

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

EKSAMEN I
FY2045 KVANTEMekanikk I/
TFY4250 KVANTEMekanikk I

Tirsdag 10. august 2010
kl. 09.00 - 13.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator

Rottmann: Matematisk formelsamling

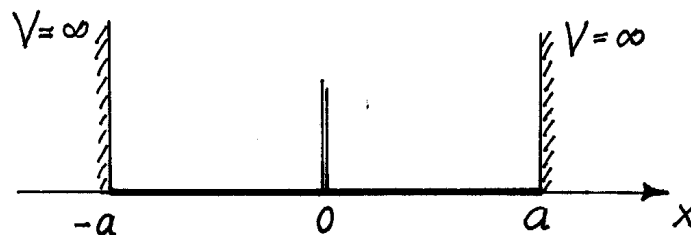
Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk, eller

Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter

Et ark med uttrykk og formler er vedlagt.

Sensuren faller i august 2010.

Oppgave 1



Et elektron befinner seg i en endimensjonal boks med en deltafunksjonsbarriere i midten,

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } |x| > a, \\ \beta \delta(x) & \text{for } |x| < a. \end{cases}$$

Her er

$$\beta = 200 \hbar^2 / (m_e a).$$

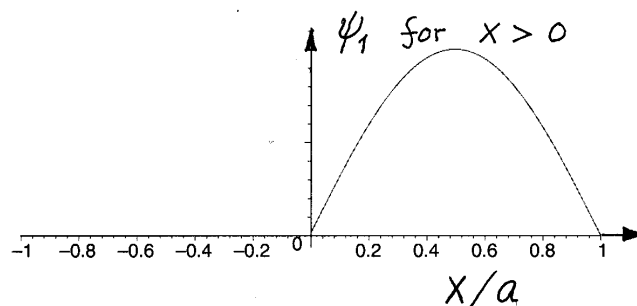
Det opplyses at energieigenfunksjoner i dette potensialet må oppfylle diskontinuitetsbetingelsen

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

a. •Forklar hvorfor første eksiterte tilstand ψ_2 har samme energi og bølgefunksjon som for tilfellet $\beta = 0$, dvs i fravær av deltabarrieren. •Skissér ψ_2 , og finn lengdeparameteren a uttrykt ved Bohr-radien a_0 , når det oppgis at energien til 1. eksiterte tilstand er en hundredel av en Rydberg,

$$E_2 = 0.01 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}.$$

b. Figuren viser hvordan bølgefunksjonen ψ_1 for grunntilstanden ser ut for dette systemet, for $x > 0$. Fordi β er så stor, er $\psi_1(0)$ praktisk talt lik null (men positiv).



•Lag en skisse som viser ψ_1 for *alle* x , og angi hvilket prinsipp som ligger til grunn for skissen. •Forklar kort hvorfor ψ_1 for $0 < x < a$ kan skrives (f.eks) på formen $\psi_1 = -B \sin[k_1(x - a)]$, og angi formen til ψ_1 for $-a < x < 0$. •Finn (uten å gjennomføre beregningen) en ligning som kan brukes til å bestemme k_1 .

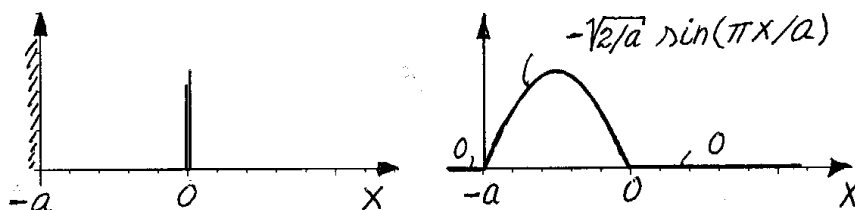
c. Anta nå at dette systemet prepareres i tilstanden

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

ved $t = 0$. •Hva blir da tilstanden $\Psi(x, t)$ for $t > 0$?

Vi antar at både ψ_1 og ψ_2 er normerte, og at fasevalget for ψ_2 er slik at $\psi_1 + \psi_2$ er praktisk talt lik null for $x < 0$. I tilstanden $\Psi(x, t)$ vil sannsynlighetstettheten da oscillere mellom høyre og venstre halvdel av potensialet. •Vis at periodetiden T for denne oscillasjonen kan uttrykkes bl.a ved energidifferansen mellom 1. eksiterte tilstand og grunntilstanden, og finn T i sekunder, når det oppgis at $E_2 - E_1 \approx 10^{-4} \hbar^2 / (2m_e a_0^2)$. [Hint: Spalt av en faktor $\exp(-iE_1 t / \hbar)$ i bølgefunksjonen. Oppgitt: $\hbar^2 / (2m_e a_0^2) = 13.6 \text{ eV}$, $2\pi\hbar = 4.136 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}$.]

d. La oss nå begynne på nytt, med å fjerne den harde veggen ved $x = a$, slik at vi står igjen med et potensial som er uendelig for $x < -a$, mens δ -barrieren beholdes, slik at potensialet for $x > -a$ er lik $\beta\delta(x)$. Vi preparerer nå systemet slik at bølgefunksjonen ved $t = 0$ er $-\sqrt{2/a} \sin kx$ for $-a < x < 0$ og null ellers.



Her er bølgetallet $k = \pi/a$, slik at $\langle E \rangle = \hbar^2 k^2 / 2m_e = \hbar^2 \pi^2 / (2m_e a^2)$. Dersom vi tillater oss å tenke halvklassisk, vil elektronet sprette fram og tilbake mellom den harde veggen til venstre og den nesten ugjennomtrengelige δ -barrieren med farten $v = \sqrt{2\langle E \rangle / m_e}$.

• Finn tidsintervallet t_1 mellom hver kollisjon med barrieren, i sekunder.

For hver kollisjon er det en viss sannsynlighet T_{tr} for transmisjon gjennom barrieren. Ved å regne med en bølgefunksjon som er lik $e^{ikx} + Be^{-ikx}$ for $x < 0$ og lik Ce^{ikx} for $x > 0$ kan det vises at

$$C = \left(1 + \frac{im_e \beta}{\hbar^2 k} \right)^{-1}.$$

• Bruk disse opplysningene til å finne den numeriske verdien av sannsynligheten T_{tr} for transmisjon ved én enkelt kollisjon med barrieren. • Bruk disse resultatene til å finne et estimat av “levetiden” τ for begynnelsestilstanden, som vi definerer som den tiden det tar før sannsynligheten for å finne elektronet i intervallet $-a < x < 0$ er redusert med en faktor $1/e$. Finn τ i sekunder, og sammenlign med periodetiden T funnet under pkt. c. [Hint: For $\epsilon \ll 1$ er $1 - \epsilon \approx \exp(-\epsilon)$.]

Oppgave 2

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

$$|\mathbf{S}_1| = \hbar \sqrt{s_1(s_1 + 1)} = \hbar \sqrt{2} \quad \text{og} \quad |\mathbf{S}_2| = \hbar \sqrt{s_2(s_2 + 1)} = \hbar \sqrt{2}.$$

Ved en måling av S_{1z} og S_{2z} etterlates dette topartikkelsystemet i én av de 9 tilstandene $|m_1\rangle|m_2\rangle$, der $m_1 = -1, 0, 1$ og $m_2 = -1, 0, 1$. Her beskriver den første ket-vektoren spinnet til partikkel 1, mens den andre beskriver spinnet til partikkel 2.

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, vil det havne i en tilstand av typen $|s, m\rangle$, slik at $|\mathbf{S}| = \hbar \sqrt{s(s + 1)}$ og $S_z = \hbar m$. Vi antar at alle disse tilstandene er normerte.

a. • Skriv ned trekant-ulikheten som begrenser de mulige verdiene av kvantetallet s for dette topartikkelsystemet, *angi* de mulige s -verdiene, og *angi* for hver av disse de mulige verdiene av m . Kontrollér at antallet tilstander av typen $|s, m\rangle$ er lik antallet av typen $|m_1\rangle|m_2\rangle$, som var lik 9. • Hvorfor kan hver av tilstandene $|s, m\rangle$ uttrykkes som lineærkombinasjoner av tilstandene $|m_1\rangle|m_2\rangle$? • Vis at tilstanden $|m_1\rangle|m_2\rangle$ er en egentilstand (ikke bare til $\hat{S}_1^2$, $\hat{S}_2^2$, $\hat{S}_{1z}$ og $\hat{S}_{2z}$, men også) til $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$ og bestem egenverdien.

b. I denne oppgaven skal vi fokusere spesielt på tilstandene $|s, 0\rangle$ (med $m = 0$) som er

$$|s = 0, m = 0\rangle, \quad |s = 1, m = 0\rangle \quad \text{og} \quad |s = 2, m = 0\rangle.$$

Disse tre tilstandene kan alle uttrykkes som lineærkombinasjoner av typen

$$|s, 0\rangle = A|1\rangle|-1\rangle + B|0\rangle|0\rangle + C|-1\rangle|1\rangle,$$

der koeffisientene A , B og C selvsagt avhenger av s , og der $|1\rangle|-1\rangle$ står for $|m_1 = 1\rangle|m_2 = -1\rangle$ osv. •Hvorfor opptrer ingen av de 6 øvrige tilstandene av typen $|m_1\rangle|m_2\rangle$ i disse lineærkombinasjonene?

Det oppgis at

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 (A|1\rangle|-1\rangle + B|0\rangle|0\rangle + C|-1\rangle|1\rangle) \\ = K\{ (A+B)|1\rangle|-1\rangle + (A+2B+C)|0\rangle|0\rangle + (B+C)|-1\rangle|1\rangle \}, \end{aligned}$$

der K er et helt multiplum av $\hbar^2$ ($\neq 0$). •Bruk denne relasjonen til å finne en formel for tilstanden $|0, 0\rangle$ ($\equiv |s = 0, m = 0\rangle$). [Hint: Dette kan gjøres uten å kjenne K . Finn B og C uttrykt ved A , og velg A slik at $|0, 0\rangle$ blir normert.]

•Vis formelen ovenfor, og bestem dermed konstanten K . Hint: Fra formelarket følger det at $\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 + \hbar\hat{S}_z + \hat{S}_-\hat{S}_+$. Med $i = 1$ (2) for partikkel 1 (2) følger det videre at

$$\hat{S}_{i\pm}|\pm 1_i\rangle = 0, \quad \hat{S}_{i\pm}|\mp 1_i\rangle = \hbar\sqrt{2}|0_i\rangle, \quad \text{og} \quad \hat{S}_{i\pm}|0_i\rangle = \hbar\sqrt{2}|\pm 1_i\rangle.$$

c. •Finn de normerte tilstandene $|1, 0\rangle$ og $|2, 0\rangle$, og kontrollér at disse sammen med $|0, 0\rangle$ danner et ortogonalt sett. [Hint: Dersom du ikke har funnet konstanten K , kan du sette den lik $2\hbar^2$.]

Oppgave 3

En partikkel med masse m befinner seg i utgangspunktet (ved $t = 0^-$) i grunntilstanden $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$ i et endimensjonalt harmonisk oscillatorpotensial $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Partikkelen utsettes så for en transient (forbigående) perturbasjon

$$V_1(t) = -x p_0 \delta(t).$$

Denne svarer til et deltafunksjonsformet kraftstøt (“ δ -spark”) $F_1(t) = -\partial V_1/\partial x = p_0 \delta(t)$, og en impulsoverføring p_0 . Det kan vises at kraftstøtet resulterer i en ekstra faktor $\exp(ip_0 x/\hbar)$ i bølgefunksjonen, som dermed umiddelbart etter perturbasjonen får formen

$$\Psi(x, 0^+) = e^{ip_0 x/\hbar} \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{ip_0 x/\hbar} e^{-m\omega x^2/2\hbar}.$$

Tilstanden for $t > 0$ blir i realiteten en såkalt koherent tilstand, der usikkerhetene i posisjon og impuls hele tiden er de samme som ved $t = 0^+$ (og ved $t = 0^-$), nemlig

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad \text{og} \quad \Delta p_x = \sqrt{\frac{1}{2}\hbar m\omega}.$$

a. Problemstillingen i denne oppgaven kan også angripes ved hjelp av 1.-ordens tids-avhengig perturbasjonsteori: •Finn matrise-elementene

$$(V_1)_{n0}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) V_1(t) \psi_0(x) dx \equiv \langle n | \hat{V}_1(t) | 0 \rangle.$$

•Beregn overgangsamplitudene $a_{0 \rightarrow n}$, og de tilsvarende overgangssannsynlighetene $P_{0 \rightarrow n}$, etter at perturbasjonen er overstått, ved hjelp av 1.-ordens perturbasjonsteori. For å sette ting i perspektiv kan du uttrykke disse størrelsene ved det dimensjonsløse forholdet mellom p_0 og $2\Delta p_x$,

$$\alpha_0 \equiv \frac{p_0}{2\Delta p_x} = \frac{p_0}{\sqrt{2m\hbar\omega}}.$$

Oppgitt:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger); \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle.$$

•Hva er, ut fra disse resultatene, sannsynligheten for å finne oscillatoren i grunntilstanden etter perturbasjonen? •Hvilket krav må stilles til impulsoverføringen p_0 (ev. til α_0) for at disse resultatene skal være gode tilnærmelser?

b. Fra den oppgitte tilstanden $\Psi(x, 0^+)$ er det nokså enkelt å beregne de *eksakte* resultatene for amplitudene (a_n^{eks}) og sannsynlighetene (P_n^{eks}). Amplitudene bestemmes av

$$\Psi(x, 0^+) = \sum_n a_n^{\text{eks}} \psi_n(x), \quad a_n^{\text{eks}} = \langle \psi_n, \Psi(0^+) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, 0^+) dx.$$

•Finn a_0^{eks} ved hjelp av integralet

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-Ay^2 + By) dy = \left(\frac{\pi}{A}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{B^2}{4A}\right), \quad (\Re A > 0),$$

og vis at sannsynligheten for å finne oscillatoren i grunntilstanden etter perturbasjonen er $P_0^{\text{eks}} = \exp(-\alpha_0^2)$. •Sammenlign P_0^{eks} med resultatet for P_0 funnet i pkt. **a**. [Hint: P_0^{eks} kan rekkeutvikles vha formelen $\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n/n!$.] For $\alpha_0^2 \gg 1$ ser vi at P_0^{eks} går veldig raskt mot null for økende α_0 . •Hva venter du vil skje med den eksakte sannsynligheten for å finne oscillatoren i 1. eksiterte tilstand når α_0 er stor og økende?

c. Relasjonen $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$ tar i posisjonsrepresentasjonen formen

$$a_{\text{pr}} \psi_n(x) = \sqrt{n} \psi_{n-1}(x), \quad \text{der} \quad a_{\text{pr}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{i\hat{p}_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \quad \left(\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

•Vis eksplisitt at operatoren a_{pr} anvendt på $\Psi(x, 0^+) = \exp(ip_0 x/\hbar) \psi_0(x)$ gir

$$a_{\text{pr}} \Psi(x, 0^+) = \frac{ip_0}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \Psi(x, 0^+) \equiv i\alpha_0 \Psi(x, 0^+).$$

• Sett inn $\Psi(x, 0^+) = \sum_n a_n^{\text{eks}} \psi_n(x)$ i denne egenverdiligningen, og vis at

$$a_n^{\text{eks}} = \text{konst} \cdot \frac{\alpha_0}{\sqrt{n}} a_{n-1}^{\text{eks}},$$

der konstanten skal bestemmes.

d. • Finn den eksakte sannsynlighetsamplituden a_1^{eks} samt sannsynligheten P_1^{eks} , og sammenlign med resultatene i pkt. **a** og siste spørsmål i pkt. **b**. • Finn også P_2^{eks} og P_3^{eks} og generaliser til P_n^{eks} . • Anta at α_0 er stor, og finn ut for hvilken n sannsynligheten P_n^{eks} er størst.

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Sannsynlighets-strømtetthet

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

Stigeoperator-relasjoner for dreieimpuls

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j + 1 \pm m)} |j, m \pm 1\rangle; \quad \hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z + \hat{J}_+ \hat{J}_-.$$

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 .

Harmonisk oscillator

Energieigenfunksjonene for potensialet $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ ($-\infty < x < \infty$) oppfyller egenverdiligningen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \right] \psi_n(x) = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

med løsninger på formen

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-m\omega x^2 / 2\hbar} H_n(\xi), \quad \xi = \frac{x}{\sqrt{\hbar/m\omega}};$$

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad \dots$$

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

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_n e^{i\omega_{kn}t} V_{kn}(t) a_n(t); \quad \omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar;$$

$$V_{kn}(t) = \langle \psi_k | \widehat{V}(t) | \psi_n \rangle = \int \psi_k^* \widehat{V}(t) \psi_n d\tau.$$

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

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

Til første orden i perturbasjonen er da amplituden $a_f \equiv a_{i \rightarrow f}$ gitt ved

$$a_{i \rightarrow f} = \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{fi}t'} V_{fi}(t') dt'.$$

Noen fysiske konstanter

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

Tidsutvikling av forventningsverdier

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

δ -funksjonen og sprangfunksjonen

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