

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

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

EKSAMEN I
FY2045/TFY4250 KVANTEMEKANIKK I

Mandag 8. august 2011
kl. 09.00 - 13.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator

Rottmann: Matematisk formelsamling

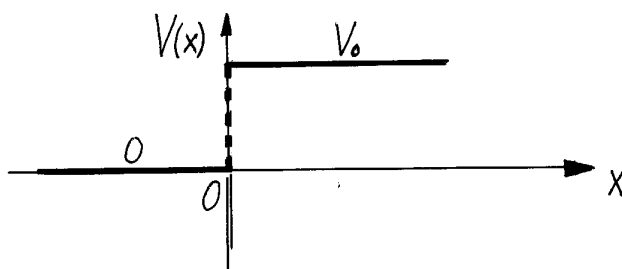
Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk, eller

Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter

Et ark med uttrykk og formler er vedlagt.

Sensuren faller i uke 35.

Oppgave 1



En partikkel med masse m beveger seg i et endimensjonalt potensial som er en overlagring av en deltafunksjonsbrønn og et potentialsprang:

$$V(x) = -\beta \delta(x) + V_0 \Theta(x) ; \quad \beta > 0, \quad V_0 > 0.$$

Her er

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$$

sprangfunksjonen. I denne oppgaven skal vi studere energieigenfunksjoner for dette systemet.

a. Innledningsvis får du tre små oppdrag: ♠ *Finn* hvilken form en egenfunksjon med energi $E < V_0$ må ha i området $x > 0$. ♠ *Vis* deretter at en egenfunksjon med energi $E > 0$ beskriver en ubunden tilstand. ♠ *Angi* hvor stor sannsynligheten er for at partikler som kommer inn fra venstre med $0 < E < V_0$ blir reflektert.

b. ♠ Skriv ned skjøtebetingelsene (for $x = 0$) som alle energiegenfunksjoner for dette systemet må oppfylle, ved hjelp av diskontinuitetsbetingelsen oppgitt på formelarket. Som anført i pkt. **a** er egentilstander med $E > 0$ ubundne. ♠ Hvorfor må eventuelle *bundne* egentilstander i dette potensialet ha $E < 0$? [Hint: Finn ut hvilken form en egentilstand med $E = 0$ må ha for $x < 0$, om den eksisterer.] ♠ Hva blir formen for $x < 0$ for en eventuell egentilstand med $E < 0$?

c. Vi setter nå

$$V_0 = v_0 \text{ Ry} = v_0 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \quad \text{og} \quad \frac{\beta}{a_0} = b \text{ Ry} = b \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2},$$

der tallfaktorene $v_0 \geq 0$ og $b > 0$ er dimensjonsløse. I tillegg innfører vi en dimensjonsløs energivariabel ϵ ved å sette

$$E = \epsilon \text{ Ry} = \epsilon \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}.$$

Vi antar dessuten at partikkelen med masse m er et elektron ($m = m_e$). For en bunden tilstand ($\epsilon < 0$) må ϵ da oppfylle betingelsen

$$\sqrt{v_0 - \epsilon} + \sqrt{-\epsilon} = \sqrt{v_0 + |\epsilon|} + \sqrt{|\epsilon|} = b \quad (v_0 \geq 0, \quad b > 0).$$

♠ Utled denne betingelsen.

♠ Hvor mange bundne tilstander eksisterer det ifølge denne betingelsen (for en gitt $b > 0$) i grensen $v_0 \rightarrow 0$ (dvs når potensialet forenkler seg til en enkel δ -brønn), og hva er eventuelt ϵ -verdiene (energiene i Rydberg-enheter) til disse bundne tilstandene?

♠ Hvor stor må b minst være for at det skal eksistere en bunden tilstand når $v_0 > 0$, og hvor mange bundne tilstander har vi når b oppfyller dette kravet? [Hint: Ligningen ovenfor kan løses grafisk.]

d. Anta nå at $E > V_0$, dvs $\epsilon > v_0$. Spredningsprosessen der elektroner som kommer inn fra venstre med energien $E = \epsilon \hbar^2 / (2m_e a_0^2)$ og enten blir reflektert eller transmittert, kan beskrives ved hjelp av en egenfunksjon på formen

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & \text{for } x < 0, \\ t e^{ik_1 x} & \text{for } x > 0, \end{cases}$$

der r og t er komplekse koeffisienter. Det kan vises at

$$r = \frac{\sqrt{\epsilon} - \sqrt{\epsilon - v_0} + ib}{\sqrt{\epsilon} + \sqrt{\epsilon - v_0} - ib}; \quad (\epsilon \geq v_0 \geq 0, \quad b \text{ vilkårlig}),$$

og at sannsynligheten for at elektronet blir reflektert er $R = |r|^2$. ♠ Finn R i grensen der E nærmer seg V_0 ovenfra. Finn også ut hvilke krav ϵ må oppfylle for at refleksjons-sannsynligheten R skal være mye mindre enn 1 for spesialtilfellene

- ♠ (i) $v_0 = 0$ (og $b \neq 0$, enkelt delta-potensial),
- ♠ (ii) $b \rightarrow 0$ (og $v_0 > 0$; enkelt potensialsprang).

Oppgave 2

En spinn- $\frac{1}{2}$ -partikkel befinner seg i utgangspunktet i et konstant og homogent magnetfelt $\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{n}}$, der $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}} \sin \theta + \hat{\mathbf{z}} \cos \theta$, med $0 < \theta < \pi$. Når vi ser bort fra andre frihetsgrader, kan Hamilton-operatoren for dette systemet skrives på formen

$$\widehat{H} = \omega \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{2} \hbar \omega \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}},$$

der vi antar at ω er positiv.

a. ♠ Angi de mulige egenverdiene til $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$. Ved $t = 0$ foretas det en energimåling som etterlater spinnretningen i tilstanden

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2} \theta \\ \sin \frac{1}{2} \theta \end{pmatrix}.$$

♠ Finn den målte energiverdien. ♠ Hva er spinnretningen ($\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_0$) umiddelbart etter målingen?

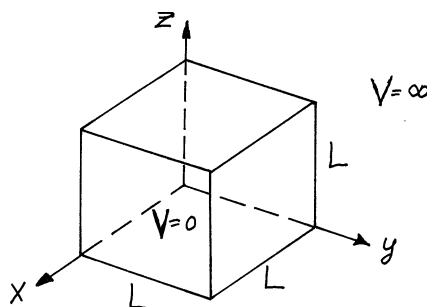
♠ Hva er $\chi(t)$ og spinnretningen $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_t$ i tiden etter denne målingen (og fram til systemet eventuelt forstyrres på nytt)?

b. Ved tiden $t_1 = 4\pi/\omega$ er $\chi(t_1) = \chi(0)$. Ved dette tidspunktet endres $\mathbf{B}$ -feltets retning plutselig, slik at feltet ved $t = t_1^+$ er $\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{z}}$, og slik at den nye Hamilton-operatoren blir $\widehat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega \sigma_z$. Endringen skjer så raskt at vi kan sette $\chi(t_1^+) = \chi(0)$.

♠ Finn forventningsverdiene $\langle E \rangle$ og $\langle E^2 \rangle$ og usikkerheten ΔE for $t = t_1^+$. ♠ Hvorfor er disse størrelsene tidsuavhengige (helt til systemet eventuelt forstyrres på nytt)?

c. ♠ Finn forventningsverdien $\langle \mathbf{S} \rangle_t$ som funksjon av tiden for $t > t_1$.

Oppgave 3



Figuren viser et kubisk bokspotensial som inneholder et elektron i grunntilstanden. Ved $t = 0$ utsettes dette systemet for et elektrisk felt i form av en deltafunksjonspuls. Denne svarer til et perturberende ledd $V(t) = -z p_0 \delta(t)$, en perturberende kraft $\mathbf{F}(t) = \hat{\mathbf{z}} p_0 \delta(t)$ og en impulsoverføring p_0 i z -retningen. Denne problemstillingen skal angripes ved hjelp av første-ordens tidsavhengig perturbasjonsteori. Som (normerte) energieigenstater for det uperturberte systemet kan vi bruke

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z), \quad \text{med} \quad \psi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n_x \pi x / L), \quad n_x = 1, 2, \dots, \text{ osv.}$$

For $t > 0$ (etter at perturbasjonen er overstått) kan bølgefunksjonen i prinsippet skrives på formen

$$\Psi = \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z} \psi_{n_x n_y n_z} \exp(-i E_{n_x n_y n_z} t / \hbar),$$

der amplitudene $a_{n_x n_y n_z}$ er tidsuavhengige. Det oppgis at

$$I_{k,n} \equiv \int_0^L \psi_k^*(z) z \psi_n(z) dz = \begin{cases} 0 & \text{for } k - n = 0, \pm 2, \pm 4, \dots \\ -\frac{8knL}{\pi^2(k^2 - n^2)^2} & \text{for } k - n = \pm 1, \pm 3, \dots \end{cases}$$

a. ♠ Finn først matrise-elementene $V_{fi}(t)$ [av perturbasjonen $V(t)$] som inngår i amplitudene for overganger fra grunntilstanden $\psi_i = \psi_{111}$ til tilstandene $\psi_f = \psi_{11n_z}$, med $n_z \geq 2$, uttrykt ved integralene $I_{n_z,1}$ (se ovenfor). ♠ Beregn så disse overgangsamplitudene ($a_{111 \rightarrow 11n_z}$) og de tilsvarende sannsynlighetene, uttrykt ved p_0 og L .

b. ♠ Hvorfor er alle amplitudene $a_{111 \rightarrow n_x n_y n_z}$ med $n_x \geq 2$ og/eller $n_y \geq 2$ lik null? ♠ Hva er betingelsen for at første-ordens-resultatene funnet hittil skal være en god tilnærming?

c. Anta nå at elektronet i boksen er eksitert til tilstanden ψ_{222} (ved hjelp av en passende perturbasjon), og at de-eksitasjonen skjer via spontan emisjon av fotoner. (Vi antar at denne prosessen ikke påvirkes av veggene i boksen.) Den spontane overgangsraten (sannsynligheten pr tidsenhet) kan da i dipoltilnærmelsen beregnes ved hjelp av formelen

$$w_{i \rightarrow f} = \alpha \frac{4\omega_{if}^3}{3c^2} |\mathbf{d}_{fi}|^2,$$

der

$$\mathbf{d}_{fi} \equiv \int \psi_f^* \mathbf{r} \psi_i d^3r \equiv \hat{\mathbf{e}}_x d_x + \hat{\mathbf{e}}_y d_y + \hat{\mathbf{e}}_z d_z \quad \text{og} \quad \omega_{if} = \frac{E_i - E_f}{\hbar}.$$

♠ Beregn x -komponenten d_x av dipolmomentet $\mathbf{d}_{fi}$ for overgangen fra $\psi_i = \psi_{222}$ til $\psi_f = \psi_{n_x n_y n_z}$, uttrykt ved integralet $I_{n_x,2}$. ♠ Finn ut hvilke spontane overganger som bidrar til den samlede overgangsraten w_{222} for tilstanden ψ_{222} . ♠ Finn et uttrykk for w_{222} og avgjør hvordan denne skalerer som funksjon av L .

d. ♠ Anta at $L = 4a_0$, og finn tallverdier for (i) dipolmomentet d_x , (ii) energien til det emitterte fotonet, (iii) Bohr-frekvensen ω_{if} og (iv) overgangsraten w_{222} . ♠ Avgjør om dipoltilnærmelsen er en god tilnærming for dette tilfellet.

Opgitt:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}; \quad \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = 13.6 \text{ eV}; \quad \hbar = 0.6582 \cdot 10^{-15} \text{ eVs};$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.036}; \quad c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}.$$

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Diskontinuitetsbetingelse, med potensial $V(x) = \alpha\delta(x - a)$

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

Endimensjonal boks, $V(x) = 0$ for $0 < x < L$, uendelig utenfor

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x; \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}; \quad k_n = n\pi/L; \quad \langle \psi_k, \psi_n \rangle = \delta_{kn}.$$

Sannsynlighets-strømtetthet

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

Binomialutviklingen

$$(1 + \delta)^a = 1 + \frac{a}{1} \delta + \frac{a(a-1)}{1 \cdot 2} \delta^2 + \dots; \quad |\delta| < 1.$$

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

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

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

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

Noen formler

$$\sin(a+b) = \sin a \cos b + \cos a \sin b; \quad \sin 2a = 2 \sin a \cos a;$$

$$\cos(a+b) = \cos a \cos b - \sin a \sin b; \quad \cos(2a) = \cos^2 a - \sin^2 a = 2 \cos^2 a - 1 = 1 - 2 \sin^2 a.$$

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

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

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

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

Utgangspunktet for tidsavhengig perturbasjonsteori

Med en Hamilton-operator $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t)$ 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

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

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

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