

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
 Institutt for fysikk

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

EKSAMEN I FY2045/TFY4250 KVANTEMESKANIKK I

Torsdag 9. august 2012

kl. 09.00 - 13.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator

Rottmann: Matematisk formelsamling

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

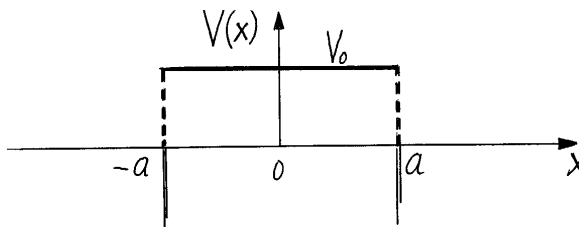
Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter

Et ark med uttrykk og formler er vedlagt.

Sensuren faller i uke 35.

Oppgave 1

Det oppgis at bundne tilstander i et symmetrisk endimensjonalt potensial generelt har veldefinert paritet; grunntilstanden er symmetrisk og fri for nullpunkter, første eksiterte tilstand er antisymmetrisk med ett nullpunkt, osv.



En partikkel med masse m beveger seg i et endimensjonalt potensial som inneholder en barriere og to deltafunksjonsbrønner:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for } -a < x < a, \\ -\beta[\delta(x-a) + \delta(x+a)] & \text{ellers.} \end{cases}$$

Her er $V_0 = \hbar^2/(2ma^2)$ og $\beta > 0$.

a. For én bestemt β -verdi, $\beta = \beta_0$, har dette systemet en energiegenfunksjon med formen $\psi = C \neq 0$ både for $x < -a$ og for $x > a$. ♠ Finn energien E for denne tilstanden. For $-a < x < a$ kan den generelle løsningen for denne tilstanden (med $\beta = \beta_0$) skrives på formen

$$\psi = A \cosh(\kappa_0 x) + B \sinh(\kappa_0 x).$$

♠ Finn κ_0 og vis at $B = 0$.

b. ♠ Bruk den oppgitte diskontinuitetsbetingelsen (se formelarket) til å finne β_0 . ♠ Skissér ψ . ♠ Argumentér for at dette systemet ikke har noen *bunden* tilstand for $\beta = \beta_0$.

c. For β større enn en viss grenseverdi, β_1 , har dette systemet mer enn én bunden tilstand. ♠ Finn β_1 . ♠ Kan dette systemet ha *mer enn to* bundne tilstander? (Begrunn svaret.)

Oppgave 2

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

$$\widehat{H} = \omega S_z = \frac{1}{2} \hbar \omega \sigma_z.$$

a. ♠ Angi egentilstandene til $\widehat{H}$ og de tilhørende egenverdiene. ♠ Skriv også ned formeler for de tidsavhengige stasjonære tilstandene [analogt med $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$] for dette systemet. ♠ Finn kommutatorene $[\widehat{H}, S_x]$ og $[\widehat{H}, S_y]$. ♠ Hva innebærer disse kommutatorene for *kompatibiliteten* mellom observablene E , S_x og S_y ?

b. Ved $t = 0$ måles komponenten $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ av spinnet, der $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}} \sin \theta + \hat{\mathbf{z}} \cos \theta$ er en enhetsvektor i xz -planet, med $0 < \theta < \pi$. Målingen etterlater spinnet i tilstanden

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

♠ Finn måleresultatet for $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$, og sannsynligheten for dette resultatet, når spinntilstanden umiddelbart *før* målingen var

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

♠ Hva kan forklaringen være på at denne sannsynligheten er uavhengig av θ ? [Hint: Sjekk spinnretningen før målingen.]

c. ♠ Forklar hvorfor energien ikke er skarp i tilstanden $\chi(0^+)$, og finn forventningsverdiene $\langle E \rangle$ og $\langle E^2 \rangle$ samt usikkerheten ΔE ved $t = 0^+$. ♠ Hvorfor er disse størrelsene tidsuavhengige for $t > 0$?

d. ♠ Finn spinnretningen $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_t$ som funksjon av t for $t > 0$. Det oppgis at ved tiden $t = 2\pi/\omega$ er $\chi(t) = \chi(2\pi/\omega) = -\chi(0^+)$. ♠ Finn sannsynligheten for at en måling av S_x ved dette tidspunktet gir resultatet $+\frac{1}{2}\hbar$?

Oppgave 3

Et elektron befinner seg i utgangspunktet i grunntilstanden i et hydrogenlignende atom, som beskrives ved potensialet $V(r) = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r)$. Ved $t = 0$ utsettes dette systemet for et elektrisk felt i form av en deltafunksjonspuls. Denne svarer til et perturberende ledd $V_1(t) = -zp_0\delta(t)$, en perturberende kraft $\mathbf{F}(t) = \hat{\mathbf{z}}p_0\delta(t)$, og en impulsoverføring p_0 i z -retningen. Dette problemet skal angripes ved hjelp av førsteordens tidsavhengig perturbasjonsteori. Som (normerte og bundne) energiegentilstander for det uperturberte systemet kan vi bruke

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

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

$$\Psi = \sum_{nlm} a_{nlm} \psi_{nlm} e^{-iE_n t/\hbar} + \text{bidrag fra ubundne tilstander},$$

der amplitudene er tidsuavhengige. (Vi ser i første omgang bort fra muligheten for spontan de-eksitasjon.)

a. ♠ Betrakt matrise-elementene

$$(z)_{nlm,100} \equiv \int \psi_{nlm}^* z \psi_{100} d^3r,$$

og vis at disse er lik null når $l \neq 1$ og/eller $m \neq 0$. [Hint: $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$ og $z = r\sqrt{4\pi/3}Y_{10}$.] Det oppgis at

$$R_{10} = 2a^{-3/2} \exp(-r/a) \quad \text{og} \quad R_{21} = [3(2a)^3]^{-1/2}(r/a) \exp(-r/2a) \quad (a = \frac{a_0}{Z}).$$

♠ Anslå uten regning størrelsen av matrise-elementet

$$(z)_{210,100} \equiv \int_0^\infty \psi_{210}^* z \psi_{100} d^3r$$

uttrykt ved “grunntilstandsradien” a . ♠ Bruk dette til å finne et estimat av sannsynligheten for at atomet befinner seg i tilstanden ψ_{210} umiddelbart etter perturbasjonen, når impulsoverføringen p_0 er 10 prosent av rms-impulsen p_{rms} i grunntilstanden.

Oppgitt:

$$p_{\text{rms}}^2 = \langle 2m_e K \rangle = \langle 2m_e |E| \rangle; \quad E_n = -\frac{1}{2}(\alpha Z)^2 \frac{m_e c^2}{n^2}.$$

b. Overganger vil også skje til andre tilstander med $l = 1$ og $m = 0$. La oss da fokusere på et ensemble av slike hydrogenlignende atomer som er eksitert til tilstanden ψ_{410} . ♠ Forklar hvilke spontane overganger fra denne tilstanden som er mulige i dipoltilnærmelsen, og hvilke slutt-tilstander som dermed bidrar når en skal beregne levetiden for tilstanden ψ_{410} (i denne tilnærmelsen). ♠ Illustrér dette ved hjelp av et nivåskjema, der overgangene er markert.

c. I dipoltilnærmelsen (og ifølge 1.-ordens perturbasjonsteori) er overgangsraten (overgangssannsynligheten pr tidsenhet) ved en spontan overgang gitt ved

$$w_{i \rightarrow f} = \alpha \frac{4\omega_{if}^3}{3c^2} |\mathbf{d}_{fi}|^2, \quad \text{med} \quad \mathbf{d}_{fi} = \int \psi_f^* \mathbf{r} \psi_i d^3r.$$

Dette uttrykket skal vi etter hvert bruke til å finne levetiden for tilstanden ψ_{210} . ♠ Vis først at x - og y -komponentene av det aktuelle dipolmomentet $\mathbf{d}_{fi}$ er lik null.

Det oppgis at

$$I_r \equiv \int_0^\infty r^3 R_{10}(r) R_{21}(r) dr = \frac{256}{81\sqrt{6}} a.$$

♠ Finn tallverdier for (i) energien til det spontant emitterte fotonet, (ii) Bohr-frekvensen ω_{if} , (iii) dipolmomentet $|\mathbf{d}_{fi}|$, (iv) overgangsraten $w_{i \rightarrow f}$ og (v) levetiden τ_{210} for tilfellet $Z = 100$, og notér samtidig hvordan hver av disse størrelsene skalerer som funksjoner av Z . ♠ Avgjør om dipoltilnærmelsen er en god tilnærmelse for dette tilfellet.

Oppgitt:

$$\alpha \approx \frac{1}{137.036}; \quad \frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = 13.6 \text{ eV}; \quad \hbar = 6.582 \cdot 10^{-16} \text{ eVs};$$

$$a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}; \quad c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}.$$

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

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

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

Vinkelfunksjoner

$$\left\{ \begin{array}{c} \hat{\mathbf{L}}^2 \\ \hat{L}_z \end{array} \right\} Y_{lm} = \left\{ \begin{array}{c} \hbar^2 l(l+1) \\ \hbar m \end{array} \right\} Y_{lm}, \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_{l'm'}^* Y_{lm} = \delta_{l'l} \delta_{m'm};$$
$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \equiv Y_{pz}, \quad Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi};$$

Utvalsregler i dipol-tilnærmelsen

$$\Delta l = \pm 1; \quad \Delta m = 0, \pm 1.$$

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

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

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

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

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

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

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

Tidsutvikling av forventningsverdier

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

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

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