eksiterte tilstanden, χ_+. De stasjonære tilstandene (for det uperturberte systemet) er dermed

$$\chi_\pm(t) = \chi_\pm\, e^{-iE_\pm t/\hbar} = \chi_\pm\, e^{\mp i\omega_0 t/2}.$$

♠Den fysiske tolkningen av koeffisientene $a_\pm(t)$ er at de er sannsynlighetsamplitudene — slik at $|a_\pm(t)|^2$ er sannsynlighetene — for å måle henholdsvis $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$ (spinn opp) og $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$ (spinn ned) ved tiden t.

♠Dersom det perturberende magnetfeltet er lik null ($\widehat{H} = \widehat{H}_0$), vet vi fra superposisjonsprinsippet at den mest generelle tilstanden for dette systemet er en superposisjon av de stasjonære tilstandene, med konstante koeffisienter. Koeffisientene $a_+(t)$ og $a_-(t)$ blir altså i dette tilfellet tidsuavhengige. Med $\omega_1 = \epsilon\omega_0 = 0$ følger dette selvsagt også fra den oppgitte matriseligningen.

b. ♠Ved å derivere ligning nr 2 i settet

$$\frac{da_+}{dt} = -\frac{i}{2}\,\omega_1\, a_- \,, \qquad \frac{da_-}{dt} = -\frac{i}{2}\,\omega_1\, a_+$$

med hensyn på t finner vi vha nr 1 at

$$\frac{d^2 a_-}{dt^2} = -\frac{i}{2}\omega_1\, \frac{da_+}{dt} = -\frac{\omega_1^2}{4}\, a_-.$$

Den generelle løsningen er

$$a_- = A\cos\tfrac{1}{2}\omega_1 t + B\sin\tfrac{1}{2}\omega_1 t,$$

slik at

$$a_+ = \frac{2i}{\omega_1}\frac{da_-}{dt} = i(-A\sin\tfrac{1}{2}\omega_1 t + B\cos\tfrac{1}{2}\omega_1 t).$$

Ved $t = 0$ er $a_+ = 0$ og $a_- = 1$, slik at

$$0 = iB \qquad \text{og} \qquad 1 = A.$$

Løsningen er altså

$$a_+ = -i\sin\tfrac{1}{2}\omega_1 t \qquad \text{og} \qquad a_- = \cos\tfrac{1}{2}\omega_1 t, \quad \text{q.e.d.}$$

c. ♠Ved å sette inn disse resultatene og formlene for de stasjonære løsningene kan vi uttrykke spinntilsanden ved tiden t slik:

$$\chi(t) = a_+(t)\chi_+(t) + a_-(t)\chi_-(t) = \begin{pmatrix} -i\sin\frac{1}{2}\omega_1 t\, e^{-i\omega_0 t/2} \\ \cos\frac{1}{2}\omega_1 t\, e^{i\omega_0 t/2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

Fra formelarket har vi da, med $2a^*b = i\sin\omega_1 t e^{i\omega_0 t}$ og $|a|^2 - |b|^2 = \sin^2\frac{1}{2}\omega_1 t - \cos^2\frac{1}{2}\omega_1 t = -\cos\omega_1 t$,

$$\begin{aligned}
\langle\,\sigma_x\,\rangle &= \Re\mathrm{e}(2a^*b) = -\sin\omega_1 t\sin\omega_0 t, \\
\langle\,\sigma_y\,\rangle &= \Im\mathrm{m}(2a^*b) = \sin\omega_1 t\cos\omega_0 t, \\
\langle\,\sigma_z\,\rangle &= |a|^2 - |b|^2 = -\cos\omega_1 t.
\end{aligned}$$

♠Da vektoren $\boldsymbol{\omega}_0 \times \langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle$ er horisontal, har vi at

$$\frac{d}{dt}\langle\,\sigma_z\,\rangle = (\boldsymbol{\omega}_1 \times \langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle)_z = (\boldsymbol{\omega}_1 \times \langle\,\boldsymbol{\sigma}_\perp\,\rangle)_z$$

er positiv når $\langle\,\boldsymbol{\sigma}_\perp\,\rangle$ ligger foran $\boldsymbol{\omega}_1$. Dersom vi lar $\boldsymbol{\omega}_1$ rotere med en frekvens som avviker vesentlig fra resonansfrekvensen, vil $\langle\,\boldsymbol{\sigma}_\perp\,\rangle$ ligge *foran* $\boldsymbol{\omega}_1$ bare en kort stund, hvoretter den blir liggende bak, så foran igjen, så bak, osv. Resultatet er at $\langle\,\sigma_z\,\rangle$ vokser en kort stund (men langt fra helt opp til $+1$), for så å minke igjen, hvoretter den vokser, så minker, så vokser, osv. [Dette er grunnen til at $\langle\,\sigma_z\,\rangle$ i et slikt tilfelle aldri vokser særlig langt fra -1.]

d. ♠Til første orden er overgangsamplituden

$$a_+^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{+-}t'}V_{+-}(t')dt'.$$

Her er Bohr-frekvensen $\omega_{+-} = (E_+ - E_-)/\hbar = \omega_0$, og matrise-elementet er

$$V_{+-}(t') = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_1\, e^{-i\omega_0 t'}.$$

Innsatt gir dette

$$a_+^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\,\tfrac{1}{2}\hbar\omega_1\int_0^t e^{i(\omega_0-\omega_0)t'}dt' = -\tfrac{1}{2}i\omega_1 t.$$

♠For å sammenligne kan vi utvikle det eksakte resultatet i $\omega_1 t$:

$$a_+(t) = -i\sin\tfrac{1}{2}\omega_1 t = -i\left[\tfrac{1}{2}\omega_1 t - (\tfrac{1}{2}\omega_1 t)^3/3! + \cdots\right].$$

Her ser vi at de to resultatene stemmer godt overens for

$$\omega_1 t \ll 1,$$

som blir gyldighetskriteriet for 1.-ordens p.t. i dette tilfellet. Dette er akkurat hva vi måtte vente; 1.-ordens p.t. vil fungere bra så lenge amplituden $a_- = \cos\frac{1}{2}\omega_1 t$ for å være i den opprinnelige tilstanden ikke har rukket å endre seg vesentlig. [Merk at disse resultatene ikke krever at ω_1 er mye mindre enn ω_0, dvs at perturbasjonen er svak. Men jo større ω_1 er desto strengere blir gyldighetskravet til t: $t \ll 1/\omega_1$, slik vi ville vente ut fra erfaringer med tidsavhengig perturbasjonsteori.]

Oppgave 3

a. ♠Siden de "kartesiske" tilstandene $\psi_{n_xn_yn_z} \equiv (n_xn_yn_z)$ er ortonormerte, vil normeringsintegralet bli lik summen av absoluttkvadratene av koeffisientene i den oppgitte lineærkombinasjonen:

$$\int |\Psi(\mathbf{r},0)|^2 d^3r = 3(1/\sqrt{6})^2 + (1/\sqrt{2})^2 = 1, \quad \text{q.e.d.}$$

♠Koeffisienten $1/\sqrt{2}$ er sannsynlighetsamplituden for å måle grunntilstandsenergien $E_{N=0} = \frac{3}{2}\hbar\omega$ og etterlate systemet i grunntilstanden, (000). Sannsynligheten for dette resultatet er altså $P_{N=0} = (1/\sqrt{2})^2 = 1/2$. Egentilstandene (200), (020) og (002) har alle $N = n_x + n_y + n_z = 2$, dvs energi $E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$. Sannsynligheten for å måle energien E_2 er $P_{N=2} = 3(1/\sqrt{6})^2 = \frac{1}{2}$ $(= 1 - P_{N=0}$ selvsagt).

♠En energimåling med resultatet E_2 vil "skrelle bort" den delen av bølgefunksjonen som ikke er forenlig med denne energien, dvs (000)-delen. Den normerte tilstanden etter en måling med dette resultatet blir da

$$\frac{1}{\sqrt{3}}[(200) + (020) + (002)].$$

♠Fra formelarket har vi at

$$\psi_{200}(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-m\omega(x^2+y^2+z^2)/2\hbar}\left(4\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 2\right),$$

og tilsvarende for (020) og (002), med $x \to y$ og $x \to z$. Den oppgitte tilstanden kan altså skrives på formen

$$\frac{1}{\sqrt{3}}[(200) + (020) + (002)] = \frac{1}{\sqrt{24}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-m\omega r^2/2\hbar}\left(4\frac{m\omega}{\hbar}r^2 - 6\right).$$

Siden denne er vinkeluavhengig, er den en egentilstand til $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $\widehat{L}_z$ med egenverdier lik null, dvs en s-tilstand av typen $\psi_{N=2,l=0,m=0}$.

b. ♠Med $\psi_i = R_{N=2,l=0}Y_{00}$ og $\psi_f = R_{N'l'}Y_{l'm'}$ tar vinkeldelen av dipolmomentet formen

$$Y_{00}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\int Y^*_{l'm'}\left[\hat{\mathbf{e}}_z\,Y_{10} - \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}}\,Y_{11} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}}\,Y_{1-1}\right]d\Omega.$$

Her ser vi fra ortogonaliteten til de sfæriske harmoniske at dipolmomentet blir forskjellig fra null bare for $l' = 1$, i tråd med utvalgsregelen $\Delta l = \pm 1$.

♠Den mest generelle begynnelsestilstanden $|\psi_i\rangle$ er en lineærkombinasjon av vektorer $|n_x, n_y, n_z\rangle$ med alle mulige kombinasjoner av n_x, n_y og n_z som har $n_x + n_y + n_z = N$. Når operatoren

$$\widehat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_x + a_x^\dagger)$$

virker på en slik lineærkombinasjon $|\psi_i\rangle$, gir a_x en tilsvarende lineærkombinasjon der hver vektor får senket kvantetallet n_x med 1. Denne lineærkombinasjonen har altså energikvantetallet $N' = N - 1$. Operatoren $a_x^\dagger$ gir tilsvarende en lineærkombinasjon med

$N' = N + 1$. Tilsvarende gjelder for operatorene

$$\widehat{y} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_y + a_y^\dagger) \qquad \text{og} \qquad \widehat{z} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_z + a_z^\dagger).$$

Uttrykket $\mathbf{r}|\psi_i\rangle$ blir derfor en lineærkombinasjon av tilstander med kvantetall $N-1$ og $N+1$. Dermed blir matrise-elementet

$$\mathbf{d}_{fi} = \langle\psi_f|\mathbf{r}|\psi_i\rangle$$

forskjellig fra null bare for slutt-tilstander $|\psi_f\rangle$ med $N' = N \pm 1$, hvilket skulle vises.

<u>**c.**</u> ♠Bohr-frekvensen er

$$\omega_{if} = \frac{E_i - E_f}{\hbar} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \omega.$$

♠Slutt-tilstanden (100) er proporsjonal med $x\,\exp(-m\omega r^2/2\hbar)$, og er følgelig rotasjonssymmetrisk mhp x-aksen og antisymmetrisk mhp yz-planet. Da begynnelsestilstanden er kulesymmetrisk, skjønner vi at dipolmoment-vektoren $\mathbf{d}_{fi}$ for denne overgangen ikke kan ha noen komponent i x- og y-retningene, og derfor må være parallell med x-aksen.

♠"Skalaen" for de aktuelle oscillatortilstandene er $\sqrt{\hbar/m\omega}$ (som er den klassiske venderadien for grunntilstanden). Derfor må vi vente at d_{fi} er av størrelsesorden $\sqrt{\hbar/m\omega}$.

♠De to tilstandene (010) $\propto y$ og (001) $\propto z$ har samme form mhp hhvis y- og z-aksene som (100) $\propto x$ har mhp x-aksen. Derfor vil størrelsen av dipolmomentet, $|\mathbf{d}_{fi}|$, for hver av disse være like stor som for (100) (mens retningene er langs hhvis x-,y- og z-aksene).

<u>**d.**</u> ♠For å finne den samlede overgangsraten i dipoltilnærmelsen må vi også ta med bidragene fra alle de tre slutt-tilstandene. Den totale spontane overgangsraten for tilstanden $\psi_{N=2,l=m=0}$ blir derfor

$$w_{N=2,l=m=0} = 3 \cdot \frac{4\alpha\,\omega^3}{3c^2}\frac{\hbar}{3m\omega} = \frac{4\alpha}{3}\frac{\hbar\omega}{mc^2}\,\omega.$$

Med $\omega = 10^{16}\ \mathrm{s}^{-1}$ blir avstanden mellom oscillatornivåene

$$\hbar\omega = 6.582 \cdot 10^{-16}\mathrm{eVs} \cdot 10^{16}\mathrm{s}^{-1} \approx 6.58\ \mathrm{eV}.$$

Dette gir en total rate for spontan overgang fra $\psi_{N=2,l=m=0}$ på

$$w = \frac{4\alpha}{3}\frac{\hbar\omega}{m_ec^2}\,\omega \approx \frac{4}{3\cdot 137}\frac{6.58}{511000} \cdot 10^{16}\mathrm{s}^{-1} \approx 1.25 \cdot 10^9\mathrm{s}^{-1},$$

og en levetid for denne tilstanden på

$$\tau \approx 8.0 \cdot 10^{-10}\mathrm{s}.$$

♠Dipoltilnærmelsen er god forutsatt at $|\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}| \ll 1$ i den vesentlige delen av integrasjonsområdet for dipolmomentet, som er for $0 < r \lesssim \sqrt{\hbar/m\omega}$. Med $k = \omega/c$ skal vi altså undersøke størrelsen av

$$\frac{\omega}{c}\sqrt{\hbar/m\omega} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m_ec^2}} = \sqrt{6.58/511000} \approx 0.0036.$$

Konklusjonen er at dipoltilnærmelsen er en god tilnærmelse i dette tilfellet.