

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

Mandag 1. desember 2008

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 2008.

Oppgave 1

En partikkel med masse m befinner seg i et endimensjonalt potensial som består av en deltafunksjonsbrønn,

$$V(x) = -\beta\delta(x) \quad (\beta > 0).$$

Det opplyses at energieigenfunksjoner i dette potensialet må oppfylle diskontinuitetsbetingelsen

$$\psi'/\psi|_{x=0+} - \psi'/\psi|_{x=0-} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}.$$

a. • Vis at dette systemet har bare én bundet tilstand, med energien

$$E \equiv -E_B = -\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}.$$

b. Anta at partikler med (masse m og) energi $E > 0$ sendes fra venstre inn mot denne deltafunksjons-brønnen. Dette spredningsproblemet kan beskrives ved hjelp av en energieigenfunksjon som har formen

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx} \equiv \psi_i + \psi_r \quad \text{for } x < 0.$$

• Finn bølgetallet k uttrykt ved energien E .

Sannsynlighets-strømtettheten kan for $x < 0$ skrives på formen

$$j = \Re \left[\psi_I^* \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dx} \psi_I \right] = j_i + j_r = j_i - |j_r|.$$

• Finn j_i og j_r uttrykt ved k og den komplekse koeffisienten B . [Hint: $z - z^* = 2i\Im(z)$.]

• Hvilken form skal energieigenfunksjonen ha for $x > 0$ i dette spredningsproblemet?

c. Det kan vises at koeffisienten B er

$$B = - \left(1 + i \frac{\hbar^2 k}{m\beta} \right)^{-1}.$$

- Finn energien E når det oppgis at 25 % av partiklene reflekteres av potensialbrønnen.
- Utled formelen ovenfor for B .

Oppgave 2

I denne oppgaven betrakter vi en spinn- $\frac{1}{2}$ -partikkel som befinner seg i et konstant og homogent magnetfelt $\mathbf{B}$ rettet i z -retningen. Når vi ser bort fra andre frihetsgrader, kan Hamilton-operatoren for dette spinnet skrives på formen

$$H = \omega S_z,$$

der vi antar at ω er positiv.

a. • Finn energieigenverdiene og de (tidsavhengige) stasjonære tilstandene for dette systemet, og pass på at disse skal oppfylle ligningen

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi(t) = H\chi(t) = E\chi(t),$$

der E er de respektive egenverdiene. • Finn spinnretningene ($\langle \sigma \rangle$) for de stasjonære tilstandene, og kontrollér at disse retningene er tidsuavhengige. • Hvorfor er en lineærkombinasjon (med tidsuavhengige koeffisienter) av de stasjonære tilstandene en mulig tilstand for dette systemet? • Hvorfor er en slik lineærkombinasjon den *mest generelle* tilstanden vi kan ha for dette systemet?

b. Ved $t = 0$ foretas det en måling av komponenten S_y av spinnet. • Finn måleresultatet dersom spinnet umiddelbart etter målingen befinner seg i tilstanden

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

• Finn spinnretningen $\langle \sigma \rangle_0$ ved tiden $t = 0$ (dvs umiddelbart etter målingen). • Finn også spinnretningen $\langle \sigma \rangle$ ved tidene $t = \pi/(2\omega)$ og $t = \pi/\omega$.

Oppgave 3

I denne oppgaven betrakter vi et topartikkelsystem (eller snarere et *ensemble* av slike), der begge partiklene har spinn 1 (dvs $s_1 = s_2 = 1$):

$$|S_1| = \hbar\sqrt{s_1(s_1+1)} = \hbar\sqrt{2} \quad \text{og} \quad |S_2| = \hbar\sqrt{s_2(s_2+1)} = \hbar\sqrt{2}.$$

Ved en måling av S_{1z} og S_{2z} etterlates spinn nummer 1 i en av triplett-tilstandene $|1_1\rangle, |0_1\rangle, |-1_1\rangle$ og spinn nummer 2 i en av tilstandene $|1_2\rangle, |0_2\rangle, |-1_2\rangle$. Vi bruker

her de magnetiske kvantetallene m_1 og m_2 som merkelapper, sammen med partikkelindeksene 1 og 2. Topartikkelsystemet havner altså i en av 9 mulige produkt-tilstander av typen $|m_1\rangle|m_2\rangle$, der $m_1 = 1, 0, -1$ og $m_2 = 1, 0, -1$. Disse 9 tilstandene danner en basis for dette spinnsystemet, som vi godt kan kalle den "gamle" basisen.

Gjør vi i stedet en måling av størrelsen $|\mathbf{S}|$ og z -komponenten S_z av det totale spinnet $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ for dette topartikkelsystemet, havner systemet i en tilstand av typen $|s, m\rangle$ (slik at $|\mathbf{S}| = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ og $S_z = \hbar m$), der det oppgis at

$$|s_1 - s_2| \leq s \leq s_1 + s_2.$$

Disse tilstandene $|s, m\rangle$ velger vi å kalle "nye".

a. •Kontrollér at antallet av "nye" tilstander er lik antallet "gamle". •Hvorfor kan de "nye" tilstandene $|s, m\rangle$ uttrykkes som lineærkombinasjoner av de "gamle", $|m_1\rangle|m_2\rangle$? •Vis at den "gamle" tilstanden $|1_1\rangle|1_2\rangle$ er en egentilstand til $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$ med egenverdien $2\hbar$. •Hvorfor er den "nye" tilstanden $|2, 2\rangle$ lik den "gamle" $|1_1\rangle|1_2\rangle$, og hvorfor er $|2, -2\rangle = |-1_1\rangle|-1_2\rangle$?

b. Fra de generelle stigeoperator-relasjonene (se formelarket) følger det at vi for hvert av spinnene har

$$\hat{S}_{n-}|1_n\rangle = \hbar\sqrt{2}|0_n\rangle; \quad \hat{S}_{n-}|0_n\rangle = \hbar\sqrt{2}|-1_n\rangle; \quad n = 1, 2,$$

mens vi for de "nye" tilstandene har

$$\hat{S}_-|2, 2\rangle = 2\hbar|2, 1\rangle, \quad \text{osv.}$$

•Bruk disse relasjonene til å vise at den "nye" tilstanden $|2, 1\rangle$, med $s = 2$ og $m = 1$, er

$$|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_1\rangle|0_2\rangle + |0_1\rangle|1_2\rangle).$$

•Vis at den "nye" tilstanden med $s = 2$ og $m = 0$ er

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1_1\rangle|-1_2\rangle + 2|0_1\rangle|0_2\rangle + |-1_1\rangle|1_2\rangle).$$

•Hva er den fysiske tolkningen av koeffisientene i denne utviklingsformelen?

c. "Topp-trinnet" $|1, 1\rangle$ i triplett-"stigen" for $s = 1$ skal være en lineærkombinasjon av de to "gamle" tilstandene med $m = 1$, samtidig som den er ortogonal på $|2, 1\rangle$ (fordi s -kvantetallene er forskjellige for tilstandene $|2, 1\rangle$ og $|1, 1\rangle$). Disse kriteriene oppfylles av

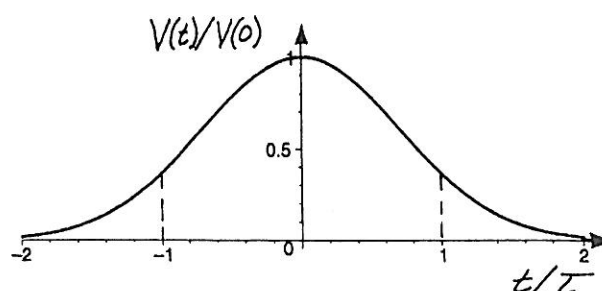
$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_1\rangle|0_2\rangle - |0_1\rangle|1_2\rangle).$$

•Vis med utgangspunkt i tilstanden $|1, 1\rangle$ at

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_1\rangle|-1_2\rangle - |-1_1\rangle|1_2\rangle).$$

•Finn til slutt (den normerte) singletten $|0, 0\rangle$ uttrykt ved de "gamle" tilstandene med $m = 0$.

Oppgave 4



Et elektron som ved tiden $t = -\infty$ befinner seg i grunntilstanden i et hydrogenatom, utsettes for en transient (forbigående) perturbasjon, i form av et homogent tidsavhengig elektrisk felt som svarer til et perturberende ledd

$$V(t) = -ze\mathcal{E}_0 \exp(-t^2/\tau^2)$$

i Hamilton-operatoren. Ifølge 1.-ordens tidsavhengig perturbasjonsteori er overgangssannsynligheten fra grunntilstanden $\psi_i = \psi_{100} = (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/a_0)$ (ved $t = -\infty$) til en bundet slutt-tilstand

$$\psi_f = \psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

(ved $t = \infty$) gitt ved

$$P_{i \rightarrow f} = |a_{i \rightarrow f}|^2 = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{fi}t) \langle \psi_f | V(t) | \psi_i \rangle dt \right|^2,$$

der $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$.

a. • Vis at denne overgangssannsynligheten kan skrives på formen

$$P_{i \rightarrow f} = f(\tau) \left| \int \psi_f^*(z/a_0) \psi_i d^3r \right|^2 \equiv f(\tau) \left| \frac{d_{fi}}{a_0} \right|^2,$$

der integralet er dimensjonsløst, og finn funksjonen $f(\tau)$ uttrykt ved de oppgitte størrelsene. Oppgitt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ay^2 + by) dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp(b^2/4a); \quad (\Re(a) > 0).$$

• Vis at overganger bare er mulig til slutt-tilstander med $l = 1$ og $m = 0$ (til 1. orden). [Hint: $z = r \cos \theta = r \sqrt{4\pi/3} Y_{10}$.]

b. Figuren ovenfor viser at "mesteparten" av perturbasjonen foregår i løpet av et tidsintervall 2τ . • Finn den τ -verdien (τ_m) som gir den maksimale overgangssannsynligheten $P_{i \rightarrow f}$ for fastholdt $\mathcal{E}_0$, og sammenlign $2\tau_m$ med den naturlige perioden $T_{fi} = 2\pi/\omega_{fi}$.

• Lag en rask skisse av $P_{i \rightarrow f}(\tau)/P_{i \rightarrow f}(\tau_m)$ som funksjon av τ/τ_m (for fastholdt $\mathcal{E}_0$), og kommentér spesielt oppførselen for tilfellene $\tau \ll \tau_m$ og $\tau \gg \tau_m$.

c. Dipolmomentene $d_{fi} = \langle \psi_f | z | \psi_i \rangle$ for overganger fra ψ_{100} til tilstandene ψ_{n10} er av størrelsesorden a_0 (Bohr-radien) eller mindre. F.eks er

$$\langle \psi_{210} | z | \psi_{100} \rangle \approx 0.745 a_0 \quad \text{og} \quad \langle \psi_{310} | z | \psi_{100} \rangle \approx 0.298 a_0.$$

La oss anta at $\mathcal{E}_0$ har samme styrke som feltet fra protonet i en avstand a_0 , dvs $\mathcal{E}_0 = e/(4\pi\epsilon_0 a_0^2)$, slik at $e\mathcal{E}_0 a_0 = e^2/(4\pi\epsilon_0 a_0) = 27.2 \text{ eV}$. Ser vi da på overgangen $\psi_{100} \rightarrow \psi_{210}$, med $\hbar\omega_{21} = E_2 - E_1 = 10.2 \text{ eV}$, så følger det fra resultatene ovenfor og formelen

$$f(\tau_m) = \frac{2\pi}{e} \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar\omega_{21}} \right)^2,$$

at

$$P_{100 \rightarrow 210}(\tau) = P_{100 \rightarrow 210}(\tau_m) \frac{f(\tau)}{f(\tau_m)} \approx 9.12 (\tau/\tau_m)^2 \exp[1 - (\tau/\tau_m)^2].$$

Dette resultatet har for å si det mildt en alvorlig svakhet for $\tau \sim \tau_m$. •Forklar hva svakheten består i, og hvordan feilen har kommet inn.

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Sannsynlighets-strømtetthet

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

Målepostulatet

- (i) De eneste mulige verdiene som en måling av observabelen F kan gi er en av egenverdiene f_n .
- (ii) Umiddelbart etter målingen av F er systemet i en egentilstand til den tilhørende operatoren $\hat{F}$, nemlig en egentilstand som svarer til den målte egenverdien f_n .

Spinn $\frac{1}{2}$

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

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

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**,

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

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

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

Stigeoperator-relasjoner for dreieimpulser

$$\hat{J}_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j-m)(j+1+m)} |j, m+1\rangle; \quad \hat{J}_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m)(j+1-m)} |j, m-1\rangle.$$

Sfæriske harmoniske

$$\left\{ \begin{array}{c} \hat{L}^2 \\ \hat{L}_z \end{array} \right\} Y_{lm} = \left\{ \begin{array}{c} \hbar^2 l(l+1) \\ \hbar m \end{array} \right\} Y_{lm}; \quad \int Y_{l'm'}^* Y_{lm} d\Omega = \delta_{l'l} \delta_{m'm}; \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi};$$

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}.$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}.$$

Utgangspunktet for tidsavhengig perturbasjonsteori

Med en Hamilton-operator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ kan den eksakte løsningen utvikles i de uperturberte stasjonære løsningene:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \Psi_n^{(0)}(\mathbf{r}, t),$$

der

$$\Psi_n^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad \hat{H}_0 \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}).$$

Det eksakte ligningssettet for utviklingskoeffisientene er

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_n e^{i\omega_{kn}t} V_{kn}(t) a_n(t); \quad V_{kn}(t) = \langle \psi_k | \hat{V}(t) | \psi_n \rangle, \quad \omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar.$$

Med $a_n(t_0) = \delta_{ni}$ oppfyller den eksakte amplituden ligningen

$$a_f(t) = \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_{t_0}^t e^{i\omega_{fn}t'} V_{fn}(t') a_n(t') dt'.$$

Noen fysiske konstanter

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

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

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

Tidsutvikling av forventningsverdier

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

δ -funksjonen og sprangfunksjonen

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