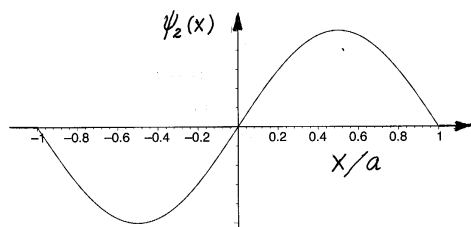


Løsningsforslag
Eksamen 10. august 2010
FY2045/TFY4250 Kvantemekanikk I

Oppgave 1

a. • Bølgefunksjonen ψ_2 for første eksiterte tilstand er (i likhet med ψ_4, ψ_6 osv) anti-symmetrisk, og har følgelig et nullpunkt i origo, hvor deltabarrieren sitter. Ifølge diskontinuitetsbetingelsen skal da ψ_2 være glatt i dette punktet, i likhet med ψ_2 for tilfellet med $\beta = 0$ (vanlig boks). Også *utenom* origo skal ψ_2 oppfylle akkurat de samme betingelsene som for $\beta = 0$: dvs oppfylle Schrödingerligningen, være lik null for $x = \pm a$, og ikke ha flere nullpunkter. Følgelig er ψ_2 for $\beta \neq 0$ identisk med ψ_2 for tilfellet $\beta = 0$.

• Første eksiterte tilstand blir da ganske enkelt en helbølge-sinus, med nullpunkt i origo:



Bølgefunksjonen for denne tilstanden er

$$\psi_2 = A \sin k_2 x, \quad \text{med } k_2 = \pi/a.$$

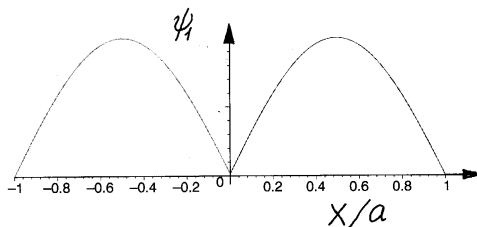
Dette kan vi kontrollere ved innsetting i den TUSL, som sammen med den oppgitte energien gir

$$\underbrace{0.01 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}}_{\text{oppgitt}} E_2 \stackrel{\text{TUSL}}{=} \frac{-(\hbar^2/2m_e)\psi_2''}{\psi_2} = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2}.$$

Av dette ser vi at

$$a = 10 \pi a_0 = 31.4 a_0.$$

b. • Det nødvendige prinsippet er at grunntilstanden ganske enkelt er symmetrisk, så venstre halvdel av ψ_1 er speilbildet av høyre halvdel. Skissen ser da slik ut:



• Begge halvdelene av grunntilstanden er sinusformet, og kontinuitetskravet i $x = a$ innebærer at den for $0 < x < a$ kan skrives f.eks på formen $\psi_1 = -B \sin[k_1(x-a)]$ (med $B > 0$). Venstre del (speilbildet) finner vi ved å skifte fortegn på x , så for $-a < x < 0$ er $\psi_1 = B \sin[k_1(x+a)]$.

• Bølgetallet k_1 (og dermed energien $E_1 = \hbar^2 k_1^2 / 2m_e$) bestemmes ved hjelp av diskontinuitetsbetingelsen. Den logaritmisk deriverte er for $x = 0^+$

$$\psi'_1 / \psi_1|_{0^+} = \frac{-k_1 B \cos[-k_1 a]}{-B \sin[-k_1 a]} = -k_1 \cot k_1 a,$$

og er for $x = 0^-$ motsatt like stor (pga symmetrien til ψ_1). Innsetting gir da

$$\underline{-k_1 a \cot k_1 a} = \frac{2m_e \beta}{\hbar^2} \frac{a}{2} = \underline{200}.$$

[Vha denne kan en vise at $k_2 a - k_1 a \approx \pi/200$, og at energidifferansen $E_2 - E_1$ blir som oppgitt i oppgaveteksten.]

c. • For $t > 0$ blir bølgefunksjonen

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}].$$

[Denne oppfyller Schrödingerligningen, fordi den er en superposisjon av stasjonære løsninger, og den er lik den oppgitte tilstanden for $t = 0$.]

• Ved å spalte av en faktor $\exp(-iE_1 t/\hbar)$ har vi

$$\Psi(x, t) = e^{-iE_1 t/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) + \psi_2(x) e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar}].$$

Med $\psi_2 = A \sin \pi x/a$ og $\psi_1 = B \sin[k_1(a - x)]$, der k_1 bare er ørlite grann mindre enn π/a og B av normeringsgrunner er bare ørlite grann mindre enn A , skjønner vi at ψ_1 og ψ_2 er praktisk talt like for $x > 0$, og praktisk talt motsatt like for $x < 0$. Sannsynligheten for å finne elektronet i høyre halvdel av potensialet ved $t = 0$ er derfor svært nær 1. Etter tiden $t = \pi\hbar/(E_2 - E_1) \equiv T/2$ er bølgefunksjonen

$$\Psi(x, T/2) = e^{-iE_1 T/2\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) - \psi_2(x)],$$

så ved dette tidspunktet er det like sannsynlig å finne elektronet på venstresiden. Etter tiden

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1}$$

er sannsynlighetstettheten den samme som for $t = 0$, så dette er periodetiden for oscillasjonen. Innsetting av $E_2 - E_1 = 10^{-4} \hbar^2 / (2m_e a_0^2)$ gir

$$T = \frac{2\pi\hbar}{10^{-4} \hbar^2 / (2m_e a_0^2)} = \frac{4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}}{10^{-4} \cdot 13.6 \text{ eV}} = 3.04 \cdot 10^{-12} \text{ s}.$$

d. • Med farten

$$v = \sqrt{\frac{2\langle E \rangle}{m_e}} = \frac{\hbar\pi}{m_e a}$$

blir tidsintervallet mellom hver kollisjon med barrieren

$$t_1 = \frac{2a}{v} = \frac{2m_e}{\hbar\pi} \cdot (10\pi a_0)^2 = 100 \left(\frac{2m_e a_0^2}{\hbar^2} \right) \pi\hbar = 100 \frac{4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}/2}{13.6 \text{ eV}} = 1.52 \cdot 10^{-14} \text{ s}.$$

- Med en transmittert strømtetthet

$$j_t = \Re \left[C^* e^{-ikx} \frac{\hbar}{im_e} ik C e^{ikx} \right] = |C|^2 \frac{\hbar k}{m_e}$$

og en innkommende strømtetthet $j_i = \hbar k / m_e$ er transmisjonskoeffisienten $T_{\text{tr}} = j_t / j_i = |C|^2$. Med $ka = \pi$ og

$$C^{-1} = 1 + \frac{im_e \beta}{\hbar^2 k} = 1 + \frac{im_e}{\hbar^2 k} \frac{200 \hbar^2}{m_e a} = 1 + i \frac{200}{\pi}$$

har vi da

$$T_{\text{tr}} = |C|^2 = [1 + (200/\pi)^2]^{-1} \approx (\pi/200)^2 = 2.47 \cdot 10^{-4}.$$

• Sannsynligheten for å finne elektronet til venstre for barrieren reduseres med en faktor $1 - T_{\text{tr}}$ for hver kollisjon. Ved tiden t er antall kollisjoner $\approx t/t_1$, slik at sannsynligheten er redusert til

$$(1 - T_{\text{tr}})^{t/t_1} \approx (\exp(-T_{\text{tr}}))^{t/t_1} = \exp(-tT_{\text{tr}}/t_1).$$

Denne er lik $1/e$ for $tT_{\text{tr}}/t_1 = 1$. “Levetiden” er altså

$$\tau = \frac{t_1}{T_{\text{tr}}} = 6.15 \cdot 10^{-11} \text{ s}.$$

Vi ser at denne er omlag en faktor 20 ganger større enn periodetiden under pkt. **b**.

Oppgave 2

a. • Med spinnkvantetallene $s_1 = 1$ og $s_2 = 1$ for partikkel 1 og 2, begrenses de mulige verdiene av kvantetallet s for totalspinnet til topartikkelsystemet av trekant-ulikheten

$$|s_1 - s_2| \leq s \leq s_1 + s_2, \quad \text{dvs} \quad 0 \leq s \leq 2.$$

De mulige verdiene for s og m er altså

$$\begin{aligned} s &= 0, & \text{med } m &= 0, \\ s &= 1, & \text{med } m &= 0, \pm 1, \\ s &= 2, & \text{med } m &= 0, \pm 1, \pm 2. \end{aligned}$$

Antallet tilstander av typen $|s, m\rangle$ er altså ganske riktig $1 + 3 + 5 = 9$.

• Tilstandene $|s, m\rangle$ kan skrives som lineærkombinasjoner av de 9 tilstandene $|m_1\rangle|m_2\rangle$ fordi de sistnevnte danner en (9-dimensjonal) basis for dette spinnsystemet.

• Da $\hat{S}_{1z}|m_1\rangle = \hbar m_1|m_1\rangle$ og $\hat{S}_{2z}|m_2\rangle = \hbar m_2|m_2\rangle$, følger det at

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |m_1\rangle|m_2\rangle &= (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z})|m_1\rangle|m_2\rangle = (\hat{S}_{1z}|m_1\rangle)|m_2\rangle + |m_1\rangle\hat{S}_{2z}|m_2\rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2)|m_1\rangle|m_2\rangle. \end{aligned}$$

Tilstanden $|m_1\rangle|m_2\rangle$ er altså også en egentilstand til $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$, med egenverdien

$$\hbar m = \hbar(m_1 + m_2).$$

b. •Tilstandene $|s=0, m=0\rangle$, $|s=1, m=0\rangle$ og $|s=2, m=0\rangle$ har alle $m=0$, og kan da være lineærkombinasjoner av tilstandene $|1\rangle|-1\rangle$, $|0\rangle|0\rangle$ og $|-1\rangle|1\rangle$, som alle har $m=0$. Alle de øvrige tilstandene av typen $|m_1\rangle|m_2\rangle$ har $m=m_1+m_2 \neq 0$, og kan følgelig ikke inngå i de aktuelle lineærkombinasjonene.

•Singlett-tilstanden $|0,0\rangle$ har egenverdien $\mathbf{S}^2 = \hbar^2 s(s+1) = 0$. Fra den oppgitte formelen følger det da at

$$B = -A \quad \text{og} \quad C = -B = A,$$

Vi har altså

$$|0,0\rangle = A(|1\rangle|-1\rangle - |0\rangle|0\rangle + |-1\rangle|1\rangle).$$

Da tilstandene i dette uttrykket er ortonormerte, får vi en normert singlett-tilstand ved å velge (f.eks) $A = 1/\sqrt{3}$.

•Da den aktuelle lineærkombinasjonen har $m=0$, har vi

$$\begin{aligned} & \hat{\mathbf{S}}^2 (A|1\rangle|-1\rangle + B|0\rangle|0\rangle + C|-1\rangle|1\rangle) \\ &= (\hat{S}_z^2 + \hbar^2 \hat{S}_z + \hat{S}_- \hat{S}_+) (A|1\rangle|-1\rangle + B|0\rangle|0\rangle + C|-1\rangle|1\rangle) \\ &= (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-})(\hat{S}_{1+} + \hat{S}_{2+}) (A|1\rangle|-1\rangle + B|0\rangle|0\rangle + C|-1\rangle|1\rangle) \\ &= (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-})\hbar\sqrt{2} [A(0+|1\rangle|0\rangle) + B(|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle) + C(|0\rangle|1\rangle + 0)] \\ &= (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-})\hbar\sqrt{2} [(A+B)|1\rangle|0\rangle + (B+C)|0\rangle|1\rangle] \\ &= \hbar\sqrt{2} \cdot \hbar\sqrt{2} [(A+B)(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|-1\rangle) + (B+C)(|-1\rangle|1\rangle + |0\rangle|0\rangle)] \\ &= 2\hbar^2 \{ (A+B)|1\rangle|-1\rangle + (A+2B+C)|0\rangle|0\rangle + (B+C)|-1\rangle|1\rangle \}. \end{aligned}$$

Dermed har vi bevist den oppgitte formelen og funnet at konstanten er $K = 2\hbar^2$.

c. For $s=1$ skal $\hat{\mathbf{S}}^2$ ha egenverdien $2\hbar^2$, så vi må ha

$$A+B=A, \quad A+2B+C=B \quad \text{og} \quad B+C=C.$$

Dette krever at $B=0$ og $C=-A$, så løsningen er

$$|1,0\rangle = A(|1\rangle|-1\rangle - |-1\rangle|1\rangle).$$

Normering oppnås ved å velge (f.eks) $A = 1/\sqrt{2}$. Kontroll av ortogonaliteten:

$$\langle 0,0|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 3}}(1+0-1) = 0, \quad \text{q.e.d.}$$

For $s=2$ skal $\hat{\mathbf{S}}^2$ ha egenverdien $\hbar^2 \cdot 2 \cdot (2+1) = 6\hbar^2$. Vi må da ha

$$A+B=3A, \quad A+2B+C=3B \quad \text{og} \quad B+C=3C,$$

dvs $B=2A$ og $C=B/2=A$, slik at

$$|2,0\rangle = A(|1\rangle|-1\rangle + 2|0\rangle|0\rangle + |-1\rangle|1\rangle).$$

Normering oppnås ved å sette (f.eks) $A = 1/\sqrt{6}$. Kontroll av ortogonalitet:

$$\begin{aligned} \langle 0,0|2,0\rangle &\propto 1-2+1=0, \quad \text{q.e.d.}, \\ \langle 1,0|2,0\rangle &\propto 1+0-1=0, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Oppgave 3

a. •Matrise-elementene av perturbasjonen, tatt mellom grunntilstanden ($n = 0$) og eksitert tilstand nr n , er

$$\begin{aligned}(V_1)_{n0}(t) &= \langle n | \hat{V}_1(t) | 0 \rangle = -p_0 \delta(t) \langle n | \hat{x} | 0 \rangle = -p_0 \delta(t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | (a + a^\dagger) | 0 \rangle \\ &= -p_0 \delta(t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{n1},\end{aligned}$$

idet $(a + a^\dagger)|0\rangle = a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$.

•Ifølge 1.-ordens perturbasjonsteori er da overgangsamplituden(e)

$$\begin{aligned}a_{0 \rightarrow n}(t) &= -p_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{n1} \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \delta(t') \exp(i\omega_{n0}t') dt' \quad \left(\omega_{n0} = \frac{E_n - E_0}{\hbar} = n\hbar\omega \right) \\ &= \frac{ip_0}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \delta_{n1} \equiv i\alpha_0 \delta_{n1} \quad (t_0 < 0, t > 0).\end{aligned}$$

Ifølge 1.-ordens perturbasjonsteori har vi altså bare overgang fra grunntilstanden til 1. eksiterte tilstand, og overgangssannsynligheten er

$$P_{0 \rightarrow 1} = |a_{0 \rightarrow 1}|^2 = \frac{p_0^2}{2\hbar m\omega} \equiv \alpha_0^2.$$

•Ifølge disse resultatene er sannsynligheten for å finne oscillatoren i den opprinnelige (grunn-)tilstanden

$$P_0 = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} P_{0 \rightarrow n} = 1 - \alpha_0^2.$$

•Førsteordens perturbasjonsteori er bare gyldig så lenge amplitudene er tilnærmet lik de verdiene de hadde i begynnelsestilstanden, $\Psi(x, 0^-) = \psi_0(x)$. Resultatene ovenfor er derfor en god tilnærming dersom

$$p_0^2 \ll 2\hbar m\omega, \quad \text{dvs dersom} \quad \alpha_0^2 \ll 1.$$

b. •Den *eksakte* amplituden for å finne oscillatoren i grunntilstanden etter perturbasjonen er projeksjonen av $\Psi(x, 0^+)$ på $\psi_0(x)$. Vha det oppgitte integralet, med $A = m\omega/\hbar$ og $B = ip_0/\hbar$, finner vi at den er

$$\begin{aligned}a_0^{\text{eks}} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \Psi(x, 0^+) dx = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-m\omega x^2/\hbar) \exp(ip_0 x/\hbar) dx \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} (\pi/A)^{1/2} \exp(B^2/4A) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{p_0^2}{\hbar^2} \frac{\hbar}{4m\omega} \right) \\ &= \exp\left(-\frac{p_0^2}{4m\hbar\omega} \right) \equiv \exp(-\alpha_0^2/2).\end{aligned}$$

Sannsynligheten for å finne oscillatoren i grunntilstanden er altså

$$P_0^{\text{eks}} = |a_0^{\text{eks}}|^2 = \exp\left(-\frac{p_0^2}{2m\hbar\omega} \right) \equiv \exp(-\alpha_0^2), \quad \text{q.e.d.}$$

- Vi rekkeutvikler

$$P_0^{\text{eks}} = \exp(-\alpha_0^2) = 1 - \alpha_0^2 + \mathcal{O}(\alpha_0^4).$$

Gyldighetsområdet for 1.-ordens perturbasjonsteori var $\alpha_0^2 \ll 1$, og vi ser at i dette området stemmer resultatet fra pkt. **a** med det eksakte. Utenfor gyldighetsområdet ser vi at feilen i 1.-ordensresultatet øker med α_0 , og det måtte vi også vente.

• Det eksakte resultatet, $P_0^{\text{eks}} = \exp(-\alpha_0^2)$, viser at sannsynligheten for å finne oscillatoren i grunntilstanden går mot null for store α_0 , dvs når “ δ -sparket” blir tilstrekkelig kraftig ($p_0 \gg \sqrt{2m\hbar\omega}$). For et slikt kraftig spark må vi vente at også sannsynligheten P_1^{eks} for å finne oscillatoren i 1. eksiterte tilstand blir liten. Oscillatoren vil få tilført mye energi av sparket, og det vil være mest sannsynlig å observere tilsvarende høye energieigenverdier.

c. • Det er lett å vise eksplisitt at $\Psi(x, 0^+)$ er en egenfunksjon til annihilasjonsoperatoren (noe som er typisk for koherente tilstander). Vi holder normeringsfaktoren utenfor, og finner at

$$\begin{aligned} a_{\text{pr}} \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0 x/\hbar) &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0 x/\hbar) \\ &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (-m\omega x/\hbar + ip_0/\hbar) \right] \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0 x/\hbar) \\ &= \frac{ip_0}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0 x/\hbar) \\ &\equiv i\alpha_0 \exp(-m\omega x^2/2\hbar + ip_0 x/\hbar), \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

- Ved å sette inn utviklingsformelen i egenverdligningen

$$\Psi(x, 0^+) = \frac{a_{\text{pr}}}{i\alpha_0} \Psi(x, 0^+)$$

finner vi at

$$\begin{aligned} \sum_{k=0} a_k^{\text{eks}} \psi_k(x) &= \sum_{n=0} \frac{a_n^{\text{eks}}}{i\alpha_0} a_{\text{pr}} \psi_n(x) = \sum_{n=1} \frac{a_n^{\text{eks}}}{i\alpha_0} \sqrt{n} \psi_{n-1}(x) \\ &= \sum_{k=0} \frac{a_{k+1}^{\text{eks}}}{i\alpha_0} \sqrt{k+1} \psi_k(x). \end{aligned}$$

For at denne skal være oppfylt må koeffisientene oppfylle følgende rekursjonsformel:

$$a_{k+1}^{\text{eks}} = \frac{i\alpha_0}{\sqrt{k+1}} a_k^{\text{eks}}, \quad \text{eller} \quad a_n^{\text{eks}} = \frac{i\alpha_0}{\sqrt{n}} a_{n-1}^{\text{eks}} \quad (n = 1, 2, \dots), \quad \text{q.e.d.}$$

Så konstanten som det var spørsmål om i oppgaveteksten er altså i .

d. •Fra formelen ovenfor finner vi at den eksakte sannsynlighetsamplituden for å finne oscillatoren i 1. eksiterte tilstand er

$$a_1^{\text{eks}} = i\alpha_0 a_0^{\text{eks}} = i\alpha_0 \exp(-\alpha_0^2/2) = i\alpha_0(1 - \alpha_0^2 + \dots),$$

og vi ser at denne til 1. orden er identisk med den vi fant i pkt. **a** vha 1.-ordens perturbasjonsteori. Som ventet er altså sistnevnte en god tilnærming for $\alpha_0^2 \ll 1$. Det samme gjelder $P_1 = \alpha_0^2$, som stemmer bra med det eksakte resultatet

$$P_1^{\text{eks}} = \alpha_0^2 \exp(-\alpha_0^2) = \alpha_0^2(1 - \alpha_0^2 + \dots)$$

for $\alpha_0^2 \ll 1$. For økende α_0 blir feilen i førsteordensresultatet gradvis større, som vi måtte vente. Vi ser også at P_1^{eks} går eksponensielt mot null for store α_0 , i tråd med formodningen på slutten av pkt. **b**.

•Fra rekusjonsformelen ser vi at

$$P_2^{\text{eks}} = \frac{\alpha_0^2}{2} P_1^{\text{eks}} = \frac{(\alpha_0^2)^2}{1 \cdot 2} \exp(-\alpha_0^2) \quad \text{og} \quad P_3^{\text{eks}} = \frac{\alpha_0^2}{3} P_2^{\text{eks}} = \frac{(\alpha_0^2)^3}{1 \cdot 2 \cdot 3} \exp(-\alpha_0^2).$$

Generelt er åpenbart sannsynligheten for å observere energien $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

$$P_n^{\text{eks}} = \frac{(\alpha_0^2)^n}{n!} \exp(-\alpha_0^2).$$

•Med

$$\frac{P_n^{\text{eks}}}{P_{n-1}^{\text{eks}}} = \frac{\alpha_0^2}{n}$$

ser vi at den maksimale sannsynligheten opptrer for

$$n \approx \alpha_0^2.$$

Som vi var inne på i pkt. **b**, er det altså for store α_0^2 (kraftige spark) mest sannsynlig å observere høye energier.