

Løsningsforslag
Eksamen 13. desember 2005
TFY4250 Atom- og molekylfysikk/FY2045 Kvantefysikk

Oppgave 1**a.** Med

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin \frac{n\pi x}{L_x} = -\frac{n_x^2 \pi^2}{L_x^2} \sin \frac{n\pi x}{L_x}, \quad \text{osv.}$$

finner vi energien til egenfunksjonen

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = A \sin \frac{n_x \pi x}{L_x} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}$$

slik:

$$\begin{aligned} \hat{H} \psi_{n_x, n_y, n_z} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{n_x, n_y, n_z} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L^2} + \frac{n_z^2}{L^2} \right) \psi_{n_x, n_y, n_z} \equiv E \psi_{n_x, n_y, n_z}. \end{aligned}$$

Ved en infinitesimal endring dL_x av L_x , med fastholdt L , har vi

$$F_x dL_x = -dE.$$

Kraften på stempelet er altså

$$F_x = -\frac{\partial E}{\partial L_x} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_x^2}{m L_x^3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L_x^3},$$

siden $n_x = 1$ for grunntilstanden.

b. I grunntilstanden vil de 8 spinn- $\frac{1}{2}$ -fermionene fordele seg med to i hver av de fire romlige én-partikkel-tilstandene med lavest energi. Når L_x er i nærheten av L , er kvantetallene for disse fire tilstandene gitt ved

$$(n_x, n_y, n_z) = (1, 1, 1), (2, 1, 1), (1, 2, 1) \quad \text{og} \quad (1, 1, 2).$$

Kraften avhenger bare av de L_x -avhengige bidragene til den totale energien for de 8 fermionene, som er

$$E_{\text{tot}}^{(x)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \cdot 2 \cdot \left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{4}{L_x^2} + \frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_x^2} \right) = 7 \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L_x^2}.$$

For $L_x = L$ blir da kraften

$$F_x = - \left. \frac{\partial E_{\text{tot}}^{(x)}}{\partial L_x} \right|_L = 14 \frac{\hbar^2 \pi^2}{m L^3}.$$

Oppgave 2**a.** Med

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} \left[x^2 + \frac{1}{2}b^2(1 + e^{-2i\omega t}) + \frac{i\hbar t}{m} - 2bx e^{-i\omega t} \right] \right\}$$

har vi

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi_b}{\partial t} &= \Psi_b \cdot \left\{ i\hbar \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} \right) \left[\frac{1}{2}b^2 e^{-2i\omega t} (-2i\omega) + \frac{i\hbar}{m} - 2bx e^{-i\omega t} (-i\omega) \right] \right\} \\ &= \Psi_b \cdot \left[-\frac{1}{2}m\omega^2 b^2 e^{-2i\omega t} + \frac{1}{2}\hbar\omega + m\omega^2 bx e^{-i\omega t} \right], \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Videre har vi

$$\frac{\partial \Psi_b}{\partial x} = \Psi_b \cdot \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (2x - 2b e^{-i\omega t}) \right] = \Psi_b \cdot \left[-\frac{m\omega}{\hbar} (x - b e^{-i\omega t}) \right],$$

og

$$\frac{\partial^2 \Psi_b}{\partial x^2} = \Psi_b \cdot \left(-\frac{m\omega}{\hbar} \right) \left[-\frac{m\omega}{\hbar} (x - b e^{-i\omega t})^2 + 1 \right],$$

slik at

$$\hat{K} \Psi_b = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_b}{\partial x^2} = \Psi_b \cdot \left[-\frac{1}{2}m\omega^2 (x - b e^{-i\omega t})^2 + \frac{1}{2}\hbar\omega \right], \quad \text{q.e.d.}$$

b. Ved innsetting i den tidsavhengige Schrödingerligningen, $i\hbar \partial \Psi_b / \partial t = [\hat{K} + V(x)] \Psi_b = \hat{H} \Psi_b$, finner vi at

$$\begin{aligned} V(x) \Psi_b &= i\hbar \frac{\partial \Psi_b}{\partial t} - \hat{K} \Psi_b \\ &= \Psi_b \cdot \left[-\frac{1}{2}m\omega^2 b^2 e^{-2i\omega t} + \frac{1}{2}\hbar\omega + m\omega^2 bx e^{-i\omega t} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 - 2xb e^{-i\omega t} + b^2 e^{-2i\omega t}) - \frac{1}{2}\hbar\omega \right] \\ &= \Psi_b \cdot \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \end{aligned}$$

Dette viser at den oppgitte bølgefunksjonen virkelig oppfyller Schrödingerligningen, for det harmoniske oscillatorpotensialet

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

For spesialtilfellet $b = 0$ finner vi fra formlene ovenfor:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_0}{\partial t} = \frac{1}{2}\hbar\omega \Psi_0 \equiv E_0 \Psi_0,$$

$$\Psi_0(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp \left[-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} - i\frac{\omega t}{2} \right] \equiv \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar} e^{-iE_0 t/\hbar},$$

$$\hat{H} \Psi_0 = [\hat{K} + V(x)] \Psi_0 = \dots = E_0 \Psi_0.$$

Bølgefunksjonen $\Psi_0(x, t)$ (for $b = 0$) beskriver altså grunntilstanden for oscillatoren.

Med $1 + \cos 2\omega t = 2 \cos^2 \omega t$ finner vi for $b \neq 0$ sannsynlighetstettheten

$$\begin{aligned} |\Psi_b(x, t)|^2 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}\left[x^2 + \frac{1}{2}b^2(1 + \cos 2\omega t) - 2bx \cos \omega t\right]\right\} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}(x - b \cos \omega t)^2\right\}, \end{aligned}$$

som er en Gauss-fordeling (normalfordeling) med et tyngdepunkt (symmetripunkt)

$$\langle x \rangle_t = b \cos \omega t$$

som avhenger av tiden.

c. [Det eneste som skiller $|\Psi_b(x, t)|^2$ fra sannsynligheten $|\Psi_0(x, t)|^2$ for grunntilstanden er at “tyngdepunktet” (senteret av bølgegruppen) oscillerer som $\langle x \rangle_t = b \cos \omega t$. Usikkerheten Δx er derfor konstant (tidsuavhengig) og også uavhengig av “utsvinget” b , dvs lik usikkerheten Δx for grunntilstanden Ψ_0 . Det er forsåvidt enkelt å beregne denne vha Gauss-integraler. Men for denne spesielle bølgefunksjonen kan vi bruke en alternativ og mer slagkraftig metode:]

Vha resultatet ovenfor for $\partial\Psi_b/\partial x$ finner vi

$$\begin{aligned} a\Psi_b &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x\Psi_b + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial\Psi_b}{\partial x}\right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \cdot \Psi_b \cdot \left[x + \frac{\hbar}{m\omega} \left(-\frac{m\omega}{\hbar}\right)(x - b e^{-i\omega t})\right] \\ &= b e^{-i\omega t} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \Psi_b \equiv \alpha \Psi_b, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Vha denne formelen er det enkelt å beregne forventningsverdier for tilstanden Ψ_b : Med

$$\langle a \rangle = \int \Psi_b^* a \Psi_b dx = \alpha \quad \text{og} \quad \langle a^\dagger \rangle = \int \Psi_b^* a^\dagger \Psi_b dx = \int (a \Psi_b)^* \Psi_b dx = \alpha^*$$

finner vi:

$$\langle x \rangle_t = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle a + a^\dagger \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot 2\Re(\alpha) = b \cos \omega t,$$

som er samme resultat som i pkt. b. Tilsvarende er

$$\langle p_x \rangle_t = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \cdot \frac{\langle a - a^\dagger \rangle}{i} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \cdot 2\Im(\alpha) = -m\omega b \sin \omega t.$$

Som en kontroll har vi fra Ehrenfests teorem

$$\langle p_x \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = m \frac{d}{dt} (b \cos \omega t) = -m\omega b \sin \omega t.$$

d. Vha kommutator-relasjonen $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ finner vi at

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle (a + a^\dagger)(a + a^\dagger) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle a^2 + (a^\dagger)^2 + 2a^\dagger a + 1 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} [\alpha^2 + (\alpha^*)^2 + 2\alpha^* \alpha + 1] \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} [(\alpha + \alpha^*)^2 + 1] = \frac{\hbar}{2m\omega} [(2\Re(\alpha))^2 + 1] = \frac{\hbar}{2m\omega} + \langle x \rangle^2. \end{aligned}$$

Her har vi brukt resultatet $\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot 2\Re(\alpha)$ fra forrige punkt. Dermed blir

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Tilsvarende finner vi at

$$\begin{aligned} \langle p_x^2 \rangle &= -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle (a - a^\dagger)(a - a^\dagger) \rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle a^2 + (a^\dagger)^2 - aa^\dagger - a^\dagger a \rangle \\ &= -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle a^2 + (a^\dagger)^2 - 2a^\dagger a - 1 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} [1 - (\alpha - \alpha^*)^2] \\ &= \frac{\hbar m\omega}{2} [1 + (2\Im(\alpha))^2] = \frac{\hbar m\omega}{2} + \langle p_x \rangle^2, \end{aligned}$$

slik at

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}.$$

Disse er tidsuavhengige, slik vi skulle vise, og vi ser at

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{1}{2}\hbar.$$

Oppgave 3

a. De mulige måleverdiene for $\mathbf{S}^2 = \hbar^2 s(s+1)$ og $S_z = \hbar m$ kan angis ved kvantetallene s og m , som er

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

For den oppgitte tilstanden χ finner vi:

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

Så χ er en egentilstand til S_z med egenverdi lik null ($m = 0$).

Fra hjelpeformlene

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

følger det at

$$S_{i+}\chi_+(i) = 0 \quad \text{og} \quad S_{i+}\chi_-(i) = \hbar \chi_+(i), \quad i = 1, 2,$$

slik at

$$S_{1+}\chi = \frac{1}{\sqrt{2}} [-\hbar \chi_+(1)\chi_+(2)] \quad \text{og} \quad S_{2+}\chi = \frac{1}{\sqrt{2}} [+ \hbar \chi_+(1)\chi_+(2)].$$

Følgelig er $S_+\chi = 0$, og

$$\mathbf{S}^2 \chi = [S_z^2 + \hbar S_z + S_- S_+] \chi = 0,$$

så χ er en egentilstand til $\mathbf{S}^2$ med egenverdi null ($s = 0$).

b. Med

$$\chi = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \chi_+(1) \chi_-(2) - \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_-(1) \chi_+(2) \right]$$

er koeffisientene ($1/\sqrt{2}$ og $-1/\sqrt{2}$) sannsynlighetsamplituder. Sannsynligheten for å måle $S_{1z} = \frac{1}{2}\hbar$ er altså lik $\frac{1}{2}$. *Etter* en slik måling vil systemet være i den tilstanden som svarer til den målte egenverdien, altså $\chi_+(1)\chi_-(2)$.

Hvis en måler både S_{1z} og S_{2z} for tilstanden χ , og finner $S_{1z} = \frac{1}{2}\hbar$, så må den samtidige målingen av S_{2z} gi $-\frac{1}{2}\hbar$, siden summen jo er skarpt definert lik null i tilstanden χ .

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

$$\langle S_{1z} \rangle = 0,$$

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

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