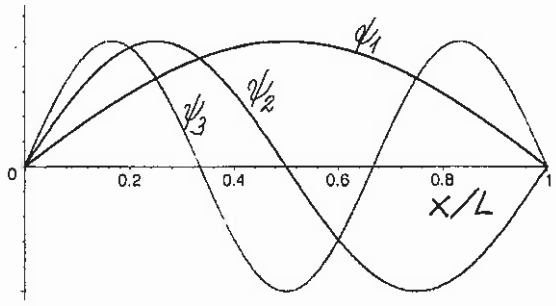
Løsningsforslag
Eksamen 8. august 2009
TFY4250 Atom- og molekylfysikk

Oppgave 1

a. • For $\beta = 0$ har vi en ordinær boks fra $x = 0$ til $x = L$. Energiegenfunksjonene har formen $\psi_n = A \sin k_n^{(0)} x$, der

$$k_n^{(0)} L = n\pi, \qquad n = 1, 2, \cdots \qquad \Longrightarrow \qquad E_n^{(0)} = \frac{(\hbar k_n^{(0)})^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2.$$

De tre første energiegenfunksjonene ser slik ut:



•For $\beta \neq 0$ har vi enten en δ-brønn ($\beta > 0$) eller en δ-barriere ($\beta < 0$). Forutsetningen for at en egenfunksjon $\psi_n(x)$ skal være den samme som for $\beta = 0$, er at $\psi_n(x)$ er lik null for $x = L/3$, hvor deltafunksjonen sitter. Kravet er altså

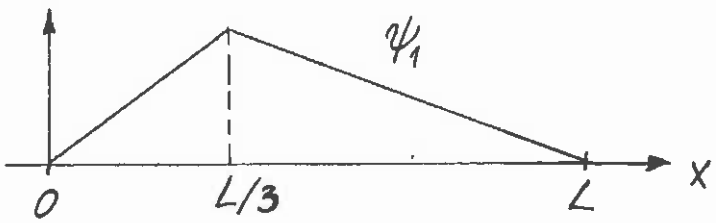
$$\sin k_n^{(0)} L/3 = 0 \qquad \text{dvs} \qquad \frac{k_n^{(0)} L}{3} = j\pi, \qquad j = 1, 2, 3, \cdots,$$

altså

$$\frac{n\pi}{L}\frac{L}{3} = j\pi \qquad \text{dvs} \qquad n = 3j, \quad j = 1, 2, \cdots.$$

Tilstandene ψ_3, ψ_6, ψ_9 osv påvirkes altså ikke av deltafunksjonen i det hele tatt, og er de samme som for $\beta = 0$.

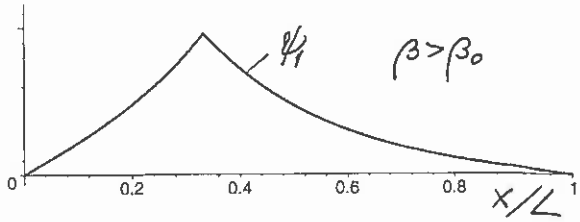
b. •For $E_1 = 0$ følger det fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at ψ_1'' er lik null for $x \neq L/3$. Dette betyr at ψ_1 må være lineær unntatt for $x = L/3$, hvor den har en knekk:



Like til venstre for knekken er da den logaritmisk deriverte $\psi_1'/\psi_1 = 3/L$. Like til høyre er den $\psi_1'/\psi_1 = -3/2L$. Innsetting i diskontinuitetsbetingelsen gir da

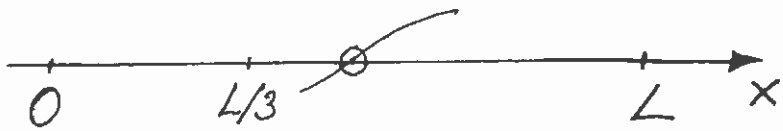
$$-\frac{3}{2L} - \frac{3}{L} = -\frac{2m\beta_0}{\hbar^2} \qquad \Longrightarrow \qquad \beta_0 = \frac{9\hbar^2}{4mL}.$$

•Vi kan konstatere at δ-brønnen med $\beta = \beta_0$ er akkurat dyp nok til å senke grunntilstandsenergien fra $E_1^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ til $E_1 = 0$. Øker vi "dybden" β ytterligere, blir E_1 negativ. For $\beta > \beta_0$ må ψ_1 nemlig ha en kraftigere "knekk",

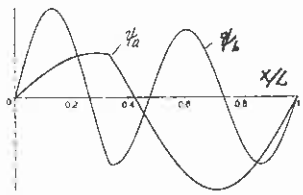


og da skjønner vi at ψ_1 må krumme utover fra aksen. Dette svarer til $E_1 < 0$.

•En eksitert tilstand har minst ett nullpunkt, og da er det lett å skjønne at den må krumme *mot* aksen, slik at energien er positiv. (En utoverkrummende funksjon med ett eller flere nullpunkter kan ikke være lik null ved begge veggene.)



c.



•ψ_a og ψ_b har hhvis ett og tre nullpunkter, og må da være hhvis 1. eksiterte og 3. eksiterte tilstand (ψ_2 og ψ_4).

•Fra figuren kan vi lese ut at halve bølgelengden til ψ_2 er ca $0.58\,L$, slik at

$$k_2 \cdot 0.58L \approx \pi, \qquad \text{dvs} \qquad k_2 L \approx \frac{\pi}{0.58}.$$

Tilsvarende ser vi at $k_4 \cdot 0.53\,L$ er ca 2π, slik at

$$k_4 L \approx \frac{2\pi}{0.53}.$$

Energiene er altså tilnærmet gitt ved

$$E_2 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2(\pi/0.58)^2}{2mL^2} \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \cdot (1.72)^2,$$

og tilsvarende

$$E_4 \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \cdot (3.77)^2.$$

Som vi ser er disse energiene noe lavere enn for $\beta = 0$, hvor vi istedenfor 1.72 og 3.77 jo har 2 og 4. Deltabrønnen senker energiene til alle tilstandene unntatt de som ikke berøres i det hele tatt.

d. •For å oppfylle grensebetingelsene ved veggene setter vi

$$\psi = \begin{cases} A \sin kx & \text{for} \quad x < L/3, \\ B \sin[k(x-L)] & \text{for} \quad x > L/3. \end{cases}$$

De logaritmisk deriverte er da

$$\frac{\psi'}{\psi} = \begin{cases} k \cot kx & \text{for} \quad x < L/3, \\ k \cot[k(x-L)] & \text{for} \quad x > L/3. \end{cases}$$

Diskontinuitetsbetingelsen for $x = L/3$ gir dermed

$$k \cot[k(-2L/3)] - k \cot kL/3 = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} = -\frac{9}{L},$$

eller, med $kL \equiv u$,

$$\frac{u}{\tan(-2u/3)} - \frac{u}{tan(u/3)} = -9.$$

Denne ligningen kan brukes til å bestemme $u = kL$ for alle de eksiterte løsningene. (Grunntilstanden har for den aktuelle β-verdien negativ energi, og må behandles vha sinus hyperbolicus.)

•Da vi kjenner $u_2 = k_2 L$ tilnærmet ($u_2 \approx \pi/0.58 \approx 5.42$), er det en smal sak å finne en nøyaktigere verdi vha kalkulatoren. Med u lik hhvis 5.43, 5.44 og 5.437 blir venstresiden i ligningen over hhvis -9.14, -8.97 og -9.02. Et siste forsøk med $u = k_2 L = 5.4385$ gir -9.00065, og dette får klare seg. En ganske nøyaktig verdi for energien til 1. eksiterte tilstand er altså

$$E_2 \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(5.4385/\pi)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(1.7311)^2.$$

Oppgave 2

a. •Med $S_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x$ finner vi at

$$H\chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\omega\, \chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}}.$$

Egenverdiene til $\chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}}$ er altså hhvis

$$E_+ = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{og} \qquad E_- = -\tfrac{1}{2}\hbar\omega.$$

•I de stasjonære tilstandene

$$\chi_\pm(t) = \chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}}\, e^{-iE_\pm t/\hbar} = \chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}}\, e^{\mp i\omega t/2}$$

er spinnretningene $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\pm$ selvsagt tidsuavhengige:

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\pm = \chi_\pm^\dagger(t)\, \boldsymbol{\sigma}\, \chi_\pm(t) = \chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}}^\dagger\, \boldsymbol{\sigma}\, \chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}}; \qquad \left(\chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ \pm 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a_\pm \\ b_\pm \end{pmatrix} \right)$$

(idet de to tidsavhengige eksponensialfaktorene opphever hverandre). Vha den oppgitte formelen for spinnretningen finner vi da, med $2a_\pm^* b_\pm = \pm 1$:

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\pm = \hat{\mathbf{e}}_x\, \Re\mathrm{e}(\pm 1) + \hat{\mathbf{e}}_y\, \Im\mathrm{m}(\pm 1) + \hat{\mathbf{e}}_z\, (\tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{2}) = \pm\hat{\mathbf{e}}_x,$$

akkurat slik vi måtte vente for tilstandene $\chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}}$.

•Da begge de stasjonære tilstandene $\chi_+(t)$ og $\chi_-(t)$ er løsninger av den lineære og homogene Schrödingerligningen $i\hbar\, d\chi(t)/dt = H\,\chi(t)$ for systemet, gjelder superposisjonsprinsippet;

$$\chi(t) = c_+\chi_+(t) + c_-\chi_-(t)$$

er en løsning for vilkårlige komplekse (tidsuavhengige) koeffisienter c_+ og c_-.

•En slik lineærkombinasjon er også den mest generelle tilstanden vi kan ha for dette spinnet, fordi $\chi_{\pm\hat{\mathbf{x}}}$ og dermed $\chi_\pm(t)$ danner et fullstendig sett (dvs en basis).

<u>b.</u> •Spinnretningen ved $t = 0$, for tilstanden $\chi(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, er selvsagt

$$\langle\, \boldsymbol{\sigma}\,\rangle_0 = \hat{\mathbf{e}}_x\, \Re\mathrm{e}(2\cdot 0\cdot 1) + \hat{\mathbf{e}}_y \Im\mathrm{m}(2\cdot 0\cdot 1) + \hat{\mathbf{e}}_z(|0|^2 - |1|^2) = -\hat{\mathbf{e}}_z.$$

• Ifølge målepostulatet må målingen av gi en av egenverdiene og etterlate spinnet i den tilsvarende egentilstanden. Siden den oppgitte tilstanden er en egentilstand til S_z, er det S_z som er målt ($\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{e}}_z$). Da

$$S_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

kan vi da konstatere at måleresultatet ved $t = 0$ var $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$.

•Forventningsverdien av energien i begynnelsestilstanden er

$$\langle\, E\,\rangle_0 = \left\langle \tfrac{1}{2}\hbar\omega\sigma_x \right\rangle = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\, \chi^\dagger(0)\sigma_x\chi(0) = \tfrac{1}{2}\hbar\omega(0\ \ 1) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0.$$

Da de mulige måleresultatene er $E_\pm = \pm\frac{1}{2}\hbar\omega$, blir usikkerheten $\Delta E = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

<u>c.</u> •Her er det flere måter å gå fram på. Vi kan f.eks ta utgangspunkt i den generelle løsningen under pkt. <u>a</u>, hvor vi ved $t = 0$ har at

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = c_+\chi_{\hat{\mathbf{x}}} + c_-\chi_{-\hat{\mathbf{x}}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_+ + c_- \\ c_+ - c_- \end{pmatrix},$$

dvs $c_+ + c_- = 0$ og $(c_+ - c_-)/\sqrt{2} = 1$, slik at $c_+ = -c_- = 1/\sqrt{2}$. Tilstanden for $t > 0$ er følgelig

$$\begin{aligned} \chi(t) &= c_+\chi_{\hat{\mathbf{x}}} e^{-i\omega t/2} + c_-\chi_{-\hat{\mathbf{x}}} e^{i\omega t/2} \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\omega t/2} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{i\omega t/2} \\ &= \begin{pmatrix} -i\sin\omega t/2 \\ \cos\omega t/2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

•Med $2a^*b = i\sin\omega t$ og $|a|^2 - |b|^2 = -\cos\omega t$ blir da spinnretningen

$$\begin{aligned} \langle\, \boldsymbol{\sigma}\,\rangle_t &= \hat{\mathbf{e}}_x\, \Re\mathrm{e}(i\sin\omega t) + \hat{\mathbf{e}}_y\, \Im\mathrm{m}(i\sin\omega t) - \hat{\mathbf{e}}_z\, \cos\omega t \\ &= \hat{\mathbf{e}}_y\, \sin\omega t - \hat{\mathbf{e}}_z\, \cos\omega t, \end{aligned}$$

altså en presesjon omkring x-aksen med vinkelfrekvens ω og periode $T = 2\pi/\omega$. Som en kontroll merker vi oss at denne formelen ganske riktig gir at $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_0 = -\hat{\mathbf{e}}_z$ for $t = 0$. For $t = t_1 = \pi/(2\omega) = T/4$ gir den $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\pi/2\omega} = \hat{\mathbf{e}}_y$. For $t = t_2 = \pi/\omega = T/2$ gir den $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\pi/\omega} = \hat{\mathbf{e}}_z$. For $t = 2\pi/\omega = T$ ser vi at $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ har presesert hele veien rundt, til utgangspunktet $-\hat{\mathbf{e}}_z$.

d. •Ved $t = 2\pi/\omega = T$ er spinnretningen som nevnt tilbake til utgangspunktet, $-\hat{\mathbf{e}}_z$. Den plutselige endringen av magnetfeltet ved dette tidspunktet betyr at den nye Hamilton-operatoren blir $H' = \omega' S_y$, med $\omega' = 2\omega$. Spinnretningen vil da starte å presesere omkring y-aksen, med presesjonsfrekvensen $\omega' = 2\omega$.

e. •Ved $t = 0$ er spinntilstanden $\chi_{-\hat{\mathbf{x}}}$ en energiegentilstand, med energien $E_- = -\frac{1}{2}\hbar\omega$, altså grunntilstanden, med spinnretningen $-\hat{\mathbf{e}}_x$. Under den svært langsomme endringen av magnetfeltet, vil spinnet nå holde seg i det som til enhver tid er grunntilstanden for vedkommende magnetfelt, og vil altså ende opp i grunntilstanden til Hamilton-operatoren $H' = 2\omega S_y$, med spinnretningen $-\hat{\mathbf{e}}_y$.

•Dette er egentilstanden til S_y med egenverdi $-\frac{1}{2}\hbar$, som følgelig har energien $E = 2\omega \cdot (-\frac{1}{2}\hbar) = -\hbar\omega$. Denne egentilstanden oppfyller egenverdiligningen

$$\sigma_y \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

som gir $-b = ia$. En normert løsning er

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Oppgave 3

a. •Utgangspunktet er her matrise-elementene

$$V_{fi}(t) = \langle n_x n_y n_z | V_1(t) | 000 \rangle = \int \psi^*_{n_x}(x)\psi^*_{n_y}(y)\psi^*_{n_z}(z)\, V_1(t)\, \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z) d^3r.$$

Da

$$x\,\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\psi_1(x) \qquad \text{og} \qquad y\,\psi_0(y) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\psi_1(y),$$

ser vi (med $p_0 = \epsilon\sqrt{2\hbar m\omega}$) at

$$V_1(t)\,\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z) = -\epsilon\hbar\left[\delta(t + \frac{\pi}{2\omega})\psi_1(x)\psi_0(y)\psi_0(z) + \delta(t)\psi_0(x)\psi_1(y)\psi_0(z)\right].$$

De eneste ikke-forsvinnende matrise-elementene er altså

$$\langle 100 | V_1(t) | 000 \rangle = -\epsilon\hbar\,\delta(t + \frac{\pi}{2\omega}) \qquad \text{og} \qquad \langle 010 | V_1(t) | 000 \rangle = -\epsilon\hbar\,\delta(t);$$

i begge tilfeller er $\omega_{fi} = \omega$. Innsetting i formelen fra 1.-oredens perturbasjonsteori gir da, for $t_0 < -\pi/2\omega$ og $t > 0$

$$a_{100} = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{i\omega t'}[-\epsilon\hbar\delta(t' + \frac{\pi}{2\omega})]dt' = i\epsilon\, e^{-ipi/2} = \epsilon$$

og

$$a_{010} = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{i\omega t'}[-\epsilon\hbar\delta(t')]dt' = i\epsilon.$$

•Overgangssannsynlighetene er

$$P_{100} = |a_{100}|^2 = \epsilon^2 \qquad \text{og} \qquad P_{010} = \epsilon^2.$$

Dette betyr at sannsynligheten for å finne oscillatoren i den opprinnelige tilstanden er

$$P_{000} = 1 - 2\epsilon^2.$$

Gyldighetskriteriet for 1.-ordens perturbasjonsteori er her at P_{000} er nær 1, dvs vi må kreve at $\epsilon^2 << 1$.

<u>b.</u> •Til 1. orden kan bølgefunksjonen etter perturbasjonen skrives på formen

$$\Psi(\mathbf{r},t) = a_{000}\Psi^{(0)}_{000}(\mathbf{r},t) + \sqrt{2}\epsilon\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi^{(0)}_{100}(\mathbf{r},t) + i\,\Psi^{(0)}_{010}(\mathbf{r},t)\right),$$

hvor siste ledd utgjør funksjonen kalt Ψ_b i oppgaveteksten, mens første ledd er Ψ_a. Energiene til Ψ_a og Ψ_b er hhvis $\frac{3}{2}\hbar\omega$ og $\frac{5}{2}\hbar\omega$. Videre er (grunntilstanden) Ψ_a kulesymmetrisk og har derfor $L_z = 0$. Funksjonen Ψ_b kan skrives som en kulesymmetrisk faktor multiplisert med $x + iy = \sin\theta e^{i\phi}$, og er følgelig en egenfunksjon til $\widehat{L}_z$ med egenverdi $\hbar$.

•Den forventede energiøkningen er

$$\left\langle E - \frac{3}{2}\hbar\omega \right\rangle = \hbar\omega(P_{100} + P_{010}) = 2\epsilon^2\hbar\omega,$$

dvs akkurat like stor som den klassiske energiøkningen nevnt innledningsvis, $E = \frac{p_0^2}{m} = 2\epsilon^2\hbar\omega$.

•Fra formelen ovenfor ser vi at sannsynlighten for å måle L_z lik $\hbar$ er $2\epsilon^2$. Forventningsverdien av L_z er derfor

$$\langle L_z \rangle = P_{000}\cdot 0 + 2\epsilon^2\cdot\hbar = 2\epsilon^2\hbar.$$

Til sammenligning var den klassiske dreieimpulsen nevnt innledningsvis

$$\mathbf{L} = \hat{\mathbf{e}}_z\frac{p_0^2}{m\omega} = \hat{\mathbf{e}}_z\, 2\epsilon^2\hbar.$$