NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

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

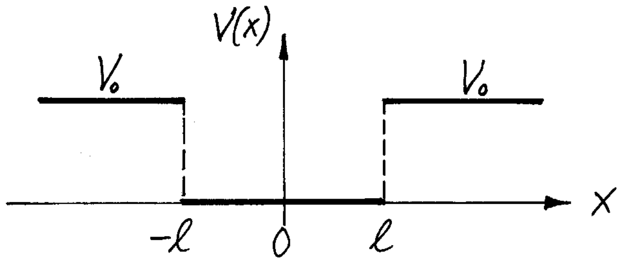
EKSAMEN I
TFY4250 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK

Fredag 19. august 2005
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 2005.

Oppgave 1



En partikkel med masse m befinner seg i et éndimensjonalt brønnpotensial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad -l < x < l, \\ V_0 & \text{for} \quad |x| > l. \end{cases}$$

a. Gjør rede for *symmetriegenskapene* til grunntilstanden og eventuelle andre bundne energiegentilstander i dette potensialet. Hva er *degenerasjonsgraden* (antall energiegentilstander pr energinivå) for de bundne tilstandene? Hva kan du si om *antall nullpunkter* for grunntilstanden og eventuelle andre bundne energiegentilstander?

Hva er degenerasjonsgraden for de *ubundne* energinivåene for dette potensialet? Behøver en energiegenfunksjon med energi $E > V_0$ å ha *veldefinert paritet*? (Begrunn svaret så godt du kan.)

Hvilke kontinuitetsegenskaper har energiegenfunksjonene når potensialet $V(x)$ er endelig som i denne problemstillingen?

b. I denne oppgaven antar vi at brønndybden V_0 er valgt slik at dette potensialet har en bundet tilstand beskrevet ved en energiegenfunksjon $\psi_a(x)$ som for $0 \le x \le l$ har formen $A\cos q_a x$, med $q_a = 13\pi/(6l)$. Vis at energien E_a for tilstanden ψ_a er

$$E_a = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2} \cdot \frac{169}{36}.$$

Forklar hvorfor energiegenfunksjonen ψ_a må ha formen $A\cos q_a x$ også for $-l \le x \le 0$. Hint: Ta utgangspunkt i den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for dette området.

c. Finn $\psi_a(x)$ også for $x > l$, og vis at eksistensen av denne energiegenfunksjonen ψ_a (med den oppgitte formen for $0 \le x \le l$) krever at brønndybden må være $V_0 = 4E_a/3$, der E_a er energien oppgitt i pkt. **b**.
Oppgitt: $\tan\pi/6 = 1/\sqrt{3}$.

d. Skissér energiegenfunksjonen $\psi_a(x)$ for både positive og negative x. Hvor mange bundne energiegentilstander med energi $E < E_a$ har vi for dette brønnpotensialet? (Begrunn svaret.) Undersøk om dette potensialet (med $V_0 = 4E_a/3$) har bundne energiegentilstander med energi $E > E_a$.

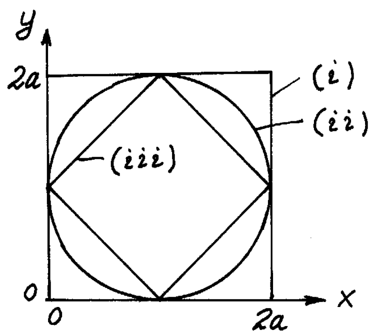
e. For en energi E større enn V_0 går det an å finne en energiegenfunksjon $\psi_E(x)$ som har formen $\psi_E = e^{ik(x-l)}$ for $x > l$; her er k bølgetallet i dette området. For området $x < -l$ kan den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen skrives på formen

$$\psi_E = a\,e^{ik(x+l)} + b\,e^{-ik(x+l)}.$$

De komplekse koeffisientene a og b kan bestemmes, og vil avhenge av E, V_0, l og m. Energiegenfunksjonen ψ_E kan brukes til å beregne sannsynlighetene T og R for transmisjon og refleksjon av partikler med energi E som sendes inn mot dette brønnpotensialet. Finn T og R uttrykt ved koeffisientene a og b.

Skriv ned den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for området $-l < x < l$, uttrykt ved bølgetallet $q = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ for dette området. Anta at energien velges slik at $q \cdot 2l = 6\pi$. Vis at både ψ_E og $d\psi_E/dx$ da har samme verdier for $x = -l$ som for $x = l$. Bruk dette til å finne T og R for den aktuelle energien E. De samme resultatene for T og R oppnås også for andre verdier av $q \cdot 2l$. Hvilke er disse verdiene?

Oppgave 2



Figuren viser grunnflatene (tverrsnittene) av tre forskjellige 3-dimensjonale "bokser", alle med høyde a (i z-retningen), og med potensial V lik null inne i boksene (for $0 < z < a$) og uendelig utenfor. Tverrsnittene av de tre boksene er

(i) et kvadrat med sidekant $2a$,

(ii) en sirkel med radius a,

(iii) et kvadrat med sidekant $\sqrt{2}\,a$.

I hver av boksene befinner det seg en partikkel med masse μ.

a. Angi energiegenfunksjonen for grunntilstanden for boks (i) som funksjon av x, y og z, og bruk Hamilton-operatoren til å finne den tilhørende energien $E^{(i)}_{\text{gr.t.}}$ uttrykt ved energibeløpet $\hbar^2\pi^2/(2\mu a^2)$. (Normeringskonstanten trenger du ikke å bestemme.) Angi tilsvarende energien $E^{(iii)}_{\text{gr.t.}}$ for grunntilstanden for boks (iii).

I resten av oppgaven ser vi nærmere på den sylinderformede boksen (ii). Med origo plassert i sentrum av den sirkulære grunnflaten, og med sylinderkoordinater,

$$z, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad \text{og} \quad \phi = \arctan(y/x),$$

kan Hamilton-operatoren da skrives på formen

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}_z^2}{2\mu r^2} + \hat{H}^{(z)}, \quad \text{med} \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \phi} \quad \text{og} \quad \hat{H}^{(z)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

De simultane egenfunksjonene til $\hat{H}, \hat{H}^{(z)}$ og $\hat{L}_z$ kan skrives på formen

$$\psi(r, \phi, z) = R(r)\Phi(\phi)\psi^{(z)}(z).$$

b. Vis at funksjonssettet

$$\Phi_m(\phi) = e^{im\phi}\,, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots,$$

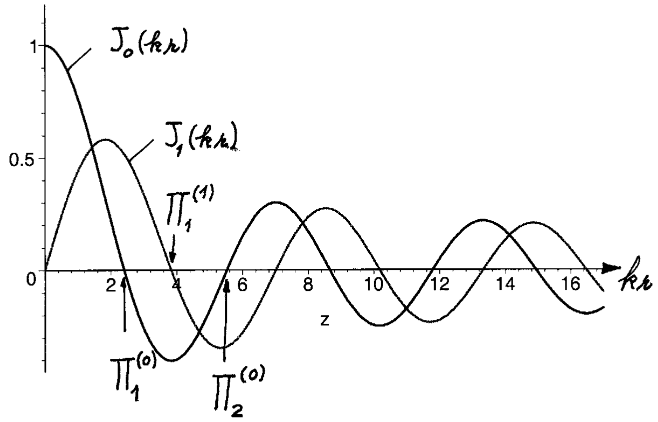
er egenfunksjoner til $\hat{L}_z$. Hvorfor må kvantetallet m være heltallig?

Skriv ned egenfunksjonene $\psi^{(z)}(z)$ til $\hat{H}^{(z)}$ og de mulige egenverdiene $E^{(z)}$. Sett

$$E = E^{(z)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu},$$

og utled radialligningen som radialfunksjonen $R^{(m)}(r)$ må oppfylle for et gitt kvantetall m.

Løsningen av den nevnte radialligningen som er regulær i origo er Bessel-funksjonen $J_{|m|}(kr)$. Diagrammet viser $J_0(kr)$ og $J_1(kr)$ som funksjoner av kr.



Tabellen angir noen av nullpunktene, $\Pi_n^{(m)}$, for disse funksjonene.

J_0	J_1	J_2	J_3
$\Pi_1^{(0)} = 2.4048$	$\Pi_1^{(1)} = 3.8317$	$\Pi_1^{(2)} = 5.1356$	$\Pi_1^{(3)} = 6.3802$
$\Pi_2^{(0)} = 5.5201$	$\Pi_2^{(1)} = 7.0156$	$\Pi_2^{(2)} = 8.4172$	$\Pi_2^{(3)} = 9.7610$
$\Pi_3^{(0)} = 8.6537$	$\Pi_3^{(1)} = 10.1735$	$\Pi_3^{(2)} = 11.6198$	$\Pi_3^{(3)} = 13.0152$

Det oppgis at

$$\Pi_{n_2}^{(m)} > \Pi_{n_1}^{(m)} \quad \text{for} \quad n_2 > n_1 \qquad \text{og} \qquad \Pi_n^{(m_2)} > \Pi_n^{(m_1)} \quad \text{for} \quad m_2 > m_1.$$

c. Forklar hvordan disse opplysningene kan brukes til å bestemme de mulige verdiene for størrelsen k, energiegenverdiene $E = E^{(z)} + \hbar^2 k^2/2\mu$ og de tilhørende energiegenfunksjonene $\psi(r, \phi, z)$. Bestem spesielt energien $E_{\text{gr.t.}}^{(ii)}$ til grunntilstanden for boks (ii), og skriv ned formelen for bølgefunksjonen for denne tilstanden. Er resultatet for denne energien fornuftig sammenlignet med de to grunntilstandsenergiene funnet i pkt. **a**?

d. Finn kvantetallene, energiene og degenerasjonsgradene for 1., 2. og 3. eksiterte nivå for boks (ii).

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Sannsynlighets-strømtetthet

$$j_x(x,t) = \Re\mathrm{e}\left[\Psi^*(x,t)\frac{\hbar}{im}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right].$$

Éndimensjonal boks, $V(x) = 0$ for $0 < x < L$, uendelig utenfor: Energiegenfunksjoner

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/L}\,\sin\frac{n\pi x}{L}.$$