

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET  
 Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:

## EKSAMEN I TFY4250 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK

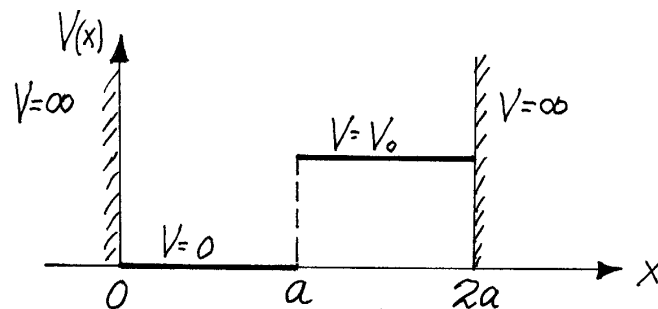
Onsdag 8. august 2007  
 kl. 09.00 - 13.00

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 2007.

### Oppgave 1



En partikkel med masse  $m$  befinner seg i et éndimensjonalt potensial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 < x < a, \\ V_0 & \text{for } a < x < 2a, \\ \infty & \text{for } x < 0 \text{ og for } x > 2a. \end{cases} \quad (V_0 \geq 0),$$

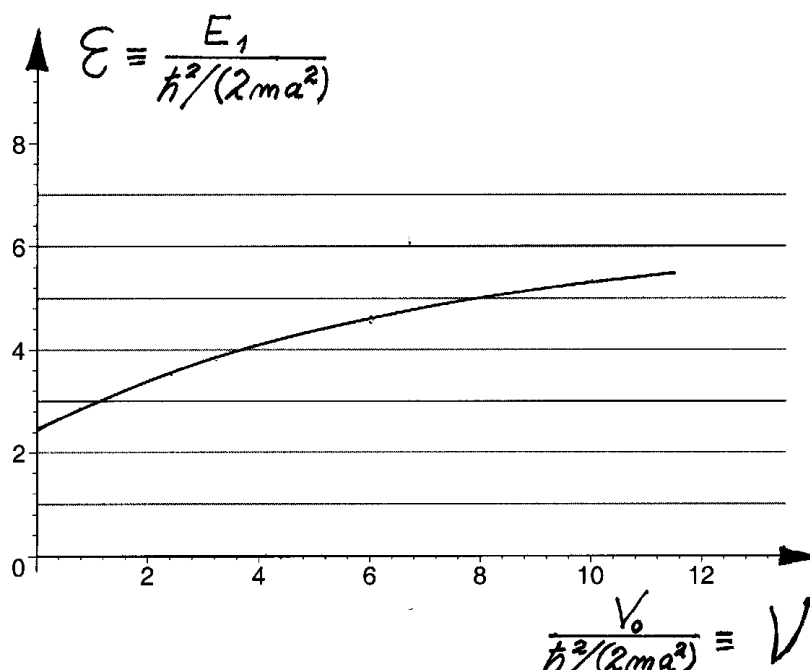
Oppgaven går ut på å undersøke hvordan grunntilstanden  $\psi_1(x)$  og dennes energi  $E_1$  oppfører seg når  $V_0$  varierer mellom null og uendelig. (Lengdeparameteren  $a$  tenker vi oss er holdt fast.) I beregningene er det praktisk å innføre bølgetallet  $k$  via definisjonen

$$E_1 \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (ka)^2 \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2} \mathcal{E}.$$

Det er også praktisk å skrive

$$V_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2} \mathcal{V},$$

slik at de dimensjonsløse størrelsene  $\mathcal{E}$  og  $\mathcal{V}$  blir mål for henholdsvis energien og  $V_0$ . Figuren nedenfor viser et noenlunde nøyaktig diagram over  $\mathcal{E}$  som funksjon av  $\mathcal{V}$ .



**a.** •Se først på grensetilfellet  $\mathcal{V} = 0$ . Finn bølgetallet  $k$ , energien  $E_1(0)$  og den normerte grunntilstanden  $\psi_1^{(0)}(x)$  i denne grensen, og kontrollér at resultatet for  $E_1(0)$  stemmer med diagrammet. •Se deretter på grensen  $\mathcal{V} \rightarrow \infty$ , og finn i denne grensen bølgetallet  $k$ , energien  $E_1(\infty)$  og  $\mathcal{E}(\infty)$ .

**b.** Diagrammet indikerer at kurven  $\mathcal{E}(\mathcal{V})$  er tilnærmet lineær for små  $\mathcal{V}$ . For små  $\mathcal{V}$  kan energien beregnes ved hjelp av tidsuavhengig pertubasjonsteori:

$$E_1(\mathcal{V}) \approx E_1(0) + \int (\psi_1^{(0)})^* \Delta V \psi_1^{(0)} dx.$$

Her er  $\psi_1^{(0)}$  grunntilstanden for  $\mathcal{V} = 0$ , og “perturbasjonen” er

$$\Delta V = V_0 \quad \text{for} \quad a < x < 2a, \quad \text{og null ellers.}$$

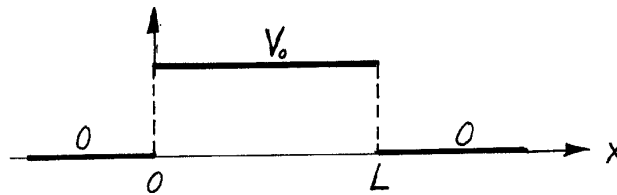
•Bruk dette til å finne et tilnærmet uttrykk for  $\mathcal{E}(\mathcal{V})$  for små  $\mathcal{V}$ .

**c.** For en viss  $\mathcal{V}$ -verdi  $\mathcal{V}_1$  vil grunntilstandsenergien  $E_1$  være lik  $V_0$ , slik at  $\mathcal{E} = \mathcal{V} (= \mathcal{V}_1)$ .

•Finn en omtrentlig verdi for  $\mathcal{V}_1$ , og dermed også for  $ka = \sqrt{\mathcal{E}} = \sqrt{\mathcal{V}_1}$ , ved hjelp av diagrammet. •Lag en omtrentlig skisse av  $\psi_1$  for dette tilfellet, og forklar “prinsippene” i skissen.

**d.** •Finn en ligning som bestemmer den nøyaktige verdien av  $ka$ , og dermed også av  $\mathcal{E} = \mathcal{V}_1$ , for tilfellet  $E_1 = V_0$ . Denne ligningen er transcendent, hvilket betyr at den må løses numerisk. •Finn nøyaktige verdier av  $ka$  — og dermed av  $\mathcal{E} = \mathcal{V}_1$  — for tilfellet  $E_1 = V_0$ , ved å prøve deg fram med kalkulatoren. (Ta utgangspunkt i den omtrentlige verdien av  $ka$  funnet ovenfor.)

## Oppgave 2



Partikler med masse  $m$  spres mot en éndimensjonal firkantbarriere med vidde  $L$  og høyde  $V_0$ . Dette potensialet har for  $0 < E < V_0$  energieigenfunksjoner på formen

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{for } x < 0, \\ De^{-\kappa x} + Fe^{\kappa x} & \text{for } 0 < x < L, \\ Ce^{ikx} & \text{for } x > L, \end{cases}$$

der  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ ,  $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$  og

$$C = e^{-ikL} \frac{2k\kappa}{2k\kappa \cosh \kappa L + i(\kappa^2 - k^2) \sinh \kappa L}.$$

**a.** • Forklar hvordan en kommer fram til at sannsynligheten for transmisjon gjennom denne barrieren er

$$T = |C|^2.$$

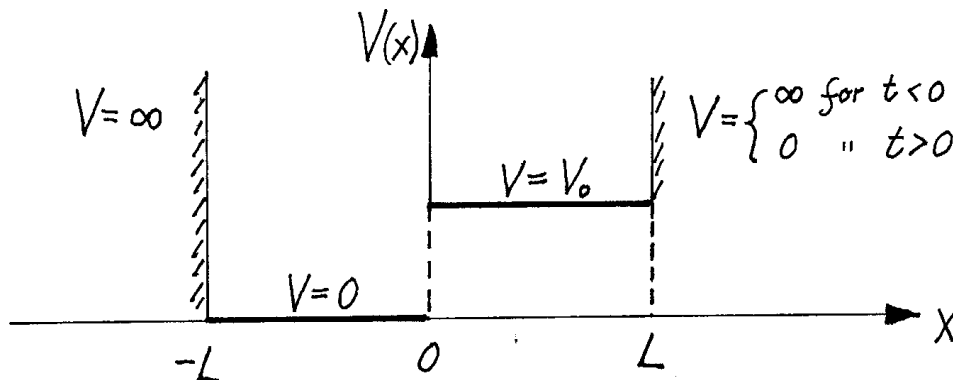
• Vis at denne transmisjonskoeffisienten (for  $0 < E < V_0$ ) kan skrives på formen

$$T = \left[ 1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \kappa L}{4E(V_0 - E)} \right]^{-1}.$$

[Hint:  $\cosh^2 y = 1 + \sinh^2 y$ .]

**b.** Anta nå at en partikkel med masse  $m$  befinner seg i et éndimensjonalt potensial som for tiden  $t < 0$  har formen

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



For  $t < 0$  er partikkelen preparert i en av de stasjonære tilstandene for dette potensialet (med energi  $E_n < V_0$ ), slik at bølgefunksjonen ved  $t = 0$  har formen

$$\Psi(x, 0) = \psi_n(x) = \begin{cases} A_n \sin k_n(x + L) & \text{for } -L < x < 0, \\ B_n \sinh \kappa_n(L - x) & \text{for } 0 < x < L, \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases}$$

Ved  $t = 0$  fjernes den “harde veggen” i  $x = L$ , slik at  $V(x)$  for  $x > L$  brått endres fra  $\infty$  til 0 (og forblir lik null deretter). •Forklar hvorfor funksjonen  $\psi_n(x)$  *ikke* er en energieigenfunksjon for  $t = 0^+$  (etter endringen av potensialet). [Hint: For  $x < L$  er potensialet uendret, og vi har fortsatt  $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$  for  $-L < x < L$ . I punktet  $x = L$  har  $\psi_n$  en “knekk”, slik at  $\psi_n'$  har et sprang og  $\psi_n''$  går som en  $\delta$ -funksjon:  $\psi_n''(x \approx L) = B_n\kappa_n\delta(x - L)$ .]

•Finn forventningsverdien  $\langle E \rangle$  av energien for  $t > 0$ .

**c.** I resten av oppgaven antar vi at partikkelen er et elektron med masse  $m_e$ , mens

$$L = 5a_0 \quad \text{og} \quad V_0 = 5 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \equiv 5 \text{ Rydberg} \approx 5 \cdot 13.6 \text{ eV}.$$

Med disse parametrene kan det vises at to av energieigenverdiene  $E_n$  nevnt i pkt. **b** er

$$E_a \approx 0.3320 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \quad \text{og} \quad E_b \approx 4.9424 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}.$$

•Finn transmisjonskoeffisientene  $T_a$  og  $T_b$  for barrieren i pkt. **a** for disse to energiene.

**d.** Med  $\Psi(x, 0) = \psi_n(x)$  blir tilstanden  $\Psi(x, t)$  åpenbart ikke-stasjonær for  $t > 0$ : Sannsynligheten vil gradvis “lekke ut” til området  $x > L$ . Halvklassisk kan vi beregne en hastighet  $v = \sqrt{2E/m_e}$  i området  $-L < x < 0$  og en tid  $\Delta t = 2L/v$  mellom hver kollisjon med barrieren. •Hvor lang tid tar det ut fra denne tankegangen før sannsynligheten for å finne elektronet i området  $|x| < L$  er redusert fra 1 til  $1/e$  — (i) for  $E_n = E_a$ , (ii) for  $E_n = E_b$ ? [Hint: For små  $\epsilon$  er  $\ln(1 - \epsilon) \approx -\epsilon$ .]

### Oppgave 3

I denne oppgaven ser vi på et elektronspinn  $\mathbf{S}$ , plassert i et magnetfelt  $\mathbf{B} = B\hat{e}_z$ . Elektronets indre magnetiske moment representeres av operatoren

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{ge}{2m_e} \mathbf{S}, \quad g \approx 2.00232.$$

Oppførselen til spinnets bestemmes da av Hamilton-operatoren

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \equiv \omega S_z, \quad \omega \equiv \frac{geB}{2m_e}.$$

**a.** •Vis at de to Pauli-spinorene  $\chi_+$  og  $\chi_-$  da er energiegentilstander, og finn de to energiene,  $E_+$  og  $E_-$ , uttrykt ved  $\omega$ . [Se formelarket.] •Finn  $E_+$  og  $E_-$  i elektronvolt (eV) når  $B = 1$  T(esla). Det oppgis at

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e} \equiv 1 \text{ Bohr-magneton} = 5.788 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T(esla)}.$$

•Finn bølgelengden  $\lambda$  til fotonene som er inne i bildet ved overganger mellom de to energiegentilstandene.

**b.** Ved en måling av spinnkomponenten  $S_x$  ved  $t = 0$  etterlates spinnet i tilstanden

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

•Hva er måleresultatet for  $S_x$ ?

Den resulterende tilstanden for  $t > 0$  kan skrives som en lineærkombinasjon av de stasjonære tilstandene for dette systemet;

$$\chi(t) = c_+\chi_+e^{-iE_+t/\hbar} + c_-\chi_-e^{-iE_-t/\hbar}.$$

•Hva er  $c_+$  og  $c_-$ ? •Skriv denne tilstanden på formen

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

og finn spinnretningen  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_t$  som funksjon av tiden.

**c.** •Hvor lang tid ( $t_1$ ) tar det (minst) før  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_t$  peker i samme retning som for  $t = 0$ ?

•Hvor lang tid ( $t_2$ ) tar det (minst) før spinoren  $\chi(t)$  er identisk med  $\chi(0)$ ? •Er det noen målbar forskjell mellom de fysiske tilstandene til spinnet ved tidene  $t_1$  og  $t_2$ ? (Begrunn svaret.)

**d.** Anta at en måling av spinnkomponenten  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S}$  i retningen  $\hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{2}\sqrt{3}\hat{\mathbf{e}}_x + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{e}}_z$  gir måleresultatet  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar$ . •Finn en normert spinor  $\chi$  som beskriver tilstanden til spinnet umiddelbart etter målingen.



## Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

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

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

**Tidsutvikling av forventningsverdier**

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

**Sannsynlighets-strømtetthet**

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

**Noen formler**

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

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

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

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

$$\sinh y = y + \mathcal{O}(y^3).$$

**$\delta$ -funksjonen og sprangfunksjonen**

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

**Noen fysiske konstanter**

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

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

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

## 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

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