

Løsningsforslag
Eksamen 9. august 2012
FY2045/TFY4250 Kvantemekanikk I

Oppgave 1

a. ♠ Med $\psi = C$ for $|x| > a$ følger det fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at energien er lik null:

$$E = \frac{\widehat{H}\psi}{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''}{\psi} = 0.$$

♠ For $-a < x < a$ har ligningen da formen

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \psi \equiv \kappa_0^2 \psi, \quad \text{med} \quad \kappa_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0} = \frac{1}{a},$$

og med den generelle løsningen

$$\psi = A \cosh \kappa_0 x + B \sinh \kappa_0 x.$$

Kontinuiteten av ψ i $x = -a$ og $+a$ gir

$$\begin{aligned} C &= A \cosh(-\kappa_0 a) + B \sinh(-\kappa_0 a) \\ &= A \cosh(\kappa_0 a) - B \sinh(\kappa_0 a) \quad \text{og} \\ C &= A \cosh(\kappa_0 a) + B \sinh(\kappa_0 a). \end{aligned}$$

Addisjon og subtraksjon av de to ligningene gir $B = 0$, som skulle vises, og

$$A = \frac{C}{\cosh(\kappa_0 a)} \quad \text{slik at} \quad \psi = C \frac{\cosh(\kappa_0 x)}{\cosh(\kappa_0 a)} \quad \text{for} \quad -a < x < a.$$

b. ♠ Med $\psi'(a^+)/\psi(a) = 0$ og

$$\frac{\psi'(a^-)}{\psi(a)} = \frac{\kappa_0 \sinh(\kappa_0 a)}{\cosh(\kappa_0 a)} = \kappa_0 \tanh(\kappa_0 a),$$

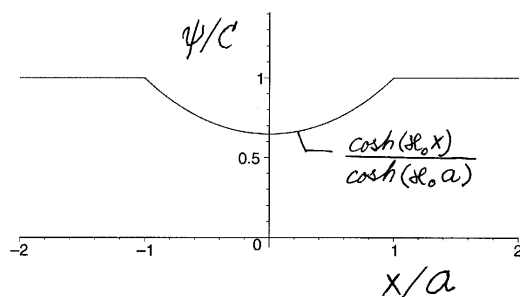
der $\kappa_0 a = 1$, gir den oppgitte diskontinuitetsbetingelsen

$$0 - \kappa_0 \tanh(\kappa_0 a) = -\frac{2m\beta_0}{\hbar^2},$$

dvs

$$\beta_0 = \frac{\hbar^2}{2ma} \kappa_0 a \tanh(\kappa_0 a) = \frac{\hbar^2}{2ma} \tanh(1) = 0.76 \frac{\hbar^2}{2ma}.$$

♠ Den symmetriske egenfunksjonen vi har funnet ser slik ut.



♠ Denne egenfunksjonen beskriver ikke en bunden tilstand, da den hverken er lokalisert eller normerbar. En eventuell *bunden* tilstand må være enten symmetrisk eller antisymmetrisk. Vi skal da se at det er tilstrekkelig å undersøke om det finnes en symmetrisk tilstand. En slik løsning må ha formen $C \exp(-\kappa x)$ for $x > a$ og $C \exp(\kappa x)$ for $x < -a$, med $\kappa > 0$. For $-a < x < a$ må den ha formen $A \cosh(\kappa_1 x)$, der $\kappa_1 > \kappa_0$. Dette krever et større sprang $\psi'(a^+) - \psi'(a^-)$ enn ovenfor, dvs det krever $\beta > \beta_0$. Det eksisterer altså for $\beta = \beta_0$ ingen symmetrisk bunden tilstand med $E < 0$, og følgelig heller ingen antisymmetrisk bunden tilstand (idet en slik tilstand må ha høyere energi).

c. ♠ Dersom første eksiterte tilstand skal være bunden, må den være antisymmetrisk, med nullpunkt i origo. For β ørlite grann mindre enn β_1 er energien til denne tilstanden tilnærmet lik null, slik at den er praktisk talt lik en konstant C_1 for $x > a$ og $\approx$ lik $-C_1$ for $x < -a$. For $-a < x < a$ har den formen $A \sinh(\kappa_0 x)$. Med

$$\frac{\psi'(a^+)}{\psi(a)} = 0 \quad \text{og} \quad \frac{\psi'(a^-)}{\psi(a)} = \kappa_0 \coth(\kappa_0 a)$$

gir diskontinuitetsbetingelsen da

$$0 - \kappa_0 \coth(\kappa_0 a) = -\frac{2m\beta_1}{\hbar^2},$$

dvs

$$\beta_1 = \frac{\hbar^2}{2ma} \coth(1) = 1.31 \frac{\hbar^2}{2ma}.$$

♠ En eventuell 2. eksiterte bunden tilstand skal ha to nullpunkter. Dette er ikke mulig, da den også skal være symmetrisk, og dermed må gå som $\cosh(\kappa_1 x)$ for $-a < x < a$. Denne funksjonen har ingen nullpunkter, og det har heller ikke $C \exp(-\kappa x)$ for $x > a$ og $C \exp(\kappa x)$ for $x < -a$. Systemet har altså i høyden to bundne tilstander, og det er for $\beta > \beta_1$.

Oppgave 2

a. ♠ Egentilstandene til S_z og dermed til $\widehat{H}$ er Pauli-spinorene

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Eigenverdiene til S_z er hhvis $+\frac{1}{2}\hbar$ og $-\frac{1}{2}\hbar$, og (de to eneste) energieigenverdiene blir dermed

$$E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \hbar \omega.$$

♠ De tilhørende stasjonære tilstandene er da

$$\chi_{\pm}(t) = \chi_{\pm} e^{-iE_{\pm}t/\hbar} = \chi_{\pm} e^{\mp \frac{1}{2} i \omega t}.$$

♠ Ved hjelp av dreieimpulsalgebraen finner vi at hverken S_x eller S_y kommuterer med $\widehat{H}$:

$$[\widehat{H}, S_x] = \omega [S_z, S_x] = +i\hbar\omega S_y,$$

$$[\widehat{H}, S_y] = \omega [S_z, S_y] = -i\hbar\omega S_x.$$

♠ Siden $\widehat{H}$ og S_x (S_y) ikke kommuterer, kan de tilhørende observablene, E og S_x (S_y), ikke ha skarpe verdier samtidig, dvs de er ikke kompatible.

b. ♠ Ifølge målepostulatet skal en måling av $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{2}\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ gi en av egenverdiene for denne størrelsen og etterlate systemet i den tilhørende egentilstanden. Vi regner derfor ut

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} \chi(0^+) &= (n_x \sigma_x + n_z \sigma_z) \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta \\ \sin \frac{1}{2}\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta \\ \sin \frac{1}{2}\theta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \frac{1}{2}\theta + \sin \theta \sin \frac{1}{2}\theta \\ \sin \theta \cos \frac{1}{2}\theta - \cos \theta \sin \frac{1}{2}\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta - \frac{1}{2}\theta) \\ \sin(\theta - \frac{1}{2}\theta) \end{pmatrix} = 1 \cdot \chi(0^+).\end{aligned}$$

Dette viser at $\chi(0^+)$ er en egentilstand til $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ med egenverdi $+1$. Konklusjonen er at måleresultatet for $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ var $+\frac{1}{2}\hbar$.

Sannsynligheten for dette resultatet er tallverdikvadratet av projeksjonen av tilstanden *før* målingen på tilstanden etter:

$$\begin{aligned}P &= |\chi^\dagger(0^+) \chi(0^-)|^2 = \left| \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta & \sin \frac{1}{2}\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix} \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \cos \frac{1}{2}\theta + \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \frac{1}{2}\theta \right|^2 = \frac{1}{2} (\cos^2 \frac{1}{2}\theta + \sin^2 \frac{1}{2}\theta) = \frac{1}{2}.\end{aligned}$$

♠ Vha den oppgitte formelen er det lett å se at spinnretningen før målingen var $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{0^+} = \hat{\mathbf{y}}$, som står vinkelrett på $\hat{\mathbf{n}}$, uavhengig av θ . Dette er grunnen til at sannsynligheten blir uavhengig av θ .

c. ♠ Målingen av $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ etterlater som vi har sett spinnretningen i en egentilstand for denne størrelsen. Derfor er $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ skarp (lik $+\frac{1}{2}\hbar$) i denne tilstanden. Fra resultatene i pkt. **a** følger det at $\hat{H}$ ikke kommuterer med $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$. Derfor kan ikke energien være skarp samtidig med $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$.

Dette innsees også ved å utvikle tilstanden i energiegentilstandene: I utviklingsformelen

$$\chi(0^+) = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta \\ \sin \frac{1}{2}\theta \end{pmatrix} = \cos \frac{1}{2}\theta \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin \frac{1}{2}\theta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv c_+ \chi_+ + c_- \chi_-$$

er $c_+ = \cos \frac{1}{2}\theta$ og $c_- = \sin \frac{1}{2}\theta$ sannsynlighetsamplitudene for å måle hhvis $E_+ = \frac{1}{2}\hbar\omega$ og $E_- = -\frac{1}{2}\hbar\omega$. Siden begge amplitudene er forskjellige fra null, er energien uskarp.

♠ Vha disse amplitudene er det lett å finne både forventningsverdi og usikkerhet for energien:

$$\langle E \rangle_{0^+} = |c_+|^2 E_+ + |c_-|^2 E_- = \frac{1}{2}\hbar\omega (\cos^2 \frac{1}{2}\theta - \sin^2 \frac{1}{2}\theta) = \frac{1}{2}\hbar\omega \cos \theta,$$

$$\langle E^2 \rangle_{0^+} = |c_+|^2 E_+^2 + |c_-|^2 E_-^2 = (\frac{1}{2}\hbar\omega) (\cos^2 \frac{1}{2}\theta + \sin^2 \frac{1}{2}\theta) = (\frac{1}{2}\hbar\omega)^2.$$

Usikkerheten i energien ved $t = 0^+$ er derfor

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \frac{1}{2}\hbar\omega \sqrt{1 - \cos^2 \theta} = \frac{1}{2}\hbar\omega \sin \theta,$$

og er som vi ser lik null for $\theta = 0, \pi$ og maksimal for $\theta = \frac{1}{2}\pi$.

♠ Hamilton-operatoren er tidsuavhengig, slik at

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{H}] \rangle = 0,$$

dvs slik at $\langle E \rangle$ blir tidsuavhengig. Tilsvarende for $\langle E^2 \rangle$, og dermed også for ΔE . Det samme innser vi ved å notere oss at for $t > 0^+$ er

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta \exp(-iE_+t/\hbar) \\ \sin \frac{1}{2}\theta \exp(-iE_-t/\hbar) \end{pmatrix},$$

slik at sannsynlighetene P_+ og P_- blir tidsuavhengige.

d. ♠ Formelen ovenfor,

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta \exp(-iE_+t/\hbar) \\ \sin \frac{1}{2}\theta \exp(-iE_-t/\hbar) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta \exp(-i\omega t/2) \\ \sin \frac{1}{2}\theta \exp(i\omega t/2) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

gjør det enkelt å finne spinnretningen som funksjon av tiden. Med $2a^*b = \sin \theta e^{i\omega t}$ og $|a|^2 - |b|^2 = \cos \theta$ blir spinnretningen

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_t &= \hat{\mathbf{x}} \sin \theta \cos \omega t + \hat{\mathbf{y}} \sin \theta \sin \omega t + \hat{\mathbf{z}} \cos \theta \\ &= (\hat{\mathbf{x}} \cos \omega t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega t) \sin \theta + \hat{\mathbf{z}} \cos \theta. \end{aligned}$$

Her ser vi at spinnretningen preseserer omkring $\mathbf{B}$ -retningen ($\hat{\mathbf{z}}$) med vinkelfrekvensen ω .

[Et alternativ er å bruke formelen for tidsutvikling av forventningsverdier, sammen med dreieimpulsalgebraen.]

♠ En måling av S_x med resultatet $+\frac{1}{2}\hbar$ må etterlate spinnet i den tilhørende egen-tilstanden. Denne finner vi fra formlene i pkt. **a**, hvor retningen $\hat{\mathbf{x}}$ svarer til $\theta = \pi/2$. Etter denne målingen er altså spinttilstanden

$$\chi_{\hat{\mathbf{x}}} = \begin{pmatrix} \cos(\pi/4) \\ \sin(\pi/4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Sannsynligheten for å måle $S_x = +\frac{1}{2}\hbar$ ved $t = 2\pi/\omega$ er derfor

$$P = |\chi_{\hat{\mathbf{x}}}^\dagger \chi(2\pi/\omega)|^2 = \left| (1/\sqrt{2} \ 1/\sqrt{2}) \begin{pmatrix} -\cos \frac{1}{2}\theta \\ -\sin \frac{1}{2}\theta \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}(\cos \frac{1}{2}\theta + \sin \frac{1}{2}\theta)^2 = \frac{1}{2}(1 + \sin \theta).$$

Denne er som vi måtte vente lik 1 for $\theta = \pi/2$.

Oppgave 3

a. ♠ Med $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$ og $zY_{00} = rY_{10}/\sqrt{3}$ kan vi skrive matrise-elementene av z på formen

$$\begin{aligned} (z)_{nlm,100} &\equiv \int \psi_{nlm}^* z \psi_{100} d^3r = \int Y_{lm}^* Y_{10} d\Omega \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^\infty R_{nl} r R_{10} r^2 dr \\ &\equiv \delta_{l1} \delta_{m0} \cdot I_n. \end{aligned}$$

Matrise-elementene er altså lik null unntatt når $l = 1$ og $m = 0$.

♠ Matrise-elementet av z mellom grunntilstanden ψ_{100} og første-nivå-tilstanden ψ_{210} bør være av samme størrelsesorden som “grunntilstandsradien” a , altså

$$(z)_{210,100} \equiv \int_0^\infty \psi_{210}^* z \psi_{100} d^3r \sim a.$$

[En enkel beregning gir $(z)_{210,100} = \frac{a}{3\sqrt{2}} \left(\frac{4}{3}\right)^4 = 0.745 a.$

♠ For overgangen fra ψ_{100} til ψ_{210} er matrise-elementet av perturbasjonen

$$(V_1)_{fi}(t') = -(z)_{210,100} p_0 \delta(t'),$$

slik at overgangsamplituden blir

$$\begin{aligned} a_{100 \rightarrow 210} &= \frac{1}{i\hbar} \int (V_1)_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt' = -\frac{p_0}{i\hbar} (z)_{210,100} \underbrace{\int \delta(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt'}_1 \\ &\sim \frac{ip_0 a}{\hbar}. \end{aligned}$$

Sannsynligheten for denne overgangen er altså av størrelsesorden

$$P_{100 \rightarrow 210} = |a_{100 \rightarrow 210}|^2 \sim \left(\frac{p_0 a}{\hbar}\right)^2.$$

[Den nøyaktige prefaktoren er $0.745^2 = 0.555.$]

Med

$$p_0 = 0.1 p_{\text{rms}} = 0.1 \sqrt{2m_e |E_1|} = 0.1 \alpha Z m_e c$$

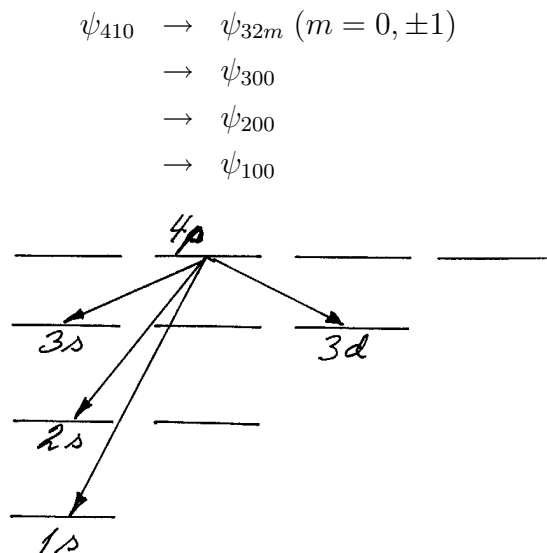
blir denne sannsynligheten av størrelsesorden

$$(p_0 a / \hbar)^2 = 0.01 \left(\frac{\alpha Z m_e c a_0}{\hbar Z} \right) = 0.01.$$

b. ♠ Med begynnelsestilstanden $4p \equiv \psi_{410}$ ser vi at utvalgsreglene

$$\Delta l = \pm 1 \quad \text{og} \quad \Delta m = 0, \pm 1$$

bare tillater overgangene



Her er det altså 6 mulige slutt-tilstander, som alle bidrar til den samlede overgangsraten fra ψ_{410} ,

$$w_{410} = \sum_f w_{i \rightarrow f},$$

og dermed til levetiden $\tau_{410} = 1/w_{410}$.

c. ♠ Ved den spontane overgangen fra ψ_{210} til grunntilstanden er dipolmomentet

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{100 \leftarrow 210} &= \int \psi_{100}^* r (\hat{\mathbf{x}} \sin \theta \cos \phi + \hat{\mathbf{y}} \sin \theta \sin \phi + \hat{\mathbf{z}} \cos \theta) \psi_{210} d^3r \\ &= I_r \hat{\mathbf{z}} \int d\Omega Y_{10} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta = I_r \hat{\mathbf{z}} \frac{1}{\sqrt{3}} \underbrace{\int d\Omega |Y_{10}|^2}_{=1} \\ &= \frac{\hat{\mathbf{z}}}{\sqrt{3}} I_r \quad \text{med} \quad I_r \equiv \int_0^\infty r^3 R_{10}(r) R_{21}(r) dr. \end{aligned}$$

Komponentene i x - og y -retning er lik null fordi integralene over ϕ fra 0 til 2π av $\cos \phi$ og $\sin \phi$ begge er lik null.

♠(i) Energien til det emitterte fotonet er proporsjonal med Z^2 , og er for $Z = 100$

$$\hbar\omega_{21} = E_2 - E_1 = \frac{1}{2}(\alpha Z)^2 m_e c^2 (1 - 1/4) = 1.02 \cdot 10^5 \text{ eV}.$$

(ii) Bohr-frekvensen skalerer på samme måte, og er

$$\omega_{21} = \frac{\hbar\omega_{21}}{\hbar} = \frac{1.02 \cdot 10^5 \text{ eV}}{6.582 \cdot 10^{-16} \text{ eVs}} = 1.55 \cdot 10^{20} \text{ s}^{-1}.$$

(iii) Dipolmomentet er omvendt proporsjonalt med Z , og er

$$d_{12} = \frac{I_r}{\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{256}{81\sqrt{6}} \frac{a_0}{Z} = 3.94 \cdot 10^{-13} \text{ m}.$$

(iv) Overgangsraten vil dermed skalere som Z^4 , og er

$$w_{210 \rightarrow 100} = \frac{4\alpha\omega_{21}^3}{3c^2} d_{12}^2 = 6.25 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}.$$

(v) Dermed blir levetiden omvendt proporsjonal med Z^4 , og er for $Z = 100$ en faktor 10^8 mindre enn for hydrogen:

$$\tau_{210} = 1.6 \cdot 10^{-17} \text{ s}.$$

♠ Dipoltilnærmelsen bygger på at en setter $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = 1$ i et integral som inneholder radialfunksjonene R_{10} og R_{21} i det aktuelle tilfellet. Dette krever at

$$ka = \frac{\omega_{21}}{c} \frac{a_0}{Z} \ll 1.$$

I det aktuelle tilfellet er $ka = 0.27$, som *ikke* kan sies å oppfylle denne ulikheten. Med Z så stor som 100, er vi derfor på gyngende grunn når det gjelder dipoltilnærmelsen.