Løsningsskisse

Eksamen i SIF4045 Kvantemekanikk 10.05.02

Oppgave 1

a) Schrödingerlikningen i intervallet $(0, L)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi,$$

med grensebetingelse $\psi(0) = 0$ har løsning

$$\psi(x) = C\sin(x\sqrt{2mE/\hbar^2}).$$

Grensebetingelsen $\psi(L) = 0$ gir

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\, n^2, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Grunntilstanden for $n = 1$,

$$E_{\mathrm{g}}(0) = \underline{\underline{\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}}},$$

tilsvarer egenfunksjonen

$$\psi_g(x) = C\sin(\pi x/L) = \underline{\underline{\sqrt{2/L}\ \sin(\pi x/L)}} \qquad \text{for } 0 \le x \le L$$

etter normering. Utenfor intervallet $(0, L)$ er $\psi_g = 0$.

For $V_0 = +\infty$ har det tilgjengelige området utstrekning $L/2$ i stedet for L. Ved å erstatte L med $L/2$ i uttrykket for grunntilstandsenergien får vi

$$E_{\mathrm{g}}(+\infty) = 4E_1 = \underline{\underline{4\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}}},$$

b) Vi kan forskyve energiskalaen med beløpet V_0 slik at potensiell energi i venstre halvdel av potensialboksen er $-V_0$ og i høyre halvdel lik null. Når V_0 er stor og negativ har vi da samme situasjon som i siste spørsmål i a), slik at når $V_0 \to -\infty$ vil

$$E_{\mathrm{g}} - V_0 \to 4\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}.$$

Altså

$$E_{\mathrm{g}}(V_0 \text{ stor og negativ}) \approx V_0 + 4E_1 = \underline{\underline{V_0 + 4\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}}}.$$

c) Som læreboka.

d) Vi skal se på virkningen av en svak konstant potensiell energi lik V_0 i intervallet $(L/2, L)$. Med grunntilstanden som vi fant i punkt a) får vi til første orden

$$E_{\rm g} = E_1 + \int_{L/2}^{L} V_0 \frac{2}{L} \sin^2(\pi x/L)\, dx = E_1 + V_0\, \frac{2}{L}\, \frac{L}{4} = \underline{\underline{E_1 + \frac{1}{2} V_0}}.$$

Av det oppgitte uttrykket for andreordensbidraget ser vi at i summen er tellerne alltid positive og nevnerne $E_n - E_k$ alltid negative når n er grunntilstanden. Altså er andreordensbidraget $\propto V_0^2$ alltid negativt.

e) Når energiegenverdien er lik V_0 er Schrödingerlikningen i intervallet $(L/2, L)$ lik

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

Løsningen er en rett linje. Fordi $\psi(L) = 0$ er linjen av formen

$$\psi(x) = D(L - x) \qquad \text{for } L/2 \le x \le L,$$

med en ukjent konstant D. I venstre intervall er, som i punkt a,

$$\psi(x) = C\sin(kx), \text{ der } k = \sqrt{2mE/\hbar^2}.$$

I punktet $x = L/2$ skjøter vi både bølgefunksjonen og dens deriverte. Det gir de to likningene

$$\begin{aligned} C\sin(kL/2) &= DL/2 \\ Ck\cos(kL/2) &= -D \end{aligned}$$

Ved å sette inn D fra siste likning i den første får vi, etter divisjon med C,

$$\sin(kL/2) = -(kL/2)\cos(kL/2), \qquad \text{eller } \tan\kappa = -\kappa$$

der $\kappa = kL/2$. Med ovenstående sammenheng mellom k og energien får vi

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \underline{\underline{\frac{2\hbar^2\kappa^2}{mL^2}}}.$$

Med den oppgitte løsning av den transcendente likningen for κ får vi energien

$$E_{\rm g} = \left(\frac{2\kappa}{\pi}\right)^2 E_1 \simeq \left(\frac{2 \cdot 2.0288}{\pi}\right)^2 E_1 = 1.668 E_1$$

Vi skisserer $E_{\mathrm{g}}(V_0)$ ved å bruke $x = V_0/E_1$ som abscisse og $y = E_g$ som ordinat. Vi vet følgende om $y = y(x)$:

- $y(0) = 1$
- Linjen $y = 1 + \frac{1}{2}x$ er tangent til funksjonen i $x = 0$, og nær tangering ligger funksjonen $y(x)$ *under* tangenten.
- $y(1.668) = 1.688$.
- $y = 4$ er asymptote for store positive x.
- $y = x + 4$ er asymptote for store negative x.

Oppgave 2

a) Vi har

$$P_{k\to j} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \langle j|\widehat{V}(\vec{r},\tau)|k\rangle \, e^{i(E_j - E_k)\tau/\hbar} \, d\tau \right|^2 .$$

Siden vi skal ta absoluttkvadratet får vi det samme om vi tar den kompleks-konjugerte av integranden:

$$P_{k\to j} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \langle j|\widehat{V}(\vec{r},\tau)|k\rangle^* \, e^{-i(E_j - E_k)\tau/\hbar} \, d\tau \right|^2 .$$

Vi har

$$\langle j|\widehat{V}|k\rangle^* = \langle k|\widehat{V}^\dagger|j\rangle,$$

der $\widehat{V}^\dagger$ er den adjungerte operator til $\widehat{V}$. Da fysiske operatorer er selvadjungerte er $\widehat{V}^\dagger = \widehat{V}$. Innsetting gir påstanden

$$P_{k\to j} = P_{j\to k}.$$

b) Vi må beregne

$$P_{100\to 2\ell m} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 2\ell m|\widehat{V}|100\rangle \, e^{i(E_2-E_1)\tau/\hbar} \, d\tau \right|^2 .$$

Vi starter med å se på matriseelementet av $\widehat{V}$,

$$\langle 2\ell m|\widehat{V}|100\rangle = \int \psi^*_{2\ell m} \, \widehat{V} \psi_{100} \, d^3r.$$

Ved å se på vinkeldelen av bølgefunksjonene kan vi raskt se at enkelte overgangssannsynligheter er null. Da $\widehat{V}$ er proporsjonal med $z = r\cos\vartheta$ vil vinkeldelen av $\widehat{V}\psi_{100}$ være

$$\cos\vartheta \propto Y_{10}.$$

Siden $\psi_{n\ell m}$ er proporsjonal med $Y_{\ell m}$, og Y_{10} er ortogonal på alle andre $Y_{\ell m}$, får vi null for $\ell \neq 1$ og $m \neq 0$. Altså har bare overgangen $|100\rangle \to |210\rangle$ sannsynlighet forskjellig fra null. (Alternativt kunne vi først se på φ-integrasjonen som umiddelbart gir $m = 0$, slik at bare alternativet $|210\rangle$ gjenstår. Så er det bare å sjekke at $\langle|\widehat{V}|100\rangle$ ikke er null.)

For å beregne overgangssannsynligheten for denne trenger vi matriseelementet

$$\begin{aligned}
\langle 210|\widehat{V}(\vec{r},\tau)|100\rangle &= -e\mathcal{E}_0 e^{-\tau^2/T^2} \int \psi^*_{210} \, r \, \cos\vartheta \, \psi_{100} \, d^3r \\
&= -e\mathcal{E}_0 e^{-\tau^2/T^2} \frac{1}{\sqrt{32}\,\pi a_0^4} \int_0^\infty r^2 e^{-3r/(2a_0)} \, r^2 \, dr \cdot 2\pi \cdot \int_0^\pi \cos^2\vartheta \, \sin\vartheta d\vartheta \\
&= -e\mathcal{E}_0 e^{-\tau^2/T^2} \frac{1}{\sqrt{32}\,\pi a_0^4} \cdot 4!(2a_0/3)^5 \cdot 2\pi \cdot \frac{2}{3} \\
&= -e\mathcal{E}_0 a_0 \, 2^{\frac{15}{2}} \, 3^{-5} \, e^{-\tau^2/T^2}
\end{aligned}$$

Integrasjonen over τ gjenstår. Vi trenger

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\tau^2/T^2} e^{i(E_2-E_1)\tau/\hbar} \, d\tau = \sqrt{\pi T^2} e^{-(E_2-E_1)^2 T^2/(4\hbar^2)} = T\sqrt{\pi} e^{-(3\hbar T/16 m a_0^2)^2},$$

når $E_n = -\hbar^2/(2ma_0^2 n^2)$ innsettes.

Alt i alt får vi

$$P_{1s\to 2p} = \underline{\underline{2^{15} 3^{-10} \pi \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0 T}{\hbar}\right)^2 e^{-2(3\hbar T/16 m a_0^2)^2}}}.$$

Oppgave 3

a)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{antall partikler ut i romvinkelen } d\Omega \text{ pr. tidsenhet}}{d\Omega \cdot \text{innfallende partikkelstrøm}}.$$

b) Innsetting av det oppgitte potensial i uttrykket for spredningsamplituden, og innføring av ny integrasjonsvariabel $x = qr$, gir

$$f = -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2}\int_0^R \frac{4\pi}{q}\sin(qr)\, r\, dr = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3}\int_0^{qR} x\sin x\; dx = -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3}[\sin(qR) - qR\cos(qR)]$$

Det differensielle spredningstverrsnittet er da

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \underline{\underline{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3}\right)^2 [\sin(qR) - qR\cos(qR)]^2}},$$

der $q = 2k\sin(\vartheta/2)$. De tre første (tripletten) er symmetriske i ombytte av 1 og 2, den siste (singletten) er antisymmetrisk.

c) Bornapproksimasjonen ventes være en god tilnærmelse når forstyrrelsen av den innfallende stråle er beskjeden. Det vil være tilfelle når energien er høy nok, eller når potensialet er svakt nok.

Oppgave 4

a)

$$j = 1 \text{ eller } 0.$$

På venstre side setter vi egentilstandene $|j, m\rangle$ for total dreieimpuls, på høyre side produkttilstandene for de to komponentdreieimpulsene, med nr. 1 først. Vi har

$$\begin{aligned}
|1,1\rangle &= |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1\, |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_2 \\
|1,-1\rangle &= |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_1\, |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_2 \\
|1,0\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1\, |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_2 + |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_1\, |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_2\right) \\
|0,0\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_1\, |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_2 - |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_1\, |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_2\right)
\end{aligned}$$

b) Spinn-$\frac{1}{2}$-partikler er fermioner, og topartikkel-tilstandene må derfor være antisymmetriske i ombyttet $1 \leftrightarrow 2$. En antisymmetrisk spinntilstand må derfor kombineres med en symmetrisk romtilstand, og vice versa. Romtilstanden for topartikkelsystemet med lavest energi $E = 2E_1$ er

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\,\psi_1(\vec{r}_2),$$

en symmetrisk funksjon. Denne må derfor kombineres med den ene antisymmetriske spinnfunksjonen ($j = 0$, en singlett).

Romtilstander med nest lavest energi $E = E_1 + E_2 = 5E_1$ er

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) + \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) \right] \text{ (symmetrisk)}$$

og

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) \right] \text{ (antisymmetrisk).}$$

Det er ialt fire tilstander for topartikkelsystemet med denne energien, 3 med antisymmetrisk romfunksjon og symmetrisk spinntilstand og 1 med symmetrisk romfunksjon og antisymmetrisk spinnfunksjon.

Romtilstanden med tredje laveste energi $E = E_2 + E_2 = 8E_1$ er den symmetriske funksjonen

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_2(\vec{r}_1)\, \psi_2(\vec{r}_2),$$

Denne må kombineres med den ene antisymmetriske spinnfunksjonen.

Lavest energi er altså $\underline{\underline{2E_1}}$ med degenerasjonsgrad 1, nestlavest energi er $\underline{\underline{5E_1}}$ med degenerasjonsgrad 4, og den tredje laveste energi er $\underline{\underline{8E_1}}$ med degenerasjongrad 1.