Løsningsforslag
Eksamen 19. august 2005
TFY4250 Atom- og molekylfysikk

Oppgave 1

a. For det oppgitte, symmetriske brønnpotensialet er bundne energiegentilstander enten symmetriske eller antisymmetriske mhp origo, $\psi(-x) = \pm\psi(x)$. Grunntilstanden er symmetrisk, og fri for nullpunkter. Dersom det eksisterer flere bundne tilstander, er 1. eksiterte tilstand antisymmetrisk, med ett nullpunkt. 2. eksiterte tilstand er symmetrisk med to nullpunkter. 3. eksiterte er antisymmetrisk med tre nullpunkter, osv. For de bundne energiegentilstandene er degenerasjonsgraden lik 1; det er bare én energiegenfunksjon pr energinivå.

For de *ubundne* energinivåene for dette potensialet, dvs for hver energi $E > V_0$, har vi to uavhengige energiegenfunksjoner, dvs degenerasjonsgrad 2.

Siden potensialet er symmetrisk, *går det an* (for $E > V_0$) å finne to energiegenfunksjoner med veldefinert partitet, én symmetrisk og én antisymmetrisk. Men, asymmetriske lineærkombinasjoner av disse vil også være energiegenfunksjoner. Så svaret er nei; energiegenfunksjoner for $E > V_0$ behøver ikke å ha veldefinert paritet.

For et endelig éndimensjonalt potensial $V(x)$, som i denne oppgaven, er alle energiegenfunksjoner $\psi(x)$ kontinuerlige, og det samme gjelder den deriverte, $d\psi/dx$. Energiegenfunksjonene er altså kontinuerlige og glatte.

b. Fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi = E\psi,$$

finner vi ved innsetting av $\psi_a = A\cos q_a x$ for $0 < x < l$ at energien for tilstanden ψ_a må være

$$E_a = V(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_a/\partial x^2}{\psi_a} = 0 - \frac{\hbar^2}{2m}\cdot(-q_a^2) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2}\cdot\frac{169}{36}, \quad \text{q.e.d.}$$

Den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for området $-l < x < 0$, $\psi_a'' = -q^2\psi_a$, er

$$\psi_a = A'\cos q_a x + B'\sin q_a x.$$

I origo skal denne skal gå glatt og kontinuerlig over i kosinusløsningen $A\cos q_a x$ for $0 < x < l$. Da er det vel ikke rart at vi må ha $A' = A$ og $B' = 0$, slik at formelen blir den samme på begge sider av origo. Rent teknisk følger dette fra kontinuitetsbetingelsene, som gir

$$\psi(0-) = \psi(0+) \quad\Longrightarrow\quad A' = A;$$

$$\psi'(0-) = \psi'(0+) \quad\Longrightarrow\quad q_a B' = 0, \quad \text{dvs.} \quad B' = 0, \quad \text{q.e.d.}$$

c. For den bundne tilstanden ψ_a er energien E_a mindre enn potensialet V_0 for $x > l$. Den tidsuavhengige Schrödingerligningen tar da formen

$$\psi_a'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E_a]\psi_a \equiv \kappa^2\psi_a, \qquad \text{med} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E_a)}.$$

Denne har den generelle løsningen

$$\psi_a = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}.$$

Her må D settes lik null for å gi en akseptabel løsning. For $x > l$ har vi altså

$$\psi_a = Ce^{-\kappa x}, \quad \psi_a' = -\kappa Ce^{-\kappa x} \quad \text{og} \quad \psi_a'/\psi_a = -\kappa.$$

For $-l < x < l$ har vi tilsvarende

$$\psi_a'/\psi_a = \frac{-q_a A \sin q_a x}{A \cos q_a x} = -q_a \tan q_a x.$$

Kontinuitet av ψ'/ψ for $x = l$ krever da at

$$\kappa = q_a \tan q_a l = q_a \tan 13\pi/6 = q_a \tan \pi/6 = \frac{q_a}{\sqrt{3}}.$$

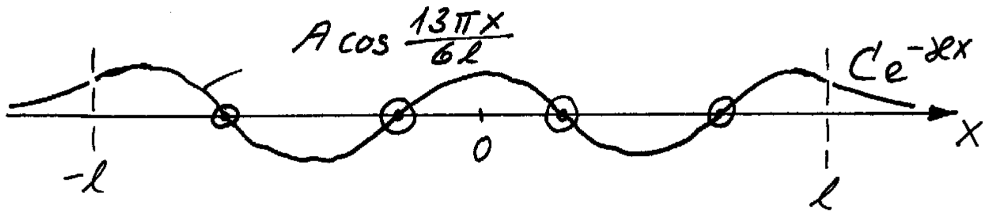
Innsetting i formelen for κ gir da

$$\frac{\kappa}{q_a} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E_a)/\hbar^2}{2mE_a/\hbar^2}} = \frac{1}{\sqrt{3}}, \qquad \text{dvs.} \quad \frac{V_0 - E_a}{E_a} = \frac{1}{3},$$

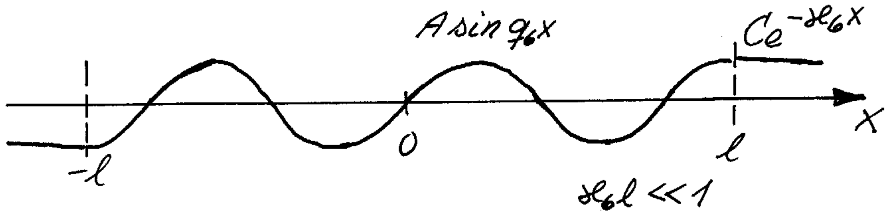
eller

$$V_0 = \frac{4E_a}{3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2} \cdot \frac{169}{27} \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2} \cdot 6.259, \quad \text{q.e.d.}$$

d.



Som indikert i skissen, er energiegenfunksjonen $\psi_a(x)$ symmetrisk, med fire nullpunkter. Dette er da fjerde eksiterte tilstand for dette brønnpotensialet ($\psi_a = \psi_5$). I tillegg vil det finnes en antisymmetrisk tilstand $\psi_4(x)$, med tre nullpunkter. Med større avstand mellom nullpunktene krummer denne langsommere enn $\psi_a = \psi_5$, og har derfor lavere energi ($E_4 < E_a = E_5$). Enda lavere energi E_3 har den symmetriske energiegenfunksjonen ψ_3, som har bare to nullpunkter. Enda lavere energi enn denne har den antisymmetriske tilstanden ψ_2 med ett nullpunkt. Og lavest energi av alle har den symmetriske grunntilstanden, som er fri for nullpunkter og derfor krummer langsomst. Antall energiegentilstander med energi mindre enn E_a er altså fire.



Som indikert i figuren, må brønnen gi plass til mer enn 5 halve bølgelengder dersom det skal eksistere en 6. bundet energiegentilstand, antisymmetrisk og med fem nullpunkter. Vi må altså ha

$$q_6 \cdot 2l > 5\pi.$$

Dette svarer til

$$E_6 = \frac{\hbar^2 q_6^2}{2m} > \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{5\pi}{2l})^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2} \cdot 6.25.$$

Eksistensen av en 6. bundet tilstand krever altså at

$$V_0 > \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2} \cdot 6.25.$$

I pkt. **c** fant vi at V_0 er ørlite grann større enn dette. Følgelig gir dette brønnpoptensialet virkelig plass til en 6. bundet energiegentilstand $\psi_6(x)$. Denne vil være svakt bundet, og det er ikke plass til flere enn disse 6 bundne energiegentilstandene. (En sjuende tilstand ville kreve $q_7 \cdot 2l > 6\pi$, og dette går ikke da det svarer til en energi større enn V_0.)

e. Sannsynlighetene for transmisjon og refleksjon kan beregnes vha strømtetthetene for innkommende bølge ($ae^{ik(x+l)} \equiv \psi_i$), reflektert bølge ($be^{-ik(x+l)} \equiv \psi_r$) og transmittert bølge ($e^{ik(x-l)} \equiv \psi_t$). Disse strømtetthetene er hhvis

$$\begin{aligned}
j_i &= \Re\mathrm{e}\left[\psi_i^* \frac{\hbar}{im}\frac{d\psi_i}{dx}\right] = \Re\mathrm{e}\left[a^* e^{-ik(x+l)}\frac{\hbar}{im}(ik)\, ae^{ik(x+l)}\right] = |a|^2\frac{\hbar k}{m},\\
j_r &= \Re\mathrm{e}\left[b^* e^{ik(x+l)}\frac{\hbar}{im}(-ik)\, be^{-ik(x+l)}\right] = -|b|^2\frac{\hbar k}{m} \quad \text{og}\\
j_t &= \Re\mathrm{e}\left[e^{-ik(x-l)}\frac{\hbar}{im}(ik)\, e^{ik(x-l)}\right] = \frac{\hbar k}{m}.
\end{aligned}$$

Sannsynlighetene for transmisjon og refleksjon er da hhvis

$$T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{1}{|a|^2} \qquad \text{og} \qquad R = \frac{|j_r|}{j_i} = \left|\frac{b}{a}\right|^2.$$

Den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for området $-l < x < l$,

$$\psi_E'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_E \equiv -q^2\psi_E,$$

er

$$\psi_E = A\cos qx + B\sin qx \equiv A'e^{iqx} + B'e^{-iqx}.$$

Uten å beregne koeffisientene kan vi slå fast at denne løsningen er en periodisk funksjon, med periode (bølgelengde) $\lambda = 2\pi/q$. Vi har da

$$\frac{2l}{\lambda} = \frac{2lq}{2\pi} = \frac{6\pi}{2\pi} = 3,$$

dvs intervallet $2l$ svarer til tre hele bølgelengder. Det er vel da åpenbart (fra periodisiteten) at både ψ_E og ψ'_E vil ha samme verdi for $x = -l$ som for $x = l$. Vi har altså (vha kontinuiteten for $x = l$)

$$\psi_E(-l) = \psi_E(l) = 1 \qquad \text{og} \qquad \psi'_E(-l) = \psi'_E(l) = ik.$$

Kontinuiteten for $x = -l$ gir da

$$a + b = 1 \qquad \text{og} \qquad ik(a - b) = ik, \quad \text{dvs.} \qquad a - b = 1.$$

Løsningen er

$$a = 1 \quad \text{og} \quad b = 0, \quad \text{slik at} \quad \psi_E(x) = e^{ik(x+l)} \quad \text{for} \quad x < -l.$$

For den aktuelle energien, som svarer til at $q \cdot 2l = 6\pi$, har vi altså ingen reflektert bølge. Sannsynlighetene for transmisjon og refleksjon er derfor hhvis

$$T = \frac{1}{|a|^2} = 1 \qquad \text{og} \qquad R = \left|\frac{b}{a}\right|^2 = 0.$$

Samme resultat for T og R oppnås åpenbart når $q \cdot 2l = 8\pi,\ 10\pi,\ 12\pi$ osv. Og faktisk også for $q \cdot 2l = 7\pi,\ 9\pi,\ 11\pi$ osv. For de sistnevnte verdiene er $\psi_E(-l) = -\psi_E(l)$ og $\psi'_E(-l) = -\psi'_E(l)$, som gir $a = -1$ og $b = 0$.

Oppgave 2

a. Energiegenfunksjonen for grunntilstanden for boks (i) er

$$\psi^{(i)}_{\text{gr.t.}} = A \sin k_x x \, \sin k_y y \, \sin k_z z, \quad \text{med} \quad k_x \cdot 2a = \pi, \quad k_y \cdot 2a = \pi, \quad k_z \cdot a = \pi.$$

Med

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

finner vi da at

$$\hat{H}\,\psi^{(i)}_{\text{gr.t.}} = \frac{\hbar^2}{2\mu}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\psi^{(i)}_{\text{gr.t.}}.$$

Energiegenverdien er altså

$$E^{(i)}_{\text{gr.t.}} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2\right] = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2} \cdot \frac{3}{2}.$$

For boks (iii), som er trangere, finner vi på tilsvarende måte en noe høyere energi for grunntilstanden:

$$E^{(iii)}_{\text{gr.t.}} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\frac{\pi}{\sqrt{2}\,a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{\sqrt{2}\,a}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{a}\right)^2\right] = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2} \cdot 2.$$

b. Ved innsetting finner vi

$$\hat{L}_z \Phi_m = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\, e^{im\phi} = \hbar m\, \Phi_m,$$

så Φ_m er en egenfunksjon til $\hat{L}_z$ med egenverdi $\hbar m$. Med m heltallig $(0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$ unngår vi et sprang i Φ_m som funksjon av ϕ, og dermed en δ-funksjon i den deriverte. Funksjonen Φ må altså "bite seg selv i halen" for å være en akseptabel egenfunksjon til $\hat{L}_z$.

Egenfunksjoner og egenverdier til $\hat{H}^{(z)} = -(\hbar^2/2\mu)\partial^2/\partial z^2$ er

$$\psi^{(z)}_{n_z}(z) = A \sin\frac{\pi n_z z}{a} \qquad \text{og} \qquad E^{(z)}_{n_z}(z) = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\pi n_z}{a}\right)^2.$$

Innsetting i den tidsuavhengige Schrödingerligningen $(\hat{H} - E)\psi = 0$ gir (med $E = E^{(z)} + \hbar^2 k^2/2\mu$)

$$\begin{aligned} 0 &= \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}_z^2}{2\mu r^2} + \hat{H}^{(z)} - E\right] R^{(m)}(r)\Phi_m(\phi)\psi^{(z)}_{n_z}(z) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2 m^2}{2\mu r^2} - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}\right] R^{(m)}(r)\Phi_m(\phi)\psi^{(z)}_{n_z}(z). \end{aligned}$$

Multiplikasjon med $-2\mu r^2/\hbar^2$ (og divisjon med Φ_m og $\psi^{(z)}_{n_z}$) gir radialligningen

$$\begin{aligned} 0 &= r^2\frac{d^2 R^{(m)}}{dr^2} + r\frac{dR^{(m)}}{dr} + [-m^2 + k^2 r^2]R^{(m)} \\ &= (kr)^2\frac{d^2 R^{(m)}}{d(kr)^2} + kr\frac{dR^{(m)}}{d(kr)} + [(kr)^2 - m^2]R^{(m)}. \end{aligned}$$

c. De akseptable løsningene av radialligningen for en gitt m er $J_{|m|}(kr)$, med ekstrakravet $J_{|m|}(ka) = 0$, siden potensialet er uendelig for $r > a$. Produktet ka må altså være lik et av nullpunktene for Bessel-funksjonen $J_{|m|}$:

$$ka = \Pi^{(m)}_n \quad\Longrightarrow\quad k^{(m)}_n = \Pi^{(m)}_n/a.$$

Energiegenverdiene (-nivåene) er altså

$$E^{(m)}_{nn_z} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\frac{\pi n_z}{a}\right)^2 + \left(\frac{\Pi^{(m)}_n}{a}\right)^2\right] = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}\left[n_z^2 + (\Pi^{(m)}_n/\pi)^2\right],$$

hvor $n_z = 1, 2, \cdots,$ $m = 0, 1, 2, \cdots$ og $n = 1, 2, \cdots$. De tilsvarende energiegenfunksjonene er

$$\psi^{(m)}_{nn_z} \propto J_{|m|}(\Pi^{|m|}_n\, r/a)\, e^{im\phi}\, \sin\frac{n_z\pi z}{a}, \quad (m = \pm|m|).$$

Grunntilstanden svarer til $n_z = 1$ og den laveste av nullpunktsverdiene $\Pi^{(m)}_n$. Denne finner vi for $m = 0$ og $n = 1$:

$$E^{(ii)}_{\text{gr.t.}} = E^{m=0}_{n=1,n_z=1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}\left[1 + (2.4048/\pi)^2\right] = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}\cdot 1.586.$$

Den tilhørende energiegenfunksjonen er

$$\psi_{\text{gr.t.}} \;\propto\; J_0(2.4048\, r/a)\cdot 1\cdot \sin\frac{\pi z}{a}.$$

Vi ser her at $E^{(ii)}_{\text{gr.t.}}$ kommer ut med en verdi som er litt større enn grunntilstandsenergien for boks (i), men mindre enn for boks (iii). Dette er naturlig, da boks (ii) er trangere enn boks (i), men ikke så trang som boks (iii).

d. Fra formelen ovenfor og tabellene i oppgaveteksten framgår det at 1., 2. og 3. eksiterte nivå alle har $n_z = 1$ (altså ingen eksitasjon i z-retningen), mens de øvrige kvantetallene er som følger:

$$\underline{\text{1. eks. nivå:}}\quad n=1,\ m=\pm 1,\quad E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}[1+(3.8317/\pi)^2]=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}\cdot 2.488,$$

(altså "rotasjons-eksitasjon").

$$\underline{\text{2. eks. nivå:}}\quad n=1,\ m=\pm 2,\quad E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}[1+(5.1356/\pi)^2]=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}\cdot 3.672,$$

(mer "rotasjons-eksitasjon").

$$\underline{\text{3. eks. nivå:}}\quad n=2,\ m=0,\quad E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}[1+(5.5201/\pi)^2]=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}\cdot 4.087,$$

(eksitasjon bare radielt). For 1. og 2. eksiterte nivå er degenerasjonsgraden lik 2, siden m kan ha begge fortegn. For 3. eksiterte nivå er $g = 1$; vi har bare én tilstand, med $m = 0$.