Løsningsforslag
Eksamen 4. august 2008
TFY4250 Atom- og molekylfysikk

Oppgave 1

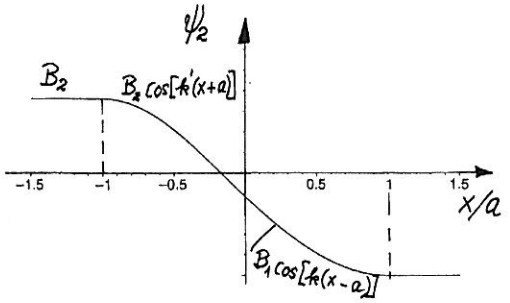
a. •I områdene $x < -a$ og $x > a$ har vi (med $E_2 = 2V_0$) at

$$\psi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E_2]\psi_2 = 0.$$

ψ_2 må derfor være lineær i disse områdene, med formen $A_i x + B_i$. Da ψ_2 er en energiegenfunksjon, tillates den ikke å divergere. Derfor må konstantene A_i settes lik null, slik at vi i disse områddene har

$$\psi_2 = \begin{cases} B_1 & \text{for} \quad x > a, \\ B_2 & \text{for} \quad x < -a. \end{cases}$$

•I brønnområdene følger det fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at ψ_2 er sinusformet, med bølgetall $k = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$ for $0 < x < a$ og $k' = \sqrt{2m \cdot 2V_0/\hbar^2} = k\sqrt{2}$ for $-a < x < 0$. Videre skal første eksiterte tilstand ha ett nullpunkt, og "skjøtene" i $x = -a$ og $x = a$ skal være glatte. Skissen blir da omtrent slik:[1]



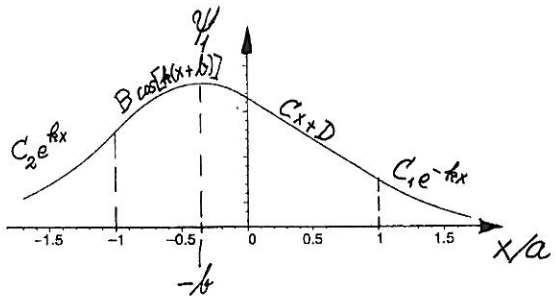
Fordi bølgetallet k' er en faktor $\sqrt{2}$ større enn k, ser vi at nullpunktet må ligge til venstre for origo.

b. •For $E_1 = V_0$ blir grunntilstanden ψ_1 sinusformet med bølgetall $k = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$ i området $-a < x < 0$. I dette området kan vi da sette $\psi_1 = B\cos k(x + b)$, hvor posisjonen $-b$ til "topp-punktet" for kosinusen er ukjent. I områdene $|x| > a$ er

$$\psi_1'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E_1]\psi_1 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi_1 = k^2\psi_1,$$

med løsningene $e^{\pm kx}$. For $x > a$ må vi da ha $\psi_1 = C_1 e^{-kx}$ (og $\psi_1'/\psi_1 = -k$). For $x < -a$ må vi tilsvarende ha $\psi_1 = C_2 e^{kx}$ (og $\psi_1'/\psi_1 = k$). Da gjenstår bare området $0 < x < a$, hvor $\psi_1'' = 0$ og $\psi_1 = Cx + D$. Med glatt skjøting i $x = \pm a$ og ingen nullpunkter blir skissen da slik:

[1] Diagrammet viser egentlig en nøyaktig løsning.



c. •Følgende oversikt viser ψ_1, ψ_1' og den logaritmisk deriverte, ψ_1'/ψ_1, i de fire områdene:

	$x<-a$:	$-a<x<0$:	$0<x<a$:	$x>a$:
$\frac{\psi_1'}{\psi_1}$ |	$\frac{kC_2e^{kx}}{C_2e^{kx}}=k$	$\frac{-kB\sin k(x+b)}{B\cos k(x+b)}=-k\tan k(x+b)$	$\frac{C}{Cx+D}$	$\frac{-kC_1e^{-kx}}{C_1e^{-kx}}=-k$

Kontinuitet av den logaritmisk deriverte i punktene $x=-a,\,0$ og a gir da betingelsene

$$k=k\tan k(a-b), \qquad -k\tan kb=\frac{C}{D}, \qquad \frac{C}{Ca+D}=-k.$$

Disse tre ligningene kan brukes til å finne de tre ukjente (C,D,k), og til slutt $V_0=E_1=\hbar^2k^2/(2m)$. [2]

d. •Ut fra skissen vil jeg anslå at fasebeløpet kb er ca $\pi/6$, mens $k(a-b)$ jo er nøyaktig lik $\pi/4$ (ifølge den første betingelsen ovenfor). Følgelig er

$$ka=\pi/4+kb\approx\pi/4+\pi/6=\frac{5}{12}\pi=1.31.$$

Basert på dette overslaget er den V_0-verdien som gir $E_1=V_0$ tilnærmet gitt ved

$$V_0=E_1=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\approx\frac{25\pi^2}{144}\frac{\hbar^2}{2ma^2}\approx1.71\,\frac{\hbar^2}{2ma^2}.$$

[Den nøyaktige verdien, gitt i en fotnote, viser at jeg har overvurdert fasebeløpet kb litt.]

Oppgave 2

a. •Funksjonen ψ_{Nlm} kan generelt skrives som en lineærkombinasjon av funksjoner $\psi_{n_xn_yn_z}$, som alle har paritet $(-1)^{n_x+n_y+n_z}=(-1)^N$. Følgelig er pariteten til ψ_{Nlm} lik $(-1)^N$.

[2]Kommentar: Fra den første betingelsen følger det at $k(a-b)$ er lik $\pi/4$ pluss et helt multiplum av π, slik at $\tan kb=\tan(ka-\pi/4)$. Fra betingelse nr 3 følger det at $C/D=k/(1+ka)$. Ved å kombinere med betingelse nr 2 finner en da at

$$-(1+ka)\tan(ka-\pi/4)=1.$$

Kalkulatoren gir $ka\approx1.2103$, slik at

$$V_0=(1.2103)^2\frac{\hbar^2}{2ma^2}.$$

•Samtidig er pariteten gitt ved

$$\widehat{\mathcal{P}}\psi_{Nlm} = \widehat{\mathcal{P}}R_{Nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi) = R_{Nl}(r)\widehat{\mathcal{P}}Y_{lm} = (-1)^l R_{Nl}Y_{lm} = (-1)^l\psi_{Nlm}.$$

Følgelig må vi ha

$$(-1)^l = (-1)^N,$$

dvs

$$\text{like } N \Longleftrightarrow \text{like } l \quad \text{og} \quad \text{odde } N \Longleftrightarrow \text{odde } l.$$

•Energien

$$E = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2) \equiv \hbar\omega(N + 3/2) \equiv E_N$$

er lavest mulig for $n_x = n_y = n_z = 0$, dvs for $N = 0$, som gir $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$. Grunntilstanden er altså

$$\psi_g = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-m\omega(x^2+y^2+z^2)/2\hbar} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-m\omega r^2/2\hbar}, \quad \text{q.e.d.}$$

•Da dreieimpulsoperatorene $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $\widehat{L}_z$ bare inneholder deriverte med hensyn på vinkler, ser vi at egenverdiene til disse operatorene begge er lik null:

$$\mathbf{L}^2 = \hbar^2 l(l+1) = 0, \quad L_z = \hbar m = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad l = 0, \quad m = 0.$$

<u>b.</u> •Med $|\boldsymbol{\nabla}\psi_g| = |\partial\psi_g/\partial r| = \psi_g \cdot |-m\omega r/\hbar| = (m\omega r/\hbar)\psi_g$ innsatt i formelen for $\langle K \rangle$ har vi

$$\begin{aligned} \langle K \rangle_g &= \frac{\hbar^2}{2m}\int |\boldsymbol{\nabla}\psi_g|^2 d^3r = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\int r^2\psi_g^2\, d^3r \\ &= \tfrac{1}{2}m\omega^2\left\langle r^2 \right\rangle_g \qquad = \langle V \rangle_g, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

•Med $\langle K \rangle_g = \langle V \rangle_g = \frac{1}{2}\langle K+V \rangle_g = \frac{1}{2}E_0 = \frac{3}{4}\hbar\omega$ blir den midlere kvadratiske radien i grunntilstanden

$$\left\langle r^2 \right\rangle_g = \frac{2}{m\omega^2}\langle V \rangle_g = \frac{3\hbar}{2m\omega}.$$

•Kulesymmetrien betyr selvsagt at $\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$. Av samme grunn er $\langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle = 0$, slik at $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle = \langle r^2 \rangle/3$ osv. Fra dette følger det at usikkerhetene i de kartesiske posisjonskoordinatene i grunntilstanden er

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Disse kan vi, i likhet med rms-radien

$$r_{\text{rms}} = \sqrt{\langle r^2 \rangle_g} = \sqrt{\frac{3\hbar}{2m\omega}},$$

bruke som mål for utstrekningen av grunntilstanden.

c. •Ved å sette $t = 0$ i den oppgitte utviklingsformelen har vi

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \psi_b(r) = \sum_{Nlm} c_{Nlm} R_{Nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = \sum_{Nlm} c_{Nlm} \psi_{Nlm}.$$

Koeffisientene c_{Nlm} er da projeksjonene av begynnelsestilstanden ψ_b på de respektive tilstandene ψ_{Nlm}:

$$c_{Nlm} = \langle \psi_{Nlm}, \psi_b \rangle = \int \psi^*_{Nlm} \psi_b(r) d^3r.$$

•Da begynnelsestilstanden $\psi_b(r)$ er en s-bølge ($\propto Y_{00}$), vil vinkelintegralet her gå som $\int Y^*_{lm} Y_{00} d\Omega = \delta_{l0}\delta_{m0}$. Følgelig er $c_{Nlm} = 0$ unntatt for $l = m = 0$; bare s-bølger bidrar i utviklingsformelen. Den ikke-stasjonære bølgefunksjonen $\Psi(\mathbf{r}, t)$ er altså hele tiden kulesymmetrisk:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(r, t) = \sum_{N=0}^{\infty} c_{N00} \psi_{N00}(r) e^{-iE_N t/\hbar}.$$

•Kulesymmetrien innebærer at pariteten er like. Dette utelukker bidrag fra ψ_{N00} med odde N, siden disse har odde paritet.

d. •Den fysiske tolkningen av koeffisienten C_{N00} er at dette er sannsynlighetsamplituden for å måle energien E_N og etterlate systemet i energiegentilstanden $\psi_{N00} = R_{N0}(r)Y_{00}$. Sannsynligheten er kvadratet av denne amplituden.

•Sannsynligheten for å måle energien $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$, dvs for å finne partikkelen i grunntilstanden, er $P_0 = |c_{000}|^2 = |\langle \psi_g, \psi_b \rangle|^2$. Innsetting gir

$$\begin{aligned} c_{000} &= \int_0^\infty \psi^*_g \psi_b d^3r = \left(10\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/2} \int_0^\infty e^{-101\, m\omega r^2/2\hbar} \cdot 4\pi r^2 dr \\ &= 4\pi \left(10\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/2} \cdot \frac{1}{4}\pi^{1/2} \left(\frac{2\hbar}{101\, m\omega}\right)^{3/2} = \left(\frac{2\cdot 10}{101}\right)^{3/2}. \end{aligned}$$

Sannsynligheten for å finne partikkelen i grunntilstanden er altså så liten som

$$P_0 = \left(\frac{2\cdot 10}{101}\right)^3 = 7.76 \cdot 10^{-3}.$$

e. •Vi har sett at bølgefunksjonen er en sum av s-bølger, som alle har N lik et partall:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{N=0,2,..} c_{N00} \psi_{N00}(r) e^{-iE_N t/\hbar}.$$

Ved et tillegg på en halvperiode i tiden har vi

$$e^{-iE_N(t+T/2)/\hbar} = e^{-iE_N t/\hbar}\, e^{-i\omega(N+3/2)\pi/\omega}.$$

Den siste faktoren er (for $N = 0, 2, 4, \cdots$) lik $e^{-iN\pi} \cdot e^{-3i\pi/2} = 1 \cdot i$. Følgelig er

$$\Psi(\mathbf{r}, t + T/2) = i \sum_{N=0,2,..} c_{N00} \psi_{N00}(r) e^{-iE_N t/\hbar} = i\, \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Sannsynlighetstettheten $|\Psi(\mathbf{r}, t + T/2)|^2$ er altså den samme som for tiden t. Sannsynlighetsfordelingen er derfor lik den opprinnelige ved tidspunktene $t = T/2$, T, $3T/2$, $2T$ osv.

f. •Den sterke skvisingen av begynnelsestilstanden innebærer som opplyst en stor "kvantevillskap" i denne tilstanden; partikkelen befinner seg praktisk talt i origo, med neglisjerbar potensiell energi $\langle V \rangle_b$, mens den kinetiske er en faktor 100 større enn i grunntilstanden, slik at forventningsverdien av energien i tilstanden $\Psi(\mathbf{r}, t)$ er

$$\langle E \rangle = \langle E \rangle_b \approx \langle K \rangle_b = 100 \langle K \rangle_g = 75\hbar\omega.$$

Fra et halvklassisk synspunkt vil en partikkel som starter med en slik kinetisk energi nå ganske langt ut før den snur. Derfor må vi vente at sannsynlighetsfordelingen ekspanderer ganske kraftig før den gjenskapes ved $t = T/2$. Vi ser altså for oss en "pulserende" tilstand.

Verdien $\langle E \rangle = 75\,\hbar\omega$ forteller at det er vesentlige bidrag for ganske store kvantetall N i utviklingsformelen for $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Utstrekningen av "orbitalene" som inngår i denne summen er tildels mye større enn for grunntilstanden. For $t = 0, T/2$, osv kansellerer disse bidragene unntatt for små r (siden de summerer til begynnelsestilstanden ψ_b), men for andre tider må vi vente at de *ikke* kansellerer. Derfor må vi vente at utstrekningen av sannsynlighetsfordelingen er vesentlig større enn for grunntilstanden *mellom* de nevnte tidspunktene.

•Med en gitt energi E når partikkelen klassisk ut til en venderadius $r_{\max}$, bestemt av $\frac{1}{2}m\omega^2 r_{\max}^2 = E$, slik at

$$r_{\max}^2 = \frac{2E}{m\omega^2}.$$

Om vi erstatter E med den kvantemekaniske middelverdien, får vi da en slags midlere kvadratisk klassisk max-avstand,

$$\left\langle r_{\max}^2 \right\rangle = \frac{2\langle E \rangle}{m\omega^2} = \frac{150\,\hbar\omega}{m\omega^2} = 100\frac{3\hbar}{2m\omega} = 100 \left\langle r^2 \right\rangle_g^2 = 100\, r_{rms,g}^2.$$

Det er ikke urimelig å tro at roten av denne størrelsen ligger i nærheten av den virkelige, maksimale kvantemekaniske rms-radien. Vårt estimat er altså at denne størrelsesordensmessig er gitt ved

$$r_{\mathrm{rms,max}} \approx 10\, r_{\mathrm{rms,g}} = 100\, r_{\mathrm{rms,b}},$$

altså 10 ganger så stor som i grunntilstanden (og 100 ganger større enn i begynnelsestilstanden).

Oppgave 3

a. •Med

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_+(1)\chi_-(2) + \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_-(1)\chi_+(2)$$

er koeffisientene ($1/\sqrt{2}$ og $1/\sqrt{2}$) sannsynlighetsamplituder. Sannsynligheten for å måle $S_{1z} = \frac{1}{2}\hbar$ og etterlate systemet i tilstanden $\chi_+(1)\chi_-(2)$ er da 1/2. I denne tilstanden er $S_{2z} = -\frac{1}{2}\hbar$, så en samtidig måling av S_{2z} må gi $S_{2z} = -\frac{1}{2}\hbar$.

•Med 50/50 sjanse for å måle S_{1z} lik $+\frac{1}{2}\hbar$ og $-\frac{1}{2}\hbar$ i tilstanden χ blir forventningsverdien

$$\langle S_{1z} \rangle_\chi = 0,$$

og usikkerheten (roten av det midlere kvadratiske avviket fra middelverdien) blir

$$\Delta S_{1z} = \tfrac{1}{2}\hbar.$$

b. •De mulige kvantetallene for dette to-spinn-systemet er

$$\begin{aligned} s = 0 \quad \& \quad m = 0, \qquad & \text{(singlett)} \\ s = 1 \quad \& \quad m = 0, \pm 1. \qquad & \text{(triplett)} \end{aligned}$$

Dette svarer til de mulige måleverdiene

$$\mathbf{S}^2 = \hbar^2 s(s+1) = 0 \quad \text{og} \quad S_z = \hbar m = 0 \quad \text{og}$$

$$\mathbf{S}^2 = 2\hbar^2 \quad \text{og} \quad S_z = 0, \pm\hbar.$$

•Måleverdien for $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ er åpenbart lik null. Én måte å måle S_z på er jo å måle både S_{1z} og S_{2z} og så legge sammen resultatene, og da får vi jo enten $+\frac{1}{2}\hbar + (-\frac{1}{2}\hbar)$ eller $-\frac{1}{2}\hbar + \frac{1}{2}\hbar$. Ellers sier målepostulatet at måleverdien for S_z må være egenverdien (til tilstanden χ etter målingen):

$$\begin{aligned} S_z\chi &= (S_{1z} + S_{2z})\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2)\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{[S_{1z}\chi_+(1)]\chi_-(2) + \chi_+(1)[S_{2z}\chi_-(2)] \;\; + [S_{1z}\chi_-(1)]\chi_+(2) + \chi_-(1)[S_{2z}\chi_+(2)]\right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{(\tfrac{1}{2}\hbar - \tfrac{1}{2}\hbar)\chi_+(1)\chi_-(2) + (-\tfrac{1}{2}\hbar + \tfrac{1}{2}\hbar)\chi_-(1)\chi_+(2)\right\} = 0, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

c. •Fra målepostuletet vet vi tilsvarende at måleverdien for $\mathbf{S}^2$ må være lik egenverdien. Denne kan vi regne ut vha formelen $\mathbf{S}^2 = S_z^2 + \hbar S_z + S_- S_+$. Fra hjelpeformlene

$$J_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j+1 \pm m)}\,|j, m \pm 1\rangle$$

følger det at

$$S_{i+}\chi_+(i) = 0, \quad S_{i-}\chi_-(i) = 0, \quad S_{i+}\chi_-(i) = \hbar\chi_+(i), \quad S_{i-}\chi_+(i) = \hbar\chi_-(i),$$

slik at

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2\chi &= [S_z^2 + \hbar S_z + S_- S_+]\chi = 0 + 0 + (S_{1-} + S_{2-})(S_{1+} + S_{2+})\chi \\ &= (S_{1-} + S_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_+(1)\hbar\chi_+(2) + \hbar\chi_+(1)\chi_+(2)\right] \\ &= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}}\left[\chi_-(1)\chi_+(2) + \chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_-(1)\chi_+(2) + \chi_+(1)\chi_-(2)\right] = 2\hbar^2\chi. \end{aligned}$$

Måleverdien for $\mathbf{S}^2$ var altså $2\hbar^2$; tilstanden χ er en triplett-tilstand (med $s = 1$).