

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET  
 Institutt for fysikk

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

**EKSAMEN I**  
**FY2045 KVANTEMEKANIKK I/**  
**TFY4250 KVANTEMEKANIKK I**

Torsdag 20. desember 2012  
 kl. 15.00 - 19.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator

Rottmann: Matematisk formelsamling

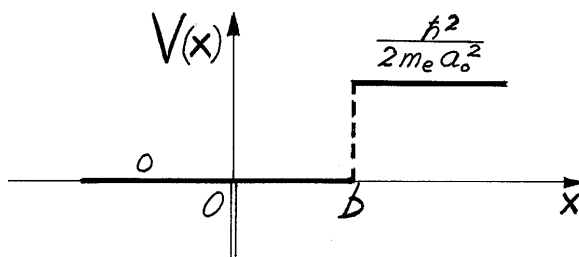
Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk, eller

Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter

Et ark med uttrykk og formler er vedlagt.

Sensuren faller i januar 2012.

### Oppgave 1



Et elektron (med masse  $m_e$ ) beveger seg i et endimensjonalt potensial som består av en deltafunksjonsbrønn og et potentialsprang:

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{g\hbar^2}{m_e a_0} \delta(x) & \text{for } -\infty < x < b, \quad (b > 0, g > 0) \\ \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \equiv V_0 & \text{for } b < x < \infty. \end{cases}$$

Anta at  $\psi_E(x)$  er en energieigenfunksjon med energi  $E$  for dette systemet. ♠ Bruk den tidsuavhengige Schrödingerligningen til å finne ut hvordan  $\psi_E$  må oppføre seg for negative  $x$  dersom (i)  $E > 0$ , (ii)  $E = 0$ . ♠ (iii) Finn også formen til  $\psi_E$  for negative  $x$  dersom  $E < 0$ , og forklar ut fra drøftingen av disse tre tilfellene hvorfor en *bunden* tilstand må ha  $E < 0$ . [Hint: En bunden tilstand skal være kvadratisk integrerbar.] ♠ Finn også formen til en eventuell bunden tilstand  $\psi_E$  for  $x > b$ .

**b.** Forutsetningen for at dette systemet *har* en bunden tilstand  $\psi(x)$  er at faktoren  $g$  (som bestemmer “styrken” av delta-brønnen) er større enn en viss grenseverdi  $g_0$ . Anta nå at betingelsen  $g > g_0$  er oppfylt, og at vi velger  $\psi(x)$  reell og “normert” slik at  $\psi = 1$  i origo.

Oppførselen til  $\psi(x)$  for  $x < 0$  og for  $x > b$  er funnet ovenfor. ♠Angi hvordan  $\psi$  krummer, både i disse områdene og ellers.

For  $0 < x < b$  kan den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen skrives på formen

$$\psi = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x},$$

der  $A$  og  $B$  er reelle konstanter. Isolert sett kan dette uttrykket ha et nullpunkt i intervallet  $0 < x < b$ . ♠Forklar hvorfor egenfunksjonen  $\psi$  likevel ikke kan ha noe nullpunkt. [Hint: Prøv å skissere en løsning med et nullpunkt for  $0 < x < b$ , og forklar hva som blir galt med denne “løsningen”.]

♠Lag så en prinsippskisse som viser hvordan egenfunksjonen  $\psi$  for den bundne tilstanden (uten nullpunkter) *må* se ut, og forklar hvorfor denne egenfunksjonen er unik, slik at vi har bare én slik bunden tilstand (for en gitt  $g > g_0$ ). [Hint: Hvor mange ukjente har vi i denne problemstillingen?]

**c.** I grensetilfellet  $g = g_0$  har dette systemet en (ubunden) energiegentilstand med energien  $E = 0$ . ♠Forklar hvilken form denne energieigenfunksjonen har i de tre områdene  $x < 0$ ,  $0 < x < b$  og  $x > b$ , og lag en skisse av den. ♠Bruk de nødvendige betingelsene til å bestemme  $g_0$ . ♠Er resultatet fornuftig i grensen  $b \rightarrow \infty$ ?

## Oppgave 2

En spinn- $\frac{1}{2}$ -partikkel med masse  $m$ , ladning  $q$  og magnetisk moment  $\boldsymbol{\mu} = g(q/2m)\mathbf{S}$  befinner seg (i utgangspunktet) i et konstant og homogent magnetfelt  $\mathbf{B}_0 = B_0\hat{\mathbf{z}}$  rettet i  $z$ -retningen. Når vi ser bort fra andre frihetsgrader, kan Hamilton-operatoren for dette (uperturberte) systemet skrives på formen

$$\widehat{H}_0 = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_0 \equiv \boldsymbol{\omega}_0 \cdot \mathbf{S} = \omega_0 S_z, \quad \text{der} \quad \boldsymbol{\omega}_0 = -qB_0 \frac{g}{2m} \hat{\mathbf{z}} \equiv \omega_0 \hat{\mathbf{z}}.$$

Her antar vi at  $\omega_0$  er positiv, slik at vektoren  $\boldsymbol{\omega}_0$  peker i positiv  $z$ -retning. Dette systemet velger vi å perturbere med et tidsavhengig magnetfelt

$$\mathbf{B}_1 = \epsilon B_0 (\hat{\mathbf{x}} \cos \omega_0 t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega_0 t)$$

som ligger i  $xy$ -planet og roterer med samme vinkelfrekvens  $\omega_0$  som inngår i  $\widehat{H}_0$ . Dette magnetfeltet svarer til et perturberende ledd

$$\widehat{V}(t) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_1 = \epsilon \omega_0 (\hat{\mathbf{x}} \cos \omega_0 t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega_0 t) \cdot \mathbf{S} \equiv \boldsymbol{\omega}_1 \cdot \mathbf{S} \quad (\omega_1 = \epsilon \omega_0),$$

og en total Hamilton-operator

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t) = (\boldsymbol{\omega}_0 + \boldsymbol{\omega}_1) \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \hbar \omega_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega_0 t} \\ e^{i\omega_0 t} & 0 \end{pmatrix}.$$

**a.** ♠ Finn energieigenverdiene ( $E_{\pm}$ ) for det uperturberte systemet (dvs for  $\epsilon = 0$ ) uttrykt ved  $\omega_0$ , og vis at de tilhørende stasjonære tilstandene kan skrives på formen

$$\chi_{\pm}^{(0)}(t) = \chi_{\pm} e^{\mp i\omega_0 t/2}, \quad \text{der} \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Siden tilstandene  $\chi_{\pm}^{(0)}(t)$  danner en basis, kan tilstanden for spinn-systemet generelt utvikles i disse:

$$\chi(t) = a_+(t)\chi_+^{(0)}(t) + a_-(t)\chi_-^{(0)}(t).$$

♠ Hva er den fysiske tolkningen av koeffisientene  $a_+(t)$  og  $a_-(t)$ ?

Ved innsetting i Schrödingerligningen  $i\hbar \frac{d}{dt} \chi(t) = \widehat{H} \chi(t)$  finner en at utviklingskoeffisientene oppfyller det koblede ligningssettet

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\omega_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} \quad (\omega_1 = \epsilon\omega_0).$$

♠ Hva sier dette ligningssettet om tidsavhengigheten til koeffisientene  $a_+(t)$  og  $a_-(t)$  når det perturberende magnetfeltet er lik null (dvs når  $\epsilon = 0$ )?

**b.** Anta at  $\epsilon > 0$ , slik at det perturberende feltet er forskjellig fra null. ♠ Bruk ligningssettet ovenfor til å vise at

$$a_+(t) = -i \sin \frac{1}{2}\omega_1 t \quad \text{og} \quad a_-(t) = \cos \frac{1}{2}\omega_1 t,$$

når det oppgis at spinnnet ved  $t = 0$  var i grunntilstanden;  $\chi(0) = \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

**c.** ♠ Skriv den resulterende spinntilstanden  $\chi(t) = a_+(t)\chi_+^{(0)}(t) + a_-(t)\chi_-^{(0)}(t)$  på formen

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix},$$

og finn komponentene  $\langle \sigma_x \rangle$ ,  $\langle \sigma_y \rangle$  og  $\langle \sigma_z \rangle$  av spinnretningen  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  som funksjoner av  $t$ , ved hjelp av formelarket.

Fra disse resultatene følger det at komponenten av  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  vinkelrett på  $z$ -aksen kan skrives på formen

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_{\perp} \rangle = \sin \omega_1 t [\hat{\mathbf{x}} \cos(\omega_0 t + \pi/2) + \hat{\mathbf{y}} \sin(\omega_0 t + \pi/2)].$$

Denne roterer som du ser med samme vinkelfrekvens som det perturberende  $\mathbf{B}$ -feltet, men 90 grader foran dette hele tiden mens  $t$  øker fra 0 til  $\pi/\omega_1$ . Sammen med formelen  $d\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle / dt = (\boldsymbol{\omega}_0 + \boldsymbol{\omega}_1) \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  (som kan utledes fra dreieimpulsalgebraen), forklarer dette hvorfor  $\langle \sigma_z \rangle$  øker hele tiden mens  $\sin \omega_1 t > 0$ , dvs helt til  $\langle \sigma_z \rangle$  blir lik 1. Anta nå at  $\epsilon \ll 1$ , slik at  $\omega_1 \ll \omega_0$ . ♠ Beskriv kvalitativt hva som da vil skje med  $\langle \sigma_z \rangle$  dersom vi lar det perturberende feltet rotere med en vinkelfrekvens  $\omega$  som ligger langt unna resonansfrekvensen  $\omega_0$ ?

**d.** ♠ Anta igjen at det perturberende feltet  $\mathbf{B}_1$  roterer med vinkelfrekvensen  $\omega_0$ , og beregn overgangsamplituden  $a_+(t)$  ved tiden  $t$  ved hjelp av 1.-ordens tidsavhengig perturbasjonsteori. ♠ Sammenlign 1.-ordens-resultatet for  $a_+(t)$  med det eksakte resultatet oppgitt i pkt. **b**, og finn på den måten hva som i dette tilfellet kreves for at 1.-ordens perturbasjonsteori skal gi en god tilnærming.

### Oppgave 3

En partikkel med masse  $m$  beveger seg i det tredimensjonale oscillatorpotensialet  $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ . Som energiegentilstander for dette systemet kan vi bruke enten (i) produkttilstander av den “kartesiske” typen,

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \equiv (n_x n_y n_z), \quad E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2),$$

der  $\psi_{n_x}(x)$  osv er ordinære endimensjonale oscillatorløsninger (se formel-arket), eller (ii) “dreieimpulstilstander” av typen  $\psi_{Nlm} = R_{Nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$  (der hver slik tilstand er en lineærkombinasjon av “kartesiske” tilstander med  $n_x + n_y + n_z = N$ ).

**a.** Anta at oscillatoren ved  $t = 0$  er preparert i følgende lineærkombinasjon av “kartesiske” tilstander,

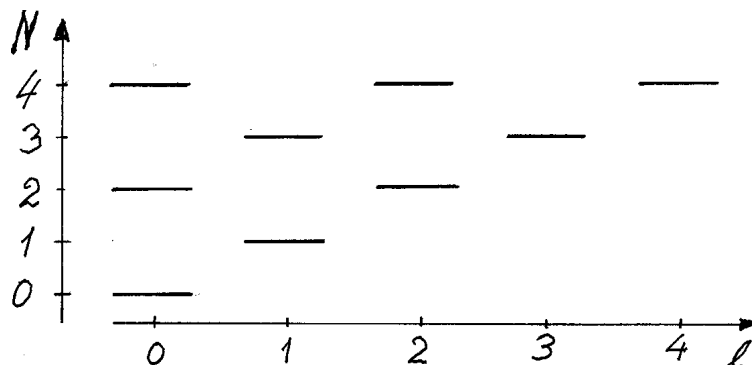
$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{6}}[(200) + (020) + (002)] + \frac{1}{\sqrt{2}}(000).$$

♠ Vis at denne er normert.

Anta at vi straks etter prepareringen (dvs ved  $t = 0^+$ ) måler energien  $E$ . ♠ Hva er sannsynligheten for at målingen gir (i) resultatet  $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$  og etterlater systemet i grunntilstanden  $\psi_{000} \equiv (000)$ , (ii) resultatet  $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$ ? ♠ Hva blir (den normerte) tilstanden umiddelbart etter en måling med resultatet  $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$ ?

♠ Vis ved hjelp av formelarket at tilstanden  $[(200) + (020) + (002)]/\sqrt{3}$  er vinkel-uavhengig, dvs avhenger bare av  $r$ , og derfor er en tilstand av typen  $\psi_{Nlm}$ , der  $N$ ,  $l$  og  $m$  skal angis.

**b.** Anta nå at oscillatoren er i tilstanden  $\psi_{N=2,l=m=0} = R_{N=2,l=0}Y_{00}$  ved  $t = 0$ . Vi vil studere strålingsoverganger fra denne tilstanden via absorpsjon og spontan og stimulert emisjon. Om vi bruker “dreieimpulsegentilstander”  $\psi_{Nlm}$  som basis, ser nivåskjemaet for denne oscillatoren slik ut (for  $N \leq 4$ ):



I dipoltilnærmelsen er overgangsratene for absorpsjon og stimulert emisjon proporsjonale med  $|\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2$ , der  $\mathbf{e}_k$  er polarisasjonsvektoren for strålingen og vektoren

$$\mathbf{d}_{fi} = \int \psi_f^* \mathbf{r} \psi_i d^3r$$

er dipolmomentet for overgangen. Overgangsraten for spontan emisjon er proporsjonal med  $|\mathbf{d}_{fi}|^2$ .

♠ Vis direkte (ut fra integralet over) at overganger fra  $\psi_{N=2,l=m=0}$  i dipoltilnærmelsen bare skjer til  $p$ -tilstander ( $\psi_{N'l'm'}$  med  $l' = 1$ ), i tråd med utvalsregelen  $\Delta l = \pm 1$ . Hint: Bruk at

$$\mathbf{r} = r \sqrt{4\pi/3} \left[ \hat{\mathbf{e}}_z Y_{10} - \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{11} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1} \right],$$

og se på vinkeldelen av integralet over.

♠ Vis at de tillatte overgangene i dipoltilnærmelsen for dette systemet generelt begrenser seg til  $\Delta N = \pm 1$ . Hint: I dipolmomentet

$$\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle$$

er ket-vektoren  $|\psi_i\rangle$  en superposisjon av “kartesiske” tilstander som alle har  $n_x + n_y + n_z = N$ . Betrakt

$$\hat{\mathbf{r}} |\psi_i\rangle = (\hat{\mathbf{e}}_x \hat{x} + \hat{\mathbf{e}}_y \hat{y} + \hat{\mathbf{e}}_z \hat{z}) |\psi_i\rangle,$$

og undersøk hvordan operatorene

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_x + a_x^\dagger) \quad \text{etc}$$

virker på  $|\psi_i\rangle$ . Husk at  $a_x |n_x\rangle = \sqrt{n_x} |n_x - 1\rangle$  og  $a_x^\dagger |n_x\rangle = \sqrt{n_x + 1} |n_x + 1\rangle$ .

**c.** Fra resultatene ovenfor følger det at *spontane* overganger fra tilstanden  $\psi_{N=2,l=m=0}$  i dipoltilnærmelsen bare skjer til tilstander med  $N = 1$ . For de sistnevnte kan vi like godt velge å bruke de “kartesiske”. Raten (sannsynligheten pr tidsenhet) for spontan overgang fra tilstanden  $\psi_{N=2,l=m=0}$  til den “kartesiske” tilstanden  $\psi_{100} \equiv (100)$  er i dipoltilnærmelsen gitt ved formelen

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

♠ Hva er Bohr-frekvensen  $\omega_{if}$  for denne overgangen? ♠ Forklar ut fra symmetriegenskapene til de aktuelle tilstandene hvorfor dipolmoment-vektoren  $\mathbf{d}_{fi}$  for denne overgangen ikke kan ha komponenter i  $y$ - og  $z$ -retningene. ♠ Forklar også hvorfor *lengden* av  $\mathbf{d}_{fi}$  må være av størrelsesorden  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ . ♠ Forklar dessuten hvorfor  $|\mathbf{d}_{fi}|$  er like stor for alle de tre slutt-tilstandene  $(100)$ ,  $(010)$  og  $(001)$ .

**d.** Det opplyses at  $|\mathbf{d}_{fi}| = \sqrt{\hbar/(3m\omega)}$  for hver av de tre nevnte overgangene. ♠ Anta at  $m = m_e$  og  $\omega = 10^{16} \text{ s}^{-1}$ , og finn (i dipoltilnærmelsen) tallverdier for den totale raten for spontan overgang fra tilstanden  $\psi_{N=2,l=m=0}$  og den tilsvarende levetiden  $\tau$ . ♠ Avgjør om dipoltilnærmelsen er en god tilnærming i dette tilfellet.



## Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

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

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

**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

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

## **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 normerte 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  $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t)$  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

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

## Sfæriske harmoniske

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

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

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

## 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

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

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

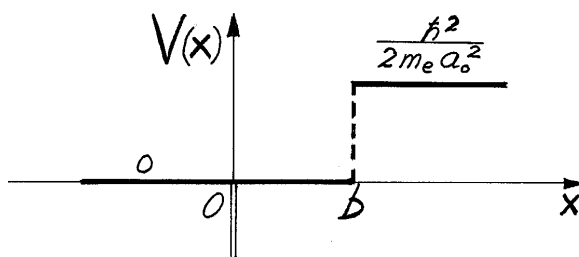
Torsdag 20. desember 2012  
 kl. 15.00 - 19.00

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 on pages 1–5. The Norwegian version is also attached.  
 A sheet with expressions and formulae is attached Sensuren faller i januar 2013.

---

### Problem 1



An electron (of mass  $m_e$ ) is moving in a one-dimensional potential consisting of a delta-function well and a potential step:

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{g\hbar^2}{m_e a_0} \delta(x) & \text{for } -\infty < x < b, \quad (b > 0, g > 0) \\ \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \equiv V_0 & \text{for } b < x < \infty. \end{cases}$$

Suppose that  $\psi_E(x)$  is an energy eigenfunction with energy  $E$  for this system. ♠ Use the time-independent Schrödinger equation to find out how  $\psi_E$  must behave for negative  $x$  for (i)  $E > 0$ , (ii)  $E = 0$ . ♠(iii) Find the form of  $\psi_E$  for negative  $x$  also for  $E < 0$  and, based on the discussion of these three cases, explain why a *bound* state must have  $E < 0$ . [Hint: A bound state must be quadratically integrable.] ♠ Find also the form of a possible bound state  $\psi_E$  for  $x > b$ .

**b.** The condition for this system to *have* a bound state  $\psi(x)$  is that the factor  $g$  (which determines the “strength” of the delta well) is larger than a certain limiting value  $g_0$ . Assume now that the condition  $g > g_0$  is satisfied, and that we choose  $\psi(x)$  to be real and “normalized” in such a way that  $\psi = 1$  at the origin.

The behaviour of  $\psi(x)$  for  $x < 0$  and for  $x > b$  was found above. ♠State how  $\psi$  curves, both in these regions and elsewhere.

For  $0 < x < b$  the general solution of the time-independent Schrödinger equation can be written on the form

$$\psi = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x},$$

where  $A$  and  $B$  are real constants. From an “isolated point of view”, this expression can have a zero in the interval  $0 < x < b$ . ♠Explain why the eigenfunction  $\psi$  still can not have a zero. [Hint: Try to sketch a solution with a zero for  $0 < x < b$ , and explain what goes wrong with this “solution”.]

♠Then make a sketch which shows how the eigenfunction  $\psi$  of the bound state (without zeros) *must* look, and explain why this eigenfunction is unique, so that we have only one such bound state (for a given  $g > g_0$ ). [Hint: How many unknown quantities do we have in this problem?]

**c.** In the limiting case  $g = g_0$ , this system has an (unbound) energy eigenstate with the energy  $E = 0$ . ♠Explain which forms this eigenfunction has in the three regions  $x < 0$ ,  $0 < x < b$  og  $x > b$ , and make a sketch of it. ♠Use the necessary conditions to determine  $g_0$ . ♠Is the result reasonable in the limit  $b \rightarrow \infty$ ?

## Problem 2

A spin- $\frac{1}{2}$  particle of mass  $m$ , charge  $q$  and magnetic moment  $\boldsymbol{\mu} = g(q/2m)\mathbf{S}$  is (from the outset) in a constant and homogeneous magnetic field  $\mathbf{B}_0 = B_0\hat{\mathbf{z}}$  pointing in the  $z$ -direction. When other degrees of freedom are neglected, the Hamiltonian of this (unperturbed) system can be written as

$$\widehat{H}_0 = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_0 \equiv \boldsymbol{\omega}_0 \cdot \mathbf{S} = \omega_0 S_z, \quad \text{where} \quad \boldsymbol{\omega}_0 = -qB_0 \frac{g}{2m} \hat{\mathbf{z}} \equiv \omega_0 \hat{\mathbf{z}}.$$

Here we assume that  $\omega_0$  is positive, so that the vector  $\boldsymbol{\omega}_0$  points in the positive  $z$ -direction. We choose to perturb this system with a time-dependent magnetic field

$$\mathbf{B}_1 = \epsilon B_0 (\hat{\mathbf{x}} \cos \omega_0 t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega_0 t)$$

which lies in the  $xy$ -plane and rotates with the same angular frequency  $\omega_0$  that occurs in  $\widehat{H}_0$ . This magnetic field corresponds to a perturbing term

$$\widehat{V}(t) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_1 = \epsilon \omega_0 (\hat{\mathbf{x}} \cos \omega_0 t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega_0 t) \cdot \mathbf{S} \equiv \boldsymbol{\omega}_1 \cdot \mathbf{S} \quad (\omega_1 = \epsilon \omega_0),$$

and a total Hamiltonian

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t) = (\boldsymbol{\omega}_0 + \boldsymbol{\omega}_1) \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \hbar \omega_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega_0 t} \\ e^{i\omega_0 t} & 0 \end{pmatrix}.$$

**a.** ♠ Find the energy eigenvalues ( $E_{\pm}$ ) of the unperturbed system (that is, for  $\epsilon = 0$ ) expressed in terms of  $\omega_0$ , and show that the corresponding stationary states can be written on the form

$$\chi_{\pm}^{(0)}(t) = \chi_{\pm} e^{\mp i\omega_0 t/2}, \quad \text{where} \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Since the states  $\chi_{\pm}^{(0)}(t)$  form a basis, the state of the spin system may in general be expanded in terms of these states:

$$\chi(t) = a_+(t)\chi_+^{(0)}(t) + a_-(t)\chi_-^{(0)}(t).$$

♠ What is the physical interpretation of the coefficients  $a_+(t)$  and  $a_-(t)$ ?

Inserting into the Schrödinger equation  $i\hbar \frac{d}{dt} \chi(t) = \widehat{H} \chi(t)$  one finds that the expansion coefficients satisfy the coupled set of equations

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\omega_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} \quad (\omega_1 = \epsilon\omega_0).$$

♠ What does this set of equations tell us about the time dependence of the coefficients  $a_+(t)$  and  $a_-(t)$  in the case when the perturbing magnetic field is equal to zero (that is, when  $\epsilon = 0$ )?

**b.** Assume that  $\epsilon > 0$ , so that the perturbing field is different from zero. ♠ Use the set of equations above to show that

$$a_+(t) = -i \sin \frac{1}{2}\omega_1 t \quad \text{and} \quad a_-(t) = \cos \frac{1}{2}\omega_1 t,$$

given that the spin was in the ground state at  $t = 0$ ;  $\chi(0) = \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

**c.** ♠ Write the resulting spin state  $\chi(t) = a_+(t)\chi_+^{(0)}(t) + a_-(t)\chi_-^{(0)}(t)$  on the form

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix},$$

and find the components  $\langle \sigma_x \rangle$ ,  $\langle \sigma_y \rangle$  and  $\langle \sigma_z \rangle$  of the spin direction  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  as functions of  $t$ , using the formula sheet.

From these results it follows that the component of  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  perpendicular to the  $z$ -axis can be written on the form

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_{\perp} \rangle = \sin \omega_1 t [\hat{\mathbf{x}} \cos(\omega_0 t + \pi/2) + \hat{\mathbf{y}} \sin(\omega_0 t + \pi/2)].$$

As you will observe, this component rotates with the same angular frequency as the perturbing  $\mathbf{B}$ -field, but 90 degrees ahead of the latter the whole time when  $t$  increases from 0 to  $\pi/\omega_1$ . Together with the formula  $d\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle/dt = (\boldsymbol{\omega}_0 + \boldsymbol{\omega}_1) \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  (which can be derived from the angular-momentum algebra), this explains why  $\langle \sigma_z \rangle$  increases the whole time while  $\sin \omega_1 t > 0$ , that is, until  $\langle \sigma_z \rangle$  becomes equal to 1. Suppose now that  $\epsilon \ll 1$ , so that  $\omega_1 \ll \omega_0$ . ♠ Describe qualitatively what will then happen with  $\langle \sigma_z \rangle$  if we let the perturbing field rotate with an angular frequency  $\omega$  which lies far away from the resonance frequency  $\omega_0$ ?

**d.** ♠ Assume once again that the perturbing field  $\mathbf{B}_1$  rotates with the angular frequency  $\omega_0$ , and calculate the transition amplitude  $a_+(t)$  at time  $t$  using first-order time-dependent perturbation theory. ♠ Compare the first-order result for  $a_+(t)$  with the exact result given above (in point **b**), and find in this way what is required in order that first-order perturbation theory give a good approximation in this case.

### Problem 3

A particle of mass  $m$  is moving in the three-dimensional oscillator potential  $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ . As energy eigenstates of this system we can use either (i) product states of “Cartesian” type,

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \equiv (n_x n_y n_z), \quad E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2),$$

where  $\psi_{n_x}(x)$  etc are ordinary one-dimensional oscillator solutions (see the formula sheet), or (ii) “angular-momentum states” of the type  $\psi_{Nlm} = R_{Nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$  (where each such state is a linear combination of “Cartesian” states with  $n_x + n_y + n_z = N$ ).

**a.** Assume that the oscillator is at  $t = 0$  prepared in the following linear combination of “Cartesian” states,

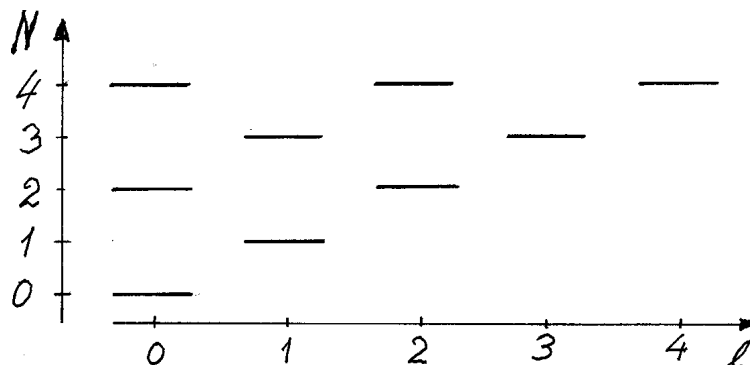
$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{6}}[(200) + (020) + (002)] + \frac{1}{\sqrt{2}}(000).$$

♠ Show that this state is normalized.

Suppose that we immediately after the preparation (that is, at  $t = 0^+$ ) measure the energy  $E$ . ♠ What is the probability that the measurement gives (i) the result  $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$  and leaves the system in the ground state  $\psi_{000} \equiv (000)$ , (ii) the result  $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$ ? ♠ What is (the normalized) state immediately after a measurement with the result  $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$ ?

♠ Use the formula sheet to show that the state  $[(200) + (020) + (002)]/\sqrt{3}$  is independent of angles, that is depends only on  $r$ , and therefore is a state of the type  $\psi_{Nlm}$ . What are the values of  $N$ ,  $l$  and  $m$  for this state.

**b.** Assume now that the oscillator is in the state  $\psi_{N=2,l=m=0} = R_{N=2,l=0}Y_{00}$  at  $t = 0$ . We want to study radiative transitions from this state via absorption and stimulated and spontaneous emission. If we use “angular-momentum states”  $\psi_{Nlm}$  as a basis, the level scheme for this oscillator looks like this (for  $N \leq 4$ ):



In the dipole approximation, the transition rates for absorption and stimulated emission are proportional to  $|\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2$ , where  $\mathbf{e}_k$  is the polarization vector of the radiation and the vector

$$\mathbf{d}_{fi} = \int \psi_f^* \mathbf{r} \psi_i d^3r$$

is the dipole moment of the transition. The spontaneous transition rate is proportional to  $|\mathbf{d}_{fi}|^2$ .

♠ Show directly (from the integral above) that transitions from  $\psi_{N=2,l=m=0}$  in the dipole approximation only occur to  $p$ -states ( $\psi_{N'l'm'}$  with  $l' = 1$ ), in accordance with the selection rule  $\Delta l = \pm 1$ . Hint: Use that

$$\mathbf{r} = r \sqrt{4\pi/3} \left[ \hat{\mathbf{e}}_z Y_{10} - \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{11} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1} \right],$$

and consider the angular part of the above integral.

♠ Show that in the dipole approximation the allowed transitions for this system are in general limited to  $\Delta N = \pm 1$ . Hint: In the dipole moment

$$\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle,$$

the ket  $|\psi_i\rangle$  is a superposition of “Cartesian” states which all have  $n_x + n_y + n_z = N$ . Consider

$$\hat{\mathbf{r}} |\psi_i\rangle = (\hat{\mathbf{e}}_x \hat{x} + \hat{\mathbf{e}}_y \hat{y} + \hat{\mathbf{e}}_z \hat{z}) |\psi_i\rangle,$$

and investigate how the operators

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_x + a_x^\dagger) \quad \text{etc}$$

act on  $|\psi_i\rangle$ . Remember that  $a_x |n_x\rangle = \sqrt{n_x} |n_x - 1\rangle$  and  $a_x^\dagger |n_x\rangle = \sqrt{n_x + 1} |n_x + 1\rangle$ .

**c.** From the above results it follows that *spontaneous* transitions from the state  $\psi_{N=2,l=m=0}$  in the dipole approximation occur only for final states with  $N = 1$ . For the latter we may just as well use the “Cartesian” ones. The rate (probability per unit time) for spontaneous transition from the state  $\psi_{N=2,l=m=0}$  to the “Cartesian” state  $\psi_{100} \equiv (100)$  is in the dipole approximation given by the formula

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

♠ What is the Bohr frequency  $\omega_{if}$  for this transition? ♠ Using the symmetry properties of the states in question, explain why the dipole moment vector  $\mathbf{d}_{fi}$  of this transition can not have components in the  $y$ - and  $z$ -directions. ♠ Explain also why the *length* of  $\mathbf{d}_{fi}$  must be of the order of  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ . ♠ Explain in addition why the length  $|\mathbf{d}_{fi}|$  of the dipole moment vector has the same value for all of the three final states  $(100)$ ,  $(010)$  og  $(001)$ .

**d.** Actually, we have  $|\mathbf{d}_{fi}| = \sqrt{\hbar/(3m\omega)}$  for each of the three transitions. ♠ Assume that  $m = m_e$  and  $\omega = 10^{16} \text{ s}^{-1}$ , and find (in the dipole approximation) numerical values for the total rate for spontaneous transition from the state  $\psi_{N=2,l=m=0}$  and the corresponding lifetime  $\tau$ . ♠ Decide if the dipole approximation is a good approximation in this case.



## Attachment: Formulae and expressions

Some of this may turn out to be useful.

**Discontinuity condition, with potential**  $V(x) = \alpha\delta(x - a)$

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

**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 normalized spin state  $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$  may be characterized 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,

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

## **Harmonic oscillator**

The energy eigenfunctions for the potential  $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  ( $-\infty < x < \infty$ ) satisfy the eigenvalue equation

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

with normalized solutions on the form

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

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

## Starting point for time-dependent perturbation theory

With a Hamiltonian  $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t)$ , the exact solution can be expanded in terms of the unperturbed stationary solutions:

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

where

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

The exact set of equations for the expansion coefficients is

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

With  $a_n(t_0) = \delta_{ni}$ , the exact amplitude satisfies the equation

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

To first order in the perturbation the amplitude  $a_f \equiv a_{i \rightarrow f}$  is then given by

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

## Spherical harmonics

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

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

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

## Some physical constants

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

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

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