Løsningsforslag
Eksamen 7. august 2006
TFY4250 Atom- og molekylfysikk

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, $\psi'(x) = d\psi(x)/dx$.

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

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

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

$$k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV_0}.$$

b. •For $x > L$ er $V(x) = 2V_0$, og den tidsuavhengige Schrödingerligningen tar formen

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

Den generelle løsningen er

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + \cancel{D}e^{k_2x} \qquad (x > L),$$

hvor koeffisienten D må settes lik null fordi ψ_2 skal være normerbar.
•For $x < 0$ er $V(x) = 5V_0$, og vi har tilsvarende

$$\psi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E_2]\psi_2 = \frac{8mV_0}{\hbar^2}\,\psi_2 = (2k_2)^2\psi_2.$$

Den generelle løsningen er

$$\psi_2(x) = C'e^{2k_2x} + \cancel{D}'e^{-2k_2x} \qquad (x < 0),$$

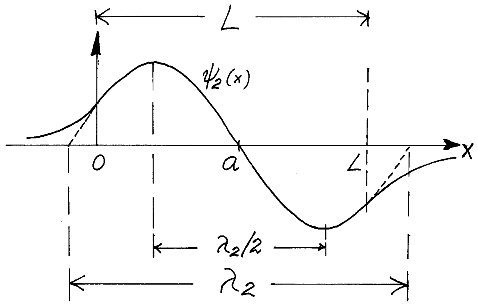
hvor koeffisienten D' må settes lik null fordi ψ_2 skal være normerbar.

•For $x > L$ er $|\psi_2(x)| = |C|\exp(-k_2x)$ jevnt avtagende mot null for når x går mot uendelig. Funksjonen kan derfor ikke ha noe nullpunkt i dette området. [Kommentar: Det samme gjelder for alle bundne energiegentilstander i et potensial som dette.] Tilsvarende for $x < 0$. Følgelig må nullpunktet for energiegentilstanden $\psi_2(x)$ ligge i brønnområdet. [Kommentar: Det samme gjelder for alle bundne energiegentilstander i et potensial som dette.]

c. •Fra resultatene ovenfor finner vi de "relative helningene"

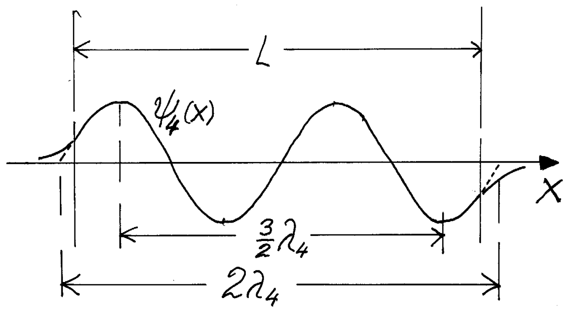
$$\frac{\psi_2'}{\psi_2} = -k_2 \quad \text{for } x > L \qquad \text{og} \qquad \frac{\psi_2'}{\psi_2} = 2k_2 \quad \text{for } x < 0, \quad \text{q.e.d.}$$

•Etter dette blir prinsippskissen av $\psi_2(x)$ omtrent som følger:



•Nullpunktet ($x = a$) ligger litt til høyre for midten av brønnen, slik at origo ligger nærmere "venstre" nullpunkt for sinusen enn punktet $x = L$ ligger i forhold til "høyre" nullpunkt for sinusen. Dette fordi den relative helningen skal være dobbelt så stor i origo som for $x = L$.

<u>d.</u> • Prinsippskissen av en eventuell bunden tilstand $\psi_4(x)$ med tre nullpunkter er som følger:



Fra denne ser vi at

$$\frac{3}{2}\lambda_4 < L < 2\lambda_4.$$

•Siden $(3/2)\lambda_4 < L$ og $L < \lambda_2$, har vi at $(3/2)\lambda_4 < \lambda_2$, dvs at en øvre skranke for λ_4/λ_2 er 2/3:

$$\frac{\lambda_4}{\lambda_2} < \frac{2}{3}.$$

Den tilsvarende nedre skranken for k_4/k_2 er da 3/2, som svarer til at

$$\frac{E_4}{E_2} = \frac{k_4^2}{k_2^2} > (3/2)^2 = 9/4, \qquad \text{dvs.} \qquad E_4 > \frac{9}{4}E_2 = \frac{9}{4}V_0.$$

Men en tilstand med energi større enn brønndybden $2V_0$ kan ikke være bundet. Det eksisterer altså ingen 3.-eksiterte bunden tilstand (med 3 nullpunkter).

Oppgave 2

<u>a.</u> •Egenverdiligningen $\hat{H}^{\text{long}}\Phi(\phi) = E^{\text{long}}\Phi(\phi)$ tar formen

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -\frac{2\mu r_0^2 E^{\text{long}}}{\hbar^2}\Phi \equiv -\nu^2\Phi \qquad \left(E^{\text{long}} = \frac{\hbar^2\nu^2}{2\mu r_0^2}\right).$$

Den generelle løsningen av denne er

$$\Phi = A\sin\nu\phi + B\cos\nu\phi.$$

Kontinuitetsbetingelsene $\Phi(0)=0$ og $\Phi(\pi)=0$ gir hhvis $B=0$ og

$$\sin\nu\pi=0, \qquad \text{som oppfylles av } \nu=m=1,2,3,\cdots.$$

De longitudinale energiegenverdiene og de tilhørende egenfunksjonene er altså

$$E_m^{\text{long}}=\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}\,m^2; \qquad \Phi_m(\phi)=A\sin m\phi; \qquad m=1,2,3,\cdots, \quad \text{q.e.d.}$$

•For et rett rør har vi en ordinær éndimensjonal boks med lengde $L=\pi r_0$. Bølgefunksjoner på formen $A\sin kx$ og kvantiseringsbetingelsen $kL=n\pi$ gir da

$$k_n=\frac{n\pi}{L}=\frac{n}{r_0} \qquad \text{og} \qquad E_n^{\text{long}}=\frac{\hbar^2k_n^2}{2\mu}=\frac{\hbar^2n^2}{2\mu r_0^2}, \qquad n=1,2,3,\cdots,$$

som er samme resultat som ovenfor. [Hamilton-operatoren $\hat{H}^{\text{long}}$ oppgitt i oppgaven innebærer altså at vi egentlig ikke tar hensyn til krumningen av røret. Dette er en god tilnærmelse så lenge krumningsradien er mye større enn tverrsnittsdimensjonen.]

b. •Om vi kaller de to transversale bevegelsesretningene for y- og z-retningene, kan vi nå bruke energiegenfunksjoner på produktform,

$$\psi=\Phi(\phi)\sin k_yy\,\sin k_zz,$$

med kvantiseringsbetingelsene $k_yL=n_y\pi$ og $k_zL=n_z\pi$, der $L=\pi r_0/100$. De to retningene bidrar da til den totale energien med beløpene

$$E^{(y)}=\frac{\hbar^2k_y^2}{2\mu}=\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}(100n_y)^2 \qquad \text{og} \qquad E^{(z)}=\frac{\hbar^2k_z^2}{2\mu}=\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}(100n_z)^2.$$

Den totale energien for disse energiegentilstandene blir dermed

$$E_{m,n_y,n_z}=\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}\left[m^2+(100n_y)^2+(100n_z)^2\right], \quad m=1,2,\cdots, \quad n_y=1,2,\cdots, \quad n_z=1,2,\cdots.$$

•Ifølge Pauli-prinsippet er det plass til to spinn-$\frac{1}{2}$-partikler (med spinn hhvis opp og ned) i hver romlig energiegentilstand. De 10 fermionene vil derfor i grunntilstanden okkupere de romlige tilstandene med de 5 laveste energiene. Energiformelen ovenfor viser at dette er tilstandene med $n_y=n_z=1$ og $m=1,2,3,4$ og 5. Den høyeste én-partikkel-energien er altså

$$E_{\max}=\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}(25+100^2+100^2)=\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}\cdot 20025.$$

c. •For den sirkulære boksen: Grunntilstanden (lavest energi) svarer til den laveste nullpunktsverdien i tabellen, som opptrer for $m=0$ (dvs $L_z=0$) og $n=1$:

$$E_1^{(0)}=\frac{(\hbar\Pi_1^{(0)})^2}{2\mu r_0^2}=\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}\cdot 2.4048^2=\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}\cdot 5.783.$$

Den tilhørende energiegenfunksjonen er

$$\psi_1^{(0)}=A_1^{(0)}J_0(2.4048r/r_0).$$

1. eksiterte nivå svarer til den nest laveste nullpunktsverdien, som er $\Pi_1^{(1)} = 3.8317$ for $n = 1$ og $m = \pm 1$:

$$E_1^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \cdot 3.8317^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \cdot 14.68.$$

Til dette energinivået hører det to egenfunksjoner:

$$\psi_1^{(\pm 1)} = A_1^{(1)} J_1(3.8317 r/r_0) e^{\pm i\phi}.$$

•Randkravene for den halvsirkelformede boksen er at ψ skal være lik null for $r = r_0$ og for ϕ lik null og π. Det første kravet oppfylles av alle løsningene for den sirkulære boksen. Det andre kravet (for ϕ lik null og π) oppfylles ikke av disse funksjonene (siden $|e^{im\phi}| = 1$). Dette ekskluderer energinivåene for $m = 0$, da vi for hvert av disse har bare én løsning. For hvert av de andre nivåene har vi derimot to løsninger, som går som $e^{\pm i|m|\phi}$. Av disse kan vi danne lineærkombinasjonen $(e^{i|m|\phi} - e^{-i|m|\phi})/i = 2\sin|m|\phi$. Og denne *oppfyller* randkravet. For boksen til høyre har vi altså for hvert av energinivåene (som følger av tabellen, for $m = 1, 2, \cdots$) én energiegenfunksjon:

$$\psi_n^{(m)} \propto (\psi_n^{(m)} - \psi_n^{(-m)})/i \propto J_m(\Pi_n^{(m)} r/r_0) \sin m\phi, \qquad m = 1, 2, \cdots.$$

Grunntilstanden finner vi da for $m = 1$ og $n = 1$ ($\Pi_1^{(1)} = 3.8317$), og energien er identisk med energien for 1. eksiterte nivå for den sirkulære boksen.

Oppgave 3

a. •Vi har at

$$\chi^\dagger \chi = \tfrac{1}{2}(1 + |e^{i\alpha}|^2) = 1,$$

så tilstanden χ er normert. •Sannsynligheten for å måle $S_z = \frac{1}{2}\hbar$ er kvadratet av projeksjonen av χ på χ_+, dvs kvadratet av øvre komponent i spinoren χ, altså $P_+ = \frac{1}{2}$. Tilsvarende finner vi at $P_- = \frac{1}{2}$, slik at de to sannsynlighetene til sammen er lik 1.

•En serie av målinger av S_z vil gi en eksperimentell bekreftelse av disse to sannsynlighetene, men gir som vi ser ingen informasjon om vinkelen α. •En måling av S_z vil etterlate spinnet i den egentilstanden som svarer til den målte egenverdien, altså i tilstanden χ_+ dersom vi måler $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$, osv.

b. • For Pauli-spinoren $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ er $a = 1$, $b = 0$ og $2a^* b = 0$, slik at spinnretningen ifølge de oppgitte formlene blir

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\chi_+} = \hat{\mathbf{e}}_x \langle \sigma_x \rangle + \hat{\mathbf{e}}_y \langle \sigma_y \rangle + \hat{\mathbf{e}}_z \langle \sigma_z \rangle = \hat{\mathbf{e}}_z,$$

i overensstemmelse med betegnelsen "spinn opp". Tilsvarende finner vi for Pauli-spinoren χ_- at

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\chi_-} = -\hat{\mathbf{e}}_z \qquad (\text{"spinn ned"}).$$

•For den oppgitte tilstanden

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad \text{med} \quad a = 1/\sqrt{2}, \quad b = e^{i\alpha}/\sqrt{2}$$

har vi at

$$|b|^2 = |a|^2 = \tfrac{1}{2} \quad \text{og} \quad 2a^*b = e^{i\alpha}.$$

Med de oppgitte formlene finner vi at spinnretningen for denne er

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \hat{\mathbf{e}}_x \langle \sigma_x \rangle + \hat{\mathbf{e}}_y \langle \sigma_y \rangle + \hat{\mathbf{e}}_z \langle \sigma_z \rangle = \hat{\mathbf{e}}_x \cos\alpha + \hat{\mathbf{e}}_y \sin\alpha.$$

Denne retningsvektoren ligger som vi ser i xy-planet og danner vinkelen α med x-aksen.
•En serie målinger av S_z vil bekrefte at $\langle S_z \rangle$ og dermed også $\langle \sigma_z \rangle$ er lik null, dvs at $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ må peke i en eller annen retning i xy-planet. Men vinkelen α bestemmes ikke ved målingen av S_z. Ved å preparere ensemblet i tilstanden χ igjen og så måle S_x vil vi få bekreftet at $\langle \sigma_x \rangle = \cos\alpha$. Ved å preparere enda en gang og så måle S_y kan vi få en bekreftelse på at $\langle \sigma_y \rangle = \sin\alpha$, altså en fullstendig bekreftelse på den beregnede spinnretningen $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$. (Dette er én måte å gjøre det på.)

<u>c.</u> •Forventningsverdien av komponenten $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \mathbf{S}$ av spinnet er lett å regne ut:

$$\langle \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \mathbf{S} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \mathbf{S} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \tfrac{1}{2}\hbar \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \tfrac{1}{2}\hbar,$$

idet $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ er en vektor med lengde 1.

•Hver enkelt måling av komponenten $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \mathbf{S}$ av spinnet vil i prinsippet

(i) <u>enten</u> gi $+\frac{1}{2}\hbar$ og etterlate spinnet i en egentilstand til operatoren $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \mathbf{S}$ med egenverdi $+\frac{1}{2}\hbar$ ("spinn opp" i forhold til retningen $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$)

(ii) <u>eller</u> gi $-\frac{1}{2}\hbar$ og etterlate spinnet i en egentilstand til operatoren $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \mathbf{S}$ med egenverdi $-\frac{1}{2}\hbar$ ("spinn ned" i forhold til retningen $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$).

Siden forventningsverdien av $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \mathbf{S}$ ble funnet å være $+\frac{1}{2}\hbar$ for den aktuelle tilstanden, ser vi at sannsynligheten for tilfelle (ii) er nødt å være lik null. Konklusjonen er at tilstanden χ som vi måler på må være en egentilstand til operatoren $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \mathbf{S}$ med egenverdien $\frac{1}{2}\hbar$.

•Forventningsverdiene av σ_x, σ_y og σ_z for tilstanden $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ finner vi slik:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_x \rangle &= \chi^\dagger \sigma_x \chi = \begin{pmatrix} a^* & b^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^* & b^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} \\ &= a^*b + ab^* = \Re\mathrm{e}(2a^*b), \end{aligned}$$

osv.