

Inngangur að skammtafræði - Heimadæmi (haust 2025)

Matthias Harksen

*Raunvísindastofnun Háskóla Íslands
Dunhaga 3, 107 Reykjavík, Iceland*

E-mail: mbh6@hi.is

ABSTRACT: Drög að lausnum á heimadæmum í Inngangi að skammtafræði haustið 2025.

Efnisyfirlit

1	Heimadæmi 20. ágúst	2
2	Heimadæmi 27. ágúst	4
3	Heimadæmi 4. september	9
4	Heimadæmi 11. september	14
5	Heimadæmi 18. september	17
6	Heimadæmi 25. september	19
7	Heimadæmi 9. október	22
8	Heimadæmi 16. október	24
9	Heimadæmi 23. október	27
10	Heimadæmi 30. október	30
11	Heimadæmi 6. nóvember	33
12	Heimadæmi 13. nóvember	36

1 Heimadæmi 20. ágúst

Dæmi 1. Skoðum bylgjupakka með líkindaþéttleika

$$\rho(x) = Ae^{-\lambda(x-a)^2}, \quad (1.1)$$

þar sem A, a, λ eru jákvæðar rauntölur.

(a) Ákvarðið stöðlunarfastann A .

(b) Ákvarðið væntigildin á stærðunum $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle$ og staðalfrávikðið σ_x .

(c) Ríssið upp mynd af líkindaþéttleikanum $\rho(x)$.

Lausn: (a) Við byrjum á því að rifja upp Gauss-heildin

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha x^2} dx = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \quad (1.2)$$

En þar með fáum við með því að nota innsetninguna $y = x - a$ að

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = A \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \implies A = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}. \quad (1.3)$$

(b) Væntigildin og staðalfrávikðið má síðan reikna með sömu innsetningu

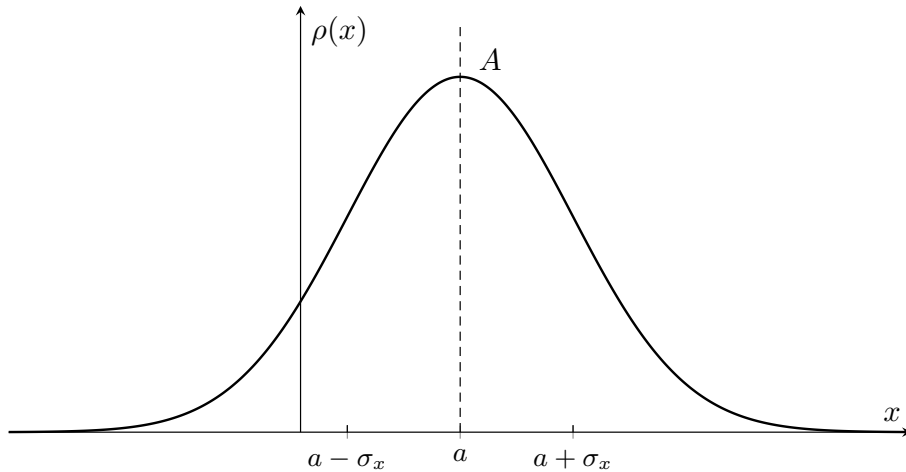
$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx = \int (y + a) A e^{-\lambda y^2} dy = a, \quad (1.4)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (y + a)^2 A e^{-\lambda y^2} dy \quad (1.5)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} (y^2 + 2ay + a^2) A e^{-\lambda y^2} dy = A \frac{1}{2\lambda} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} + a^2 A \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = \frac{1}{2\lambda} + a^2, \quad (1.6)$$

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{1}{\lambda \sqrt{2}}. \quad (1.7)$$

(c) Við rissum upp mynd af líkindaþéttleikanum



Dæmi 2. Klukkan $t = 0$ er staðsetningu agnar lýst með bylgjufallinu

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A \frac{x}{a}, & 0 \leq x \leq a, \\ A \frac{b-x}{b-a}, & a \leq x \leq b, \\ 0, & \text{annars, } x \end{cases} \quad (1.8)$$

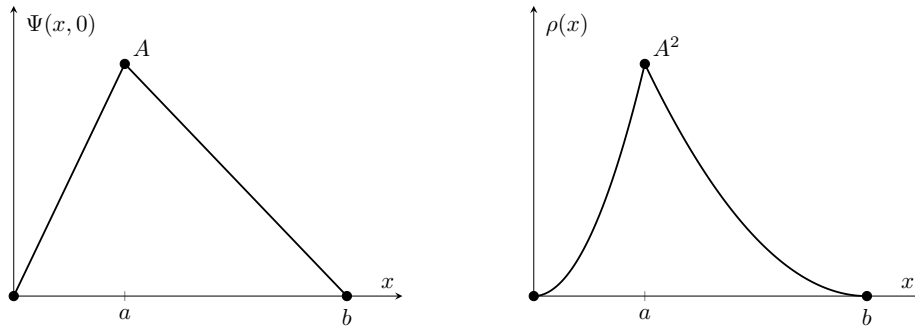
þar sem A, a, b eru jákvæðar rauntölur.

- (a) Ákvarðið stöðlunarfastann A .
- (b) Rissið upp mynd af $\Psi(x, 0)$ sem fall af x .
- (c) Hvar er líklegast að finna ögnina klukkan $t = 0$?
- (d) Hverjar eru líkurnar á því að finna ögnina vinstra megin við a ?
- (e) Hvað er væntigildið $\langle x \rangle$?

Lausn: (a) Við fáum að

$$1 = A^2 \left(\int_0^a \frac{x^2}{a^2} dx + \int_a^b \frac{(b-x)^2}{(b-a)^2} dx \right) = A^2 \left(\left[\frac{x^3}{3a^2} \right]_0^a + \left[-\frac{(b-x)^3}{3(b-a)^2} \right]_a^b \right) = \frac{A^2 b}{3} \quad (1.9)$$

En þar með ályktum við að $A = \sqrt{\frac{3}{b}}$. (b) Við rissum upp mynd af bylgjufallinu $\Psi(x, 0)$ og einnig af líkindaþéttleikanum $\rho(x) = |\Psi(x, 0)|^2$



(c) Það eru alltaf líkurnar núll á því að finna ögn í tilteknum punkti. Hinsvegar getum við spurt hvar $\rho(x)$ er stærst sem einhverskonar mælikvarða á það. En hér er það þá í $x = a$.

(d) Höfum þá að

$$P(x < a) = \frac{A^2}{a^2} \int_0^a x^2 dx = \frac{A^2 a}{3} = \frac{a}{b}. \quad (1.10)$$

(e) Væntigildið er þá

$$\langle x \rangle = A^2 \left(\int_0^a \frac{x^3}{a^2} dx + \int_a^b \frac{(b-x)^2 x}{(b-a)^2} dx \right) = A^2 \left(\left[\frac{x^4}{4a^2} \right]_0^a + \left[\frac{\frac{b^2}{2}x^2 - \frac{2b}{3}x^3 + \frac{1}{4}x^4}{(b-a)^2} \right]_a^b \right) \quad (1.11)$$

$$= \frac{3}{b} \left(\frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{4} + \frac{ab}{6} + \frac{b^2}{12} \right) = \frac{1}{4}(2a + b). \quad (1.12)$$

2 Heimadæmi 27. ágúst

Dæmi 3. Ögn með massa m er í einvíðum óendanlega djúpum mættisbrunni,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & \text{annars.} \end{cases} \quad (2.1)$$

Ástandi agnarinnar klukkan $t = 0$ er lýst með bylgjufallinu

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right), & 0 < x < \frac{a}{2}, \\ 0, & \text{annars.} \end{cases} \quad (2.2)$$

(a) Ákvarðið fastann A þannig að bylgjufallið sé staðlað og teiknið graf sem sýnir líkindaþéttleikann fyrir staðsetningu agnarinnar.

(b) Hver eru væntigildi mælistærðanna $\hat{X}$ og $\hat{P}$ klukkan $t = 0$?

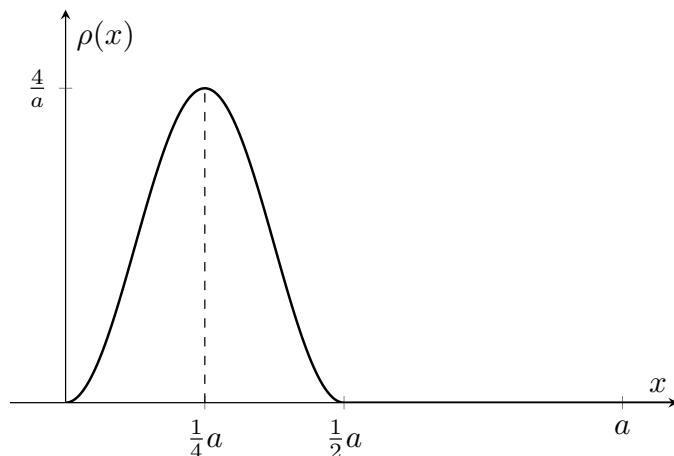
(c) Hvaða líkur eru á að mæling á orku agnarinnar gefi lægstu leyfilegu orku?

Lausn: (a) Við athugum að til að staðla líkindafallið þá fáum við að

$$1 = \int \Psi^* \Psi dx = A^2 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = \frac{A^2}{2} \int_0^{a/2} \left(1 - \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right) dx \quad (2.3)$$

$$= \frac{A^2}{2} \left[x - \frac{a}{4\pi} \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right) \right]_0^{a/2} = \frac{A^2}{2} \cdot \frac{a}{2} \quad \text{þ.a.} \quad A = \frac{2}{\sqrt{a}}. \quad (2.4)$$

Þar sem í þriðja jafnaðarmerkinu notum við hornafallaregluna $\sin^2(A) = \frac{1}{2}(1 - \cos(2A))$.
Grafð af líkindaþéttleikanum $\rho(x) = \frac{4}{a} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$ verður þá



(b) Af grafinu sést að $\langle x \rangle = \frac{1}{4}a$ og $\langle p \rangle = 0$ þar sem að bylgjufallið er jafnstætt um punktinn $x = \frac{1}{4}a$.¹ En ef við viljum þjást örlítið lengur þá getum við líka sýnt fram á það með beinum reikningum. Fáum þá að

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx = A^2 \int_0^{a/2} x \sin^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx = \frac{A^2}{2} \int_0^{a/2} x \left(1 - \cos \left(\frac{4\pi x}{a} \right) \right) dx \quad (2.5)$$

$$= \frac{A^2}{2} \left(\left[\frac{1}{2} x^2 - \frac{a}{4\pi} x \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) \right]_0^{a/2} - \frac{a}{4\pi} \int_0^{a/2} \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) dx \right) \quad (2.6)$$

$$= \frac{A^2}{2} \left(\frac{a}{2} + \left(\frac{a}{4\pi} \right) \left[\cos \left(\frac{4\pi x}{a} \right) \right]_0^{a/2} \right) = \frac{A^2}{2} \cdot \frac{a}{2} = \frac{a}{4}. \quad (2.7)$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (-i\hbar \partial_x) \Psi dx = -i\hbar A^2 \int_0^{a/2} \sin \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \partial_x \left(\sin \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \right) dx \quad (2.8)$$

$$= -i\hbar A^2 \int_0^{a/2} \sin \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \cdot \frac{2\pi}{a} \cos \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx \quad (2.9)$$

$$= -\frac{i\hbar A^2 \pi}{a} \int_0^{a/2} \sin \left(\frac{4\pi x}{a} \right) dx \quad (2.10)$$

$$= -\frac{i\hbar A^2 \pi}{a} \left[-\frac{a}{4\pi} \cos \left(\frac{4\pi x}{a} \right) \right]_0^{a/2} = \frac{i\hbar A^2}{4} [\cos(2\pi) - \cos(0)] = 0. \quad (2.11)$$

(c) Við þurfum þá að liða bylgjufallið $\Psi(x, 0)$ í eiginfallaröð af gerðinni

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x), \quad \text{þar sem } \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{n\pi x}{a} \right) \text{ með } n \geq 1. \quad (2.12)$$

Stuðlana c_n má síðan ákvarða með “trikki Fourier’s” þar sem að eiginföllin $\{\psi_n\}$ mynda þverstaðlaðan grunn fyrir fallarúmið í þeim skilningi að

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{ef } n = m, \\ 0 & \text{annars.} \end{cases} \quad (2.13)$$

þar sem δ_{nm} er Kronecker delta táknið. Til þess að gera það þá athugum við fyrst að

$$\int \psi_m^* \Psi(x, 0) dx = \int \psi_m^* \sum_n c_n \psi_n = c_m \quad (2.14)$$

Líkurnar á því að finna $\Psi(x, 0)$ í ástandinu ψ_n eru síðan $P_n = |c_n|^2$. Hér þarf því einungis að reikna stærðina $P_1 = |c_1|^2$. Sem ánægja og yndisauki látum við hinsvear almenna tilvikið á

¹Fullyrðing: Ef raungilt einvítt bylgjufall er jafnstætt um punkt $x = x_0$ þá er $\langle x \rangle = x_0$ og $\langle p \rangle = 0$. Sönnun er eftirlátin lesanda sem æfing.

c_m fylgja með. Við fáum fyrir $m \neq 2$ að

$$\begin{aligned}
c_m &= \int_0^{a/2} \psi_m^*(x) \Psi(x, 0) dx = A \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx \\
&= \frac{A}{2} \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^{a/2} \left(\cos\left((2-m)\frac{\pi x}{a}\right) - \cos\left((2+m)\frac{\pi x}{a}\right) \right) dx \\
&= \frac{A}{\sqrt{2a}} \left[\frac{a}{(2-m)\pi} \sin\left((2-m)\frac{\pi x}{a}\right) - \frac{a}{(2+m)\pi} \sin\left((2+m)\frac{\pi x}{a}\right) \right]_0^{a/2} \\
&= \frac{A}{\pi} \sqrt{\frac{a}{2}} \left(\frac{1}{2-m} \sin\left((2-m)\frac{\pi}{2}\right) - \frac{1}{2+m} \sin\left((2+m)\frac{\pi}{2}\right) \right) \\
&= \frac{A}{\pi} \sqrt{\frac{a}{2}} \left(\frac{1}{2-m} \cos(\pi) \sin\left(\frac{m\pi}{2}\right) - \frac{1}{2+m} \cos(\pi) \sin\left(\frac{m\pi}{2}\right) \right) \\
&= \frac{A}{\pi} \sqrt{\frac{a}{2}} \left(\frac{1}{2-m} + \frac{1}{2+m} \right) \sin\left(\frac{m\pi}{2}\right) \\
&= \frac{A}{\pi} \sqrt{\frac{a}{2}} \left(\frac{4}{m^2-4} \right) \sin\left(\frac{m\pi}{2}\right) = \frac{4\sqrt{2}}{\pi(m^2-4)} \sin\left(\frac{m\pi}{2}\right).
\end{aligned}$$

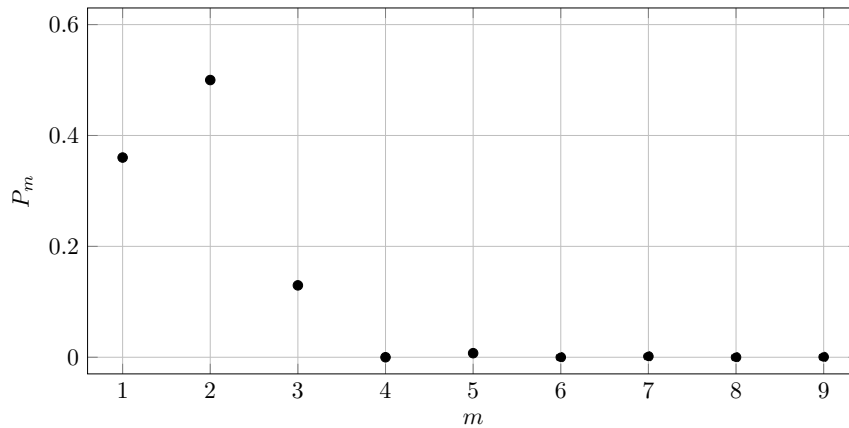
þar sem að við notuðum liðunar og summureglur hornafalla

$$\begin{aligned}
\sin(A) \sin(B) &= \frac{1}{2} (\cos(A-B) - \cos(A+B)) \\
\sin(A+B) &= \sin(A) \cos(B) + \cos(A) \sin(B).
\end{aligned}$$

Þetta gefur okkur því að líkurnar á að finna ögnina í grunnástandinu með $m = 1$ eru

$$P_1 = |c_1|^2 = \left(\frac{4\sqrt{2}}{\pi(-3)} \right)^2 = \frac{32}{9\pi^2} \approx 0,36. \quad (2.15)$$

Fyrir $m = 2$ fæst síðan að $c_2 = A \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Svo til gamans sýnum við graf af líkunum á því að finna ögnina í eiginástandi m hér að neðan:



Dæmi 4. Fallið $F(z, \xi) = e^{-z^2+2z\xi}$ er svokallað framleiðandi fall (e. *generating function*) fyrir Hermite-fleirliðurnar $H_n(\xi)$,

$$F(z, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi). \quad (2.16)$$

(a) Notið að

$$H_n(\xi) = \frac{\partial^n F}{\partial z^n}(0, \xi) \quad (2.17)$$

til að reikna fyrstu fjórar Hermite-fleirliðurnar. Berið niðurstöðuna saman við töflu 2.1 á bls. 52 í kennslubókinni.

(b) Notið framleiðandi fallið til að sanna eftirfarandi reglur um Hermite-fleirliður:

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi), \quad (2.18)$$

$$\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi). \quad (2.19)$$

(c) Notið niðurstöðuna í (b)-lið til að reikna $H_6(\xi)$ og $H_7(\xi)$ út frá fleirliðunum sem gefnar eru í töflu 2.1.

Lausn: (a) Við skrifum út framleiðandi fallið upp að $\mathcal{O}(z^5)$. Fáum að

$$\begin{aligned} e^{-z^2+2z\xi} &= 1 + (-z^2 + 2\xi z) + \frac{1}{2!}(-z^2 + 2\xi z)^2 + \frac{1}{3!}(-z^2 + 2\xi z)^3 + \frac{1}{4!}(-z^2 + 2\xi z)^4 + \mathcal{O}(z^5) \\ &= 1 + (-z^2 + 2\xi z) + \frac{1}{2}(z^4 - 4\xi z^3 + 4\xi^2 z^2) + \frac{1}{6}(z^4 - 4\xi z^3 + 4\xi^2 z^2)(-z^2 + 2\xi z) + \frac{1}{24}((2\xi z)^4 + \mathcal{O}(z^5)) \\ &= 1 + (-z^2 + 2\xi z) + \frac{1}{2}(z^4 - 4\xi z^3 + 4\xi^2 z^2) + \frac{1}{6}(-8\xi^2 z^4 + 8\xi^3 z^3 - 4\xi^2 z^4) + \frac{2}{3}\xi^4 z^4 + \mathcal{O}(z^5) \\ &= 1 + 2\xi z + (-1 + 2\xi^2)z^2 + (-2\xi + \frac{4}{3}\xi^3)z^3 + \left(\frac{1}{2} - 2\xi^2 + \frac{2}{3}\xi^4\right)z^4 + \mathcal{O}(z^5) \\ &= 1 + 2\xi z + \frac{z^2}{2}(-2 + 4\xi^2) + \frac{z^3}{6}(-12\xi + 8\xi^3) + \frac{z^4}{24}(12 - 48\xi^2 + 16\xi^4) + \mathcal{O}(z^5). \end{aligned}$$

Af þessu lesum við fyrstu fimm Hermite-margliðurnar

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = -2 + 4\xi^2, \quad H_3(\xi) = -12\xi + 8\xi^3, \quad H_4(\xi) = 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4.$$

(b) Við byrjum á því að athuga að með því að nota framleiðandi fallið fæst

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} (e^{-z^2+2z\xi}) = (-2z + 2\xi)e^{-z^2+2z\xi} = 2(\xi - z)F. \quad (2.20)$$

Með því að skrifa út raðirnar báðum megin sjáum við því að

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi) \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} H_n(\xi) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{z^m}{m!} H_{m+1}(\xi) \quad (2.21)$$

þar sem að við endurskilgreindum röðina með 'dummy' vísinum $m = n - 1$ þ.e. $n = m + 1$. Hin hlið jafnaðarmerkisins verður síðan

$$2(\xi - z)F = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (2\xi H_n(\xi)) - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{k+1}}{k!} 2H_k(\xi) \quad (2.22)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (2\xi H_n(\xi)) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} 2nH_{n-1}(\xi) \quad (2.23)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} (2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi)) . \quad (2.24)$$

Þar sem að í öðru jafnaðarmerkinu endurskilgreindum við röðina með 'dummy' vísinum $n = k + 1$ og notuðum svo í síðasta skrefinu að seinni liðurinn er núll þegar $n = 0$. Þetta gefur okkur því með samanburði að

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) . \quad (2.25)$$

Til þess að leiða út hina jöfnuna þá fáum við að fyrir framleiðandi fallið gildir að

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial \xi} e^{-z^2+2\xi z} = 2ze^{-z^2+2\xi z} = 2zF . \quad (2.26)$$

Með því að skoða aftur báðar hliðar tilheyrandi veldaraða sést að

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H'_n(\xi) = 2zF = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{k+1}}{k!} 2H_k(\xi) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m!} 2mH_{m-1}(\xi) \quad (2.27)$$

þar sem að í síðasta skrefinu endurskilgreindum við röðina með 'dummy' breytunni $m = k + 1$. Þar með ályktum við að

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) . \quad (2.28)$$

(c) Við notum þá fyrri venslins á forminu $H_n(\xi) = 2\xi H_{n-1}(\xi) - 2(n-1)H_{n-2}(\xi)$ og fáum

$$\begin{aligned} H_5(\xi) &= 2\xi H_4(\xi) - 2 \cdot 4H_3(\xi) = 2\xi(16\xi^4 - 48\xi^2 + 12) - 8(8\xi^3 - 12\xi) \\ &= 32\xi^5 - 96\xi^3 + 24\xi - 64\xi^3 + 96\xi \\ &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_6(\xi) &= 2\xi H_5(\xi) - 2 \cdot 5H_4(\xi) = 2\xi(32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi) - 10(16\xi^4 - 48\xi^2 + 12) \\ &= 64\xi^6 - 320\xi^4 + 240\xi^2 - 160\xi^4 + 480\xi^2 - 120 \\ &= 64\xi^6 - 480\xi^4 + 720\xi^2 - 120. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_7(\xi) &= 2\xi H_6(\xi) - 2 \cdot 6H_5(\xi) = 2\xi(64\xi^6 - 480\xi^4 + 720\xi^2 - 120) - 12(32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi) \\ &= 128\xi^7 - 960\xi^5 + 1440\xi^3 - 240\xi - 384\xi^5 + 1920\xi^3 - 1440\xi \\ &= 128\xi^7 - 1344\xi^5 + 3360\xi^3 - 1680\xi. \end{aligned}$$

3 Heimadæmi 4. september

Dæmi 5. Einvítt skammtakerfi inniheldur ögn með massa m í mætti,

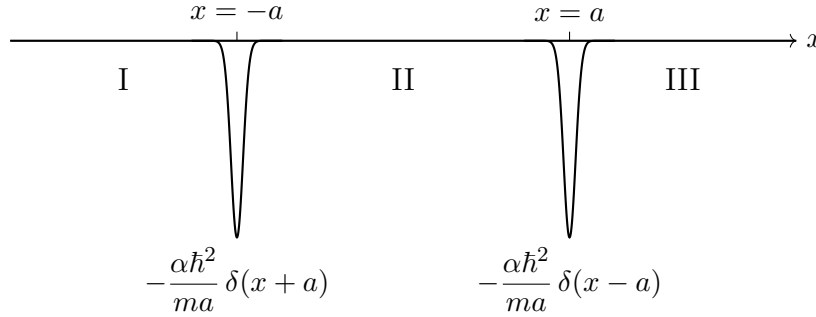
$$V(x) = -\frac{\alpha\hbar^2}{ma} \left(\delta(x-a) + \delta(x+a) \right),$$

þar sem $\alpha > 0$ er fasti og $\delta(x)$ er Dirac-deltafallið.

(a) Sýnið að kerfið hafi ávallt að minnsta kosti eitt bundið ástand.

(b) Sýnið að tvö bundin ástönd séu fyrir hendi ef $\alpha > \frac{1}{2}$.

Lausn: (Athugið að lausnin þarf ekki að vera svona löng þetta er bara aðeins lengra til útskýringar). Skoðum bundin ástönd með $E < 0$. Byrjum á því að teikna mynd af mættinu:



Þar sem að mættið $V(x)$ er jafnsætt um $x = 0$ þá er samkvæmt dæmi 2.1c í Griffiths hægt að gera ráð fyrir því að bylgjufallið sé jafnstætt eða oddstætt. Við byrjum á því að gera ráð fyrir að bylgjufallið sé jafnstætt. Á hverju af svæðunum I, II og III er mættið fasti. Almennit þegar að $V(x) = V$ er fasti þá getum við umritað Schrödinger-jöfnuna þannig að

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V\psi(x) = E\psi(x) \implies \psi''(x) + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \quad (3.1)$$

Næst skiptir formerkið á $E - V$ máli.

- Ef $E - V > 0$: bylgjuföll $A \cos(kx) + B \sin(kx)$ eða $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ með $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-V)}$.
- Ef $E = V$: þá er lausnin $A + Bx$.
- Ef $E - V < 0$: breiðbogaföll $A \cosh(\kappa x) + B \sinh(\kappa x)$ eða $Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$ með $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{-2m(E-V)}$.

Í þessu dæmi er $V = 0$ á svæðunum I, II og III. Við höfum síðan $E < 0$ þannig að lausnin á hverju svæði um sig er breiðbogalausn með $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}$. Höfum því

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_I e^{\kappa x} + B_I e^{-\kappa x}, & \text{ef } x < -a \\ \psi_{II}(x) = A_{II} e^{\kappa x} + B_{II} e^{-\kappa x}, & \text{ef } |x| < a \\ \psi_{III}(x) = A_{III} e^{\kappa x} + B_{III} e^{-\kappa x}, & \text{ef } x > a \end{cases} \quad (3.2)$$

Bylgjufallið þarf að vera takmarkað þegar að $x \rightarrow \pm\infty$ svo við sjáum að þá verður $B_I = 0$ og $A_{III} = 0$. Þá höfum við

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_I e^{\kappa x}, & \text{ef } x < -a \\ \psi_{II}(x) = A_{II} e^{\kappa x} + B_{II} e^{-\kappa x}, & \text{ef } |x| < a \\ \psi_{III}(x) = B_{III} e^{-\kappa x}, & \text{ef } x > a \end{cases} \quad (3.3)$$

(1) Ef bylgjufallið er jafnstætt þá er $A := A_I = B_{III}$ og $B := A_{II} = B_{II}$ svo það gefur

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A e^{\kappa x}, & \text{ef } x < -a \\ \psi_{II}(x) = B(e^{\kappa x} + e^{-\kappa x}), & \text{ef } |x| < a \\ \psi_{III}(x) = A e^{-\kappa x}, & \text{ef } x > a \end{cases} \quad (3.4)$$

Bylgjufallið þarf síðan að vera samfellt í $x = \pm a$ (þar sem að við erum búin að nota að bylgjufallið sé jafnstætt nægir okkur að skoða $x = +a$). En það gefur okkur skilyrðið

$$\text{Bylgjufallið samfellt í } x = a: \quad B(e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}) = A e^{-\kappa a}. \quad (3.5)$$

Næst þurfum við að skoða afleiðuskilyrðið í $x = a$. Almenn þegar maður er með delta-fall í punkti $x = x_0$ er hugmyndin að tegra Schrödinger-jöfnuna yfir bilið $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ og taka markgildið þegar $\epsilon \rightarrow 0$. Hér fáum við því

$$0 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x)\psi(x) - E\psi(x) \right] dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi'(a) - \frac{\alpha\hbar^2}{ma} \psi(a). \quad (3.6)$$

þar sem að við notuðum skilgreininguna á Dirac δ -fallinu og skilgreindum einnig ritháttinn

$$\Delta\psi'(a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\psi'(a + \epsilon) - \psi'(a - \epsilon)] = \psi'_{III}(a) - \psi'_{II}(a). \quad (3.7)$$

Þetta gefur því eftirfarandi skilyrði $\Delta\psi'(a) = -\frac{2\alpha}{a}\psi(a)$ og því

$$\text{Afleiðuskilyrðið í } x = a \quad -\kappa A e^{-\kappa a} - \kappa B(e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}) = -\frac{2\alpha}{a} A e^{-\kappa a}. \quad (3.8)$$

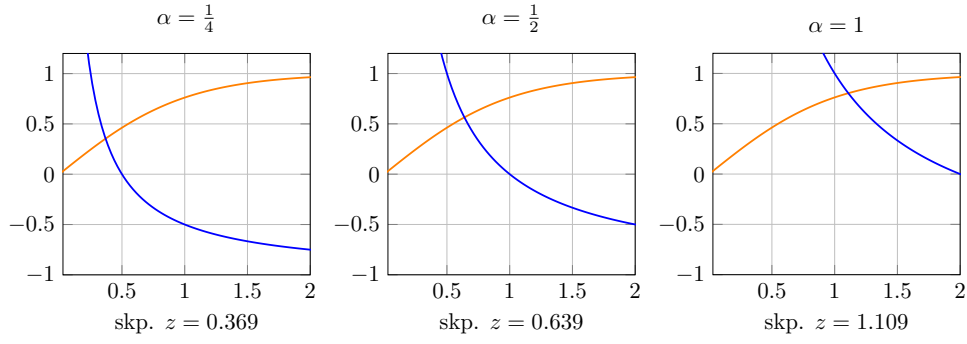
Með því að taka saman afleiðuskilyrðið og samfeldnina í $x = a$ þá fáum við að

$$B(e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}) = (-1 + \frac{2\alpha}{a\kappa}) A e^{-\kappa a} = (-1 + \frac{2\alpha}{a\kappa})(e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}) B \quad (3.9)$$

En það gefur því eftirfarandi skilyrði fyrir κ

$$\tanh(\kappa a) = -1 + \frac{2\alpha}{a\kappa}. \quad (\text{jafngilt form er } e^{-2\kappa a} = \frac{a\kappa}{\alpha} - 1) \quad (3.10)$$

Þetta er jafna sem verður að leysa með tölulegum aðferðum. Við sýnum hér nokkur mismunandi gröf með $z = a\kappa$ fyrir breytileg gildi á α .



Við sjáum af gröfunum að almennt hefur jafnstæða lausnin alltaf nákvæmlega eina rót og því er ávallt a.m.k. eitt bundið ástand fyrir hendi. Það er hægt að sýna þetta aðeins formlegra með því að skoða jafngilda formið $e^{-2\kappa a} = -1 + \frac{a\kappa}{\alpha}$

Skoðum núna **(2) Ef bylgjufallið er oddstætt** þá er $A := -A_I = B_{III}$ og $B := A_{II} = -B_{II}$ svo það gefur

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = -Ae^{\kappa x}, & \text{ef } x < -a \\ \psi_{II}(x) = B(e^{\kappa x} - e^{-\kappa x}), & \text{ef } |x| < a \\ \psi_{III}(x) = Ae^{-\kappa x}, & \text{ef } x > a \end{cases} \quad (3.11)$$

Samfelldniskilyrðið og afleiðuskilyrðið gefur þá

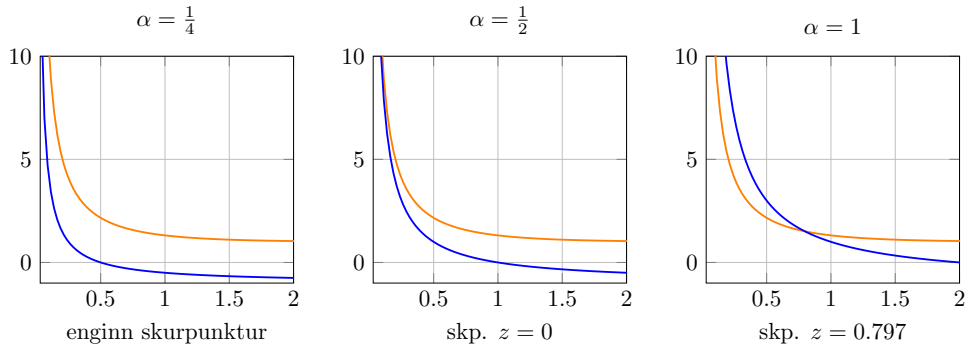
$$\text{Bylgjufallið samfellt í } x = a: \quad B(e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}) = Ae^{-\kappa a}. \quad (3.12)$$

$$\text{Afleiðuskilyrðið í } x = a \quad -\kappa Ae^{-\kappa a} - \kappa B(e^{\kappa a} + e^{-\kappa a}) = -\frac{2\alpha}{a} Ae^{-\kappa a}. \quad (3.13)$$

En þetta gefur torræða skilyrðið

$$\coth(\kappa a) = -1 + \frac{2\alpha}{\kappa a} \quad (\text{jafngilt form er } e^{-2\kappa a} = 1 - \frac{a\kappa}{\alpha}) \quad (3.14)$$

Þetta er aftur jafna sem að þarf að leysa með tölulegum aðferðum.



Við sjáum af gröfunum að ferlarnir skerast einungis ef $\alpha > \frac{1}{2}$.

Dæmi 6. Reiknið endurkastsstuðul R og gegnstreymisstuðul T fyrir agnir með orku $E > V_0 > 0$ sem lenda á mættisþröskuldi

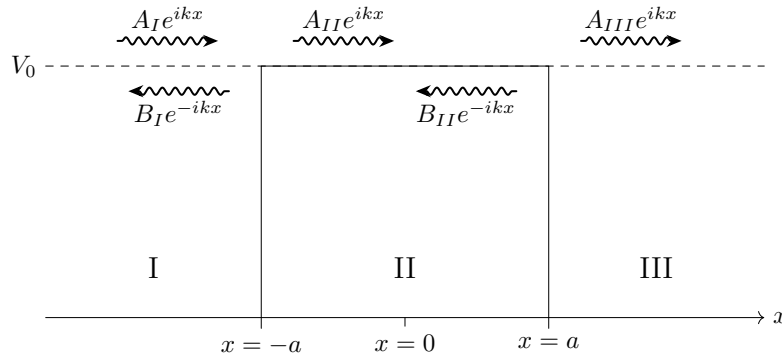
$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{ef } |x| < a, \\ 0 & \text{ef } |x| > a. \end{cases}$$

Talað er um hermur ef $T = 1$ fyrir ákveðin gildi á orku agnanna. Sýnið að hermur verða í þessu kerfi þegar orkan uppfyllir

$$\sqrt{2m(E - V_0)} = \frac{n\pi\hbar}{2a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Túlkið hermuskilyrðið út frá de Broglie bylgjulengd agnanna á svæðinu $|x| < a$.

Lausn: Við höfum fengið endanlegan mættisþröskuld:



Lausn Schrödinger-jöfnunnar á hverju svæði fyrir sig er þá

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx}, \\ \psi_{II}(x) = A_{II} e^{ikx} + B_{II} e^{-ikx}, \\ \psi_{III}(x) = A_{III} e^{ikx} + B_{III} e^{-ikx}. \end{cases} \quad (3.15)$$

með $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$ og $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)}$. Þar sem að við viljum skoða óbundin ástönd sem koma inn frá vinstri þá setjum við $B_{III} = 0$. Þá gefa samfeldni og afleiðskilyrðin í $x = -a$ okkur að

$$\begin{cases} A_I e^{-ika} + B_I e^{ika} = A_{II} e^{-i\kappa a} + B_{II} e^{i\kappa a}, \\ ik(A_I e^{-ika} - B_I e^{ika}) = i\kappa(A_{II} e^{-i\kappa a} - B_{II} e^{i\kappa a}). \end{cases} \quad (3.16)$$

Með því að leggja saman og draga frá þessar jöfnur fæst að

$$\begin{cases} 2A_I = (1 + \frac{\kappa}{k})A_{II} e^{-i\kappa a} + (1 - \frac{\kappa}{k})B_{II} e^{i\kappa a}, \\ 2B_I = (1 - \frac{\kappa}{k})A_{II} e^{-i\kappa a} + (1 + \frac{\kappa}{k})B_{II} e^{i\kappa a} \end{cases} \quad (3.17)$$

Samfeldni og afleiðuskilyrðin í $x = a$ gefa síðan að

$$\begin{cases} A_{\text{III}}e^{ika} = A_{\text{II}}e^{i\kappa a} + B_{\text{II}}e^{-i\kappa a}, \\ ikA_{\text{III}}e^{ika} = i\kappa(A_{\text{II}}e^{i\kappa a} - B_{\text{II}}e^{-i\kappa a}). \end{cases} \quad (3.18)$$

Nú gefur samlagning og frádráttur okkur að

$$\begin{cases} 2A_{\text{I}} = (1 + \frac{\kappa}{k})A_{\text{II}}e^{-i\kappa a} + (1 - \frac{\kappa}{k})B_{\text{II}}e^{i\kappa a}, \\ 2B_{\text{I}} = (1 - \frac{\kappa}{k})A_{\text{II}}e^{-i\kappa a} + (1 + \frac{\kappa}{k})B_{\text{II}}e^{i\kappa a} \end{cases} \quad (3.19)$$

Þar af leiðir að

$$2A_{\text{I}}e^{-ika} = \frac{1}{2}(1 + \frac{\kappa}{k})(1 + \frac{k}{\kappa})A_{\text{III}}e^{ika}e^{-2i\kappa a} + \frac{1}{2}(1 - \frac{\kappa}{k})(1 - \frac{k}{\kappa})A_{\text{III}}e^{ika}e^{2i\kappa a} \quad (3.20)$$

p.a.

$$4e^{-2ika}\frac{A_{\text{I}}}{A_{\text{III}}} = \left(2 + \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}\right)\right)e^{-2i\kappa a} + \left(2 - \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}\right)\right)e^{2i\kappa a} \quad (3.21)$$

$$= 4\cos(2\kappa a) - 2i\left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}\right)\sin(2\kappa a) \quad (3.22)$$

sem við getum umritað þannig að

$$\frac{A_{\text{I}}}{A_{\text{III}}} = \left[\cos(2\kappa a) - \frac{i}{2}\left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}\right)\sin(2\kappa a)\right]e^{2ika} \quad (3.23)$$

En það gefur því að

$$\frac{1}{T} = \left|\frac{A_{\text{I}}}{A_{\text{III}}}\right|^2 = \cos^2(2\kappa a) + \frac{(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa})^2}{4}\sin^2(2\kappa a) = 1 + \left[\frac{(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa})^2}{4} - 1\right]\sin^2(2\kappa a). \quad (3.24)$$

Við athugum síðan að

$$\frac{(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa})^2}{4} - 1 = \left(\frac{\kappa^2 - k^2}{2k\kappa}\right)^2 = \left(\frac{2m(E - V_0) - 2mE}{2\sqrt{2mE} \cdot 2m(E - V_0)}\right)^2 = \frac{V_0^2}{4E\sqrt{E - V_0}}, \quad (3.25)$$

En þar með ályktum við að

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{V_0^2}{4E\sqrt{E - V_0}}\sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)}\right), \quad (3.26)$$

Svo er $R = 1 - T$. Athugum að samkvæmt ofangreindri útleiðslu sést að $T = 1$ þegar

$$\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)} = n\pi \implies \sqrt{2m(E - V_0)} = \frac{n\pi\hbar}{2a} = \frac{nh}{4a} \quad (3.27)$$

En de Broglie bylgjulengdin er skilgreind sem $\lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V_0)}}$ en staðbylgjur (með lokuð jaðarskilyrði) myndu hafa $2a = \frac{n}{2}\lambda_{\text{dB}}$ saman gefur þetta að $\frac{4a}{n} = \lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - V_0)}}$.

4 Heimadæmi 11. september

Dæmi 7. Einvíður hreintóna sveifill hefur Hamilton-virkjann $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2$. Ástandi sveifilsins klukkan $t = 0$ er lýst með bylgjufallinu

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} Ax e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} & \text{ef } x > 0, \\ 0 & \text{ef } x < 0. \end{cases}$$

- (a) i. Ákvarðið fastann A þannig að bylgjufallið sé staðlað.
ii. Reiknið væntigildi $\hat{X}$ og $\hat{P}$ í þessu ástandi.
- (b) Nú er orka agnarinnar mæld. Hvaða líkur eru á að mælingin gefi lægstu mögulegu orku sveifilsins?

Lausn: Við munum nota eftirfarandi heildi viðstöðulaust í þessari lausn:

$$\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha}, \quad \int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{4\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \int_0^\infty x^3 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha^2}. \quad (4.1)$$

Til að byrja með athugum við að

$$1 = \int |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int_0^\infty x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx = \frac{|A|^2}{4} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} \sqrt{\pi} \quad (4.2)$$

En af því leiðir því að $A = \frac{2}{\pi^{1/4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4}$. Næst athugum við að

$$\langle \hat{X} \rangle = |A|^2 \int_0^\infty x^3 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx = |A|^2 \frac{1}{2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (4.3)$$

Svo er

$$\langle \hat{P} \rangle = -i\hbar |A|^2 \int_0^\infty x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \partial_x \left(x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) dx \quad (4.4)$$

$$= -i\hbar |A|^2 \int_0^\infty \left[x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} - \frac{m\omega}{\hbar} x^3 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \right] dx \quad (4.5)$$

$$= -i\hbar |A|^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} - \frac{m\omega}{2\hbar \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2} \right) = 0. \quad (4.6)$$

Loks athugum við að þegar almennt má rita bylgjufallið sem línulega samantekt á forminu $\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n$ líkurnar á því að finna ögnina í grunnástandinu $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ (sem er það ástand sem hefur lægsta orku) er þá $P = |c_0|^2$ en stuðulinn c_0 í liðuninni má reikna samkvæmt

$$c_0 = \int_0^\infty \psi_0(x) \Psi(x, 0) dx = A \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right) \int_0^\infty x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}}. \quad (4.7)$$

Líkurnar eru því $P = |c_0|^2 = \frac{1}{\pi} \approx 0,32$.

Dæmi 8. Andhverfanleg línuleg vörpun sem uppfyllir $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$ er sögð vera einoka.

- (a) Sýnið að einoka vörpun varpeitir innfeldi, þ.e.a.s. að $\langle \hat{U}\alpha | \hat{U}\beta \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle$ fyrir alla vigr $|\alpha\rangle$ og $|\beta\rangle$ í innfeldisrúmi V .
- (b) Sýnið að eigingildi einoka vörpunar hafi lengd 1.
- (c) Sýnið að eiginvigrar einoka vörpunar, sem tilheyra mismunandi eigingildum, séu hornréttir.
- (d) Sýnið að vörpunin $e^{i\hat{H}}$ sé einoka ef $\hat{H}$ er sjálfoka.

Lausn:

- (a) Látum $\tilde{\alpha} = \hat{U}\alpha$ og $\tilde{\beta} = \hat{U}\beta$. Þá fæst

$$\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\beta} \rangle = \sum_n \tilde{\alpha}_n^* \tilde{\beta}_n = \sum_n \left(\sum_m U_{nm} \alpha_m \right)^* \left(\sum_k U_{nk} \beta_k \right) = \sum_{n,m,k} U_{nm}^* U_{nk} \alpha_m^* \beta_k \quad (4.8)$$

En skilyrðið $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$ þýðir í fylkjamargföldun að

$$\sum_n U_{n\ell}^* U_{nd} = \delta_{\ell d} \quad (4.9)$$

þar sem að $\delta_{\ell d}$ er Kronecker-delta táknið. En þetta gefur okkur því að

$$\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\beta} \rangle = \sum_{n,m,k} U_{nm}^* U_{nk} \alpha_m^* \beta_k = \sum_{m,k} \delta_{mk} \alpha_m^* \beta_k = \sum_m \alpha_m^* \beta_m = \langle \alpha | \beta \rangle. \quad (4.10)$$

- (b) Látum λ vera eigingildi $\hat{U}$ með eiginvigr $|v\rangle$ þannig að $\hat{U}|v\rangle = \lambda|v\rangle$. En þetta gefur þá með niðurstöðunni í (a) að

$$\langle v | v \rangle = \langle \hat{U}v | \hat{U}v \rangle = \langle \lambda v | \lambda v \rangle = |\lambda|^2 \langle v | v \rangle \quad (4.11)$$

Nú er $\langle v | v \rangle \neq 0$ því $|v\rangle$ er eiginvigr $\hat{U}$. Þar með ályktum við að $|\lambda|^2 = 1$ þ.e. að eigingildi einoka vörpunar hefur lengd 1 (gæti verið tvinntala $e^{i\gamma}$).

- (c) Látum λ og γ vera tvö ólík eigingildi fyrir eiginvigr $|v\rangle$ og $|w\rangle$. Með því að nota niðurstöðuna úr (b) fæst að

$$\langle v | w \rangle = \langle \hat{U}v | \hat{U}w \rangle = \lambda^* \gamma \langle v | w \rangle, \quad \text{þ.a.} \quad (1 - \lambda^* \gamma) \langle v | w \rangle = 0. \quad (4.12)$$

Við ályktum því að annað hvort er $\langle v | w \rangle = 0$ eða að $1 = \lambda^* \gamma = \lambda \gamma^*$. Sýnum að hið síðara leiði til mótsagnar. Þar sem λ og γ eru eigingildi einoka vörpunar má skv. (b)-lið skrifa $\lambda = e^{ia}$ og $\gamma = e^{ib}$ en þá fæst að

$$1 = e^{i(b-a)} \quad (4.13)$$

en það þýðir að mest muni $2\pi n$ á a og b en þá væri $\lambda = \gamma$ sem er mótsögn. Því ályktum við að eiginvigrar einoka vörpunar séu þverstaðlaðir.

(d) Nú er $\hat{H}$ sjálfoka en það þýðir að $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$. Hér fáum við því

$$(e^{i\hat{H}})^\dagger e^{i\hat{H}} = \left(I + i\hat{H} + \frac{(i\hat{H})^2}{2} + \dots \right)^\dagger \left(I + i\hat{H} + \frac{(i\hat{H})^2}{2} + \dots \right) \quad (4.14)$$

$$= \left(I - i\hat{H}^\dagger + \frac{(-i\hat{H}^\dagger)^2}{2} + \dots \right) \left(I + i\hat{H} + \dots \right) \quad (4.15)$$

$$= I + i \left(H - \hat{H}^\dagger \right) + \dots \quad (4.16)$$

$$= I. \quad (4.17)$$

Aðeins formlegri leið til að skrifa út þessa aðferð væri síðan eftirfarandi

$$(e^{i\hat{H}})^\dagger e^{i\hat{H}} = \sum_{n,m} \frac{(-i\hat{H})^n}{n!} \frac{(i\hat{H})^m}{m!} = \sum_{n,m} \frac{(-i)^n (i)^m}{n!m!} \hat{H}^{n+m} \quad (4.18)$$

setjum svo $k = n + m$ og fáum

$$= \sum_k (-i)^k \hat{H}^k \sum_m \frac{(-1)^m}{(k-m)!m!} \quad (4.19)$$

En seinni röðin er $\delta_{k,0}$ og það gefur niðurstöðuna því $(\hat{H})^0 = I$.

Einfaldasta aðferðin Er líklegast að nota að $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ og nota Baker–Campbell–Hausdorff þannig að

$$\left(e^{i\hat{H}} \right)^\dagger e^{i\hat{H}} = e^{-i\hat{H}} e^{i\hat{H}} = e^{-i\hat{H}+i\hat{H}} = e^{\hat{0}} = \sum_n \frac{\hat{0}^n}{n!} = \hat{I}. \quad (4.20)$$

þar sem að $\hat{I}$ táknar einingarfylkið.

5 Heimadæmi 18. september

Dæmi 9. Hamiltonvirki einvíðs hreintóna sveifils er $\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \hat{1} \right)$.

- (a) Sýnið að virkinn $\hat{A} = i\hat{a}_+^2 \hat{a}_- - i\hat{a}_+^2 \hat{a}_-$ sé sjálfoka.
- (b) Látum ψ_n vera eiginfall $\hat{H}$ með eigingildið $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Fyrir gefið gildi á n , tilgreinið og rökstyðjið fyrir hvaða m fylkjastakið $\langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle$ þar sem $\hat{A}$ er sjálfoka virkinn úr (a)-lið, er frábrugðið núlli.
- (c) Reiknið þau fylkjastök í (b)-lið sem eru frábrugðin núlli ef $n = 1$.

Lausn: (a) Við athugum fyrst að $\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\mp i\hat{p} + m\omega x\hat{1})$ þ.a. $\hat{a}_\pm^\dagger = \hat{a}_\mp$. Síðan gildir að $(ABC)^\dagger = C^\dagger B^\dagger A^\dagger$ þannig að

$$\hat{A}^\dagger = (i\hat{a}_+ \hat{a}_-^2 - i\hat{a}_+^2 \hat{a}_-)^\dagger = (-i\hat{a}_-^\dagger \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_+^\dagger + i\hat{a}_-^\dagger \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+^\dagger) = -i\hat{a}_+^2 \hat{a}_- + i\hat{a}_+ \hat{a}_-^2 = \hat{A}. \quad (5.1)$$

Þar með höfum við sýnt að $\hat{A}$ er sjálfoka en það þýðir að $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Fylgisetning segir þá að öll eigingildi $\hat{A}$ eru rauntölur. (b) Við notum eiginleika hækkunar og lækkunarvirkjanna

$$\hat{a}_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad \hat{a}_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}. \quad (5.2)$$

Fáum því ef $n \geq 2$ að

$$\langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle = \langle \psi_m | i\hat{a}_+ \hat{a}_-^2 - i\hat{a}_+^2 \hat{a}_- | \psi_n \rangle \quad (5.3)$$

Fáum því ef $n \geq 2$ að

$$\langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle = \langle \psi_m | i\hat{a}_+ \hat{a}_-^2 - i\hat{a}_+^2 \hat{a}_- | \psi_n \rangle \quad (5.4)$$

$$= i \langle \psi_m | \hat{a}_+ \hat{a}_-^2 | \psi_n \rangle - i \langle \psi_m | \hat{a}_+^2 \hat{a}_- | \psi_n \rangle \quad (5.5)$$

$$= i \langle \psi_m | \hat{a}_+ \hat{a}_- \sqrt{n} | \psi_{n-1} \rangle - i \langle \psi_m | \hat{a}_+^2 \sqrt{n} | \psi_{n-1} \rangle \quad (5.6)$$

$$= i\sqrt{n}\sqrt{n-1} \langle \psi_m | \hat{a}_+ | \psi_{n-2} \rangle - i\sqrt{n}\sqrt{n} \langle \psi_m | \hat{a}_+ | \psi_n \rangle \quad (5.7)$$

$$= i\sqrt{n}(n-1)\delta_{m,n-1} - in\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}. \quad (5.8)$$

Fyrir $n = 1$ fæst hinsvegar að

$$\langle \psi_m | \hat{A} | \psi_1 \rangle = \langle \psi_m | -i\hat{a}_+^2 \hat{a}_- | \psi_1 \rangle = -i \langle \psi_m | \hat{a}_+^2 | \psi_0 \rangle = -i \langle \psi_m | \hat{a}_+ | \psi_1 \rangle = -i\sqrt{2}\delta_{m,2}. \quad (5.9)$$

svo eina fylkjastakið sem er ekki núll er $\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle = -i\sqrt{2}$.

Dæmi 10. Finnið líkindaþéttleika skriðþungans $|\Phi(p, t)|^2$ fyrir grunnástand og fyrsta örvaða ástand agnar í óendanlega djúpum mættisbrunni af breidd a í einni vídd. Teiknið graf $|\Phi(p, t)|^2$ fyrir bæði tilfellin.

Lausn: Hér höfum við

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad \text{ef } 0 < x < a. \quad (5.10)$$

Við fáum þá að

$$\Phi_n(p, t) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \psi_n(x, t) dx \quad (5.11)$$

$$= \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}{\sqrt{a\pi\hbar}} \int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx \quad (5.12)$$

$$= \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}{2i\sqrt{a\pi\hbar}} \int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \left(e^{i\frac{n\pi}{a} x} - e^{-i\frac{n\pi}{a} x} \right) dx \quad (5.13)$$

$$= \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}{2i\sqrt{a\pi\hbar}} \left[\frac{1}{i\left(\frac{n\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}\right)} e^{i\left(\frac{n\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}\right)x} + \frac{1}{i\left(\frac{n\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}\right)} e^{-i\left(\frac{n\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}\right)x} \right]_0^a \quad (5.14)$$

$$= -\frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}{2\sqrt{a\pi\hbar}} \left(\frac{(-1)^n e^{-\frac{ipa}{\hbar}}}{\frac{n\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}} + \frac{(-1)^n e^{-\frac{ipa}{\hbar}}}{\frac{n\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}} - \frac{1}{\frac{n\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}} - \frac{1}{\frac{n\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}} \right) \quad (5.15)$$

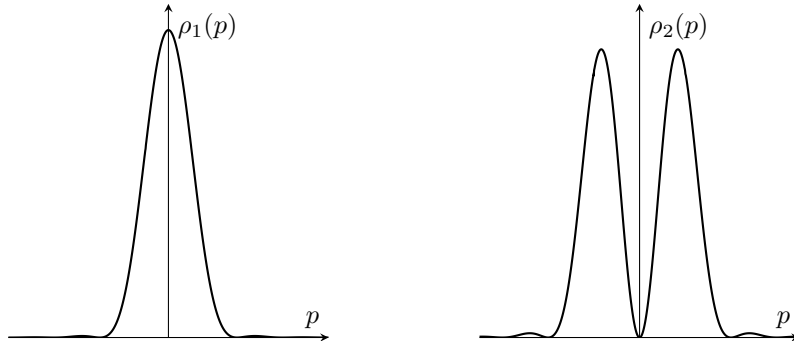
$$= -\frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}{\sqrt{a\pi\hbar}} \cdot \frac{n\pi/a}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 - \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2} \left((-1)^n e^{-\frac{ipa}{\hbar}} - 1 \right) \quad (5.16)$$

$$= \sqrt{\frac{a\pi}{\hbar}} \frac{n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}}{(n\pi)^2 - \left(\frac{ap}{\hbar}\right)^2} \left(e^{\frac{ipa}{2\hbar}} - (-1)^n e^{-\frac{ipa}{2\hbar}} \right) e^{-\frac{ipa}{2\hbar}}. \quad (5.17)$$

Fáum þá að

$$\rho_n(p, t) = |\Phi_n(p, t)|^2 = \begin{cases} \frac{a\pi}{\hbar} \frac{4(2k)^2}{(2k\pi)^2 - (ap/\hbar)^2} \sin^2\left(\frac{pa}{2\hbar}\right) & \text{ef } n = 2k \text{ slétt} \\ \frac{a\pi}{\hbar} \frac{4(2k+1)^2}{((2k+1)\pi)^2 - (ap/\hbar)^2} \cos^2\left(\frac{pa}{2\hbar}\right) & \text{ef } n = 2k + 1 \text{ oddatala} \end{cases} \quad (5.18)$$

Tökum sér í lagi eftir að $\rho_n(p, t) = \rho_n(p)$ er tímaóháð og því fást eftirfarandi gröf:



6 Heimadæmi 25. september

Dæmi 11. Fylki Hamiltonvirkjans $\hat{H}$ og mælistærðar $\hat{A}$ í skammtakerfi eru

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = a \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

þar sem $a > 0$ er fasti.

- (a) i. Hvaða mæligildi getur mæling á $\hat{A}$ gefið?
- ii. Getur kerfið verið í ástandi þar sem hægt er að segja með fullri vissu fyrir um niðurstöðu mæling á bæði $\hat{A}$ og orku kerfisins. Rökstyðjið svarið.
- (b) Klukkan $t = 0$ er framkvæmd mæling á $\hat{A}$, sem gefur hæsta mögulega mæligildi. Reiknið líkurnar á að fá aftur sama gildi ef mælingin er endurtekin klukkan $t > 0$.

Lausn: (ai) Við byrjum á því að ákvarða eigingildi og eiginvigrar $\hat{A}$. Athugum að

$$0 = \det(\hat{A} - \lambda \hat{I}) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & a & 0 \\ a & -\lambda & a \\ 0 & a & -\lambda \end{pmatrix} = -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & a \\ a & -\lambda \end{vmatrix} - a \begin{vmatrix} a & a \\ 0 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda(\lambda - \sqrt{2}a)(\lambda + \sqrt{2}a),$$

Þannig að hugsanleg mæligildi eru $\lambda = 0$ eða $\lambda = \pm\sqrt{2}a$. Við athugum svo næst hverjir eiginvigrar $\hat{A}$ eru.

$$\text{Fyrir } \lambda = 0: \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda & a & 0 \\ a & -\lambda & a \\ 0 & a & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} av_y \\ av_x + av_z \\ av_y \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

sem gefur því að

$$|a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|h_1\rangle - |h_3\rangle). \quad (6.3)$$

þar sem $|h_1\rangle, |h_2\rangle$ og $|h_3\rangle$ eru eiginvigrar Hamilton-virkjans $\hat{H}$ með tilheyrandi eigingildi $E_1 = +\hbar\omega, E_2 = 0$ og $E_3 = -\hbar\omega$. Eins fæst að

$$\text{Fyrir } \lambda = -\sqrt{2}a: \quad |a_1\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (|h_1\rangle - \sqrt{2}|h_2\rangle + |h_3\rangle), \quad (6.4)$$

$$\text{Fyrir } \lambda = +\sqrt{2}a: \quad |a_3\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (|h_1\rangle + \sqrt{2}|h_2\rangle + |h_3\rangle), \quad (6.5)$$

(a) Þar sem að eiginvigrar $\hat{A}$ eru línuleg samantekt eiginvigna $\hat{H}$ (en ekki sameiginlegir eiginvigrar) þá er ekki unnt að segja til með fullri vissu fyrir um niðurstöðu mælinga á bæði $\hat{A}$ og orku kerfisins. Önnur leið til að sýna það er að athuga að virkjarir víxlast ekki:

$$[\hat{A}, \hat{H}] = \hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A} = a\hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \neq \hat{0}. \quad (6.6)$$

(b) Stærsta mæligildið er $+\sqrt{2}a$ svo að kerfið er þá við tíma $t = 0$ í ástandinu

$$|s_0\rangle = \frac{1}{2} (|h_1\rangle + \sqrt{2}|h_2\rangle + |h_3\rangle), \quad (6.7)$$

Þegar að við tímaþróum þá margföldum við eiginástönd Hamilton-virkjans með $e^{-iE_nt/\hbar}$ og fáum því hér

$$|s(t)\rangle = \frac{1}{2} (e^{-i\omega t} |h_1\rangle + \sqrt{2}|h_2\rangle + e^{i\omega t} |h_3\rangle) = \frac{e^{-i\omega t}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{e^{i\omega t}}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.8)$$

Skoðum nú ofanvarpsvirkjan á staðlaða ástandið $|s_0\rangle$ sem er skilgreindur þannig að

$$P_{|s_0\rangle} = |s_0\rangle \langle s_0|. \quad (6.9)$$

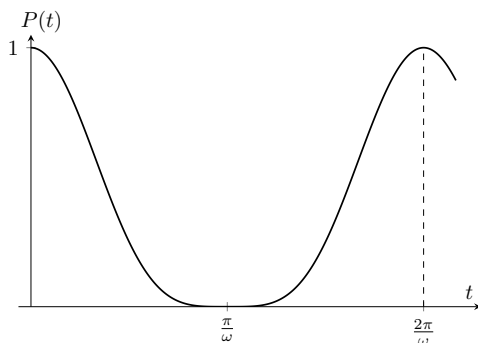
Þá eru líkurnar á því að finna kerfið í ástandinu $|s_0\rangle$ gefnar með

$$|P_{|s_0\rangle} |s(t)\rangle|^2 = ||s_0\rangle \langle s_0|s(t)\rangle|^2 = |\langle s_0|s(t)\rangle|^2. \quad (6.10)$$

Þar sem við notuðum að $|\langle s_0|s_0\rangle| = 1$. En við athugum að

$$\langle s_0|s(t)\rangle = \frac{1}{4} (e^{i\omega t} + 2 + e^{-i\omega t}) = \frac{1}{2} (1 + \cos(\omega t)). \quad (6.11)$$

En þar með eru líkurnar $\frac{1}{4}(1 + \cos(\omega t))^2$. Við getum teiknað graf sem sýnir líkurnar á því að finna ögnina í ástandinu $|s_0\rangle$ sem fall af tíma.



Dæmi 12. Ástand hreintóna sveifils sem uppfyllir

$$\hat{a}_- \psi_\alpha(x) = \alpha \psi_\alpha(x), \quad (6.12)$$

þar sem $\hat{a}_-$ er lækunarvirkinn og $\alpha \in \mathbb{C}$ er fasti, kallast samfasa ástand.

- (a) Reiknið væntigildi staðsetningarvirkjans $\hat{X}$ og skriðþungavirkjans $\hat{P}$ í stöðluðu samfasa ástandi $\psi_\alpha(x)$.
- (b) Reiknið víxlana $[\hat{a}_-, (\hat{a}_+)^n]$ og $[\hat{a}_-, e^{\alpha \hat{a}_+}]$ fyrir heiltölu n og fasta α .
- (c) Sýnið að ástandið $e^{\alpha \hat{a}_+} \psi_0(x)$, þar sem $\psi_0(x)$ lýsir grunnástandi sveifilsins, sé samfasa ástand.

Lausn: (a) Við höfum að

$$\hat{a}_\pm := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \quad (6.13)$$

Með því að leggja saman fæst því að

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-). \quad (6.14)$$

Eins fæst með því að draga frá að

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-), \quad (6.15)$$

Athugum svo að þar eð $\hat{a}_- |\psi_\alpha\rangle = \alpha |\psi_\alpha\rangle$ þá er $\langle\psi_\alpha|\hat{a}_+ = \langle\psi_\alpha|\alpha^*$. Fáum því

$$\langle\psi_\alpha|\hat{x}|\psi_\alpha\rangle = \langle\psi_\alpha|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)|\psi_\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha^* + \alpha) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\text{Re}(\alpha), \quad (6.16)$$

$$\langle\psi_\alpha|\hat{p}|\psi_\alpha\rangle = \langle\psi_\alpha|i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}|\psi_\alpha\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\alpha^* - \alpha) = \sqrt{2\hbar m\omega}\text{Im}(\alpha). \quad (6.17)$$

(bi) Fáum þá með þrepun að fyrst er $[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{I}$ og svo

$$[\hat{a}_-, (\hat{a}_+)^{n+1}] = \hat{a}_+[\hat{a}_-, (\hat{a}_+)^n] + [\hat{a}_-, \hat{a}_+](\hat{a}_+)^n = (n+1)(\hat{a}_+)^n \quad (6.18)$$

þar sem að við notuðum þrepunarforsenduna $[\hat{a}_-, (\hat{a}_+)^n] = n\hat{a}_+^{n-1}$.

(bii) Nú er

$$[\hat{a}_-, e^{\alpha \hat{a}_+}] = \left[\hat{a}_-, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha \hat{a}_+)^n}{n!} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n n \hat{a}_+^n}{n!} = \alpha e^{\alpha \hat{a}_+}. \quad (6.19)$$

(c) Fáum þá

$$\hat{a}_- (e^{\alpha \hat{a}_+} \psi_0) = (e^{\alpha \hat{a}_+} \hat{a}_- + \alpha e^{\alpha \hat{a}_+}) \psi_0 = \alpha e^{\alpha \hat{a}_+} \psi_0 = \alpha (e^{\alpha \hat{a}_+} \psi_0). \quad (6.20)$$

7 Heimadæmi 9. október

Dæmi 13. Klukkan $t = 0$ er rúmbylgjufall vetnisfrumeindar

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_{100}(\vec{r}) + \sqrt{2}\psi_{211}(\vec{r})), \quad (7.1)$$

þar sem $\psi_{n\ell m}(\vec{r})$ eru stöðluð sameiginleg eiginföll $\hat{H}$, $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$.

- (a) Hvaða mæligildi koma til greina fyrir orkuna og fyrir $\hat{L}^2$ í þessu ástandi?
- (b) Reiknið væntigildi mælistærðanna $\hat{L}_z$ og $\hat{X}$ klukkan $t = 0$.
- (c) Hvernig breytast væntigildi $\hat{L}_z$ og $\hat{X}$ með tíma?

Lausn: (a) Nú eru hugsanleg mæligildi á orkunni $E_n = \frac{E_1}{n^2}$ þar sem $E_1 = -13,6 \text{ eV}$. Hér höfum við annað hvort $n = 1$ eða $n = 2$ svo hugsanleg gildi eru $E_1 = -13,6 \text{ eV}$ með líkum $\frac{1}{3}$ og $E_2 = -3,4 \text{ eV}$ með líkum $\frac{2}{3}$. Mæling á $\hat{L}^2$ gefur síðan $\ell(\ell + 1)\hbar^2$ svo hér eru hugsanleg mæligildi 0 með líkum $\frac{1}{3}$ og $2\hbar^2$ með líkum $\frac{2}{3}$. Loks gæfi mæling á $\hat{L}_z$ hugsanleg mæligildi $m\hbar$ en hér væri það þá 0 með líkum $\frac{1}{3}$ og $\hbar$ með líkum $\frac{2}{3}$.

(c) Tímaþróun á bylgjufallinu er þannig að

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\psi_{100}(\vec{r}) e^{-iE_1 t/\hbar} + \sqrt{2} \psi_{211}(\vec{r}) e^{-iE_2 t/\hbar} \right). \quad (7.2)$$

En þá verður væntigildið á z -þátt hverfipungans

$$\langle \Psi(\vec{r}, t) | \hat{L}_z | \Psi(\vec{r}, t) \rangle = \left\langle \Psi(\vec{r}, t) \left| \hbar \sqrt{\frac{2}{3}} \psi_{211}(\vec{r}) e^{-iE_2 t/\hbar} \right. \right\rangle = \frac{2}{3} \hbar. \quad (7.3)$$

Sem er óháð tíma. Almennt gildir síðan að $\langle \psi_{n\ell m} | \hat{X} | \psi_{n\ell m} \rangle = 0$. Það þýðir að hér fáum við

$$\begin{aligned} \langle \Psi(\vec{r}, t) | \hat{X} | \Psi(\vec{r}, t) \rangle &= \frac{1}{3} \langle \psi_{100} | \hat{X} | \psi_{100} \rangle + \frac{2}{3} \langle \psi_{211} | \hat{X} | \psi_{211} \rangle \\ &\quad + \frac{\sqrt{2}}{3} \langle \psi_{100} | \hat{X} | \psi_{211} \rangle e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} + \frac{\sqrt{2}}{3} \langle \psi_{211} | \hat{X} | \psi_{100} \rangle e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \end{aligned}$$

Hér eru bylgjuföllin sem um ræðir almennt gefin með $\psi_{n\ell m} = R_{n\ell} Y_\ell^m$ (sjá töflur 4.7. og 4.3.)

$$\psi_{100}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad \psi_{211}(\vec{r}) = -\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \frac{r}{8a} e^{-r/2a} \sin \theta e^{i\phi}. \quad (7.4)$$

Í kúluhnitum er síðan $x = r \sin \theta \cos \phi$ og eftir að við margföldum með Jackobi-ákveðunni þá fáum við að eina tegrið sem þarf að reikna er

$$\begin{aligned} \langle \psi_{100} | \hat{X} | \psi_{211} \rangle &= -\frac{1}{8\pi a^4} \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \left(r^2 \sin \theta \right) r \sin \theta e^{-3r/2a} e^{i\phi} (r \sin \theta \cos \phi) \\ &= -\frac{1}{8\pi a^4} \left(\int_0^\infty r^4 e^{-3r/2a} dr \right) \left(\int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta \right) \cdot \left(\int_0^{2\pi} e^{i\phi} \cos \phi d\phi \right) \\ &= -\frac{1}{8\pi a^4} \cdot \left(\frac{4}{3} \right)^4 a^5 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi = -\frac{128}{243} a. \end{aligned} \quad (7.5)$$

En þar með er $\langle \hat{X} \rangle(t) = -\frac{256\sqrt{2}a}{729} \cos\left(\frac{E_1 - E_2}{\hbar} t\right)$.

Dæmi 14. Ögn hreyfist í þrívíðum einsátta hreintóna sveifil með mætti $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$.

- (a) Notið aðskilnað breytistærða í Kartesarhnitum til að sýna að orka sveifilsins sé $E_n = \hbar\omega(n + \frac{3}{2})$ þar sem $n \in \mathbb{Z}_+$ og að margfeldni E_n sé $d(n) = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$.
- (b) Mættið $V(r)$ er kúlusamhverft þ.a. finna má sameiginleg eiginástönd $\hat{H}, \hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$. Sýnið að rétt margfeldni fæst fyrir E_n ef við g.r.f.a. eigingildi $\hat{L}^2$ séu $\ell(\ell+1)\hbar^2$ þar sem $\ell \in \{0, 2, \dots, n\}$ ef n er slétt tala en $\ell \in \{1, 3, \dots, n\}$ ef n er oddatala.

Lausn: (a) Höfum Schrödinger-jöfnuna

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi + V(r)\Psi, \quad (7.6)$$

Notum aðskilnað breytistærða í Kartesarhnitum $\Psi(t, x, y, z) = f(t)X(x)Y(y)Z(z)$ og fáum

$$i\hbar f'XYZ = -\frac{\hbar^2 f}{2m}(X''YZ + XY''Z + XYZ'') + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)fXYZ, \quad (7.7)$$

En eftir að við deilum í gegn með $fXYZ$ ályktum við að

$$i\hbar\frac{f'}{f} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2) \quad (7.8)$$

En þar með höfum við fengið $i\hbar f'(t) = Ef(t)$ með $E = E_x + E_y + E_z$ þar sem að E_x, E_y og E_z samsvara orkugildum á þremur einvíðum hreintóna sveiflum með afleiðujöfnur

$$-\frac{\hbar^2}{2m}X''(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 X(x) = E_x X(x), \quad (7.9)$$

og eins fyrir $Y(y)$ og $Z(z)$. Fyrir hvern einvíðan kjörsveifil höfum við því $E_i = (n_i + \frac{1}{2})\hbar\omega$ þar sem $n_i \in \{0, 1, 2, \dots\}$. Þar með eru orkugildi sveiflsins gefin með $E_n = E_x + E_y + E_z = ((n_x + n_y + n_z) + \frac{3}{2})\hbar\omega$. Snúum okkur síðan að margfeldninni. Festum gildið á n og $n_z \leq n$. Þá má velja n_x á $n+1 - n_z$ vegu (því 0 er hugsanlegt gildi). Þá ákvarðast n_y ótvírætt af valinu á n_x svo heildarfjöldi möguleika er þá gefinn með margfeldinni

$$d(n) = \sum_{n_z=0}^n (n+1-n_z) = (n+1)(n+1) - \sum_{n_z} n_z = (n+1)(n+1) - \frac{(n+1)n}{2} = \frac{1}{2}(n+1)(n+2).$$

(b) Látum nú $n = 2k$ vera slétta tölu. Ef við gerum ráð fyrir að eigingildi $\hat{L}^2$ séu $\ell \in \{0, 2, \dots, n\}$ þá eru þau $k+1$ talsins. Fyrir hvert $\ell = 2s$ má síðan finna $2\ell+1 = 4s+1$ eigingildi sem samsvara eigingildum $\hat{L}_z$, þ.e. $m \in \{-\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell\}$. En þá er margfeldnin

$$d(n) = \sum_{s=0}^k (4s+1) = (k+1) + 4 \cdot \frac{(k+1)k}{2} = (k+1)(2k+1) = \frac{1}{2}(n+1)(n+2). \quad (7.10)$$

Ef $n = 2k+1$ er oddatala og eigingildi $\hat{L}^2$ eru $\ell \in \{1, 3, \dots, n\}$ þá eru þau $k+1$ talsins. Fyrir hvert $\ell = 2s+1$ fyrir $s \in \{0, \dots, k\}$ má síðan finna $2\ell+1 = 4s+3$ eigingildi sem samsvara $\hat{L}_z$ þannig að margfeldnin verður

$$d(n) = \sum_{s=0}^k (4s+3) = (k+1)(2k+3) = \frac{1}{2}(n+1)(n+2). \quad (7.11)$$

8 Heimadæmi 16. október

Dæmi 15. Tvær eins agnir með massa m hreyfast í einni vídd í mættinu

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (8.1)$$

Agnirnar eru án spuna og víxlverka ekki innbyrðis.

- (a) i. Finnið orku grunnástandsins og tilsvareandi staðlað eiginfall $\psi(x_1, x_2)$ ef agnirnar eru bóseindir.
- ii. Reiknið líkurnar á að báðar agnirnar séu sömu megin við $x = 0$ í grunnástandinu.
- (b) Endurtakið sömu útreikninga og í (a)-lið ef agnirnar eru fermíeindir.

Lausn: Þar sem að agnirnar víxlverka ekki innbyrðis þá eru hugsanleg eiginföll gefin með $\psi(x_1, x_2) = \psi_{n_a}(x_1)\psi_{n_b}(x_2)$ þar sem $\psi_n(x)$ eru eiginföll einvíða kjörsveifilsins. Orka eiginástandanna er þá $E = (n_a + n_b + 1)\hbar\omega$ og $n_a, n_b \in \mathbb{N}$.

(a) Fyrir bóseindir þarf bylgjufallið að vera samhverft en þá er orkulægsta ástandið

$$\psi_+(x_1, x_2) = A_+ \psi_0(x_1)\psi_0(x_2), \quad (8.2)$$

með orku $\hbar\omega$ þar sem að A_+ er stöðlunarfasti sem ákvarðast af skilyrðinu

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 |\psi_+(x_1, x_2)|^2 = A_+^2 \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x_1)|^2 dx_1 \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x_2)|^2 dx_2 \right) = A_+^2 \quad (8.3)$$

svo $A_+ = 1$. En þar með fæst að líkurnar á því að agnirnar séu sömu megin eru gefnar með

$$\begin{aligned} p_+ &= \int_0^{+\infty} dx_1 \int_0^{+\infty} dx_2 |\psi_+(x_1, x_2)|^2 + \int_{-\infty}^0 dx_1 \int_{-\infty}^0 dx_2 |\psi_+(x_1, x_2)|^2 \\ &= \left(\int_0^{+\infty} |\psi_0(x_1)|^2 dx_1 \right) \left(\int_0^{+\infty} |\psi_0(x_2)|^2 dx_2 \right) + \left(\int_{-\infty}^0 |\psi_0(x_1)|^2 dx_1 \right) \left(\int_{-\infty}^0 |\psi_0(x_2)|^2 dx_2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

þar sem að við notuðum að grunnástand einvíða kjörsveifilsins er jafnstætt um $x = 0$.

(b) Fyrir fermíeindir er

$$\psi_-(x_1, x_2) = A(\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) - \psi_1(x_1)\psi_0(x_2))$$

með orku $2\hbar\omega$ og við fáum að

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 |\Psi_t(x_1, x_2)|^2 \\
&= A^2 \int dx_1 dx_2 [\psi_0^*(x_1)\psi_1^*(x_2) - \psi_1^*(x_1)\psi_0^*(x_2)] [\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) - \psi_1(x_1)\psi_0(x_2)] \\
&= A^2 \int dx_1 dx_2 [|\psi_0(x_1)|^2|\psi_1(x_2)|^2 + |\psi_1(x_1)|^2|\psi_0(x_2)|^2 \\
&\quad - \psi_0^*(x_1)\psi_1(x_1)\psi_1^*(x_2)\psi_0(x_2) - \psi_1^*(x_1)\psi_0(x_1)\psi_0^*(x_2)\psi_1(x_2)] \\
&= A^2 \left[\underbrace{\langle\psi_0, \psi_0\rangle\langle\psi_1, \psi_1\rangle}_{=1} + \underbrace{\langle\psi_1, \psi_1\rangle\langle\psi_0, \psi_0\rangle}_{=1} - \underbrace{\langle\psi_0, \psi_1\rangle\langle\psi_1, \psi_0\rangle}_{=0} - \underbrace{\langle\psi_1, \psi_0\rangle\langle\psi_0, \psi_1\rangle}_{=0} \right] \\
&= 2A^2
\end{aligned}$$

þannig að $A = \frac{1}{\sqrt{2}}$ og við finnum að

$$\begin{aligned}
p_- &= \int_0^{+\infty} dx_1 \int_0^{+\infty} dx_2 |\psi_-(x_1, x_2)|^2 + \int_{-\infty}^0 dx_1 \int_{-\infty}^0 dx_2 |\psi_-(x_1, x_2)|^2 \\
&= \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} dx_1 \int_0^{+\infty} dx_2 [|\psi_0(x_1)|^2|\psi_1(x_2)|^2 + |\psi_1(x_1)|^2|\psi_0(x_2)|^2 \\
&\quad - \psi_0(x_1)\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_0(x_2) - \psi_1(x_1)\psi_0(x_1)\psi_0(x_2)\psi_1(x_2)] \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 dx_1 \int_{-\infty}^0 dx_2 [|\psi_0(x_1)|^2|\psi_1(x_2)|^2 + |\psi_1(x_1)|^2|\psi_0(x_2)|^2 \\
&\quad - \psi_0(x_1)\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_0(x_2) - \psi_1(x_1)\psi_0(x_1)\psi_0(x_2)\psi_1(x_2)].
\end{aligned}$$

En við athugum að

$$\int_0^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = \int_0^{+\infty} |\psi_1(x)|^2 dx = \frac{1}{2},$$

og

$$\int_0^{+\infty} \psi_0(x)\psi_1(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad \int_{-\infty}^0 \psi_0(x)\psi_1(x) dx = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

þar sem að

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad \psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \quad (8.4)$$

Því fæst:

$$\begin{aligned}
p_- &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right] \\
&\quad + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)\left(-\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) - \left(-\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)\left(-\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) \right] \\
&= \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \approx 0,182.
\end{aligned}$$

Dæmi 16. Tvær agnir með spuna $s = 1$ og snúðhlutfall γ eru í segulsviði með styrk B_0 í stefnu z -áss. Hvaða orkueigingildi eru leyfileg og hver er margfeldni hvers um sig ef þetta eru

- (a) aðgreinanlegar agnir (b) eins bóseindir (c) eins fermíeindir.

Lausn: Fyrir eina ögn þá er Hamilton-virki kerfisins $\hat{H} = -\gamma \vec{B} \cdot \vec{S} = -\gamma B_0 S_z$ þar sem fyrir spunatölu $s = 1$ við höfum að $\hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$. Eiginvigrar $\hat{H}$ eru því eiginvigrar $\hat{S}_z$, nefnilega $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ og $|-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ með eigingildi $-\gamma B_0 \hbar$, 0 og $+\gamma B_0 \hbar$ (í þessari röð). Þetta má þá skrifa sem $\hat{S}_z |m\rangle = m \hbar |m\rangle$. Þegar við skoðum tveggja agna kerfi þá er Hamilton-virkinn

$$\hat{H} = -\gamma B_0 (\hat{S}_{1,z} + \hat{S}_{2,z}) , \quad (8.5)$$

Eiginástöndin eru þá $|m_1, m_2\rangle$ þar sem að

$$\hat{H} |m_1, m_2\rangle = -\gamma B_0 \hbar (m_1 + m_2) \quad (8.6)$$

Þar sem að $m_1, m_2 \in \{-1, 0, 1\}$ þá eru hugsanleg gildi sem koma til greina á orkunni

$$-2\gamma B_0 \hbar, \quad -\gamma B_0 \hbar, \quad 0, \quad +\gamma B_0 \hbar, \quad +2\gamma B_0 \hbar. \quad (8.7)$$

- (a) Fyrir aðgreinanlegar agnir eru hugsanleg eiginástönd þá

Ástand	$ -1, -1\rangle$	$ -1, 0\rangle$	$ -1, 1\rangle$	$ 0, -1\rangle$	$ 0, 0\rangle$	$ 0, 1\rangle$	$ 1, -1\rangle$	$ 1, 0\rangle$	$ 1, 1\rangle$
Orka	$2\gamma B_0 \hbar$	$\gamma B_0 \hbar$	0	$\gamma B_0 \hbar$	0	$-\gamma B_0 \hbar$	0	$-\gamma B_0 \hbar$	$-2\gamma B_0 \hbar$

Margfeldni ástandanna er þá $(1, 2, 3, 2, 1)$ í stærðarröð eftir orku eigingildanna.

- (b) Fyrir bóseindir eru ástöndin samhverf þ.a. $|\psi_+\rangle = A_+ (|m_1, m_2\rangle + |m_2, m_1\rangle)$ og því

Ástand	$ -1, -1\rangle$	$ 0, 0\rangle$	$ 1, 1\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 0\rangle + 0, -1\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1\rangle + 1, -1\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1\rangle + 1, 0\rangle)$
Orka	$2\gamma B_0 \hbar$	0	$-2\gamma B_0 \hbar$	$\gamma B_0 \hbar$	0	$-\gamma B_0 \hbar$

Margfeldni ástandanna er þá $(1, 1, 2, 1, 1)$ í stærðarröð eftir orku eigingildanna.

- (c) Fyrir fermíeindir eru ástöndin andsamhverf þ.a. $|\psi_-\rangle = A_- (|m_1, m_2\rangle - |m_2, m_1\rangle)$

Ástand	$\frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 0\rangle - 0, -1\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1\rangle - 1, -1\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1\rangle - 1, 0\rangle)$
Orka	$\gamma B_0 \hbar$	0	$-\gamma B_0 \hbar$

Margfeldni ástandanna er þá $(0, 1, 1, 1, 0)$ í stærðarröð eftir orku eigingildanna.

9 Heimadæmi 23. október

Dæmi 17. Í einföldu líkani sem lýsir hvíttri dvergstjörnu eru rafeindirnar meðhöndlaðar sem frjálst Fermígas. Dæmigerður hraði rafeinda er hinsvegar það mikill að við gerum ráð fyrir að tengsl orku og ölduvigurs séu $\omega(\vec{k}) = c|\vec{k}|$ í stað $\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$.

- (a) Ákvarðið ástandsþéttleika rafeindanna í þessu líkani.
- (b) Reiknið Fermíorku rafeindanna E_F við $T = 0$.
- (c) Finnið hlutfallið $\langle E \rangle / E_F$ þar sem $\langle E \rangle$ er meðalorka rafeindanna í gasinu við $T = 0$.

Lausn: (a) Við höfum þá að

$$\int G(E) dE = Nd = 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{V}{\pi^2} \int dk k^2 \quad (9.1)$$

En þá fæst með breytiskiptum almenna formúlan (sem gildir í þremur víddum) fyrir ástandsþéttleikanum (e. DOS Density Of States)

$$G(E) = \frac{V}{\pi^2} \frac{k(E)^2}{\frac{dE}{dk}}, \quad (9.2)$$

Hér athugum við að $E = \hbar\omega(k) = \hbar ck$ þar sem $k = |\vec{k}|$ svo $k = E/(\hbar c)$ þ.a.

$$G(E) = \frac{V}{\pi^2} \frac{E^2/(\hbar c)^2}{\hbar c} = \frac{V}{\pi^2} \frac{E^2}{(\hbar c)^3}. \quad (9.3)$$

(b) Fermíorkan er orka orkuhæsta ástandsins (að frádreginni orku grunnástandsins) og er fundin með því að tegra ástandsþéttleikan upp í E_F

$$Nd = \int_0^{E_F} G(E) dE = \frac{V}{3\pi^2} \frac{E_F^3}{(\hbar c)^3} \quad (9.4)$$

Með því að leysa fyrir E_F og skilgreina $\rho = \frac{Nd}{V}$ fæst því

$$E_F = \hbar c (3\pi^2 \rho)^{1/3}. \quad (9.5)$$

(c) En þá má reikna meðalorkuna samkvæmt

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Nd} \int_0^{E_F} E G(E) dE = \frac{1}{4\pi^2 \rho} \frac{E_F^4}{(\hbar c)^3}. \quad (9.6)$$

Sem gefur því að

$$\eta = \frac{\langle E \rangle}{E_F} = \frac{1}{4\pi^2 \rho} \frac{E_F^3}{(\hbar c)^3} = \frac{3}{4}. \quad (9.7)$$

Dæmi 18. Einvítt skammtakerfi hefur Hamiltonvirkja $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$ þar sem

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2, \quad \hat{H}' = \sqrt{2\hbar m\omega^3} \hat{X}, \quad (9.8)$$

og $\lambda \ll 1$ er fasti.

- (a) Reiknið 2. stigs nálgun við orku grunnástandsins með truflanareikningi fyrir sístæð ástönd.
- (b) Ákvarðið 1. stigs nálgun við eiginfall grunnástandsins miðað við grunn eiginfalla ótruflaða Hamiltonvirkjans $\hat{H}_0$.
- (c) Færið rök fyrir því að nálgunin í (a)-lið gefi í raun nákvæma orku grunnástandsins.

Lausn: (a) Nú eru orkugildi ótruflaða ástandsins $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ og grunnástandið er $|\psi_0\rangle$. Þar sem að þetta er einvítt skammtakerfi er engin margfeldni sem við þurfum að hafa áhyggjur af. Almenn má þá reikna fyrsta stigs leiðréttingu í orku grunnástandsins sem

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle \quad (9.9)$$

Því fæst að fyrsta stigs leiðrétting við orku grunnástandsins má reikna samkvæmt

$$E_0^{(1)} = \langle \psi_0^{(0)} | \hat{H}' | \psi_0^{(0)} \rangle \quad (9.10)$$

En hér er því best að umrita $\hat{X}$ sem fall af hækkunar og lækkunarvirkjunum þannig að

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp i\hat{P} + m\omega\hat{X}) \quad (9.11)$$

En þá er $\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-)$. En því er

$$\hat{H}' = \sqrt{2\hbar m\omega^3} \hat{X} = \hbar\omega (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \quad (9.12)$$

sem gefur að

$$E_0^{(1)} = \langle \psi_0^{(0)} | \hat{H}' | \psi_0^{(0)} \rangle = \hbar\omega \langle \psi_0 | \hat{a}_+ + \hat{a}_- | \psi_0 \rangle = \hbar\omega (\langle \psi_0 | \hat{a}_+ | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | \hat{a}_- | \psi_0 \rangle) = 0.$$

Þar sem að við notuðum að $\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = 0$ og að $\hat{a}_- | \psi_0 \rangle = 0$. Athugum þá næst að 2. stigs leiðréttinguna má reikna samkvæmt

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m | \hat{H}' | \psi_n \rangle|^2}{E_n - E_m}, \quad (9.13)$$

Fyrir $n = 0$ þá höfum við að $E_0 - E_m = \frac{1}{2}\hbar\omega - \hbar\omega(m + \frac{1}{2}) = -\hbar\omega m$. Svo er $\langle \psi_m | \hat{H}' | \psi_0 \rangle = \hbar\omega \langle \psi_m | \psi_1 \rangle = \hbar\omega \delta_{m,1}$ svo við fáum

$$E_0^{(2)} = -\hbar\omega \sum_{m \neq 0} \frac{\delta_{m,1}}{m} = -\hbar\omega. \quad (9.14)$$

(b) Þá er almennt $|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m | \hat{H}' | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} \psi_m^{(0)}$ þannig að hér fáum við

$$|\psi_0^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq 0} \frac{\langle \psi_m | \hat{H}' | \psi_0 \rangle}{E_0 - E_m} \psi_m^{(0)} = - \sum_{m \neq 0} \frac{\delta_{m,1}}{m} \psi_m^{(0)} = -\psi_1^{(0)}. \quad (9.15)$$

(c) Fyllum í ferninginn og fáum að

$$\frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2 + \lambda\sqrt{2\hbar m\omega^3} \hat{X} = \frac{1}{2}m\omega^2 \left(\hat{X}^2 + \lambda\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \right)^2 - \hbar\omega\lambda^2 \quad (9.16)$$

Með því að skilgreina $\hat{Y} = \hat{X} + \lambda\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$ og athuga að $\partial_X = \partial_Y$ þá sést að þetta er hliðraður kjörsveifill með Hamilton-virkja

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{Y}^2 - \hbar\omega\lambda^2. \quad (9.17)$$

En þar með verða orkugildin fyrir þennan kjörsveifil gefin með

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2} - \lambda^2) \quad (9.18)$$

svo að þetta er stýfð röð (e. truncated series).

10 Heimadæmi 30. október

Dæmi 19. Spunalaus ögn með massa m er í tvívíðum óendanlega djúpum mættisbrunni,

$$\hat{V}_0(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{ef } x, y \in [0, a], \\ \infty & \text{annars.} \end{cases} \quad (10.1)$$

- (a) Finnið litróf Hamiltonvirkjans. Hver er margfeldni þriggja lægstu eigingildanna?
- (b) Notið fyrsta stigs truflanareikning til að ákvarða hvernig margfeldni fyrsta örvaða ástands rofnar þegar truflun $\hat{V}_1(x, y) = \lambda(x - \frac{a}{2})(y - \frac{a}{2})$ er bætt við mættið.

Lausn: (a) Fyrir óendanlegan mættisbrunn í einni vídd eru orkueigingildin $E_x = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_x^2}{2ma^2}$ þannig að fyrir óendanlegan mættisbrunn í tveimur víddum eru orkueigingildin

$$E(n_x, n_y) = E_x + E_y = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2) \quad \text{með } n_x, n_y \in \mathbb{Z}_+. \quad (10.2)$$

Pá eru þrjú orkulægstu ástöndin gefin með $E(1, 1)$, $E(2, 1) = E(1, 2)$ og $E(2, 2)$.

(b) Til að meta hvernig orkan rofnar þá skoðum við fylkjastökin $W_{ij} = \langle \psi_i^{(0)} | V_1 | \psi_j^{(0)} \rangle$ þar sem $i, j = (1, 2)$ eða $(2, 1)$. Hér höfum við ekki hækkunar- og lækkunarvirkja til að einfalda lífið okkar, en bylgjuföllin eru hinsvegar þekkt og gefin með margfeldi einvíðu eiginfallanna

$$\psi_{n_x, n_y}(x, y) = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right). \quad (10.3)$$

Með því að nýta eiginleika einvíðu bylgjufallanna, þ.e. að $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$ og $\langle \psi_n | x | \psi_n \rangle = \frac{a}{2}$. Eina nýja heildið sem að við þurfum að reikna til að leysa þetta dæmi er

$$\langle \psi_2 | x | \psi_1 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) x \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = -\frac{16a}{9\pi^2}. \quad (10.4)$$

Þar með höfum við allt sem við þurfum til að reikna fylkjastökin. Athugum fyrst að

$$W_{(1,2),(1,2)} = \langle \psi_{(1,2)}^{(0)} | (x - \frac{a}{2})(y - \frac{a}{2}) | \psi_{(1,2)}^{(0)} \rangle = \langle \psi_1^{(0)} | x - \frac{a}{2} | \psi_1^{(0)} \rangle \langle \psi_2^{(0)} | y - \frac{a}{2} | \psi_2^{(0)} \rangle = 0. \quad (10.5)$$

Eins fæst að $W_{(2,1),(2,1)} = 0$. Loks er

$$W_{(1,2),(2,1)} = \langle \psi_{(1,2)}^{(0)} | (x - \frac{a}{2})(y - \frac{a}{2}) | \psi_{(2,1)}^{(0)} \rangle \quad (10.6)$$

$$= \langle \psi_1^{(0)} | x - \frac{a}{2} | \psi_2^{(0)} \rangle \langle \psi_2^{(0)} | y - \frac{a}{2} | \psi_1^{(0)} \rangle \quad (10.7)$$

$$= \left(-\frac{16a}{9\pi^2}\right) \left(-\frac{16a}{9\pi^2}\right) = \frac{256a^2}{81\pi^4} = W_{(2,1),(1,2)}. \quad (10.8)$$

En þá þurfum við að ákvarða eigingildi fylkisins

$$0 = \det \begin{pmatrix} -E_2^{(1)} & \frac{256a^2}{81\pi^4} \\ \frac{256a^2}{81\pi^4} & -E_2^{(1)} \end{pmatrix} \implies E_2^{(1)} = \pm \frac{16}{9\pi^2} a. \quad (10.9)$$

Svo orkueigingildin rofna samkvæmt $E_2 = E_2^{(0)} + \lambda E_2^{(1)} = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \pm \lambda \frac{256a^2}{81\pi^4}$.

Dæmi 20. Tvívíður sveifill hefur Hamiltonvirkja $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ með,

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2 (\hat{X}^2 + \hat{Y}^2), \quad \hat{H}' = \lambda m\omega^2 (\hat{X}^2 - \hat{Y}^2), \quad (10.10)$$

þar sem $\lambda > 0$ er fasti. Ef $\lambda \ll 1$ má líta á $\hat{H}'$ sem truflun.

- (a) Hvert er róf ótruflaða Hamiltonvirkjans $\hat{H}_0$ og margfeldni hvers eigingildis um sig?
- (b) Reiknið 2. stigs nálgun við orku grunnástandsins $\hat{H}$ með truflanareikningi.
- (c) Ákvarðið klofnun fyrsta örvaða ástands $\hat{H}_0$ af völdum $\hat{H}'$ með 1. stigs truflana-reikningi fyrir ástönd með margfeldni.
- (d) Reikni nákvæm orkueigingildi kerfisins og berið orku grunnástandsins saman við niðurstöðuna í (b)-lið.

Lausn: Við byrjum aðeins í öfugri röð.

(d) Við athugum að með því að skilgreina $\frac{1}{2}m\omega_x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 + \lambda m\omega^2 = \frac{1}{2}m\omega^2(1 + 2\lambda)$ og $\frac{1}{2}m\omega_y^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 - \lambda m\omega^2 = \frac{1}{2}m\omega^2(1 - 2\lambda)$ þá fæst einfaldlega að orkueigingildin verða

$$\begin{aligned} E(n_x, n_y) &= \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \\ &= \hbar\omega\sqrt{1+2\lambda} \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\sqrt{1-2\lambda} \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \\ &\approx \hbar\omega(1 + n_x + n_y) + \lambda\hbar\omega(n_x - n_y) - \frac{1}{2}(1 + n_x + n_y)\omega\hbar\lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^3) \end{aligned} \quad (10.11)$$

Af þessu sést að það verður klofnun í $\pm 2\lambda\hbar\omega$ fyrir $(n_x, n_y) = (1, 0)$ og $(n_x, n_y) = (0, 1)$.

(a) Að því sögðu þá er orkuróf ótruflaða Hamilton-virkjans gefið með:

$$E_0(n_x, n_y) = \hbar\omega(1 + n_x + n_y), \quad (10.12)$$

og margfeldnin ákvaðrast af $N = n_x + n_y$. Við sjáum að fyrir fast N má velja n_x á $N+1$ vegu (og n_y ákvarðast ótvírætt sem $N - n_x$) svo fyrir N er margfeldnin $N+1$. Grunnástandið $N = 0$ er því eina ástandið sem er ekki með margfeldni. Fyrsta örvaða ástandið hefur margfeldni 2.

(b) Fáum þar sem að grunnástandið er ekki með margfeldni að

$$E_0^{(1)} = \langle \psi_{00}^{(0)} | \hat{H}' | \psi_{00}^{(0)} \rangle = \lambda m\omega^2 [\langle \psi_0^{(0)} | X^2 | \psi_0^{(0)} \rangle - \langle \psi_0^{(0)} | Y^2 | \psi_0^{(0)} \rangle] = 0. \quad (10.13)$$

Sem stemmir miðað við (d)-lið. Eins fæst að

$$E_0^{(2)} = \sum_{(n_x, n_y) \neq (0,0)} \frac{|\langle \psi_{n_x, n_y}^{(0)} | \lambda m\omega^2 (X^2 - Y^2) | \psi_{00}^{(0)} \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_{n_x, n_y}^{(0)}}. \quad (10.14)$$

En við athugum að stakur liður í summunni hefur

$$\lambda m\omega^2 [\langle \psi_{n_x}^{(0)} | X^2 | \psi_0^{(0)} \rangle \langle \psi_{n_y}^{(0)} | \psi_0^{(0)} \rangle - \langle \psi_{n_y}^{(0)} | Y^2 | \psi_0^{(0)} \rangle \langle \psi_{n_x}^{(0)} | \psi_0^{(0)} \rangle] \quad (10.15)$$

Umritum nú með hækkunar- og lækkunarvirkjum þannig að

$$\hat{X}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)^2, \quad \hat{Y}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{b}_+ + \hat{b}_-)^2, \quad (10.16)$$

og eins fyrir $\hat{X}$. Við sjáum þá að liðirnir verða

$$\frac{1}{2}\lambda\hbar\omega \left[\sqrt{2}\delta_{nx,2}\delta_{ny,0} - \sqrt{2}\delta_{ny,2}\delta_{nx,0} \right] \quad (10.17)$$

En einungis annar þessara liða getu rkomid fyrir í einu og við þurfum að reikna lengdina í öðru, því veita hvor um sig jafnt framlag og við fáum

$$E_0^{(2)} = \frac{2(\sqrt{2} \cdot \frac{1}{2}\lambda\hbar\omega)^2}{\hbar\omega - 3\hbar\omega} = -\frac{1}{2}\hbar\omega\lambda^2 \quad (10.18)$$

sem stemmir við niðurstöðuna sem við fengum í (d)-lið.

(c) Til að skoða klofnun þá skulum við skrifa fylkið

$$W_{ij} = \begin{pmatrix} W_{(0,1),(0,1)} & W_{(1,0),(0,1)} \\ W_{(0,1),(1,0)} & W_{(1,0),(1,0)} \end{pmatrix}, \quad \text{með } W_{ij} = \langle \psi_i^{(0)} | \hat{H}' | \psi_j^{(0)} \rangle. \quad (10.19)$$

Við athugum þá að fylkjastökin eru

$$W_{(0,1),(1,0)} = \lambda m\omega^2 [\langle \psi_0^{(0)} | \hat{X}^2 | \psi_1^{(0)} \rangle - \langle \psi_1^{(0)} | \hat{Y}^2 | \psi_0^{(0)} \rangle]. \quad (10.20)$$

Við sáum áðan að

$$\hat{X}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_+^2 + \hat{a}_-^2), \quad (10.21)$$

en þar með fáum við að $\langle \psi_0^{(0)} | \hat{X}^2 | \psi_0^{(0)} \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$ og $\langle \psi_1^{(0)} | \hat{Y}^2 | \psi_1^{(0)} \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2+1)$, sem gefur því

$$W_{(0,1),(1,0)} = -\lambda\hbar\omega. \quad (10.22)$$

Svo má með sama hætti sýna að $W_{(1,0),(1,0)} = +\lambda\hbar\omega$. Stökin sem eru ekki á hornalínunni hverfa síðan

$$W_{(0,1),(0,1)} = \langle \psi_{(0,1)}^{(0)} | \hat{H}' | \psi_{(0,1)}^{(0)} \rangle = 0 \quad (10.23)$$

og eins er $W_{(1,0),(0,1)} = 0$, þar sem að $\langle \psi_0^{(0)} | \psi_1^{(0)} \rangle = 0$. Þar með er eigingildisverkefnið

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda\hbar\omega - E_1^{(1)} & 0 \\ 0 & +\lambda\hbar\omega - E_1^{(1)} \end{pmatrix} = 0. \quad (10.24)$$

Þar með fáum við að $E_1^{(1)} = \pm\lambda\hbar\omega$ sem er einmitt það sem sést í (d)-lið.

11 Heimadæmi 6. nóvember

Dæmi 21. Ögn með massa m hreyfist í einni vídd í mættinu $V(x) = \alpha|x|$, þar sem $\alpha > 0$ er fasti. Sýnið að um orku grunnástandsins gildi að

$$E_0 \leq \frac{15}{16} \left(\frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} \right)^{1/3} \quad (11.1)$$

með því að nota hnikun yfir föll af gerðinni

$$\psi_a(x) = \begin{cases} a^2 - x^2 & \text{ef } |x| \leq a, \\ 0 & \text{ef } |x| > a. \end{cases} \quad (11.2)$$

Lausn: Við byrjum á því að staðla bylgjufallið ψ_a en við athugum að

$$\langle \psi_a | \psi_a \rangle = \int_{-a}^a (a^2 - x^2)^2 dx = \frac{16}{15} a^5 \quad (11.3)$$

Staðlaða bylgjufallið er því $|\tilde{\psi}_a\rangle = \sqrt{\frac{15}{16a}}(1 - \frac{x^2}{a^2})$. Þar með gildir fyrir sérhvert a að orka grunnástandsins er minni heldur en væntigildið á Hamilton-virkjanum miðað við ástöndin $\tilde{\psi}_a$. Ályktum því að

$$E_{\text{gs}} \leq \langle \tilde{\psi}_a | \hat{H} | \tilde{\psi}_a \rangle = \langle \tilde{\psi}_a | \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{X}) | \tilde{\psi}_a \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \tilde{\psi}_a | \partial_x^2 | \tilde{\psi}_a \rangle + \alpha \langle \tilde{\psi}_a | |x| | \tilde{\psi}_a \rangle \quad (11.4)$$

Athugum síðan að heildin tvö verða

$$\langle \tilde{\psi}_a | \partial_x^2 | \tilde{\psi}_a \rangle = -\frac{15}{8a^5} \int_{-a}^a (a^2 - x^2) dx = -\frac{5}{2a^2}, \quad (11.5)$$

$$\langle \tilde{\psi}_a | |x| | \tilde{\psi}_a \rangle = 2 \cdot \frac{15}{16a} \int_0^a (1 - \frac{x^2}{a^2})^2 dx = \frac{5a}{16}. \quad (11.6)$$

Við ályktum því að

$$E_{\text{gs}} \leq f(a) = \frac{5\hbar^2}{4a^2m} + \frac{5\alpha a}{16}. \quad (11.7)$$

Við viljum síðan lágmarka fallið $f(a)$ svo við athugum að

$$f'(a) = 0 \implies a_{\min} = 2 \left(\frac{\hbar^2}{m\alpha} \right)^{1/3} \quad (11.8)$$

Athugum að þetta er lággildi því $a \rightarrow \infty$ þýðir að f verður eins stórt og vera skal. Því fæst

$$E_{\text{gs}} \leq f(a_{\min}) = \frac{15}{16} \left(\frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} \right)^{1/3}. \quad (11.9)$$

Dæmi 22. (Lokapróf 2015) Ögn með massa m er í óendanlega djúpum mættisbrunni með δ -mætti í miðjum brunnum,

$$V(x) = \begin{cases} \frac{\alpha\pi^2\hbar^2}{ma}\delta(x - \frac{a}{2}) & \text{ef } 0 < x < a, \\ \infty & \text{annars,} \end{cases} \quad (11.10)$$

- (a) i. Rissið upp graf af bylgjufalli sem lýsir grunnástandi agnarinnar.
 ii. Notið 1. stigs tímaóháðan truflanareikning til að meta hliðrun leyfilegra orkugilda í mættisbrunnum þegar litið er á δ -mættið sem truflun.
 (b) Finnið efri mörk á orku grunnástandsins með hnikun yfir föllin

$$\psi_b(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + b \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right), \quad (11.11)$$

Lausn: (aii) Til að rissa upp grafið er best að gera það með truflanareikning og líta á þetta sem $\hat{H} = \hat{H}_0 + \alpha\hat{H}'$ með $\hat{H}' = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma}\delta(x - \frac{a}{2}) = 2aE_1^{(0)}\delta(x - \frac{a}{2})$ þar sem að eiginástönd og eigingildi ótruflaða Hamilton-virkjans eru

$$|n\rangle := |\psi_n^{(0)}\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}. \quad (11.12)$$

Með truflanareikningi má meta eiginorkur $\hat{H}$ sem $E_n = E_n^{(0)} + \alpha E_n^{(1)} + \alpha^2 E_n^{(2)}$ þar sem

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}' | n \rangle = 4E_1^{(0)} \int \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) dx = 4E_1^{(0)} \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right) = \begin{cases} 4E_1^{(0)} & \text{ef } n \text{ er oddatala,} \\ 0 & \text{ef } n \text{ er slétt.} \end{cases}$$

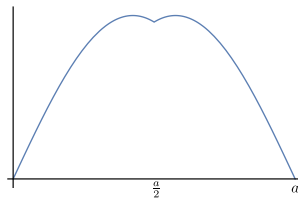
Fyrir grunnástandið getum við líka metið annars stigs leiðréttinguna

$$E_1^{(2)} = \sum_{n \geq 2} \frac{|\langle n | \hat{H}' | 1 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(2)}} = 16E_1^{(0)} \sum_{n \geq 2} \frac{\sin^2(\frac{n\pi}{2})}{1 - n^2} = 16E_1^{(0)} \sum_{k \geq 1} \frac{1}{1 - (2k+1)^2} = -4E_1^{(0)} \quad (11.13)$$

En við getum einnig metið leiðréttingu við grunnástandið sjálft vegna truflunarinnar

$$|\psi_1^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq 1} \frac{\langle m | \hat{H}' | 1 \rangle}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle = \sum_{m \geq 2} \frac{4\alpha \sin(\frac{m\pi}{2})}{1 - m^2} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right). \quad (11.14)$$

Með því að taka fyrstu liðina fáum við eftirfarandi mynd:



Mynd 1. (ai) Grunnástand miðað við 1. stigs truflanareikning.

(b) Þverstaðlaða hnikunarfallið er þá

$$|\psi_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+b^2}} (|1\rangle + b|3\rangle) . \quad (11.15)$$

Athugum því að

$$E_{\text{gs}} \leq \langle \psi_b | \hat{H} | \psi_b \rangle = \frac{1}{1+b^2} (\langle 1| + b\langle 3|) (\hat{H}_0 + \hat{H}') (|1\rangle + b|3\rangle) \quad (11.16)$$

$$= \frac{1}{1+b^2} \left[\langle 1 | \hat{H}_0 | 1 \rangle + b^2 \langle 3 | \hat{H}_0 | 3 \rangle + \alpha \langle 1 | \hat{H}' | 1 \rangle + 2\alpha b \langle 1 | \hat{H}' | 3 \rangle + \alpha b^2 \alpha \langle 3 | \hat{H}' | 3 \rangle \right] \quad (11.17)$$

$$= \frac{E_1^{(0)}}{1+b^2} \left[1 + 9b^2 + 4\alpha - 8\alpha b + 4\alpha b^2 \right] . \quad (11.18)$$

Þar sem að við notuðum

$$\langle 1 | \hat{H}_0 | 1 \rangle = E_1^{(0)} , \quad \langle 3 | \hat{H}_0 | 3 \rangle = E_3^{(0)} = 9E_1^{(0)} \quad (11.19)$$

$$\langle n | \hat{H}' | m \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma} \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) dx = 4E_1^{(0)} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{m\pi}{2}\right) .$$

Við viljum ná ákvarða fyrir hvaða gildi á b hnikunin er lágmörkuð. Skoðum því

$$f(b) = \frac{1 + 9b^2 + 4\alpha - 8\alpha b + 4\alpha b^2}{1 + b^2} , \quad (11.20)$$

og athugum að

$$f'(b) = \frac{8(2b - \alpha + b^2\alpha)}{(1 + b^2)^2} = 0 \implies b_{\min} = -\frac{1}{\alpha} \left(1 \pm \sqrt{1 + \alpha^2} \right) \quad (11.21)$$

En fyrir þessi gildi á b fæst að

$$E_{\text{gs}} \leq E_0^{(1)} f(b_{\min}) = \begin{cases} E_0^{(1)} (1 + 4\alpha - 2\alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^3)) & \text{ef } b_{\min} = -\frac{1}{\alpha} (1 - \sqrt{1 + \alpha^2}) , \\ E_0^{(1)} (9 + 4\alpha + 2\alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^3)) & \text{ef } b_{\min} = -\frac{1}{\alpha} (1 + \sqrt{1 + \alpha^2}) . \end{cases} \quad (11.22)$$

Þar með sjáum við að fyrir $b_{\min} = -\frac{1}{\alpha} (1 - \sqrt{1 + \alpha^2})$ þá náum við vissulega efra markinu í fyrsta stigs truflanareikningi. Hinsvegar í 2. stigs truflanareikningi þá er

$$E_{\text{gs}} = E_1^{(0)} (1 + 4\alpha - 4\alpha^2) < E_0^{(1)} (1 + 4\alpha - 2\alpha^2) .$$

12 Heimadæmi 13. nóvember

Dæmi 23. Tvístiga kerfi með orkueigingildi $\pm E$ er í grunnástandi klukkan $t = 0$ þegar kveikt er á truflun, sem síðan hnignar með tíma. Truflun Hamiltonvirkjans er lýst með fylkinu

$$\hat{h}(t) = \begin{bmatrix} 0 & \Delta e^{-\gamma t} \\ \Delta e^{-\gamma t} & 0 \end{bmatrix} \quad (12.1)$$

m.v. grunn eiginástanda ótruflaðra Hamiltonvirkjans og $\Delta \ll E$. Notið 1. stigs tímaháðan truflanareikning til að reikna líkur á að kerfið sé í örvuðu ástandi þegar $t \rightarrow \infty$.

Lausn: Fyrsta stigs truflanareikningur gefur almennt að

$$c_j^{(1)}(t) = c_j^{(0)}(t) - \frac{i}{\hbar} \sum_k \int_0^t dt' h_{jk}(t') c_k^{(0)}(t') e^{i\omega_{jk}t'}. \quad (12.2)$$

Ritum $|0\rangle$ fyrir grunnástandið og $|1\rangle$ fyrir örvaða ástandið. Ótruflaði Hamiltonvirkinn er

$$\hat{H}_0|0\rangle = -E|0\rangle, \quad \hat{H}_0|1\rangle = +E|1\rangle, \quad \omega_0 = \omega_{10} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} = \frac{2E}{\hbar}. \quad (12.3)$$

Kerfið er í $|0\rangle$ við $t = 0$, svo $c_0^{(0)}(0) = 1$ og $c_1^{(0)}(0) = 0$. Athugum fyrst að

$$h_{10}(t) = \langle 1|\hat{h}|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Delta e^{-\gamma t} \\ \Delta e^{\gamma t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \Delta e^{-\gamma t}. \quad (12.4)$$

Þá verður stuðullinn fyrir fyrsta örvaða ástandið

$$c_1^{(1)}(t) = -\frac{i\Delta}{\hbar} \int_0^t dt' e^{-(\gamma - i\omega_0)t'} = \frac{i\Delta}{\hbar(\gamma - i\omega_0)} \left(e^{(-\gamma + i\omega_0)t} - 1 \right). \quad (12.5)$$

Fyrsta stigs tímaháður truflanareikningur gefur því bylgjufallið

$$|\Psi(t)\rangle = \left(c_0^{(0)}(t) + c_0^{(1)}(t) \right) e^{-iEt/\hbar} |0\rangle + \left(c_1^{(0)}(t) + c_1^{(1)}(t) \right) e^{+iEt/\hbar} |1\rangle \quad (12.6)$$

$$= e^{\frac{iEt}{\hbar}} \left[|0\rangle + \frac{i\Delta}{\gamma\hbar - 2Ei} e^{-\frac{i2Et}{\hbar}} \left(e^{-\gamma t} e^{\frac{2Eit}{\hbar}} - 1 \right) |1\rangle \right]. \quad (12.7)$$

Við ályktum því að líkur á að kerfið sé í $|1\rangle$ verða

$$P_1(t) = \left| \frac{i\Delta}{\gamma\hbar - 2Ei} \left(e^{-\gamma t} e^{\frac{2Eit}{\hbar}} - 1 \right) \right|^2 \quad (12.8)$$

$$= \frac{-i\Delta}{\gamma\hbar + 2Ei} \frac{i\Delta}{\gamma\hbar - 2Ei} \left(e^{-\gamma t} e^{\frac{2Eit}{\hbar}} - 1 \right) \left(e^{-\gamma t} e^{-\frac{2Eit}{\hbar}} - 1 \right) \quad (12.9)$$

$$= \frac{\Delta^2}{(\gamma\hbar)^2 + (2E)^2} \left(1 + e^{-2\gamma t} - 2e^{-\gamma t} \cos\left(\frac{2Et}{\hbar}\right) \right) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\Delta^2}{(\gamma\hbar)^2 + (2E)^2}. \quad (12.10)$$

Dæmi 24. Hreintóna sveifill með horntíðni ω_0 verður fyrir truflun

$$\hat{h}(t) = \beta \sqrt{\frac{m^3 \omega_0^5}{\hbar}} \hat{X}^3 \cos(\omega t), \quad (12.11)$$

þar sem $\beta \ll 1$ er fasti. Sveifillinn er í grunnástandi þegar kveikt er á trufluninni klukkan $t = 0$. Slökkt er á henni aftur klukkan $t = T > 0$.

- (a) Skrifðu Hamiltonvirkja kerfisins, að trufluninni meðtalinni, sem fall af stigavirkjum.
- (b) Notið 1. stigs tímabháðan truflanareikning til að reikna líkurnar á því að sveifillinn sé í fyrsta örvaða ástandi þegar $t > T$.
- (c) Hvaða valreglur gilda um tilfærslur milli eiginástanda ótruflaðs sveifils af völdum truflunarinnar?

Lausn: (a) Hamiltonvirki ótruflaða hreintóna sveifilsins í einni vídd er

$$\hat{H}_0 = \hbar \omega \left(\hat{a}_+ \hat{a}_- + \frac{1}{2} \right). \quad (12.12)$$

Þurfum að umrita truflunina $\hat{h}$ með stigavirkjunum. Umritum því

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m \omega_0}} \left(\mp i \hat{P} \pm m \omega_0 \hat{X} \right) \quad (12.13)$$

fyrir $\hat{P}$ og $\hat{X}$ samkvæmt

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-), \quad \hat{P} = i \sqrt{\frac{m\omega_0 \hbar}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-) \quad (12.14)$$

Þar með verður truflunin

$$\hat{h}(t) = \beta \sqrt{\frac{m^3 \omega_0^5}{\hbar}} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^{3/2} \cos(\omega t) (\hat{a}_+ + \hat{a}_-)^3 = \frac{\hbar \omega_0}{2\sqrt{2}} \beta \cos(\omega t) (\hat{a}_+ + \hat{a}_-)^3. \quad (12.15)$$

(b) Fyrsta stigs tímaháður truflanareikningur gefur almennt

$$c_j^{(1)}(t) = c_j^{(0)}(t) - \frac{i}{\hbar} \sum_k \int_0^t dt' h_{jk}(t') c_k^{(0)}(t') e^{i\omega_{jk}t'}, \quad \omega_{jk} \equiv \frac{E_j - E_k}{\hbar}. \quad (12.16)$$

Ritum $|n\rangle$ fyrir eiginástand ótruflaða sveifilsins með orku E_n . Þá gildir

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad E_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (12.17)$$

svo

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0, \quad E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega_0, \quad \omega_{10} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} = \omega_0. \quad (12.18)$$

Kerfið er í $|0\rangle$ við $t = 0$ og því

$$c_0^{(0)}(0) = 1, \quad c_n^{(0)}(0) = 0 \quad \text{fyrir } n \geq 1. \quad (12.19)$$

Í summunni yfir k þegar við reiknum $c_1^{(1)}(t)$ er því einungis framlag fyrir $k = 0$ sem gefur framlag. Við athugum því að

$$h_{10}(t) = \langle 1|\hat{h}|0\rangle = \beta \frac{\hbar\omega_0}{2\sqrt{2}} \cos(\omega t) \langle 1|(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)^3|0\rangle = \frac{3\beta\hbar\omega_0}{2\sqrt{2}} \cos(\omega t). \quad (12.20)$$

þar sem að við notuðum að

$$\langle 1|(\hat{a}_0 + \hat{a}_-)^3|0\rangle = \langle 1|\hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_-\hat{a}_+^2|0\rangle = 1 + 2 = 3. \quad (12.21)$$

En þar með ályktum við að

$$c_1^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' h_{10}(t') e^{i\omega_{10}t'} = -\frac{3i\beta\omega_0}{2\sqrt{2}} \int_0^t dt' \cos(\omega t') e^{i\omega_0 t'} \quad (12.22)$$

$$= -\frac{3i\beta\omega_0}{4\sqrt{2}} \int_0^t dt' \left(e^{i(\omega_0+\omega)t'} + e^{i(\omega_0-\omega)t'} \right) \quad (12.23)$$

$$= \frac{3\beta\omega_0}{4\sqrt{2}} \left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} \right] \quad (12.24)$$

$$= \frac{3\beta\omega_0}{4\sqrt{2}} \left[e^{\frac{i(\omega_0+\omega)t}{2}} \frac{2i}{\omega_0 + \omega} \sin\left(\frac{\omega_0 + \omega}{2}t\right) + e^{\frac{i(\omega_0-\omega)t}{2}} \frac{2i}{\omega_0 - \omega} \sin\left(\frac{\omega_0 - \omega}{2}t\right) \right] \quad (12.25)$$

Eftir smá handavinnu ályktum við því að líkurnar á því að sveifilinn sé í fyrsta örvaða ástandi klukkan $t = T$ eru

$$P_1(T) = |c_1^{(1)}(T)|^2 = \frac{9\beta^2\omega_0^2}{8} \left[\frac{\sin^2\left(\frac{\omega_0+\omega}{2}T\right)}{(\omega_0 + \omega)^2} + \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_0-\omega}{2}T\right)}{(\omega_0 - \omega)^2} + \frac{2\cos(\omega T)}{\omega_0^2 - \omega^2} \sin\left(\frac{\omega_0 + \omega}{2}T\right) \sin\left(\frac{\omega_0 - \omega}{2}T\right) \right]. \quad (12.26)$$

(c) Til að reikna valreglur fyrir stök fylki truflunarinnar athugum við að

$$h_{mn}(t) = \langle m|\hat{h}|n\rangle = \beta \frac{\hbar\omega_0}{2\sqrt{2}} \cos(\omega t) \langle m|(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)^3|n\rangle. \quad (12.27)$$

Með því að skoða hugsanlegar samsentingar á hækkunar- og lækkunarvirkjum sjáum við t.d. að liður með $\hat{a}_+^3$ hækkar um 3, liður með $\hat{a}_-^3$ lækkar um 3, liður með $\hat{a}_+^2\hat{a}_-$ hækkar um 1 og liður með $\hat{a}_+\hat{a}_-^2$ lækkar um 1. Valreglur segja því að

$$\langle m|\hat{X}^3|n\rangle \neq 0 \quad \Longleftrightarrow \quad m = n \pm 3 \text{ eða } m = n \pm 1. \quad (12.28)$$