

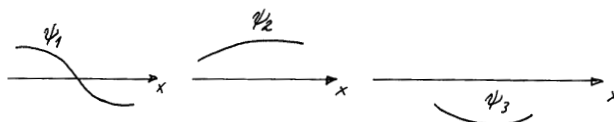
Løsningsforslag
Eksamen 7. desember 2004
TFY4250 Atom- og molekylfysikk
FY2045 Kvantefysikk

Oppgave 1

a. Med $\hat{H} = \hat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$, kan vi skrive den tidsuavhengige Schrödingerligningen på formen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = [E - V(x)]\psi(x), \quad \text{dvs} \quad \frac{d^2 \psi / dx^2}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E].$$

(i) I *klassisk tillatte områder* (hvor $E > V(x)$), ser vi at den relative krumningen $(d^2\psi/dx^2)/\psi$ er negativ (dvs at ψ'' er negativ der hvor ψ er positiv, og omvendt). Dette betyr at ψ *krummer mot x-aksen*. Eksempler:



(ii) I *klassisk forbudte områder* (hvor $E < V(x)$), har ψ'' samme fortegn som ψ . ψ vil da *krumme bort fra aksene*. Eksempler:



(iii) I et *område* hvor $E = V$ tar den tidsuavhengige Schrödingerligningen formen

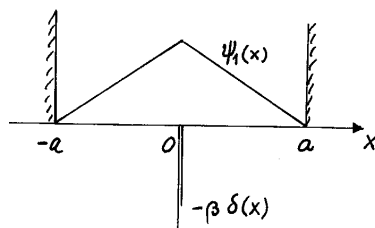
$$\psi'' = \frac{2m_e}{\hbar^2} [V - E]\psi = 0,$$

med den generelle løsningen

$$\psi = Fx + G,$$

som er en lineær funksjon, *uten krumning*.

Når potensialet er symmetrisk (med hensyn på origo, $x = 0$), vil paritetsoperatoren kommutere med Hamilton-operatoren. Siden vi har bare én (bundet) energieigenfunksjon pr energi, må denne da også være en egentilstand til paritetsoperatoren, med paritet $+1$ (ψ_n symmetrisk) eller -1 (ψ_n antisymmetrisk). En finner også at grunntilstanden er symmetrisk, første eksiterte tilstand antisymmetrisk, andre eksiterte symmetrisk, 3. antisymmetrisk, osv.

b.

Siden $\psi_1(x)$ er lineær i områdene $0 < |x| < a$, hvor $V = 0$, følger det fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen, $\psi'' = 2m(V - E)\psi/\hbar^2 = -2mE\psi/\hbar^2$ at

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''}{\psi} = 0.$$

Med $\psi'(0+) = -\psi(0)/a$ og $\psi'(0-) = \psi(0)/a$ har vi fra den oppgitte betingelsen at

$$\frac{-2m\beta}{\hbar^2} \psi(0) = \psi'(0+) - \psi'(0-) = -2\psi(0)/a,$$

dvs

$$\beta = \frac{\hbar^2}{ma}.$$

c. 1. eksiterte tilstand $\psi_2(x)$, 3. eksiterte, 5. osv er alle antisymmetriske, dvs vi har

$$\psi(0) = 0.$$

For $0 < |x| < a$ må løsningen av

$$\psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi \equiv -k^2 \psi$$

da ha formen

$$\psi(x) = A \sin kx.$$

Det minste bølgetallet k som oppfyller betingelsen $\psi(\pm a) = 0$ er $k_2 = \pi/a$. Løsningen ψ_2 for første eksiterte tilstand og den tilhørende energien er altså

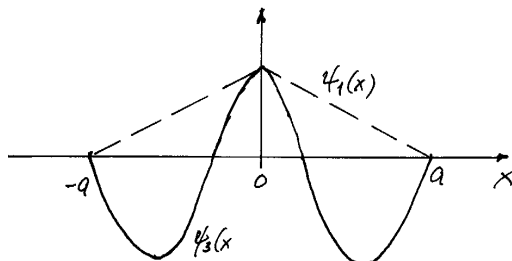
$$\psi_2(x) = A \sin(\pi x/a) \quad \text{og} \quad E_2 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}.$$

Denne løsningen er den samme som for tilfellet $\beta = 0$, og er glatt i origo. Dette er i overensstemmelse med betingelsen

$$\psi'(0+) - \psi'(0-) = \frac{-2m\beta}{\hbar^2} \psi(0),$$

idet $\psi_2(0) = 0$.

d. 2. eksiterte tilstand $\psi_3(x)$ er symmetrisk, og skal da ha *to* nullpunkter i intervallet $-a < x < a$. En symmetrisk løsning må ha $\psi(0) \neq 0$. (Ellers blir den jo antisymmetrisk, som vi nettopp har sett.) Løsningen $\psi_3(x)$ får derfor en “knekk” i origo, i likhet med grunntilstanden. Velger vi $\psi_3(0) = \psi_1(0)$, må knekken bli den samme som for $\psi_1(x)$, ifølge “betingelsen” ovenfor. Bortsett fra denne knekken har løsningen sinusform.



Som det framgår av figuren svarer sinusformen til venstre til litt mindre enn trekvart bølgelengde. Dette betyr at k_3a er noe mindre enn $3\pi/2$ (som er verdien av k_3a for tilfellet $\beta = 0$). Følgelig er energien E_3 noe lavere enn for tilfellet $\beta = 0$.

[Kommentar: Generelt vil δ -brønnen midt i boksen *senke* energiene til alle de symmetriske tilstandene, sammenlignet med tilfellet $\beta = 0$, mens de antisymmetriske tilstandene og energiene til disse er uberørt av δ -brønnen. Ellers er det ikke vanskelig å *beregne* energien E_3 . Med $\psi_3 = A \sin k(r+a)$ for venstre del av brønnen finner en at ka må oppfylle betingelsen $\tan ka = ka$. Med kalkulatoren er det lett å overbevise seg om at denne har en løsning $ka = 4.4935$. For $\beta = 0$ er tilsvarende $ka = 3\pi/2 = 4.712$. Vi har altså

$$\frac{E_3}{E_3^{\beta=0}} = \left(\frac{4.4935}{4.712} \right)^2 \approx 0.91.]$$

Oppgave 2

a. For $l = 0$ og $r > a$ har radially ligningen formen

$$u'' = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)u \equiv \kappa^2 u.$$

Den akseptable løsningen av denne er

$$u = C e^{-\kappa r}.$$

Fra ligningen over har vi at

$$E - V_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{u''}{u} = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m},$$

og når det er opplyst at κ er ekstremt liten, har vi da

$$E = V_0 - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \approx V_0.$$

b. For $0 \leq r < a$ har vi (for $l = 0$)

$$u'' = \frac{2m}{\hbar^2}(-E)u \equiv -k^2u, \quad \text{med} \quad k \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}.$$

Løsningene av denne er $\sin kr$ og $\cos kr$. Betingelsen $u(0) = 0$ gjør at den siste må forkastes, slik at løsningen for $0 \leq r < a$ tar formen

$$u(r) = A \sin kr.$$

Fra den oppgitte kurven for $u(r)$ (med ett nullpunkt i intervallet $0 < r < a$), og kontinuiteten av u'/u for $r = a$, som gir betingelsen

$$k \cot ka = -\kappa \approx 0,$$

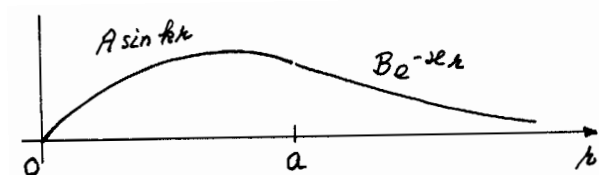
framgår det at

$$ka \approx 3\pi/2.$$

Med $E \approx V_0$ har vi da

$$ka \approx \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0} \approx \frac{3\pi}{2}, \quad \text{dvs.} \quad V_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{3\pi}{2}\right)^2.$$

c. I tillegg til løsningen ovenfor skal radialligningen for $l = 0$ også ha en løsning uten nullpunkter i intervallet $0 < r < a$. Denne vil da krumme langsommere mot akse i dette området, og får lavere energi enn løsningen ovenfor. Denne løsningen får en κ -verdi $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}$ som ikke er spesielt liten, og vil derfor gå raskere mot null for store r enn løsningen ovenfor:

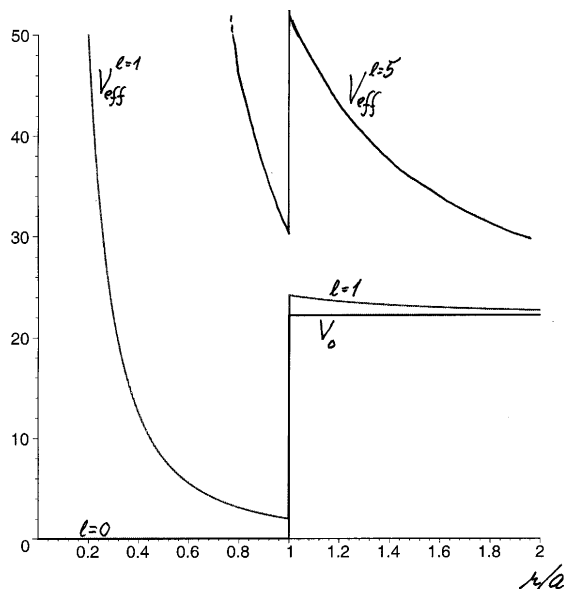


Energien til denne løsningen fastlegges av kontinuiteten til u'/u , som gir betingelsen

$$k \cot ka = -\kappa,$$

der både $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$ og $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}$ er funksjoner av energien. Sammen med figuren som forteller at ka ligger mellom $\frac{1}{2}\pi$ og π vil denne betingelsen fastlegge energien.

Løsningen som er skissert her (uten nullpunkt) og løsningen i oppgaveteksten (med ett nullpunkt) er de eneste løsningene som svarer til bundne tilstander for $l = 0$. En løsning med flere nullpunkter for $0 < r < a$ ville kreve mer krumning, og dette er ikke mulig for $E < V_0$.

d.

Figuren viser potensialbrønnen $V(r)$ ($l = 0$) og de effektive potensialene,

$$V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{l(l+1)}{(r/a)^2},$$

for $l = 1$ og $l = 5$. Vi har sett at potensialbrønnen, med dybden

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{3\pi}{2} \right)^2,$$

er akkurat dyp nok til å gi to bundne tilstander for $l = 0$. For $l = 1$ blir den “effektive brønnen” ikke så dyp som for $l = 0$, og da må vi vente at denne brønnen ikke gir plass til en løsning med ett nullpunkt i intervallet $0 < r < a$. Siden brønnen er blitt vesentlig mindre er det ikke sikkert at den gir plass til en løsning uten nullpunkt engang. (Dette kan avgjøres ved å gå inn i Bessel-funksjons-matematikk.)

For $l = 5$ ser vi at den effektive brønnen har en bunn som ligger høyere enn V_0 . Dette kommer av at $l(l+1) = 5 \cdot 6 = 30$ er et større tall enn $(3\pi/2)^2 = 22.21$. Da kan vi si med sikkerhet at det ikke finnes bundne tilstander for $l \geq 5$.

Oppgave 3

a. Énpartikkelenergiene for den todimensjonale boksen er

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2).$$

Tabellen gir $(n_x^2 + n_y^2)$ for de 10 énpartikkel-"orbitalene" med lavest energi:

n_x	n_y	$n_x^2 + n_y^2$
1	1	2
2	1	5
1	2	5
2	2	8
3	1	10
1	3	10
3	2	13
2	3	13
4	1	17
1	4	17

I hver av disse romlige tilstandene kan vi plassere to av de identiske fermionene, med motsatte spinn. Den laveste totale energien for de 20 fermionene har vi derfor når alle disse 10 romlige tilstandene er besatt med to fermioner hver. Den høyeste énpartikkelenergien er da

$$E = E_{41} = E_{14} = 17 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}.$$

b. Da

$$\hat{L}_z^2 \cos 2\phi = -\hbar^2 \frac{d^2}{d\phi^2} \cos 2\phi = -\hbar^2 (-4 \cos 2\phi),$$

er $\Phi(\phi)$ en egenfunksjon til $\hat{H} = \hat{L}_z^2 / (2mr_0^2)$ med energieigenverdi $4\hbar^2 / (2mr_0^2)$:

$$\hat{H}\Phi(\phi) = \frac{\hat{L}_z^2}{2mr_0^2} \Phi(\phi) = \frac{4\hbar^2}{2mr_0^2} \Phi(\phi).$$

De mulige måleverdiene for L_z er generelt egenverdiene, som er heltallige multipla av \hbar . Siden L_z^2 har den skarpe verdien $4\hbar^2$ i den aktuelle tilstanden, begrenses de mulige måleverdiene til $L_z = \pm 2\hbar$. Den enkleste måten å finne de to sannsynlighetene på er å skrive bølgefunksjonen som en superposisjon av de to egentilstandene $\Phi_{\pm 2\hbar} = (2\pi)^{-1/2} e^{\pm 2i\phi}$ til \hat{L}_z

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2} (e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_{+2\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_{-2\hbar}.$$

Koeffisientene $1/\sqrt{2}$ er da sannsynlighetsamplitudene for å måle hhvis $L_z = \pm 2\hbar$, og de to sannsynlighetene er altså begge lik $\frac{1}{2}$. Etter en slik måling vil systemet være i den egentilstanden som svarer til den målte verdien av L_z . Måler vi f.eks $L_z = 2\hbar$, etterlates systemet i egentilstanden

$$\Phi_{2\hbar} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{2i\phi}.$$

c. Ved direkte innsetting finner vi at

$$S_y \chi_{\pm \hat{y}} = \frac{1}{2} \hbar \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} = \dots = \pm \frac{1}{2} \hbar \chi_{\pm \hat{y}}.$$

De to spinorene $\chi_{\pm\hat{y}}$ er altså egentilstander til S_y med egenverdiene $\pm\frac{1}{2}\hbar$.

Når tilstanden før målingen av S_x er $\chi_{\hat{y}}$, så er sannsynlighetsamplituden for å måle $S_x = \frac{1}{2}\hbar$ og etterlate spinnets i tilstanden $\chi_{\hat{x}}$ gitt ved skalarproduktet (eller projeksjonen)

$$\chi_{\hat{x}}^\dagger \chi_{\hat{y}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1 + i).$$

Sannsynligheten er altså

$$|\frac{1}{2}(1 + i)|^2 = \frac{1}{4}(1 + 1) = \frac{1}{2}.$$