

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen: Ingjald Øverbø, tlf 73 59 18 67, eller 97012355

EKSAMEN I
TFY4250 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK og
FY2045 KVANTEFYSIKK

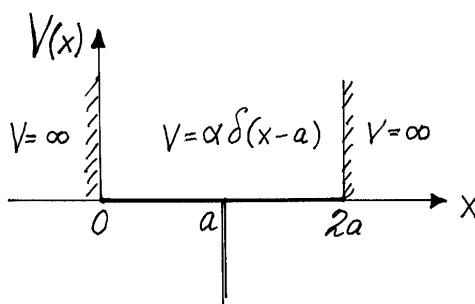
Tirsdag 4. desember 2007
kl. 09.00 - 13.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator
Rottmann: Matematisk formelsamling
Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk, eller
Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter

Et ark med uttrykk og formler er vedlagt.

Sensuren faller i desember 2007.

Oppgave 1



En partikkel med masse m befinner seg i et éndimensjonalt bokspotensial med et delta-funksjonsbidrag i midten,

$$V(x) = \begin{cases} \alpha \delta(x - a) & \text{for } 0 < x < 2a, \\ \infty & \text{for } x < 0 \text{ og for } x > 2a. \end{cases}$$

Ved å integrere den tidsuavhengige Schrödingerligningen kan en vise at energieigenfunksjoner for dette potensialet må oppfylle diskontinuitetsbetingelsen

$$\psi'(a_+) - \psi'(a_-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(a);$$

egenfunksjonen må altså ha et sprang i den deriverte som er proporsjonalt med “styrken” α til deltafunksjonen og med bølgefunksjonsverdien i punktet $x = a$. Oppgaven går i hovedsak ut på å studere hvordan energien E_1 og bølgefunksjonen $\psi_1(x)$ for grunntilstanden oppfører seg for varierende verdier av α , både positive og negative.

a. For spesialtilfellet $\alpha = 0$ kan de normerte energieigenfunksjonene skrives på formen

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin k_n x.$$

• Finn bølgetallene k_1 og k_2 og energiene $E_1^{(0)}$ og $E_2^{(0)}$ for henholdsvis grunntilstanden og 1. eksiterte tilstand, og skissér energieigenfunksjonene $\psi_1^{(0)}(x)$ og $\psi_2^{(0)}(x)$. • Forklar hvorfor resultatene for 1. eksiterte tilstand også er gyldige for α forskjellig fra null. [Hint: Kontrollér at $\psi_2^{(0)}(x)$ oppfyller diskontinuitetsbetingelsen nevnt ovenfor.]

b. I resten av oppgaven setter vi $\alpha = \beta \hbar^2 / (ma)$. Vi skal undersøke hvordan grunntilstandsenergien E_1 varierer som funksjon av den dimensjonsløse parameteren β . • Betrakt deltafunksjonsbidraget til potensialet som en perturbasjon av bokspotensialet, og finn korreksjonen $E_1^{(1)}$ til energien $E_1^{(0)}$ ved hjelp av 1.-ordens tidsuavhengig perturbasjonsteori. (Se formelarket.)

Resultatet $E_1 \approx E_1^{(0)} + E_1^{(1)}$ vil være ganske nøyaktig for små $|\beta|$ (f.eks $|\beta| \sim 0.1 - 0.2$), dvs (i) for en svakt tiltrekkende δ -brønn eller (ii) for en svakt frastøtende δ -barriere. • Bruk dette resultatet til å lage kvalitative skisser (prinsippskisser) av $\psi_1(x)$ for disse to tilfellene, og kontrollér at disse harmonerer med den oppgitte diskontinuitetsbetingelsen. [Hint: For $0 < x < a$ vil ψ_1 fortsatt gå som $\sin k_1 x$, der k_1 er det korrigerte bølgetallet.]

Når β vokser mot store positive verdier ($\gg 1$), vil også energikorreksjonen $E_1^{(1)}$ beregnet ovenfor vokse, og formelen $E_1 \approx E_1^{(0)} + E_1^{(1)}$ blir ubrukkelig. Energien E_1 vil nemlig alltid holde seg under en viss skranke, uansett hvor stor β vi velger. • Angi denne øvre skranken for E_1 og den tilsvarende skranken for k_1 .

c. For en viss verdi (β_0) av β blir grunntilstandsenergien E_1 lik null. • Forklar hvorfor grunntilstanden da må ha formen

$$\psi_1(x) = \begin{cases} (x/a)\psi_1(a) & \text{for } 0 < x < a, \\ (2 - x/a)\psi_1(a) & \text{for } a < x < 2a. \end{cases}$$

• Finn β_0 .

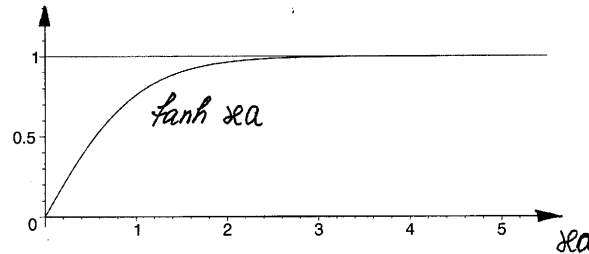
d. For $-\infty < \beta < \beta_0$ vil grunntilstandsenergien E_1 være negativ. • Vis at den er bestemt av betingelsen

$$\tanh \kappa a = -\frac{\kappa a}{\beta} \quad \left(E_1 = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \right).$$

[Hint: Vis først at løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for $0 < x < a$ må ha formen $\psi = A \sinh \kappa x$.] • Vis at den tilsvarende betingelsen for $\beta_0 < \beta < \infty$ er

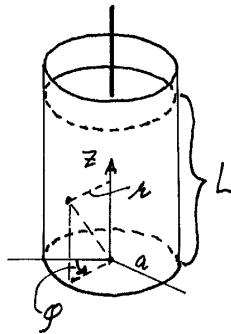
$$\tan k_1 a = -\frac{k_1 a}{\beta} \quad \left(E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \right).$$

e. •Lag en rask skisse av $\tan k_1 a$ for $0 < k_1 a < \pi$, og forklar med utgangspunkt i betingelsen $\tan k_1 a = -k_1 a / \beta$ hva som skjer med $k_1 a$ og E_1 når $\beta \rightarrow \infty$.



Diagrammet viser $\tanh \kappa a$ som funksjon av κa . •Finn et tilnærmet resultat for κ og dermed for E_1 for tilfellet $-\beta \gg 1$.

Oppgave 2



Figuren viser en sylinderformet boks ($V = 0$ inne i boksen, $V = \infty$ utenfor). Sylindere har radius a . Bunnen er fast, mens høyden L kan reguleres ved hjelp av et stempel som kan beveges friksjonsfritt. For en partikkel med masse μ er energiegenfunksjonene (uttrykt i sylinderkoordinater)

$$\psi_{nm_z}^{(m)}(r, \phi, z) \propto J_{|m|}(\Pi_n^{(|m|)} r/a) e^{im\phi} \sin(n_z \pi z/L).$$

Disse er simultane egenfunksjoner til operatorene $\hat{H}$, $\hat{H}^{(z)} \equiv -(\hbar^2/2\mu)\partial^2/\partial z^2$ og $\hat{L}_z = (\hbar/i)\partial/\partial\phi$, med energiegenverdiene

$$E_{nm_z}^{(|m|)} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[(\Pi_n^{(|m|)}/a)^2 + (\pi n_z/L)^2 \right].$$

Her er $\Pi_n^{(|m|)}$ nullpunkter i Besselfunksjonene $J_{|m|}$. Nullpunktene med de laveste verdiene er oppgitt på formelarket.

a. Anta først at denne boksen inneholder én partikkel med masse μ , som hele tiden er i (den L -avhengige) grunntilstanden (også om L endres). •Hvor mye arbeid koster det å bevege stempelet slik at høyden reduseres fra L til $L/2$? •Hva er kraften fra partikkelen på stempelet når høyden er L ?

b. Anta nå at boksen inneholder 8 ikke-vekselvirkende, identiske spinn- $\frac{1}{2}$ -fermioner med masse μ , og at dette mangepartikkelsystemet befinner seg i grunntilstanden, dvs at systemet har så lav total energi som mulig. •Hva er den totale kraften fra partiklene på stampelet når høyden L er lik diameteren, $L = 2a$?

c. Anta at selve sylindren er veldig lang, og anta at vi lar stampelet bevege seg fra $L = 2a$ til $L = 10^6 a$, mens partikkelsystemet hele tiden befinner seg i (den L -avhengige) grunntilstanden for dette 8-partikkel-systemet. •Forklar hvordan du vil gå fram for å finne det totale arbeidet som de 8 partiklene utfører på stampelet under denne prosessen, og beregn dette arbeidet.

Oppgave 3

I denne oppgaven ser vi på en partikkel med spinn $\frac{1}{2}$. Dette spinnet representeres av operatoren $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$.

a. La $\hat{\mathbf{n}}$ være en enhetsvektor med retningsvinkler (polarvinkler) θ og ϕ :

$$\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}} \sin \theta \cos \phi + \hat{\mathbf{y}} \sin \theta \sin \phi + \hat{\mathbf{z}} \cos \theta.$$

•Vis at $\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ kan skrives på matriseformen

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

•Vis videre at

$$\chi_{\hat{\mathbf{n}}} = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta \\ \sin \frac{1}{2}\theta e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

er en egen spinor til $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$ med egenverdi $\frac{1}{2}\hbar$. Hint: Bruk de trigonometriske formlene

$$\cos a \cos b + \sin a \sin b = \cos(a - b)$$

og

$$\sin a \cos b - \cos a \sin b = \sin(a - b).$$

b. Anta at en måling av $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$ gir $\frac{1}{2}\hbar$. •Finn sannsynligheten for at en måling (umiddelbart etterpå) av S_x gir $\frac{1}{2}\hbar$. Vis at denne sannsynligheten kan skrives på formen $\frac{1}{2}(1 + \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{n}})$.

c. •Finn (så lett vint som du kan) en egen spinor til $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$ med egenverdi $-\frac{1}{2}\hbar$.

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Førsteordens tidsuavhengig perturbasjonsteori

Med $\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$ og $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$ er 1.-ordens korreksjon til det uperturberte og ikke-degenererte energinivået $E_n^{(0)}$ gitt ved forventningsverdien av perturbasjonen V , beregnet ved hjelp av den uperturberte egenfunksjonen:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots; \quad E_n^{(1)} = \int (\psi_n^{(0)})^* V \psi_n^{(0)} d\tau.$$

Tidsutvikling av forventningsverdier

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} \right\rangle.$$

Sannsynlighets-strømtetthet

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \Re \left[\Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hbar}{im} \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) \right].$$

Noen formler

$$\sin a = (e^{ia} - e^{-ia})/2i, \quad \cos a = (e^{ia} + e^{-ia})/2;$$

$$\tan y = \frac{1}{\cot y} = \tan(y + n\pi), \quad n = 0, \pm 1, \dots;$$

$$\sinh y = \frac{1}{2}(e^y - e^{-y}); \quad \cosh y = \frac{1}{2}(e^y + e^{-y}); \quad \tanh y = \frac{1}{\coth y} = \frac{\sinh y}{\cosh y};$$

$$\cosh^2 y - \sinh^2 y = 1; \quad \frac{d}{dy} \sinh y = \cosh y; \quad \frac{d}{dy} \cosh y = \sinh y;$$

$$\sinh y = y + \mathcal{O}(y^3).$$

Nullpunkter i Bessel-funksjonen

De laveste nullpunktsverdiene er

J_0	J_1	J_2	J_3
$\Pi_1^{(0)} = 2.4048$	$\Pi_1^{(1)} = 3.8317$	$\Pi_1^{(2)} = 5.1356$	$\Pi_1^{(3)} = 6.3802$
$\Pi_2^{(0)} = 5.5201$	$\Pi_2^{(1)} = 7.0156$	$\Pi_2^{(2)} = 8.4172$	$\Pi_2^{(3)} = 9.7610$
$\Pi_3^{(0)} = 8.6537$	$\Pi_3^{(1)} = 10.1735$	$\Pi_3^{(2)} = 11.6198$	$\Pi_3^{(3)} = 13.0152$

δ -funksjonen og sprangfunksjonen

$$\frac{d}{dx}\Theta(x) = \delta(x); \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a).$$

Noen fysiske konstanter

$$a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{m_e c} = 0.529 \times 10^{-10} \text{m}; \quad \alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.036};$$
$$c = 2.998 \times 10^8 \text{m/s}; \quad \hbar = 0.6582 \times 10^{-15} \text{eVs}; \quad m_e = 0.5110 \text{ MeV}/c^2.$$
$$\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6 \text{ eV}.$$

Spinn $\frac{1}{2}$

For en partikkel med spinn $\frac{1}{2}$ kan en bruke spinnoperatoren

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2}\hbar(\hat{\mathbf{e}}_x\sigma_x + \hat{\mathbf{e}}_y\sigma_y + \hat{\mathbf{e}}_z\sigma_z),$$

der

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

er de såkalte Pauli-matrisene. Pauli-spinorene $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ og $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ er da egentilstander til $S_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z$ med egenverdiene $\pm\frac{1}{2}\hbar$. En normert spinntilstand $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ kan karakteriseres ved **spinnretningen**,

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \chi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \chi = \hat{\mathbf{e}}_x \Re(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_y \Im(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_z (|a|^2 - |b|^2).$$

Matrisene $S_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x$ osv oppfyller dreieimpulsalgebraen,

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y.$$

Videre er

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \mathbf{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
 Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen: Ingjald Øverbø, tlf 73 59 18 67, eller 97012355

EKSAMEN I
TFY4250 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK og
FY2045 KVANTEFYSIKK

Tirsdag 4. desember 2007
 kl. 09.00 - 13.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator

Rottmann: Matematisk formelsamling

Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk, eller

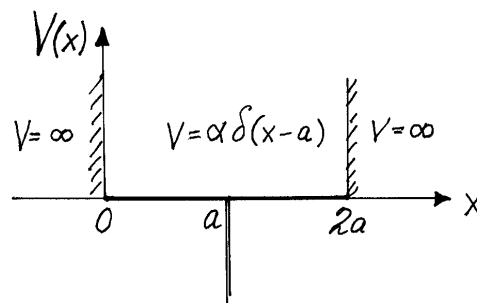
Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter

The questions are given in English page on pages 1 – 4, and then in Norwegian on pages 5 –8.
 A sheet with expressions and formulae is attached.

Sensuren faller i desember 2007.

ENGLISH TEXT

Question 1



A particle with mass m is moving in a one-dimensional box potential with an additional δ -function contribution at the middle,

$$V(x) = \begin{cases} \alpha\delta(x-a) & \text{for } 0 < x < 2a, \\ \infty & \text{for } x < 0 \text{ and for } x > 2a. \end{cases}$$

By integrating the time-independent Schrödinger equation one can show that energy eigenfunctions for this potential must satisfy the discontinuity condition

$$\psi'(a_+) - \psi'(a_-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(a);$$

thus the derivative makes a jump which is proportional with the “strength” α of the delta function and with the value of the wave function at the point $x = a$. In this Problem, we mainly study how the energy E_1 and the wave function $\psi_1(x)$ of the ground state behave for varying values of α , both positive and negative.

a. For the special case $\alpha = 0$ the normalised energy eigenfunctions can be written as

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin k_n x.$$

• Find the wave numbers k_1 and k_2 and the energies $E_1^{(0)}$ and $E_2^{(0)}$ of the ground state and the first excited state, respectively, and make a sketch of the energy eigenfunctions $\psi_1^{(0)}(x)$ and $\psi_2^{(0)}(x)$. • Explain why the results for the first excited state are valid also for values of α *different* from zero. [Hint: Check that $\psi_2^{(0)}(x)$ satisfies the discontinuity condition mentioned above.]

b. In the remaining part of this Problem, we set $\alpha = \beta \hbar^2 / (ma)$. We want to examine how the ground-state energy E_1 varies as a function of the dimensionless parameter β . • Consider the δ -function contribution to the potential as a perturbation of the box potential, and find the correction $E_1^{(1)}$ to the energy $E_1^{(0)}$ using first-order time-independent perturbation theory. (See the formula sheet.)

The result $E_1 \approx E_1^{(0)} + E_1^{(1)}$ will be quite accurate for small $|\beta|$ (say for $|\beta| \sim 0.1 - 0.2$), that is, (i) with a weakly attractive δ -function well, or (ii) with a weakly repulsive δ -function barrier. • Use this result to make qualitative sketches of $\psi_1(x)$ for these two cases, and check that these are in qualitative agreement with the discontinuity condition given above. [Hint: For $0 < x < a$, the function ψ_1 will still behave as $\sin k_1 x$, where k_1 is the corrected wave number.]

When β increases towards large positive values ($\gg 1$), the energy correction $E_1^{(1)}$ calculated above will also grow, and the formula $E_1 \approx E_1^{(0)} + E_1^{(1)}$ is no longer useful. Thus, E_1 will in fact always be smaller than a certain upper limit, no matter how large we choose β to be. • State the value of this upper limit for E_1 and the corresponding upper limit for k_1 .

c. For a certain value (β_0) of β the ground-state energy E_1 equals zero. • Explain why the ground state must then have the form

$$\psi_1(x) = \begin{cases} (x/a)\psi_1(a) & \text{for } 0 < x < a, \\ (2 - x/a)\psi_1(a) & \text{for } a < x < 2a. \end{cases}$$

• Find β_0 .

d. For $-\infty < \beta < \beta_0$, the ground-state energy E_1 is negative. • Show that it is determined by the condition

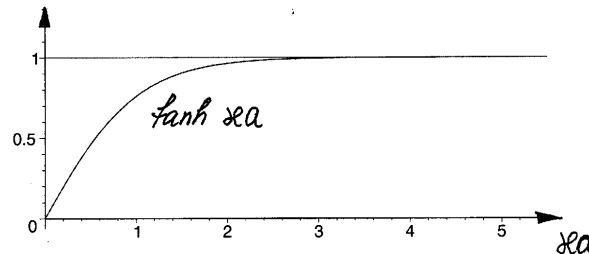
$$\tanh \kappa a = -\frac{\kappa a}{\beta} \quad \left(E_1 = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \right).$$

[Hint: Start by showing that the solution of the time-independent Schrödinger equation for $0 < x < a$ must have the form $\psi = A \sinh \kappa x$.]

• Show that the corresponding condition for $\beta_0 < \beta < \infty$ is

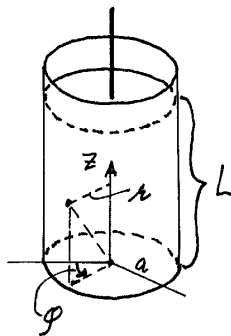
$$\tan k_1 a = -\frac{k_1 a}{\beta} \quad \left(E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \right).$$

e. • Make a rough sketch of $\tan k_1 a$ for $0 < k_1 a < \pi$, and explain what happens with $k_1 a$ and E_1 when $\beta \rightarrow \infty$, based on the condition $\tan k_1 a = -k_1 a/\beta$.



The diagram shows $\tanh \kappa a$ as a function of κa . • Find an approximate result for κ and hence for E_1 for the case $-\beta \gg 1$.

Question 2



The figure shows a cylindrical box ($V = 0$ inside the box, $V = \infty$ outside). The radius of the cylinder is a . The bottom is fixed, while the height L may be varied using a piston, which may be moved without friction. For a particle with mass μ the energy eigenfunctions (expressed in terms of cylinder coordinates) are

$$\psi_{nn_z}^{(m)}(r, \phi, z) \propto J_m(\Pi_n^{(m)} r/a) e^{im\phi} \sin(n_z \pi z/L).$$

These are simultaneous eigenfunctions of the operators $\hat{H}$, $\hat{H}^{(z)} \equiv -(\hbar^2/2\mu)\partial^2/\partial z^2$ and $\hat{L}_z = (\hbar/i)\partial/\partial\phi$, with the energy eigenvalues

$$E_{nn_z}^{(m)} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[(\Pi_n^{(m)}/a)^2 + (\pi n_z/L)^2 \right].$$

Here $\Pi_n^{(m)}$ are the zeros of the Bessel functions J_m . The zeros with the lowest values are given on the formula sheet.

a. Suppose to start with that this box contains one particle with mass μ , which is in the (L -dependent) ground state all the time (also if L is changed). • How much work does it cost to move the piston such that the height is reduced from L to $L/2$? • What is the force from the particle on the piston when the height is L ?

b. Then suppose then that the box contains 8 non-interacting, identical spin- $\frac{1}{2}$ fermions with mass μ , and suppose that this many-particle system is in the ground state, meaning that the total energy of the system is as low as possible. •What is the total force from the particles on the piston when the height L is equal to the diameter, $L = 2a$?

c. Suppose that the cylinder itself is very long, and suppose that we let the piston move from $L = 2a$ to $L = 10^6 a$, while the particle system is in the (L -dependent) ground state of this 8-particle system all the time. •Explain how you would proceed to find the total work done on the piston by the 8 particles during this process, and calculate this work.

Question 3

In this Problem we consider a particle with spin $\frac{1}{2}$. This spin may be represented by the operator $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$.

a. Let $\hat{\mathbf{n}}$ be a unit vector with a direction given by the polar angles θ and ϕ :

$$\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}} \sin \theta \cos \phi + \hat{\mathbf{y}} \sin \theta \sin \phi + \hat{\mathbf{z}} \cos \theta.$$

•Show that $\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ can be written as

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

•Show also that

$$\chi_{\hat{\mathbf{n}}} = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta \\ \sin \frac{1}{2}\theta e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

is an eigenspinor of $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$ with eigenvalue $\frac{1}{2}\hbar$. Hint: Use the trigonometric formulae

$$\cos a \cos b + \sin a \sin b = \cos(a - b)$$

and

$$\sin a \cos b - \cos a \sin b = \sin(a - b).$$

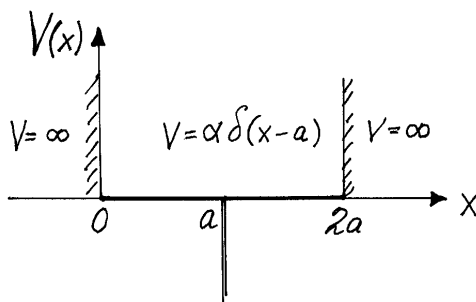
b. Suppose that a measurement of $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$ gives $\frac{1}{2}\hbar$. •Find the probability that a measurement (immediately afterwards) of S_x gives $\frac{1}{2}\hbar$. Show that this probability may be written on the form $\frac{1}{2}(1 + \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{n}})$.

c. •Find (as easily as you can) an eigenspinor of $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$ with eigenvalue $-\frac{1}{2}\hbar$.

— — —THE END— — —

Oppgave 1

NORSK TEKST



En partikkel med masse m befinner seg i et éndimensjonalt bokspotensial med et deltafunksjonsbidrag i midten,

$$V(x) = \begin{cases} \alpha \delta(x - a) & \text{for } 0 < x < 2a, \\ \infty & \text{for } x < 0 \text{ og for } x > 2a. \end{cases}$$

Ved å integrere den tidsuavhengige Schrödingerligningen kan en vise at energieigenfunksjoner for dette potensialet må oppfylle diskontinuitetsbetingelsen

$$\psi'(a_+) - \psi'(a_-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(a);$$

egenfunksjonen må altså ha et sprang i den deriverte som er proporsjonalt med “styrken” α til deltafunksjonen og med bølgefunksjonsverdien i punktet $x = a$. Oppgaven går i hovedsak ut på å studere hvordan energien E_1 og bølgefunksjonen $\psi_1(x)$ for grunntilstanden oppfører seg for varierende verdier av α , både positive og negative.

a. For spesialtilfellet $\alpha = 0$ kan de normerte energieigenfunksjonene skrives på formen

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin k_n x.$$

• Finn bølgetallene k_1 og k_2 og energiene $E_1^{(0)}$ og $E_2^{(0)}$ for henholdsvis grunntilstanden og 1. eksiterte tilstand, og skissér energieigenfunksjonene $\psi_1^{(0)}(x)$ og $\psi_2^{(0)}(x)$. • Forklar hvorfor resultatene for 1. eksiterte tilstand også er gyldige for α forskjellig fra null. [Hint: Kontrollér at $\psi_2^{(0)}(x)$ oppfyller diskontinuitetsbetingelsen nevnt ovenfor.]

b. I resten av oppgaven setter vi $\alpha = \beta \hbar^2 / (ma)$. Vi skal undersøke hvordan grunntilstandsenergien E_1 varierer som funksjon av den dimensjonsløse parameteren β . • Betrakt deltafunksjonsbidraget til potensialet som en perturbasjon av bokspotensialet, og finn korleksjonen $E_1^{(1)}$ til energien $E_1^{(0)}$ ved hjelp av 1.-ordens tidsuavhengig perturbasjonsteori. (Se formelarket.)

Dette resultatet for korreksjonen pga deltafunksjonen vil være ganske nøyaktig for små $|\beta|$ (f.eks $|\beta| \sim 0.1 - 0.2$), dvs (i) for en svakt tiltrekkende δ -brønn eller (ii) for en svakt frastøtende δ -barriere. •Bruk dette resultatet til å lage kvalitative skisser (prinsippskisser) av $\psi_1(x)$ for disse to tilfellene, og kontrollér at disse harmonerer med den oppgitte diskontinuitetsbetingelsen. [Hint: For $0 < x < a$ vil ψ_1 fortsatt gå som $\sin k_1 x$, der k_1 er det korrigerte bølgetallet.]

Når β vokser mot store positive verdier ($\gg 1$), vil også energikorreksjonen $E_1^{(1)}$ vokse, og vi kan ikke lenger bruke resultatet ovenfor. Energien E_1 vil nemlig alltid holde seg under en viss skranke, uansett hvor stor β vi velger. •Angi denne øvre skranken for E_1 og den tilsvarende skranken for k_1 .

c. For en viss verdi (β_0) av β blir grunntilstandsenergien E_1 lik null. •Forklar hvorfor grunntilstanden da må ha formen

$$\psi_1(x) = \begin{cases} (x/a)\psi_1(a) & \text{for } 0 < x < a, \\ (2 - x/a)\psi_1(a) & \text{for } a < x < 2a. \end{cases}$$

•Finn β_0 .

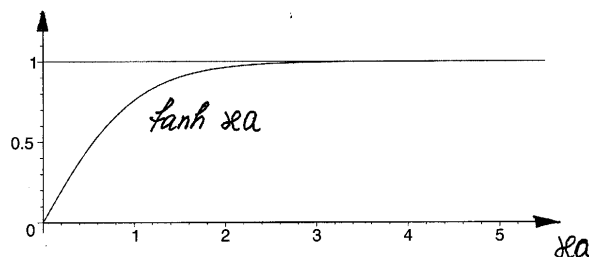
d. For $-\infty < \beta < \beta_0$ vil grunntilstandsenergien E_1 være negativ. •Vis at den er bestemt av betingelsen

$$\tanh \kappa a = -\frac{\kappa a}{\beta} \quad \left(E_1 = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \right).$$

[Hint: Vis først at løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for $0 < x < a$ må ha formen $\psi = A \sinh \kappa x$.] •Vis at den tilsvarende betingelsen for $\beta_0 < \beta < \infty$ er

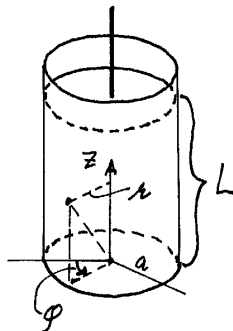
$$\tan k_1 a = -\frac{k_1 a}{\beta} \quad \left(E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \right).$$

e. •Lag en rask skisse av $\tan k_1 a$ for $0 < k_1 a < \pi$, og forklar med utgangspunkt i betingelsen $\tan k_1 a = -k_1 a / \beta$ hva som skjer med $k_1 a$ og E_1 når $\beta \rightarrow \infty$.



Diagrammet viser $\tanh \kappa a$ som funksjon av κa . •Finn et tilnærmet resultat for κ og dermed for E_1 for tilfellet $-\beta \gg 1$.

Oppgave 2



Figuren viser en sylinderformet boks ($V = 0$ inne i boksen, $V = \infty$ utenfor). Sylindere har radius a . Bunnen er fast, mens høyden L kan reguleres ved hjelp av et stempel som kan beveges friksjonsfritt. For en partikkel med masse μ er energiegenfunksjonene (uttrykt i sylinderkoordinater)

$$\psi_{nn_z}^{(m)}(r, \phi, z) \propto J_m(\Pi_n^{(m)} r/a) e^{im\phi} \sin(n_z \pi z/L).$$

Disse er simultane egenfunksjoner til operatorene $\hat{H}$, $\hat{H}^{(z)} \equiv -(\hbar^2/2\mu)\partial^2/\partial z^2$ og $\hat{L}_z = (\hbar/i)\partial/\partial\phi$, med energiegenverdiene

$$E_{nn_z}^{(m)} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[(\Pi_n^{(m)}/a)^2 + (\pi n_z/L)^2 \right].$$

Her er $\Pi_n^{(m)}$ nullpunkter i Besselfunksjonene J_m . Nullpunktene med de laveste verdiene er oppgitt på formelarket.

a. Anta først at denne boksen inneholder én partikkel med masse μ , som hele tiden er i (den L -avhengige) grunntilstanden (også om L endres). •Hvor mye arbeid koster det å bevege stempelet slik at høyden reduseres fra L til $L/2$? •Hva er kraften fra partikkelen på stempelet når høyden er L ?

b. Anta nå at boksen inneholder 8 ikke-vekselvirkende, identiske spinn- $\frac{1}{2}$ -fermioner med masse μ , og at dette mangepartikkelsystemet befinner seg i grunntilstanden, dvs at systemet har så lav total energi som mulig. •Hva er den totale kraften fra partiklene på stempelet når høyden L er lik diameteren, $L = 2a$?

c. Anta at selve sylindere er veldig lang, og anta at vi lar stempelet bevege seg fra $L = 2a$ til $L = 10^6 a$, mens partikkelsystemet hele tiden befinner seg i (den L -avhengige) grunntilstanden for dette 8-partikkel-systemet. •Forklar hvordan du vil gå fram for å finne det totale arbeidet som de 8 partiklene utfører på stempelet under denne prosessen, og beregn dette arbeidet.

Oppgave 3

I denne oppgaven ser vi på en partikkel med spinn $\frac{1}{2}$. Dette spinnet representeres av operatoren $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$.

a. La $\hat{\mathbf{n}}$ være en enhetsvektor med retningsvinkler (polarvinkler) θ og ϕ :

$$\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}} \sin \theta \cos \phi + \hat{\mathbf{y}} \sin \theta \sin \phi + \hat{\mathbf{z}} \cos \theta.$$

•Vis at $\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ kan skrives på matriseformen

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

•Vis videre at

$$\chi_{\hat{\mathbf{n}}} = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\theta \\ \sin \frac{1}{2}\theta e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

er en egenspinor til $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$ med egenverdi $\frac{1}{2}\hbar$. Hint: Bruk de trigonometriske formlene

$$\cos a \cos b + \sin a \sin b = \cos(a - b)$$

og

$$\sin a \cos b - \cos a \sin b = \sin(a - b).$$

b. Anta at en måling av $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$ gir $\frac{1}{2}\hbar$. •Finn sannsynligheten for at en måling (umiddelbart etterpå) av S_x gir $\frac{1}{2}\hbar$. Vis at denne sannsynligheten kan skrives på formen $\frac{1}{2}(1 + \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{n}})$.

c. •Finn (så lett vint som du kan) en egenspinor til $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$ med egenverdi $-\frac{1}{2}\hbar$.

— — —THE END — — —

Attachment: Formulae and expressions

Some of the formulae below may turn out to be useful.

First-order time-independent perturbation theory

With $\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$ and $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$, the first-order correction to the unperturbed and non-degenerate energy level $E_n^{(0)}$ is given by the expectation value of the perturbation V , calculated using the unperturbed eigenfunction:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \dots; \quad E_n^{(1)} = \int (\psi_n^{(0)})^* V \psi_n^{(0)} d\tau.$$

Time development of expectation values

$$\frac{d}{dt} \langle F \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{F} \right\rangle.$$

Probability density current

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \Re \left[\Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hbar}{im} \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) \right].$$

Some formulae

$$\sin a = (e^{ia} - e^{-ia})/2i, \quad \cos a = (e^{ia} + e^{-ia})/2;$$

$$\tan y = \frac{1}{\cot y} = \tan(y + n\pi), \quad n = 0, \pm 1, \dots;$$

$$\sinh y = \frac{1}{2}(e^y - e^{-y}); \quad \cosh y = \frac{1}{2}(e^y + e^{-y}); \quad \tanh y = \frac{1}{\coth y} = \frac{\sinh y}{\cosh y};$$

$$\cosh^2 y - \sinh^2 y = 1; \quad \frac{d}{dy} \sinh y = \cosh y; \quad \frac{d}{dy} \cosh y = \sinh y;$$

$$\sinh y = y + \mathcal{O}(y^3).$$

Zeros of Bessel functions

The zeros with the lowest values are

J_0	J_1	J_2	J_3
$\Pi_1^{(0)} = 2.4048$	$\Pi_1^{(1)} = 3.8317$	$\Pi_1^{(2)} = 5.1356$	$\Pi_1^{(3)} = 6.3802$
$\Pi_2^{(0)} = 5.5201$	$\Pi_2^{(1)} = 7.0156$	$\Pi_2^{(2)} = 8.4172$	$\Pi_2^{(3)} = 9.7610$
$\Pi_3^{(0)} = 8.6537$	$\Pi_3^{(1)} = 10.1735$	$\Pi_3^{(2)} = 11.6198$	$\Pi_3^{(3)} = 13.0152$

Dirac's δ -function and the step function

$$\frac{d}{dx} \Theta(x) = \delta(x); \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a).$$

Some physical constants

$$a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\hbar}{m_e c} = 0.529 \times 10^{-10} \text{m}; \quad \alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.036};$$

$$c = 2.998 \times 10^8 \text{m/s}; \quad \hbar = 0.6582 \times 10^{-15} \text{eVs}; \quad m_e = 0.5110 \text{MeV}/c^2.$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6 \text{ eV}.$$

Spin $\frac{1}{2}$

For a particle with spin $\frac{1}{2}$ one may use the spin operator

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2}\hbar(\hat{\mathbf{e}}_x\sigma_x + \hat{\mathbf{e}}_y\sigma_y + \hat{\mathbf{e}}_z\sigma_z),$$

where

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

are the so-called Pauli matrices. The Pauli *spinors* $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ and $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ then are eigenstates of $S_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z$ with the eigenvalues $\pm\frac{1}{2}\hbar$. A normalised spin state $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ may be characterised by the **spin direction**,

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \chi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \chi = \hat{\mathbf{e}}_x \Re(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_y \Im(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_z (|a|^2 - |b|^2).$$

The matrices $S_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x$ etc satisfy the angular momentum algebra,

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y.$$

Furthermore,

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \mathbf{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$