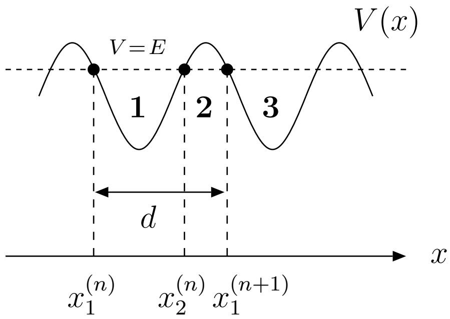
Opgaven bij het college Kwantummechanica 2
Week 10

Opgave 16: Atomaire ketens (deel 3): energiebanden in WKB benadering



Beschouw de beweging langs de x-as van een spin-0 deeltje met massa m onder invloed van een potentiaal $V(x)$. De potentiaal is periodiek met een periode die wordt gegeven door de vaste roosterafstand $d > 0$. De bijbehorende Hamilton-operator heeft dan de vorm

$$\hat{H} \;=\; \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}) \ , \qquad \text{met} \quad V(x) \;=\; V(x \pm d) \ .$$

Een deel van de potentiaal is in het plaatje afgebeeld.
Zoals in opgave 8 van het werkcollege is afgeleid, bestaat er een complete set simultane eigenfuncties van zowel de Hamilton-operator $\hat{H}$ als de roostertranslatie-operator $\hat{U}_T(d)$. Zo'n simultane eigenfunctie $\psi_\phi(x)$ moet dan voldoen aan de Bloch-conditie

$$\psi_\phi(x) \;=\; \mathrm{e}^{-i\phi}\, \psi_\phi(x+d) \ , \qquad \text{met} \qquad \phi \,\in\, (-\pi, \pi] \ .$$

We gaan nu de WKB benadering gebruiken om de energieniveaus met $E < V_{\max}$ te vinden.

(i) Leid uit de Bloch-conditie af dat de WKB-coëfficiënten $A_1^{(n)}$ en $B_1^{(n)}$ in gebied 1 (met als ondergrens $x_1^{(n)}$) gerelateerd moeten zijn aan de WKB-coëfficiënten $A_1^{(n+1)}$ en $B_1^{(n+1)}$ in gebied 3 (met als ondergrens $x_1^{(n+1)} = x_1^{(n)} + d$) volgens

$$\begin{pmatrix} A_1^{(n)} \\ B_1^{(n)} \end{pmatrix} \;=\; \mathrm{e}^{-i\phi} \begin{pmatrix} A_1^{(n+1)} \\ B_1^{(n+1)} \end{pmatrix} .$$

(ii) Gebruik de connectieformules voor kwantumtunneling om te laten zien dat ook geldt:

$$\begin{pmatrix} A_1^{(n)} \\ B_1^{(n)} \end{pmatrix} \;=\; M \begin{pmatrix} A_1^{(n+1)} \\ B_1^{(n+1)} \end{pmatrix} \quad , \quad M \;\equiv\; \begin{pmatrix} (\mathrm{e}^{\Lambda} + \frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\Lambda})\,\mathrm{e}^{-i\theta} & i\,(\mathrm{e}^{\Lambda} - \frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\Lambda})\,\mathrm{e}^{-i\theta} \\ -\,i\,(\mathrm{e}^{\Lambda} - \frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\Lambda})\,\mathrm{e}^{i\theta} & (\mathrm{e}^{\Lambda} + \frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\Lambda})\,\mathrm{e}^{i\theta} \end{pmatrix},$$

$$\text{met} \qquad \theta \;\equiv\; 2\pi \int_{x_1^{(n)}}^{x_2^{(n)}} \frac{\mathrm{d}y}{\lambda(y)} \qquad \text{en} \qquad \Lambda \;\equiv\; 2\pi \int_{x_2^{(n)}}^{x_1^{(n+1)}} \frac{\mathrm{d}y}{|\lambda(y)|} \;\gg\; 1 \ .$$

(iii) Dit houdt in dat $\mathrm{e}^{-i\phi}$ een eigenwaarde moet zijn van de matrix M. Leid de bijbehorende eigenwaardenvergelijking af en toon aan dat voor $\exp(-\Lambda) \ll \exp(\Lambda)$ dan bij benadering moet gelden dat $\cos(\theta) = \mathrm{e}^{-\Lambda}\cos(\phi)$.

(iv) Uit een berekening die lijkt op het NH_3-voorbeeld in het dictaat volgt dat de energieniveaus banden vormen rond de energieniveaus $E_n^{(0)}$ van een enkele potentiaalput. Waarom worden deze banden breder naarmate de energie van de band toeneemt?

Opgave 17: Populatie-inversie voor de NH_3-maser

Beschouw een NH_3-molecuul dat vanaf het tijdstip $t = 0$ onder invloed komt te staan van een monochromatisch elektromagnetisch veld met frequentie $\nu = \omega/(2\pi)$. Neem aan dat het molecuul uitsluitend in de twee laagstgelegen energieniveaus $|S\rangle$ en $|A\rangle$ kan zitten. De toestandsfunctie van het systeem wordt dan in het interactiebeeld gegeven door

$$|\psi_I(t)\rangle \;=\; c_A(t)\,|A\rangle \,+\, c_S(t)\,|S\rangle\ .$$

Zoals in het collegedictaat is afgeleid moeten de coëfficiënten $c_A(t \geq 0)$ en $c_S(t \geq 0)$ voldoen aan een set gekoppelde lineaire differentiaalvergelijkingen van de vorm

$$i\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} c_A(t) \\ c_S(t) \end{pmatrix} \;\equiv\; i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_A(t) \\ \dot{c}_S(t) \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} 0 & \gamma\exp(i\bar{\omega}t) \\ \gamma^*\exp(-i\bar{\omega}t) & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_A(t) \\ c_S(t) \end{pmatrix},$$

in termen van de constante parameters $\gamma \in \mathbb{C}$ en $\bar{\omega} \equiv (E_A - E_S - \hbar\omega)/\hbar \in \mathbb{R}$.

(i) Stap 1: schrijf $\tilde{c}_S(t) = c_S(t)\exp(i\bar{\omega}t)$ en laat zien dat geldt

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_A(t) \\ \dot{\tilde{c}}_S(t) \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} 0 & \gamma \\ \gamma^* & -\hbar\bar{\omega} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_A(t) \\ \tilde{c}_S(t) \end{pmatrix}.$$

De matrix is nu tijdsonafhankelijk geworden.

(ii) Stap 2: ga nu over op $\bar{c}_A(t) = c_A(t)\exp(-i\bar{\omega}t/2)$ en $\bar{c}_S(t) = \tilde{c}_S(t)\exp(-i\bar{\omega}t/2)$. Toon aan dat nu geldt

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\bar{c}}_A(t) \\ \dot{\bar{c}}_S(t) \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} \hbar\bar{\omega}/2 & \gamma \\ \gamma^* & -\hbar\bar{\omega}/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{c}_A(t) \\ \bar{c}_S(t) \end{pmatrix}.$$

De matrix uit stap 1 is daarmee spoorloos gemaakt.

(iii) Stap 3: de matrix uit stap 2 is nu op een constante na de eigen inverse. Dus het stelsel differentiaalvergelijkingen ontkoppelt als we een tweede tijdsafgeleide nemen:

$$-\hbar^2 \begin{pmatrix} \ddot{\bar{c}}_A(t) \\ \ddot{\bar{c}}_S(t) \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} \hbar^2\Omega^2 & 0 \\ 0 & \hbar^2\Omega^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{c}_A(t) \\ \bar{c}_S(t) \end{pmatrix},$$

met $\Omega = \sqrt{|\gamma|^2/\hbar^2 + \bar{\omega}^2/4}$. Geef de oplossingen voor $c_S(t)$ en $c_A(t)$ met als beginvoorwaarde dat het systeem op $t = 0$ in de toestand $|A\rangle$ zit.

(iv) Tune het elektromagnetisch veld zodanig dat $\hbar\omega = E_A - E_S$ en zet de interactie op het tijdstip $t = \frac{1}{2}\pi\hbar/|\gamma|$ weer uit. Wat is de waarschijnlijkheid om het systeem op dat tijdstip in de toestand $|S\rangle$ aan te treffen?

(v) Wat is er gebeurd met de energie dat het systeem verloren heeft?