Løsningsforslag
Eksamen 13. desember 2005
TFY4250 Atom- og molekylfysikk/FY2045 Kvantefysikk

Oppgave 1

a. Med

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin\frac{n\pi x}{L_x} = -\frac{n_x^2\pi^2}{L_x^2}\sin\frac{n\pi x}{L_x}, \quad \text{osv.}$$

finner vi energien til egenfunksjonen

$$\psi_{n_x,n_y,n_z} = A\sin\frac{n_x\pi x}{L_x}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

slik:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,\psi_{n_x,n_y,n_z} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_{n_x,n_y,n_z} \\
&= \underline{\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2+n_z^2}{L^2}\right)}\psi_{n_x,n_y,n_z} \equiv \underline{E}\,\psi_{n_x,n_y,n_z}.
\end{aligned}$$

Ved en infinitesimal endring dL_x av L_x, med fastholdt L, har vi

$$F_x\,dL_x = -dE.$$

Kraften på stempelet er altså

$$F_x = -\frac{\partial E}{\partial L_x} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_x^2}{mL_x^3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL_x^3},$$

siden $n_x = 1$ for grunntilstanden.

b. I grunntilstanden vil de 8 spinn-$\frac{1}{2}$-fermionene fordele seg med to i hver av de fire romlige én-partikkel-tilstandene med lavest energi. Når L_x er i nærheten av L, er kvantetallene for disse fire tilstandene gitt ved

$$(n_x,n_y,n_z) = (1,1,1),(2,1,1),(1,2,1) \quad \text{og} \quad (1,1,2).$$

Kraften avhenger bare av de L_x-avhengige bidragene til den totale energien for de 8 fermionene, som er

$$E_{\text{tot}}^{(x)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\cdot 2\cdot\left(\frac{1}{L_x^2}+\frac{4}{L_x^2}+\frac{1}{L_x^2}+\frac{1}{L_x^2}\right) = 7\,\frac{\hbar^2\pi^2}{mL_x^2}.$$

For $L_x = L$ blir da kraften

$$F_x = -\left.\frac{\partial E_{\text{tot}}^{(x)}}{\partial L_x}\right|_L = 14\,\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^3}.$$

Oppgave 2

a. Med

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[x^2 + \tfrac{1}{2}b^2(1+e^{-2i\omega t}) + \frac{i\hbar t}{m} - 2bx\,e^{-i\omega t}\right]\right\}$$

har vi

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{\partial\Psi_b}{\partial t} &= \Psi_b \cdot \left\{ i\hbar\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\right)\left[\tfrac{1}{2}b^2\,e^{-2i\omega t}(-2i\omega) + \frac{i\hbar}{m} - 2bx\,e^{-i\omega t}(-i\omega)\right]\right\} \\ &= \Psi_b \cdot \left[-\tfrac{1}{2}m\omega^2 b^2 e^{-2i\omega t} + \tfrac{1}{2}\hbar\omega + m\omega^2 bx\,e^{-i\omega t}\right], \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Videre har vi

$$\frac{\partial\Psi_b}{\partial x} = \Psi_b \cdot \left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(2x - 2b\,e^{-i\omega t}\right)\right] = \Psi_b \cdot \left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x - b\,e^{-i\omega t}\right)\right],$$

og

$$\frac{\partial^2\Psi_b}{\partial x^2} = \Psi_b \cdot \left(-\frac{m\omega}{\hbar}\right)\left[-\frac{m\omega}{\hbar}\left(x - b\,e^{-i\omega t}\right)^2 + 1\right],$$

slik at

$$\hat{K}\,\Psi_b = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi_b}{\partial x^2} = \Psi_b \cdot \left[-\tfrac{1}{2}m\omega^2\left(x - b\,e^{-i\omega t}\right)^2 + \tfrac{1}{2}\hbar\omega\right], \quad \text{q.e.d.}$$

b. Ved innsetting i den tidsavhengige Schrödingerligningen, $i\hbar\,\partial\Psi_b/\partial t = [\hat{K}+V(x)]\Psi_b = \hat{H}\Psi_b$, finner vi at

$$\begin{aligned} V(x)\Psi_b &= i\hbar\,\frac{\partial\Psi_b}{\partial t} - \hat{K}\Psi_b \\ &= \Psi_b \cdot \Big[-\tfrac{1}{2}m\omega^2 b^2 e^{-2i\omega t} + \tfrac{1}{2}\hbar\omega + m\omega^2 bx\,e^{-i\omega t} \\ &\quad + \tfrac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 - 2xb\,e^{-i\omega t} + b^2 e^{-2i\omega t}\right) - \tfrac{1}{2}\hbar\omega\Big] \\ &= \Psi_b \cdot \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2. \end{aligned}$$

Dette viser at den oppgitte bølgefunksjonen virkelig oppfyller Schrödingerligningen, for det harmoniske oscillatorpotensialet

$$V(x) = \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

For spesialtilfellet $b = 0$ finner vi fra formlene ovenfor:

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi_0}{\partial t} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\,\Psi_0 \equiv E_0\,\Psi_0,$$

$$\Psi_0(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} - i\frac{\omega t}{2}\right] \equiv \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}\,e^{-iE_0 t/\hbar},$$

$$\hat{H}\Psi_0 = [\hat{K} + V(x)]\Psi_0 = \cdots = E_0\Psi_0.$$

Bølgefunksjonen $\Psi_0(x,t)$ (for $b = 0$) beskriver altså grunntilstanden for oscillatoren.

Med $1 + \cos 2\omega t = 2\cos^2 \omega t$ finner vi for $b \neq 0$ sannsynlighetstettheten

$$\begin{aligned} |\Psi_b(x,t)|^2 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}\left[x^2 + \tfrac{1}{2}b^2(1+\cos 2\omega t) - 2bx\cos\omega t\right]\right\} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}(x - b\cos\omega t)^2\right\}, \end{aligned}$$

som er en Gauss-fordeling (normalfordeling) med et tyngdepunkt (symmetripunkt)

$$\langle\, x \,\rangle_t = b\cos\omega t$$

som avhenger av tiden.

c. [Det eneste som skiller $|\Psi_b(x,t)|^2$ fra sannsynligheten $|\Psi_0(x,t)|^2$ for grunntilstanden er at "tyngdepunktet" (senteret av bølgegruppen) oscillerer som $\langle\, x \,\rangle_t = b\cos\omega t$. Usikkerheten Δx er derfor konstant (tidsuavhengig) og også uavhengig av "utsvinget" b, dvs lik usikkerheten Δx for grunntilstanden Ψ_0. Det er forsåvidt enkelt å beregne denne vha Gauss-integraler. Men for denne spesielle bølgefunksjonen kan vi bruke en alternativ og mer slagkraftig metode:]

Vha resultatet ovenfor for $\partial\Psi_b/\partial x$ finner vi

$$\begin{aligned} a\Psi_b &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x\Psi_b + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial\Psi_b}{\partial x}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \cdot \Psi_b \cdot \left[x + \frac{\hbar}{m\omega}\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\right)\left(x - b\,e^{-i\omega t}\right)\right] \\ &= be^{-i\omega t}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\Psi_b \equiv \alpha\,\Psi_b, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Vha denne formelen er det enkelt å beregne forventningsverdier for tilstanden Ψ_b: Med

$$\langle\, a \,\rangle = \int \Psi_b^*\, a\Psi_b dx = \alpha \qquad \text{og} \qquad \left\langle\, a^\dagger \,\right\rangle = \int \Psi_b^*\, a^\dagger \Psi_b dx = \int (a\Psi_b)^* \Psi_b dx = \alpha^*$$

finner vi:

$$\langle\, x \,\rangle_t = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\langle\, a + a^\dagger \,\right\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot 2\Re\mathrm{e}(\alpha) = b\cos\omega t,$$

som er samme resultat som i pkt. **b**. Tilsvarende er

$$\langle\, p_x \,\rangle_t = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \cdot \frac{\left\langle\, a - a^\dagger \,\right\rangle}{i} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \cdot 2\Im\mathrm{m}(\alpha) = -m\omega b\,\sin\omega t.$$

Som en kontroll har vi fra Ehrenfests teorem

$$\langle\, p_x \,\rangle = m\frac{d}{dt}\langle\, x \,\rangle = m\frac{d}{dt}(b\cos\omega t) = -m\omega b\,\sin\omega t.$$

d. Vha kommutator-relasjonen $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ finner vi at

$$\begin{aligned} \left\langle\, x^2 \,\right\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle\, (a+a^\dagger)(a+a^\dagger) \,\right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle\, a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a \,\right\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle\, a^2 + (a^\dagger)^2 + 2a^\dagger a + 1 \,\right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left[\alpha^2 + (\alpha^*)^2 + 2\alpha^*\alpha + 1\right] \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left[(\alpha + \alpha^*)^2 + 1\right] = \frac{\hbar}{2m\omega}\left[(2\Re\mathrm{e}(\alpha))^2 + 1\right] = \frac{\hbar}{2m\omega} + \langle\, x \,\rangle^2 . \end{aligned}$$

Her har vi brukt resultatet $\langle\, x \,\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot 2\Re\mathrm{e}(\alpha)$ fra forrige punkt. Dermed blir

$$\Delta x = \sqrt{\langle\, x^2 \,\rangle - \langle\, x \,\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Tilsvarende finner vi at

$$\begin{aligned}
\Big\langle\, p_x^2 \,\Big\rangle &= -\frac{\hbar m\omega}{2} \Big\langle\, (a - a^\dagger)(a - a^\dagger) \,\Big\rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} \Big\langle\, a^2 + (a^\dagger)^2 - aa^\dagger - a^\dagger a \,\Big\rangle \\
&= -\frac{\hbar m\omega}{2} \Big\langle\, a^2 + (a^\dagger)^2 - 2a^\dagger a - 1 \,\Big\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \Big[1 - (\alpha - \alpha^*)^2\Big] \\
&= \frac{\hbar m\omega}{2} \Big[1 + (2\Im\mathrm{m}(\alpha))^2\Big] = \frac{\hbar m\omega}{2} + \langle\, p_x \,\rangle^2 ,
\end{aligned}$$

slik at

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle\, p_x^2 \,\rangle - \langle\, p_x \,\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}.$$

Disse er tidsuavhengige, slik vi skulle vise, og vi ser at

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \tfrac{1}{2}\hbar.$$

Oppgave 3

a. De mulige måleverdiene for $\mathbf{S}^2 = \hbar^2 s(s+1)$ og $S_z = \hbar m$ kan angis ved kvantetallene s og m, som er

$$\begin{aligned}
&s = 0 \quad \& \quad m = 0, \qquad \text{(singlett)} \\
&s = 1 \quad \& \quad m = 0, \pm 1. \qquad \text{(triplett)}
\end{aligned}$$

For den oppgitte tilstanden χ finner vi:

$$\begin{aligned}
S_z\,\chi &= \frac{1}{\sqrt{2}} (S_{1z} + S_{2z}) \left[\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_-(1)\chi_+(2)\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{[S_{1z}\chi_+(1)]\chi_-(2) + \chi_+(1)S_{2z}\chi_-(2) - [S_{1z}\chi_-(1)]\chi_+(2) - \chi_-(1)S_{2z}\chi_+(2)\right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \Big[(\tfrac{1}{2}\hbar - \tfrac{1}{2}\hbar)\chi_+(1)\chi_-(2) - (-\tfrac{1}{2}\hbar + \tfrac{1}{2}\hbar)\chi_-(1)\chi_+(2)\Big] = 0.
\end{aligned}$$

Så χ er en egentilstand til S_z med egenverdi lik null ($m = 0$).

Fra hjelpeformlene

$$J_\pm |j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j + 1 \pm m)}\,|j, m \pm 1\rangle$$

følger det at

$$S_{i+}\chi_+(i) = 0 \qquad \text{og} \qquad S_{i+}\chi_-(i) = \hbar\,\chi_+(i), \quad i = 1, 2,$$

slik at

$$S_{1+}\chi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\hbar\,\chi_+(1)\chi_+(2)\right] \qquad \text{og} \qquad S_{2+}\chi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[+\hbar\,\chi_+(1)\chi_+(2)\right].$$

Følgelig er $S_+\,\chi = 0$, og

$$\mathbf{S}^2\,\chi = [S_z^2 + \hbar S_z + S_- S_+]\chi = 0,$$

så χ er en egentilstand til $\mathbf{S}^2$ med egenverdi null ($s = 0$).

b. Med

$$\chi = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\,\chi_+(1)\chi_-(2) - \frac{1}{\sqrt{2}}\,\chi_-(1)\chi_+(2) \right]$$

er koeffisientene ($1/\sqrt{2}$ og $-1/\sqrt{2}$) sannsynlighetsamplituder. Sannsynligheten for å måle $S_{1z} = \frac{1}{2}\hbar$ er altså lik $\frac{1}{2}$. *Etter* en slik måling vil systemet være i den tilstanden som svarer til den målte egenverdien, altså $\chi_+(1)\chi_-(2)$.
Hvis en måler både S_{1z} og S_{2z} for tilstanden χ, og finner $S_{1z} = \frac{1}{2}\hbar$, så må den samtidige målingen av S_{2z} gi $-\frac{1}{2}\hbar$, siden summen jo er skarpt definert lik null i tilstanden χ.
Med 50/50 sjanse for å måle S_{1z} lik $+\frac{1}{2}\hbar$ og $-\frac{1}{2}\hbar$ i tilstanden χ blir forventningsverdien

$$\langle\, S_{1z}\,\rangle = 0,$$

og usikkerheten (roten av det midlere kvadratiske avviket fra middelverdien) blir

$$\Delta S_{1z} = \tfrac{1}{2}\hbar.$$