

Løsningsforslag
Eksamen 1. desember 2009
TFY4250/FY2045

Oppgave 1

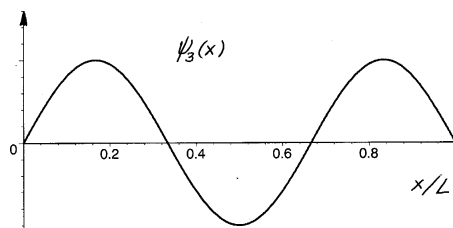
a. • For $n = 3j$ er

$$\psi_{3j}^{(0)}(L/3) = A \sin(j\pi) = 0 \quad \text{og} \quad \psi_{3j}^{(0)}(2L/3) = A \sin(2j\pi) = 0.$$

Vi kan da konstatere at egenfunksjonene $\psi_{3j}^{(0)}(x)$ (for $\beta = 0$) oppfyller egenverdiligningen i intervallene der $V(x) = 0$, samtidig som de oppfyller diskontinuitetsbetingelsene i $x = L/3$ og $x = 2L/3$, som i tilfellene $n = 3j$ bare krever at bølgefunksjonene er glatte i disse punktene, og det er jo oppfylt for funksjonene $\psi_{3j}^{(0)}(x)$. Følgelig er løsningene for $n = 3j$ (og $\beta \neq 0$):

$$\psi_{3j}(x) = \psi_{3j}^{(0)}(x) = A \sin(3j\pi x/L); \quad j = 1, 2, \dots$$

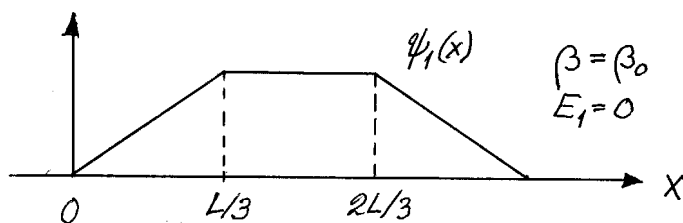
• Egenfunksjonen $\psi_3(x) = A \sin(3\pi x/L)$ har formen



med nullpunkter i $x = L/3, 2L/3$. Med bølgetallet $k_3 = 3\pi/L$ er energien til denne tilstanden

$$E_3 = \frac{(-\hbar^2/2m)\psi_3''}{\psi_3} = \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} = 9 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

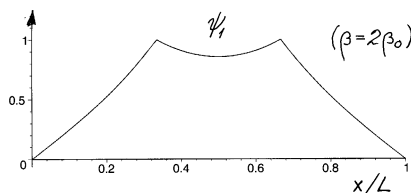
b. • For $E_1 = 0$ følger det fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at ψ_1'' er lik null for $x \neq L/3, 2L/3$. Dette betyr at ψ_1 må være lineær unntatt i de to punktene $x = L/3, 2L/3$, hvor den deriverte har sprang. Dessuten skal grunntilstanden $\psi_1(x)$ være symmetrisk:



• Like til høyre for knekken i $x = L/3$ er den logaritmisk deriverte ψ_1'/ψ_1 lik null. Like til venstre for knekken ser vi at den logaritmisk deriverte er $\psi_1'/\psi_1 = 1/(L/3) = 3/L$. Innsetting i diskontinuitetsbetingelsen gir da

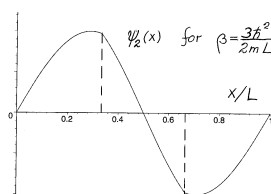
$$0 - \frac{3}{L} = -\frac{2m\beta_0}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad \beta_0 = \frac{3\hbar^2}{2mL}.$$

• Vi kan konstatere at δ -brønnene med $\beta = \beta_0$ er akkurat dype nok til å senke grunn-tilstandsenergien 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” i $x = L/3$ og $x = 2L/3$,



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

c.



• Figuren i oppgaveteksten viser at fasen $k_2 x$ passerer $\pi/2$ omtrent ved $x = 0.29L$, slik at $k_2 \cdot 0.29L \approx \pi/2$. Vi har altså

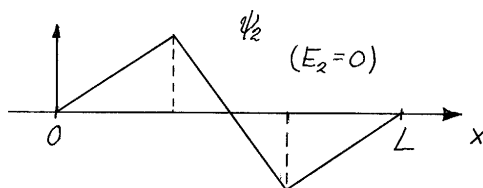
$$k_2 \approx \frac{\pi}{2 \cdot 0.29L} \approx \frac{5.42}{L} \quad \text{og} \quad E_2 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \cdot 5.42^2.$$

Til sammenligning er for $\beta = 0$

$$E_2^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \cdot (2\pi)^2, \quad \text{slik at} \quad \frac{E_2}{E_2^{(0)}} \approx \left(\frac{5.42}{2\pi}\right)^2 = 0.74.$$

Som vi ser er energien E_2 noe lavere enn for $\beta = 0$. [Deltabrønnene senker energiene til alle tilstandene unntatt de som ikke berøres i det hele tatt.]

• Det er lett å finne en brønnstyrke β som gir $E_2 = 0$. Egenfunksjonen ser da slik ut:



Dikontinuitetsbetingelsen i $x = L/3$ gir

$$-\frac{6}{L} - \frac{3}{L} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} \quad \implies \quad \beta = \frac{9\hbar^2}{2mL} = 3\beta_0.$$

Konklusjonen er at E_2 er negativ for $\beta > 3\beta_0 = 9\hbar^2/(2mL)$.

• E_4 er nødvendigvis større enn $E_3 = E_3^{(0)} = 9\pi^2 \hbar^2/(2mL^2)$. Så E_4 kan ikke bli negativ.

Oppgave 2

a. • Med $x \psi_0(x) = \sqrt{\hbar/(2m\omega)} \psi_1(x)$ blir matrise-elementene

$$(V_1)_{ni}(t) = -F(t) \int \psi_n^* \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \psi_1 dx = -F(t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{n1}.$$

• Ifølge førsteordens perturbasjonsteori er da overgangsamplitudene

$$\begin{aligned} a_{0 \rightarrow n}(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{n1} \frac{1}{i\hbar} \int_0^t F(t') e^{i\omega_{n1}t'} dt' \\ &= -F_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{n1} \frac{1}{i\hbar} \underbrace{\int_0^\tau e^{i\omega_{n1}t'} dt'}_{I(t)}, \end{aligned}$$

der $\tau = \min(t, t_0)$. I denne tilnærmelsen har vi altså bare overgang til 1. eksiterte nivå, med en overgangsamplitude

$$a_{0 \rightarrow 1}(t) = \frac{iF_0}{\sqrt{2\hbar m\omega}} I(t).$$

b. • For $t_0 \ll 1/\omega$ (og $t > t_0$) har vi at

$$\begin{aligned} I(t) &= \int_0^{t_0} e^{i\omega t'} dt' = \frac{1}{i\omega} (e^{i\omega t_0} - 1) \\ &= \frac{1}{i\omega} [i\omega t_0 + \frac{1}{2}(i\omega t_0)^2 + \dots] = t_0 [1 + \mathcal{O}(\omega t_0)] \approx t_0, \end{aligned}$$

slik at overgangsamplituden og overgangssannsynligheten til 1. eksiterte tilstand blir (for $t > t_0$)

$$a_{0 \rightarrow 1}(t) = \frac{iF_0 t_0}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \quad \text{og} \quad P_{0 \rightarrow 1} = |a_{0 \rightarrow 1}(t)|^2 = \frac{(F_0 t_0)^2}{2\hbar m\omega}.$$

Her er $F_0 t_0 \equiv \Delta p$ impulsoverføringen pga perturbasjonen, og da må selvsagt også nevneren ha dimensjonen til en kvadrert impuls. Siden forventningsverdiene av kinetisk og potensiell energi er like store for stasjonære oscillatorstilstander, følger det at den midlere kvadratiske impulsen i grunntilstanden er

$$p_{\text{rms}}^2 \equiv \langle p_x^2 \rangle_0 = 2m \cdot \hbar\omega/4 = \frac{1}{2}\hbar m\omega.$$

Overgangssannsynligheten kan derfor skrives på formen

$$P_{0 \rightarrow 1} = \frac{(\Delta p)^2}{4p_{\text{rms}}^2}. \quad (t_0 \ll 1/\omega).$$

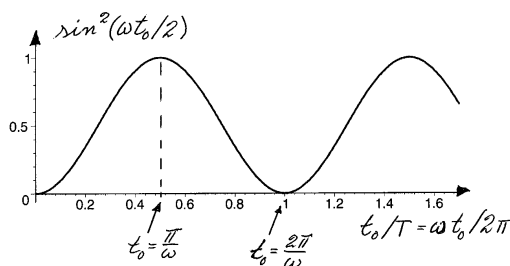
• Førsteordens perturbasjonsteori er bare gyldig så lenge amplitudene er tilnærmet lik de verdiene de hadde i beynnelsestilstanden. Resultatet ovenfor er derfor en god tilnærmelse dersom $(\Delta p)^2 = (F_0 t_0)^2 \ll p_{\text{rms}}^2 = \frac{1}{2}\hbar m\omega$.

c. • For $t > t_0$ har vi fra pkt. a og pkt. b:

$$\begin{aligned} P_{0 \rightarrow 1} &= \left| \frac{iF_0}{\sqrt{2\hbar m\omega}} I(t) \right|^2 = \frac{F_0^2}{2\hbar m\omega} \left| \frac{e^{i\omega t_0} - 1}{i\omega} \right|^2 \\ &= \frac{F_0^2}{p_{\text{rms}}^2} \frac{\sin^2(\omega t_0/2)}{\omega^2}. \end{aligned}$$

• For $\omega t_0 \ll 1$ ser vi at den siste faktoren forenkler seg til $t_0^2/4$, i overensstemmelse med resultatet i pkt. b.

• Som funksjon av t_0 ser vi at $P_{0 \rightarrow 1}$ går som $\sin^2(\omega t_0/2)$:



Denne har åpenbart et maksimum for $t_0 = t_0^{\text{max}} = \pi/\omega \equiv T/2$. Maksimalverdien er

$$P_{0 \rightarrow 1}^{\text{max}} = \frac{F_0^2}{p_{\text{rms}}^2 \omega^2} = \frac{F_0^2}{\frac{1}{2} \hbar m \omega^3}.$$

• Når t_0 ligger i nærheten av $t_0^{\text{max}} = \pi/\omega$, er $\sin(\omega t_0/2) \approx \sin(\pi/2) = 1$. For at førsteordensresultatet ovenfor skal være en god tilnærming, må vi da kreve at

$$F_0^2 \ll \frac{1}{2} \hbar m \omega^3 = p_{\text{rms}}^2 \omega^2.$$

Oppgave 3

a. • I dipolmomentet

$$\mathbf{d}_{fi} = \int Y_{l'm'}^* \mathbf{r} Y_{lm} d\Omega$$

kan pariteten til integranden skrives på formen

$$(-1)^{l'+1+l} = -(-1)^{l'-l} \equiv -(-1)^{\Delta l}.$$

Integranden er altså antisymmetrisk og integralet lik null for like Δl ; overganger med like Δl er forbudte i elektrisk-dipol-tilnærmelsen.

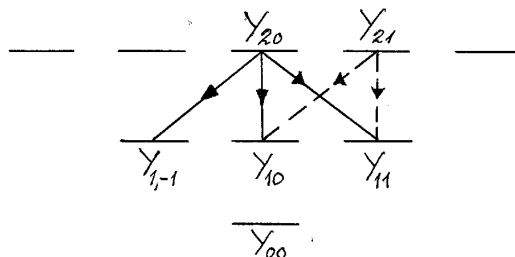
• I integralet

$$\mathbf{d}_{lm \rightarrow l'm'} = R_0 \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int Y_{l'm'}^* \left(\hat{\mathbf{e}}_z Y_{10} - \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{11} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1} \right) Y_{lm} d\Omega$$

er produktet $Y_{l'm'}^* Y_{lm}$ proporsjonalt med $\exp(im\phi - im'\phi) = \exp(-i\phi\Delta m)$, mens de tre leddene i midten går som $\exp(im''\phi)$, med m'' lik hhvis 0, 1 og -1 . I uttrykket ovenfor har vi derfor¹ ett bidrag proporsjonalt med $\hat{\mathbf{e}}_z$ for $\Delta m = 0$, og to bidrag proporsjonale med hhvis $(\hat{\mathbf{e}}_x \mp i\hat{\mathbf{e}}_y)/\sqrt{2}$ for $\Delta m = \pm 1$, i overensstemmelse med utvalgsregelen $\Delta m = 0, \pm 1$.

• Som markert i skjemaet

¹Merk at $\int_0^{2\pi} \exp(in\phi) d\phi = 2\pi\delta_{n0}$.



er det med begynnelsestilstanden Y_{20} ifølge utvalgsreglene i dipoltilnærmelsen tillatt med overganger til tilstandene Y_{11} , Y_{10} , Y_{1-1} . Fra tilstanden Y_{21} kan vi bare ha overgang til de to tilstandene Y_{10} og Y_{11} .

b. • Med energiegenverdiene

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mR_0^2} = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \cdot \frac{m_e}{m} \cdot \frac{l(l+1)}{9}$$

for rotatoren finner vi en fotonenergi i det infrarøde området:

$$\hbar\omega = E_2 - E_1 = 13.6 \text{ eV} \cdot \frac{6-2}{9 \cdot 2000} \approx 0.00302 \text{ eV}.$$

Bohr-frekvensen for denne overgangen er

$$\omega = \frac{\hbar\omega}{\hbar} = \frac{0.00302 \text{ eV}}{0.6582 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}} = 4.59 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}.$$

Vi finner da at

$$kR_0 = \frac{\omega}{c} \cdot 3a_0 = 2.43 \cdot 10^{-6}.$$

Dette betyr at tilnærmelsen $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \approx 1$, som ligger til grunn for elektrisk-dipoltilnærmelsen, er oppfylt med god margin.

Oppgave 4

a. • Vi viser først at alle de “gamle” tilstandene er egentilstander til $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$:

$$\hat{J}_z |l, m_l\rangle |\frac{1}{2}, m_s\rangle = \hat{L}_z |l, m_l\rangle |\frac{1}{2}, m_s\rangle + |l, m_l\rangle \hat{S}_z |\frac{1}{2}, m_s\rangle = \hbar(m_l + m_s) |l, m_l\rangle |\frac{1}{2}, m_s\rangle,$$

slik at $m = m_l + m_s$.

• Dette betyr at tilstanden $|l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ er en egentilstand til $\hat{J}_z$ med egenverdi $\hbar m = \hbar(l + \frac{1}{2})$. Da $|l, l\rangle$ og $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ er toppen av hver sin “stige”, har vi at

$$\hat{L}_+ |l, l\rangle = 0 \quad \text{og} \quad \hat{S}_+ |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 0.$$

Følgelig er

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= [\hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_- (\hat{L}_+ + \hat{S}_+)] |l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ &= [\hbar^2 (l + \frac{1}{2})^2 + \hbar \hbar (l + \frac{1}{2}) + 0] |l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \hbar^2 (l + \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2} + 1) |l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned}$$

Tilstanden $|l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ er altså en $|j, m\rangle$ -tilstand:

$$|l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}\rangle \quad (\text{med } j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2}).$$

b. • Ved gjentatt bruk av stigeoperator-relasjonen har vi at

$$\hat{S}_-|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \hbar|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, \quad \hat{L}_-|l, l\rangle = \hbar\sqrt{2l}|l, l-1\rangle, \quad \hat{J}_-|l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{2l+1}|l+\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}\rangle.$$

Ved å sette inn fra de to første i den siste av disse relasjonene har vi da

$$\begin{aligned} |l+\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2l+1}} (\hat{L}_- + \hat{S}_-) |l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} |l, l-1\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{2l+1}} |l, l\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle. \end{aligned}$$

Vi ser at skalarproduktet mellom denne og tilstanden $|\text{ort}\rangle$ er lik null, slik det ble opplyst.

• Tilstanden $|\text{ort}\rangle$ har åpenbart $m = l - \frac{1}{2}$, og vi mistenker selvsagt at denne tilstanden er toppen av en stige for $j = l - \frac{1}{2}$. For å *vis*e dette trenger vi egentlig bare å sjekke at $\hat{J}_+$ anvendt på $|\text{ort}\rangle$ gir null, for i så fall har vi at

$$\hat{\mathbf{J}}^2|\text{ort}\rangle = [\hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z + \hat{J}_-\hat{J}_+]|\text{ort}\rangle = [\hbar^2(l-\frac{1}{2})^2 + \hbar\hbar(l-\frac{1}{2}) + 0]|\text{ort}\rangle = \hbar^2(l-\frac{1}{2})(l-\frac{1}{2}+1)|\text{ort}\rangle.$$

Bevis: Stigeoperator-relasjonene gir $\hat{L}_+|l, l-1\rangle = \hbar\sqrt{2l}|l, l\rangle$ og $\hat{S}_+|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \hbar|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, slik at

$$\begin{aligned} \hat{J}_+|\text{ort}\rangle &= (\hat{L}_+ + \hat{S}_+) \left[\sqrt{\frac{1}{2l+1}} |l, l-1\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} |l, l\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right] \\ &= \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} (|l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - |l, l\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle) = 0, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$