Løsningsforslag
Eksamen 9. desember 2006
TFY4250 Atom- og molekylfysikk /FY2045 Kvantefysikk

Oppgave 1

a. •Grunntilstanden $\psi_1(x)$ har ingen nullpunkter. Første eksiterte tilstand $\psi_2(x)$ har ett nullpunkt. •Når potensialet er endelig som her, må alle energiegenfunksjoner $\psi(x)$ være kontinuerlige, og det samme gjelder den deriverte, $\psi'(x) = d\psi(x)/dx$, og dermed også den "logaritmisk deriverte", ψ'/ψ.

•For $0 < x < L$ har den tidsuavhengige Schrödingerligningen for 1. eksiterte tilstand $\psi_2(x)$ formen

$$\psi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E_2]\psi_2 = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi_2 = -\frac{1}{a_0^2}\,\psi_2.$$

Innsetting av $\psi_2 = A\sin[k_2(x-a)]$ gir $\psi_2'' = -k_2^2\psi_2$, dvs

$$k_2 = \frac{1}{a_0}.$$

b. •For $x < 0$ og $E = E_2 = V_0$ tar den tidsuavhengige Schrödingerligningen formen

$$\psi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E_2]\psi_2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\,\psi_2 = k_2^2\,\psi_2,$$

med den generelle løsningen $\psi_2 = Ce^{k_2 x} + De^{-k_2 x}$. Her må koeffisienten D settes lik null for å gi en akseptabel løsning:

$$\psi_2(x) = Ce^{k_2 x} \qquad \text{for} \quad x < 0, \quad \text{q.e.d.}$$

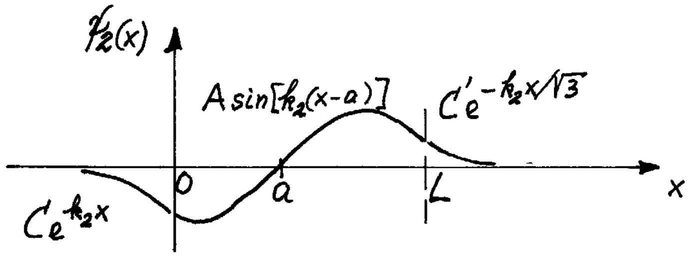
For $x > L$ har vi tilsvarende

$$\psi_2'' = \frac{2m\cdot 3V_0}{\hbar^2}\psi_2 = (k_2\sqrt{3})^2\psi_2.$$

Den akseptable løsningen er her

$$\psi_2(x) = C'e^{-\sqrt{3}\,k_2 x} \qquad \text{for} \quad x > L.$$

•Vi ser her at ψ_2 ikke har nullpunkter hverken for $x < 0$ eller $x > L$, så det eneste nullpunktet ($x = a$) må ligge i intervallet $0 < a < L$. Skissen blir da omtrent slik:



c. •Det enkleste er her å bruke kontinuiteten av den logaritmisk deriverte, ψ'/ψ. For $x < 0$ er

$$\frac{\psi_2'}{\psi_2} = \frac{(Ce^{k_2 x})'}{Ce^{k_2 x}} = k_2 \qquad (\text{for} \quad x < 0).$$

For $0 < x < L$ er

$$\frac{\psi_2'}{\psi_2} = \frac{(A\sin[k_2(x-a)])'}{A\sin[k_2(x-a)]} = k_2\cot[k_2(x-a)].$$

Kontinuiteten for $x = 0$ gir da

$$\cot[k_2(-a)] = 1, \qquad \text{dvs.} \quad \tan k_2 a = -1, \qquad \text{dvs.} \quad k_2 a = \arctan(-1) = -\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \cdots.$$

Fra skissen ovenfor ser vi at fasebeløpet $k_2 a$ må ligge mellom $\frac{1}{2}\pi$ og π. Løsningen er altså

$$k_2 a = \frac{3}{4}\pi, \quad \text{q.e.d.}$$

•Det er vel nå klart at vi kan finne fasebeløpet $k_2(L-a)$ på tilsvarende måte, ved å bruke kontinuiteten for $x = L$. For $x > L$ er

$$\frac{\psi_2'}{\psi_2} = \frac{(C'e^{-\sqrt{3}\,k_2 x})'}{C'e^{-\sqrt{3}\,k_2 x}} = -k_2\sqrt{3} \qquad (\text{for} \quad x > L).$$

Kontinuiteten for $x = L$ gir da

$$k_2\cot[k_2(L-a)] = -k_2\sqrt{3}, \qquad \text{dvs.} \qquad \tan[k_2(L-a)] = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad \Longrightarrow$$

$$k_2(L-a) = \arctan(-1/\sqrt{3}) = -\frac{\pi}{6}, \frac{5\pi}{6}, \cdots.$$

Fra skissen skjønner vi da at fasebeløpet $k_2(L-a)$ må være $5\pi/6$. Dermed har vi

$$k_2 L = k_2 a + k_2(L-a) = \frac{3\pi}{4} + \frac{5\pi}{6} = \frac{19\pi}{12}, \qquad \text{dvs.} \quad L = \frac{19\pi}{12 k_2} = \frac{19\pi}{12}\, a_0 \approx 5a_0.$$

d. •Sannsynlighetstrømtettheten er

$$\begin{aligned} j(x) &= \Re\mathrm{e}\left[\psi_E^* \frac{\hbar}{im}\frac{\partial\psi_E}{\partial x}\right] = \Re\mathrm{e}\left[\left(e^{-ikx} + r^* e^{ikx}\right)\frac{\hbar}{im}\cdot ik\left(e^{ikx} - re^{-ikx}\right)\right] \\ &= \frac{\hbar k}{m}\left(1 - |r|^2\right) + \frac{\hbar k}{m}\Re\mathrm{e}[\underbrace{r^* e^{2ikx} - re^{-2ikx}}_{2i\Im\mathrm{m}(r^* e^{2ikx})}] = \frac{\hbar k}{m}\left(1 - |r|^2\right), \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

•For $2V_0 < E < 4V_0$ har den akseptable løsningen av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen formen

$$\psi_E(x) = Ce^{-\kappa x}, \quad \text{med } \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(4V_0 - E)}, \qquad \text{for } x > L.$$

Denne svarer til en strømtetthet

$$j(x) = \Re\mathrm{e}\left[C^* e^{-\kappa x}\frac{\hbar}{im}(-\kappa)Ce^{-\kappa x}\right] = \Re\mathrm{e}\left[i\frac{\hbar\kappa}{m}|C|^2 e^{-2\kappa x}\right] = 0.$$

Da $j(x)$ er uavhengig av x for den stasjonære éndimensjonale løsningen $\Psi_E(x,t) = \psi_E(x)e^{-iEt/\hbar}$, må vi altså ha $|r|^2 = 1$. Sannsynligheten for refleksjon (refleksjonskoeffisienten) er derfor

$$R = |r|^2 = 1, \quad \text{q.e.d.}$$

e. Den transmitterte strømtettheten er

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

Med en innkommende strømtetthet $j_i = \hbar k/m$ blir da transmisjonskoeffisienten

$$T = \frac{j_t}{j_i} = |t|^2\frac{k'}{k}.$$

Når E går mot $4V_0$ ovenfra, vil $k' = \sqrt{2m(E-4V_0)}/\hbar$ gå mot null, mens både k, q og $|t|$ har endelige verdier. Følgelig går sannsynligheten for transmisjon mot null i denne grensen:

$$\lim_{E\to 4V_0} T = 0.$$

Oppgave 2

a. Siden $V(r) = 0$ for $0 < r < a$, og med $l = 0$, forenkler radialligningen for funksjonen $u_{nl}(r) \equiv rR_{nl}(r)$ (se formelarket) seg til et éndimensjonalt boks-problem:

$$u'' = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}\,u \equiv -k^2 u \qquad \left(E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}, \qquad 0 < r < a\right).$$

Den generelle løsningen er

$$u(r) = A\sin kr + B\cos kr.$$

Kravet $u(0) = 0$ gir $B = 0$. Siden $V(r) = \infty$ for $r \geq a$, må vi ha $u(a) = 0$, som gir

$$u(r) = A\sin ka = 0, \quad \text{dvs.} \quad k_n a = \pi n; \quad n = 1, 2, \cdots.$$

Energiegenverdiene for $l = 0$ blir altså

$$E_{n0} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu} = \frac{(\hbar\pi n)^2}{2\mu a^2}, \quad \text{q.e.d.}$$

De tilhørende unormerte løsningene for radialfunksjonene blir

$$R_{n0}(r) = \frac{u_{n0}(r)}{r} = \frac{A'\sin k_n r}{r} = A'\,\frac{\sin(\pi n r/a)}{r}; \qquad (l = 0); \qquad n = 1, 2, \cdots.$$

i overensstemmelse med formlene i oppgaveteksten.

b. •Fra oppgaveteksten følger det at vi har én radialfunksjon $R_{nl}(r)$ for hvert nullpunkt $\Pi_n^{(l)}$ i Bessel-funksjonene. [Det er dette nullpunktet i j_l som sørger for at $R_{nl}(r) \propto j_l(\Pi_n^{(l)} r/a)$ blir lik null for $r = a$.] Da den tilhørende energien er proporsjonal med $[\Pi_n^{(l)}]^2$, svarer 1. eksiterte nivå til den nest laveste nullpunktsverdien i tabellen:

$$\Pi_1^{(1)} = 4.4934 \quad \Longrightarrow \quad E_{n=1,l=1} = \frac{(\hbar\cdot 4.4934)^2}{2\mu a^2}.$$

Andre eksiterte nivå svarer til den "neste" nullpunktsverdien:

$$\Pi_1^{(2)} = 5.7635 \quad \Longrightarrow \quad E_{n=1,l=2} = \frac{(\hbar \cdot 5.7635)^2}{2\mu a^2}.$$

•Første eksiterte nivå har altså $n = 1$ og $l = 1$, slik at de mulige magnetiske kvantetallene er $m = 0, \pm 1$. Degenerasjonsgraden er da $g = 3$. Radialfunksjonen er $R_{11}(r) = Aj_1(4.4934\, r/a)$. De tre energiegenfunksjonene for 1. eksiterte nivå er dermed

$$\psi_{n=1,l=1,m} = Aj_1(4.4934\, r/a) Y_{1m}(\theta, \phi), \qquad m = -1, 0, +1.$$

[Kommentar: For den kulesymmetriske boksen spiller det ingen rolle hvordan vi legger det kartesiske aksekorset, bare vi legger origo i kulesentret.]
•Fra den oppgitte, "éndimensjonale" radialligningen for $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ vet vi at energien for en gitt l er strengt stigende for økende antall nullpunkter i intervallet $0 < r < a$ (dvs for økende radialkvantetall n_r). Den laveste energien for en gitt l har vi da for $n_r = 0$. Samtidig ser vi fra den oppgitte tabellen at energien for en gitt l (deriblant $l = 0, 1$ og 2) er lavest for $n = 1$. Siden radialfunksjonene både for grunntilstanden og 1. og 2. eksiterte nivå har $n = 1$, kan vi konkludere med at ingen av disse radialfunksjonene har nullpunkter i intervallet $0 < r < a$ $(n_r = 0$; minimal krumning).

<u>**c.**</u> •La oss velge z-aksen normalt på den sirkelformede "grunnflaten" i den halvsirkelformede boksen, med origo i sentrum, slik at denne boksen blir rotasjonssymmetrisk mhp z-aksen. Da vil alle egenfunksjonene ψ_{nlm} for den kuleformede boksen oppfylle egenverdiligningene for $\hat{H}$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ og $\hat{L}_z$ inne i boksen. De er også lik null på halvkuleflaten $r = a$. Da gjenstår det bare å kreve at $\psi = 0$ for $\theta = \frac{1}{2}\pi$, som svarer til den nevnte "grunnflaten". Dette kravet oppfylles *ikke* av s-bølgene $\psi_{n,l=0,m=0}$. De neste kandidatene til bølgefunksjon for grunntilstanden blir da ifølge tabellen i oppgaveteksten løsningene for $l = 1$, og $n = 1$, som er proporsjonale med vinkelfunksjonene Y_{1m}. Av disse er det bare $Y_{10} \propto \cos\theta$ som er lik null for $\theta = \frac{1}{2}\pi$. Følgelig er bølgefunksjonen og energien for grunntilstanden for den halvkuleformede boksen

$$\psi_{n=1,l=1,m=0} = Aj_1(4.4934\, r/a)\, \cos\theta \qquad \text{og} \qquad E_{n=1,l=1} = \frac{(\hbar \cdot 4.4934)^2}{2\mu a^2}.$$

•Fra tabellen i oppgaveteksten ser vi at den første kandidaten til 1. eksiterte nivå for den halvkuleformede boksen er nivået for $n = 1$ og $l = 2$. Av de fem vinkelfunksjonene Y_{2m} er det bare $Y_{2,\pm 1} = \mp\sqrt{15/(8\pi)}\, \sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$ som er lik null for $\theta = \frac{1}{2}\pi$. Vi kan altså konkludere med at energien og de to tilhørende energiegenfunksjonene for 1. eksiterte nivå er

$$E_{n=1,l=2} = \frac{(\hbar \cdot 5.7635)^2}{2\mu a^2} \qquad \text{og} \qquad \psi_{n=1,l=2,m=\pm 1} = Aj_2(5.7635\, r/a)\, \sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}.$$

Oppgave 3

<u>**a.**</u> •Med $S_z\chi_+ = \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\chi_+$ og $S_z\chi_- = -\frac{1}{2}\hbar\chi_-$, og med $\hat{H} = \omega S_z$ er det lett å se at $\chi_\pm$ er energiegentilstander:

$$\hat{H}\chi_\pm = \omega S_z \chi_\pm = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\omega\, \chi_\pm.$$

Energiegenverdiene er altså

$$E_{\pm} = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\omega = \pm\tfrac{1}{2}gB\,\frac{e\hbar}{2m_p}.$$

•For et B-felt på 4 Tesla blir de to energiene

$$E_{\pm} = \pm\tfrac{1}{2}gB\,\frac{e\hbar}{2m_p} = \pm\tfrac{1}{2}gB\cdot 1 \text{ kjernemagneton} \approx \pm\tfrac{1}{2}\cdot 5.59\cdot 4\cdot 3.15\cdot 10^{-8}\text{ eV} \approx \pm 3.52\cdot 10^{-7}\text{ eV}.$$

•Ved overganger mellom de to tilstandene utveksles det da fotoner med energi $h\nu = E_+ - E_- = 7.04\cdot 10^{-7}$ eV, som svarer til en bølgelengde

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} \approx \frac{4.136\cdot 10^{-15}\text{ eVs}\cdot 2.998\cdot 10^{8}\text{ m/s}}{7.04\cdot 10^{-7}\text{ eV}} \approx 1.76\text{ m}.$$

<u>b.</u> •Ifølge målepostulatet skal en måling av S_x gi en av egenverdiene til S_x og etterlate spinnet i den tilhørende egentilstanden. Da må vi kontrollere at den oppgitte tilstanden virkelig er en egentilstand til S_x:

$$S_x\chi(0) = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \text{q.e.d.}$$

Måleresultatet er altså $S_x = +\frac{1}{2}\hbar$.

•Med $a = b = 1/\sqrt{2}$ finner vi fra den oppgitte formelen at spinnretningen og forventningsverdien av $\mathbf{S}$ ved $t = 0$ er

$$\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle_0 = \hat{\mathbf{e}}_x \qquad \text{og} \qquad \langle\,\mathbf{S}\,\rangle_0 = \hat{\mathbf{e}}_x\cdot\tfrac{1}{2}\hbar.$$

•Fra den generelle formelen for tidsutviklingen av forventningsverdier finner vi at

$$\frac{d}{dt}\langle\,S_z\,\rangle_t = \frac{i}{\hbar}\left\langle\,[\hat{H}, S_z]\,\right\rangle = \frac{i\omega}{\hbar}\langle\,[S_z, S_z]\,\rangle = 0.$$

Følgelig er forventningsverdien av S_z konstant:

$$\langle\,S_z\,\rangle_t = \langle\,S_z\,\rangle_0 = 0 \qquad (\text{og} \quad \langle\,\sigma_z\,\rangle_t = 0).$$

<u>c.</u> •Fra dreieimpulsalgebraen og den generelle formelen for tidsutviklingen av forventningsverdier finner vi at

$$\frac{d}{dt}\langle\,S_x\,\rangle_t = \frac{i\omega}{\hbar}\langle\,[S_z, S_x]\,\rangle_t = -\omega\,\langle\,S_y\,\rangle_t \qquad \text{og} \qquad \frac{d}{dt}\langle\,S_y\,\rangle_t = \frac{i\omega}{\hbar}\langle\,[S_z, S_y]\,\rangle_t = \omega\,\langle\,S_x\,\rangle_t\,.$$

Herav følger at

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle\,S_x\,\rangle_t = -\omega\,\frac{d}{dt}\langle\,S_y\,\rangle_t = -\omega^2\langle\,S_x\,\rangle_t\,,$$

med generell løsning

$$\langle\,S_x\,\rangle_t = A\sin\omega t + B\cos\omega t \qquad \text{og} \qquad \langle\,S_y\,\rangle_t = -\frac{1}{\omega}\frac{d}{dt}\langle\,S_x\,\rangle_t = -A\cos\omega t + B\sin\omega t.$$

Innsetting for $t = 0$ gir

$$\tfrac{1}{2}\hbar = B \qquad \text{og} \qquad 0 = -A,$$

slik at løsningen er

$$\langle\, S_x \,\rangle_t = \tfrac{1}{2}\hbar\cos\omega t \qquad \text{og} \qquad \langle\, S_y \,\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar\sin\omega t.$$

Det vi ser her er at forventningsverdien $\langle\, \mathbf{S} \,\rangle_t$ og dermed spinnretningen $\langle\, \boldsymbol{\sigma} \,\rangle_t$ preseserer omkring z-aksen, i henhold til formelen

$$\frac{d}{dt}\langle\, \mathbf{S} \,\rangle_t = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{S}.$$