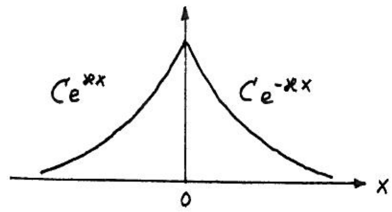
Løsningsforslag
Eksamen 1. desember 2008
TFY4250 Atom- og molekylfysikk/FY2045 Kvantefysikk

Oppgave 1

a. • For $x \neq 0$ og $E = -E_B < 0$ har den tidsuavhengige Schrödingerligningen formen

$$\psi'' = \frac{2mE_B}{\hbar^2}\,\psi \equiv \kappa^2\,\psi, \qquad \text{med} \qquad \kappa = \sqrt{2mE_B/\hbar^2}.$$

Denne har løsningene $e^{\pm\kappa x}$. For $x > 0$ må en energiegenfunksjon da ha formen $\psi = Ce^{-\kappa x}$. For $x < 0$ må vi tilsvarende ha $\psi = C'e^{-\kappa x}$, der C' må settes lik C for å gi en kontinuerlig løsning.



Diskontinuitetsbetingelsen i origo gir da

$$\left.\frac{\psi'}{\psi}\right|_{0+} - \left.\frac{\psi'}{\psi}\right|_{0-} = -\kappa - \kappa = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}, \qquad \text{dvs} \quad \kappa = \frac{m\beta}{\hbar^2}.$$

Dermed blir energien entydig gitt ved

$$E = -E_B = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}.$$

Vi har altså bare én bundet tilstand, med bindingsenergeien $E_B = m\beta^2/(2\hbar^2)$.

b. •Innsetting i den tidsuavhengige Schrödingerligningen gir

$$-\frac{2mE}{\hbar^2}\,\psi_I = \psi_I'' = -k^2\psi_I.$$

Vi har altså

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \text{og} \qquad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}.$$

•Ved innsetting for $x < 0$ finner vi sannsynlighets-strømtettheten

$$\begin{aligned} j_I &= \Re\mathrm{e}\left[\psi_I^*\,\frac{\hbar}{im}\,\frac{d\psi_I}{dx}\right] = \Re\mathrm{e}\left[(e^{-ikx} + B^*e^{ikx})\frac{\hbar k}{m}(e^{ikx} - Be^{-ikx})\right] \\ &= \frac{\hbar k}{m}\Re\mathrm{e}\left[1 - |B|^2 + B^*e^{2ikx} - Be^{-2ikx}\right] \\ &= \frac{\hbar k}{m} - |B|^2\frac{\hbar k}{m}, \end{aligned}$$

idet de to siste leddene i parentesen tilsammen er $2i\Im m(B^* e^{2ikx})$. Sannsynlighetsstrømtettheten til venstre for origo har altså formen

$$j_I = j_i + j_r = j_i - |j_r|, \qquad \text{med} \quad j_i = \frac{\hbar k}{m} \qquad \text{og} \qquad j_r = -|B|^2 \frac{\hbar k}{m}.$$

Her er j_i og j_r sannsynlighets-strømtetthetene som kan assosieres med henholdsvis den innkommende bølgen ψ_i og den reflekterte bølgen ψ_r.

•For $x > 0$ skal energiegenfunksjonen ha formen Ce^{ikx}. Løsningen e^{-ikx} skal ikke være med, fordi den svarer til partikler som kommer inn mot brønnen fra høyre, og det skal vi jo ikke ha i dette spredningstilfellet.

c. •Refleksjonskoeffisienten (sannsynligheten for refleksjon) er forholdet mellom den reflekterte strømmen og den innkommende,

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} = |B|^2 = \frac{1}{1 + \frac{\hbar^4 k^2}{m^2 \beta^2}} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\beta^2}} = \frac{1}{1 + E/E_B},$$

der $E_B = m\beta^2/(2\hbar^2)$ er bindingsenergien funnet i pkt. a. Refleksjonskoeffisienten er 25 % for

$$E = 3E_B = \frac{3m\beta^2}{2\hbar^2}.$$

•Med $\psi_t = Ce^{ikx}$ (for $x > 0$) gir kontinuiteten (av ψ) og diskontinuitetsbetingelsen for ψ' de to betingelsene

$$1 + B = C$$

og

$$ik - ik\frac{1-B}{1+B} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}, \quad \text{dvs} \quad -\frac{2m\beta}{\hbar^2 ik} = 1 - \frac{1-B}{1+B} = \frac{2B}{1+B}.$$

Ved å løse den siste med hensyn på B finner vi

$$B = -\frac{1}{1 + i\frac{\hbar^2 k}{m\beta}}, \quad \text{q.e.d.}$$

Oppgave 2

a. •Med $H = \omega S_z$ er energiegentilstandene identiske med Pauli-spinorene $\chi_\pm$. Egenverdiene bestemmes av

$$H\chi_\pm = \omega S_z \chi_\pm = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\omega\, \chi_\pm \equiv E_\pm\, \chi_\pm, \qquad \Longrightarrow \qquad E_\pm = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\omega.$$

De stasjonære tilstandene er da $\chi_\pm(t) = \chi_\pm \exp(-iE_\pm t/\hbar)$, dvs

$$\chi_+(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \qquad \text{og} \qquad \chi_-(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega t/2},$$

der den siste er grunntilstanden.

•Vi merker oss at $a^* b$ er lik null for begge de to stasjonære tilstandene. Spinnretningen er da $\langle \sigma \rangle = \hat{\mathbf{e}}_z(|a|^2 - |b|^2)$, som er lik $\hat{\mathbf{e}}_z$ for χ_+ og lik $-\hat{\mathbf{e}}_z$ for χ_-, slik det skal være for "spinn opp" og "spinn ned". Disse er tidsuavhengige, slik det selvsagt skal være for stasjonære tilstander.

•Fordi "Schrödingerligningen" gitt i oppgaveteksten er lineær og homogen, følger det fra superposisjonsprinsippet at en lineærkombinasjon av de to stasjonære løsningene, med konstante komplekse koeffisienter, $\chi(t) = a_0\chi_+(t) + b_0\chi_-(t)$, også oppfyller denne ligningen, og dermed representerer en akseptabel fysisisk tilstand.

•Dette er samtidig den mest generelle tilstanden vi kan ha, fordi de to stasjonære løsningene (ev. de to Pauli-spinorene) danner en basis.

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

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

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

•Med $a_0 = 1/\sqrt{2}$ og $b_0 = i/\sqrt{2}$ finner vi at $2a_0^*b_0 = i$. Den oppgitte formelen gir da for spinnretningen ved $t = 0$:

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_0 = \hat{\mathbf{e}}_x \Re\mathrm{e}(2a_0^*b_0) + \hat{\mathbf{e}}_y \Im\mathrm{m}(2a_0^*b_0) + \hat{\mathbf{e}}_z (|a_0|^2 - |b_0|^2) = \hat{\mathbf{e}}_y,$$

som harmonerer med den målte verdien av S_y.

•Med den oppgitte begynnelsestilstanden blir tilstanden ved tiden t en lineærkombinasjon av de stasjonære løsningene, med $a_0 = 1/\sqrt{2}$ og $b_0 = i/\sqrt{2}$:

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} (1/\sqrt{2})e^{-i\omega t/2} \\ (i/\sqrt{2})e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}.$$

Ved tiden t er altså $2a^*(t)b(t) = ie^{i\omega t}$, som er lik -1 for $t = \pi/(2\omega)$ og lik $-i$ for $t = \pi/\omega$. Innsetting i den oppgitte formelen

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \hat{\mathbf{e}}_x \Re\mathrm{e}(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_y \Im\mathrm{m}(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_z (|a|^2 - |b|^2)$$

gir da

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{t=\pi/2\omega} = -\hat{\mathbf{e}}_x \qquad \text{og} \qquad \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{t=\pi/\omega} = -\hat{\mathbf{e}}_y.$$

Spinnretningen har altså ved tidene $t = \pi/(2\omega)$ og $t = \pi/\omega$ rotert henholdsvis 90 og 180 grader. Dette stemmer med at spinnretningen i et slikt tilfelle vil presesere med vinkelfrekvensen ω, dvs med en periode $T = 2\pi/\omega$.

Oppgave 3

a. •Fra trekant-ulikheten følger det at kvantetallet s kan ha verdiene $s = 0$ (med $m = 0$), $s = 1$ (med $m = 0, \pm 1$) og $s = 2$ (med $m = 0, \pm 1, \pm 2$), altså tilsammen 9 tilstander.

•De "nye" tilstandene $|s, m\rangle$ kan skrives som lineærkombinasjoner av de "gamle" $|m_1\rangle|m_2\rangle$ fordi også de sistnevnte danner en (9-dimensjonal) basis for dette systemet.

•Tilstanden $|1_1\rangle|1_2\rangle$ er en egentilstand til $\widehat{S}_z = \widehat{S}_{1z} + \widehat{S}_{2z}$ med kvantatallet $m = m_1 + m_2 = 1 + 1 = 2$. Bevis:

$$\begin{aligned}\widehat{S}_z|1_1\rangle|1_2\rangle &= (\widehat{S}_{1z} + \widehat{S}_{2z})|1_1\rangle|1_2\rangle = (\widehat{S}_{1z}|1_1\rangle)|1_2\rangle + |1_1\rangle(\widehat{S}_{2z}|1_2\rangle) \\ &= \hbar|1_1\rangle|1_2\rangle + |1_1\rangle\hbar|1_2\rangle = 2\hbar\,|1_1\rangle|1_2\rangle, \quad \text{q.e.d.}\end{aligned}$$

•Tilstanden $|2,2\rangle$ kan som nevnt i prinsippet skrives som en lineærkombinasjon av "gamle" tilstander, som da må ha $m = 2$. Siden $|1_1\rangle|1_2\rangle$ er den eneste gamle med $m = 2$, må da

$$|2,2\rangle = |1_1\rangle|1_2\rangle.$$

Tilsvarende er $|-1_1\rangle|-1_2\rangle$ den eneste gamle med $m = -2$. Derfor er

$$|2,-2\rangle = |-1_1\rangle|-1_2\rangle.$$

<u>b.</u> •Fra de oppgitte stigeoperator-formlene følger det at

$$\begin{aligned}|2,1\rangle &= \frac{1}{2\hbar}\widehat{S}_-|2,2\rangle = \frac{1}{2\hbar}(\widehat{S}_{1-} + \widehat{S}_{2-})|1_1\rangle|1_2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1_1\rangle|0_2\rangle + |0_1\rangle|1_2\rangle\,), \quad \text{q.e.d..}\end{aligned}$$

•Fra formelarket har vi at $\widehat{S}_-|2,1\rangle = \hbar\sqrt{6}\,|2,0\rangle$. Vi kan da finne det midterste "trinnet i stigen" for $s = 2$ slik:

$$\begin{aligned}|2,0\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{6}}(\widehat{S}_{1-} + \widehat{S}_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}(\,|0_1\rangle|1_2\rangle + |1_1\rangle|0_2\rangle\,) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}(\,|-1_1\rangle|1_2\rangle + |0_1\rangle|0_2\rangle + |0_1\rangle|0_2\rangle + |1_1\rangle|-1_2\rangle\,) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}(\,|1_1\rangle|-1_2\rangle + 2|0_1\rangle|0_2\rangle + |-1_1\rangle|1_2\rangle\,), \quad \text{q.e.d.}\end{aligned}$$

•Utviklingskoeffisientene i denne formelen, som generelt kalles Clebsch–Gordan-koeffisienter, er sannsynlighetsamplitudene for at en måling av S_{1z} og S_{2z} vil gi henholdsvis $S_{1z} = -S_{2z} = \hbar$, $S_{1z} = S_{2z} = 0$ eller $S_{1z} = -S_{2z} = -\hbar$, når systemet før målingen er preparert i tilstanden $|2,0\rangle$. Sannsynlighetene er kvadratene av disse amplitudene. Vi merker oss at S_{1z} og S_{2z} begge er uskarpe i tilstanden $|2,0\rangle$.

<u>c.</u> •Fra formelarket har vi at $\widehat{S}_-|1,1\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|1,0\rangle$. Vi finner da

$$\begin{aligned}|1,0\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(\widehat{S}_{1-} + \widehat{S}_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1_1\rangle|0_2\rangle - |0_1\rangle|1_2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1_1\rangle|-1_2\rangle + |0_1\rangle|0_2\rangle - |-1_1\rangle|1_2\rangle - |0_1\rangle|0_2\rangle\,) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1_1\rangle|-1_2\rangle - |-1_1\rangle|1_2\rangle\,), \quad \text{q.e.d.}\end{aligned}$$

•Singletten

$$|0,0\rangle = a\,|1_1\rangle|-1_2\rangle + b\,|0_1\rangle|0_2\rangle + c\,|-1_1\rangle|1_2\rangle$$

skal være ortogonal på både

$$|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(\,|1_1\rangle|-1_2\rangle + 2|0_1\rangle|0_2\rangle + |-1_1\rangle|1_2\rangle\,) \quad \text{og}$$
$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1_1\rangle|-1_2\rangle - |-1_1\rangle|1_2\rangle\,).$$

Dette gir de to betingelsene

$$\sqrt{\frac{1}{6}}\,a + 2\sqrt{\frac{1}{6}}\,b + \sqrt{\frac{1}{6}}\,c = 0 \qquad \text{og} \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\,a - \frac{1}{\sqrt{2}}\,c = 0,$$

som gir

$$c = a \qquad \text{og} \qquad b = -a.$$

Normeringen krever at $1 = |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 3|a|^2$. Med et passende fasevalg er da singletten

$$|0,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}(\,|1_1\rangle|-1_2\rangle - |0_1\rangle|0_2\rangle + |-1_1\rangle|1_2\rangle\,).$$

Oppgave 4

a. •Med $V(t) = -ze\mathcal{E}_0\exp(-t^2/\tau^2)$ blir overgangsamplituden ved $t = +\infty$ til første orden i perturbasjonen

$$\begin{aligned} a_{i\to f} &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(i\omega_{fi}t)\langle\psi_f|V(t)|\psi_i\rangle dt \\ &= -\frac{e\mathcal{E}_0\,a_0}{i\hbar}\int\psi_f^*\,(z/a_0)\,\psi_i\,d^3r\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-t^2/\tau^2 + i\omega_{fi}t)dt \\ &= -\frac{e\mathcal{E}_0\,a_0}{i\hbar}\sqrt{\pi\,\tau^2}\,\exp(-\omega_{fi}^2\tau^2/4)\int\psi_f^*\,(z/a_0)\,\psi_i\,d^3r. \end{aligned}$$

Her er integralet dimensjonsløst, og det må da også faktoren foran være. Kvadrering gir overgangssannsynligheten

$$P_{i\to f} = f(\tau)\left|\int\psi_f^*\,(z/a_0)\,\psi_i\,d^3r\right|^2,$$

med

$$f(\tau) = \pi\left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar}\right)^2\tau^2\,\exp(-\omega_{fi}^2\tau^2/2).$$

•Med $z = r\cos\theta = r\sqrt{3/(4\pi)}\,Y_{10}$ er matrise-elementene

$$\langle\psi_f|z/a_0|\psi_i\rangle = \frac{1}{a_0}\sqrt{\frac{3}{4\pi}\frac{1}{\pi a_0^3}}\int_0^{\infty}R_{nl}(r)\exp(-r/a_0)r^3dr\int Y_{lm}^*Y_{10}d\Omega \propto \delta_{l1}\delta_{m0}.$$

Til første orden er altså overgangssannsynlighetene lik null unntatt for slutt-tilstander med $l = 1$ og $m = 0$, dvs vi har $\Delta l = 1$ og $\Delta m = 0$ (i overensstemmelse med utvalgsreglene).

<u>b.</u> •For en gitt overgang $i \longrightarrow f$, og for fastholdt $\mathcal{E}_0$, er overgangssannsynligheten $P_{i\to f}$ maksimal når

$$\frac{\partial P_{i\to f}/\partial t}{P_{i\to f}} = \frac{\exp(-\omega_{fi}^2\tau^2/2)[2\tau + \tau^2(-\tau\omega_{fi}^2)]}{\tau^2\exp(-\omega_{fi}^2\tau^2/2)} = 0,$$

dvs for

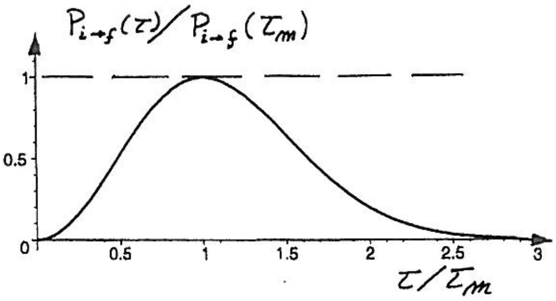
$$\tau = \frac{\sqrt{2}}{\omega_{fi}} \equiv \tau_m.$$

Sammenlignet med den naturlige perioden $T_{fi} = 2\pi/\omega_{fi}$ for overgangen $i \longrightarrow f$ ser vi at "varigheten" $2\tau_m$ er en brøkdel $\sqrt{2}/\pi \approx 0.45$ av denne perioden.

•Vi har

$$\frac{P_{i\to f}(\tau)}{P_{i\to f}(\tau_m)} = \frac{f(\tau)}{f(\tau_m)} = (\tau/\tau_m)^2\,\exp[1-(\tau/\tau_m)^2],$$

som har sitt maksimum (lik 1) for $\tau = \tau_m$ og avtar raskt både når τ minker mot null og når τ vokser fra τ_m og oppover.



Vi ser at $P_{i\to f}(\tau)$ går mot null (som τ^2/τ_m^2) når $\tau \to 0$. Dette kan vi kalle den "plutselige" tilnærmelsen: For tilstrekkelig kort "varighet" av perturbasjonen blir overgangssannsynligheten neglisjerbar. (Hva som er "tilstrekkelig" her vil avhenge av $\mathcal{E}_0$.) Vi ser også at når τ vokser og blir mye større enn τ_m, så går $P_{i\to f}(\tau)$ mot null svært raskt. Dette kan vi kalle den adiabatiske tilnærmelsen: For en tilstrekkelig langsomtvarierende perturbasjon er overgangssannsynligheten neglisjerbar.

<u>c.</u> •Problemet med resultatet

$$P_{100\to 210}(\tau) = P_{100\to 210}(\tau_m)\,\frac{f(\tau)}{f(\tau_m)} \approx 9.12\,(\tau/\tau_m)^2\exp[1-(\tau/\tau_m)^2]$$

er at P overstiger 1 i et område omkring τ_m. Dette er selvsagt umulig. Sannsynligheten for overgang kan aldri bli større enn 1. Resultatet er utledet vha 1.-ordens perturbasjonsteori, og denne er faktisk bare gyldig så lenge summen av alle overgangs-sannsynlighetene er mye *mindre* enn 1. Det ser vi fra den eksakte formelen for amplituden for å finne systemet i tilstanden ψ_f, som oppfyller det koblede ligningssettet

$$a_f(t) = \delta_{fi} + \sum_n \int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{fn}t'}V_{fn}(t')a_n(t')dt'.$$

Første-ordens-formelen i oppgaveteksten (for $t_0 = -\infty$ og $t = \infty$) bygger på tilnærmelsen $a_n(t') = a_n(-\infty) = \delta_{ni}$, og denne tilnærmelsen er jo god bare så lenge sannsynligheten for å finne systemet i den opprinnelige tilstanden er tilnærmet lik 1.