NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

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

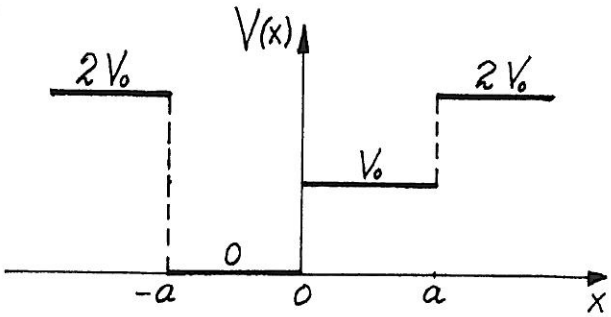
EKSAMEN I
TFY4250 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK

Mandag 4. august 2008
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 2008.

Oppgave 1



En partikkel med masse m beveger seg i et endimensjonalt asymmetrisk brønnpotensial

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

a. For en viss verdi av V_0 får 1. eksiterte tilstand ψ_2 energien $E_2 = 2V_0$. •Finn hvilken form energiegenfunksjonen ψ_2 da må ha i områdene $x < -a$ og $x > a$. [Hint: En energiegenfunksjon tillates ikke å gå mot uendelig.] •Skissér ψ_2 og redegjør for prinsippene i skissen.

b. •For en *annen* verdi av V_0 får grunntilstandsenergien E_1 verdien $E_1 = V_0$. •Skissér grunntilstanden ψ_1 i dette tilfellet, og redegjør for prinsippene i skissen.

c. •Finn et sett av betingelser som vil gjøre det mulig å finne V_0 uttrykt ved a, for tilfellet $E_1 = V_0$. (Ligningene skal ikke løses.)

d. •Gjør et omtrentlig overslag over V_0 (uttrykt ved a) for tilfellet $E_1 = V_0$.

Oppgave 2

En partikkel med masse m beveger seg i et isotropt tredimensjonalt harmonisk oscillator-potensial, $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$. Som energiegenfunksjoner for dette systemet kan en

(i) bruke produkttilstander av typen $\psi_{n_x n_y n_z} = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$, der

$$\widehat{H}_x \psi_{n_x}(x) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\psi_{n_x}(x) = \hbar\omega(n_x + \tfrac{1}{2})\,\psi_{n_x}(x)$$

osv. Energiegenverdiene bestemmes av

$$\widehat{H}\,\psi_{n_x n_y n_z} \equiv \left(\widehat{H}_x + \widehat{H}_y + \widehat{H}_z\right)\psi_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega(N + 3/2)\psi_{n_x n_y n_z} \equiv E_N\,\psi_{n_x n_y n_z},$$

der $N = n_x + n_y + n_z$. Et alternativ er

(ii) å bruke det simultane egenfunksjonssettet til $\widehat{H}$, $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $\widehat{L}_z$, på formen

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

Hver slik egenfunksjon ψ_{Nlm} vil være en lineærkombinasjon av funksjoner $\psi_{n_x n_y n_z}$, med $n_x + n_y + n_z = N$.

a. •Forklar hvorfor pariteten til funksjonen ψ_{Nlm} kan uttrykkes som $(-1)^N$. •Forklar hvorfor *like* l $(0, 2,$ osv) bare opptrer sammen med like N, og *odde* l bare opptrer for odde N. •Angi kvantetallene n_x, n_y, n_z, N og energien E_N for grunntilstanden, og vis ved hjelp av opplysningene på formelarket at den tilhørende energiegenfunksjonen kan skrives på formen

$$\psi_g = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-m\omega r^2/2\hbar}.$$

Denne er også en egenfunksjon til dreieimpulsoperatorene $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $\widehat{L}_z$. •Hva er de tilhørende kvantetallene l og m?

b. •Bruk formelen

$$\langle K \rangle_\psi = \frac{\hbar^2}{2m}\int |\nabla\psi|^2 d^3r$$

til å vise at den midlere kinetiske energien for grunntilstanden kan skrives på formen

$$\langle K \rangle_g = \tfrac{1}{2}m\omega^2 \left\langle r^2 \right\rangle_g,$$

dvs har samme verdi som den midlere *potensielle* energien, $\langle V \rangle_g$. [Hint: Vis at $|\nabla\psi_g| = |\partial\psi_g/\partial r| = (m\omega r/\hbar)\cdot\psi_g$.] •Bruk dette til å finne $\langle r^2 \rangle$ og også $\langle x^2 \rangle$, $\langle y^2 \rangle$ og $\langle z^2 \rangle$ for grunntilstanden. •Finn også usikkerhetene Δx, Δy og Δz for denne tilstanden, samt rms-radien $r_{\text{rms}} = \langle r^2 \rangle_g^{1/2}$.

c. Anta at dette systemet ved $t = 0$ prepareres i (den normerte) begynnelsestilstanden

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = 10^{3/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-100m\omega r^2/2\hbar} \equiv \psi_b(r).$$

Bølgefunksjonen for $t > 0$ kan utvikles i det stasjonære egenfunksjonssettet til $\widehat{H}$, $\widehat{\mathbf{L}}^2$ og $\widehat{L}_z$ (som danner en basis, som vi betrakter som kjent):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{Nlm} c_{Nlm}\psi_{Nlm}e^{-iE_N t/\hbar} = \sum_{Nlm} c_{Nlm}R_{Nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)e^{-iE_N t/\hbar}.$$

•Forklar hvordan koeffisientene c_{Nlm} kan finnes (i prinsippet). •Hvorfor blir c_{Nlm} lik null unntatt for $l = m = 0$? •Hvorfor er c_{N00} lik null for odde N?

d. •Hva er den fysiske tolkningen av koeffisientene c_{N00}? •Finn sannsynligheten for måleresultatet $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ ved en måling av energien når partikkelen er i tilstanden $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Oppgitt:

$$I_2(\alpha) \equiv \int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{4}\pi^{1/2}\alpha^{-3/2}.$$

e. For den isotrope oscillatoren vil sannsynlighetstettheten for en vilkårlig ikke-stasjonær tilstand ha en periodisk oppførsel, i den forstand at den opprinnelige sannsynlighetsfordelingen *gjenskapes* etter en tid $T = 2\pi/\omega$, som er den klassiske perioden for oscillatoren. •Vis at gjenskapingen (eng.: "revival") med den gitte begynnelsestilstanden skjer dobbelt så raskt. [Hint: Vis at faktorene $\exp(-iE_N t/\hbar)$ i utviklingsformelen bare endres med en konstant fasefaktor ved et tillegg på $T/2$ i tiden.]

f. Fra formelen for ψ_b framgår det at den lineære utstrekningen av begynnelsestilstanden er redusert med en faktor 10 i forhold til grunntilstanden. Begynnelsestilstanden er altså kraftig "skviset", i forhold til alle egentilstandene som inngår i utviklingsformelen for $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Dette gjenspeiler seg ved at forventningsverdien $\langle V \rangle_b$ av den potensielle energien i begynnelsestilstanden er en faktor 100 mindre enn i grunntilstanden, mens $\langle K \rangle_b$ er en faktor 100 *større* enn $\langle K \rangle_g$. •Du inviteres nå til å spekulere rundt hva som skjer med bølgefunksjonen og sannsynlighetsfordelingen *mellom* hver gjenskaping, dvs *mellom* tidspunktene $t = 0, T/2, T, 3T/2$ osv. •Gjør et halvklassisk overslag av den lineære utstrekningen av tilstanden $\Psi(\mathbf{r}, t)$, representert ved rms-radien, når denne er "på sitt største".

Oppgave 3

I denne oppgaven betraktes et system som består av to spinn-$\frac{1}{2}$-partikler. Spinnene til partikkel 1 og partikkel 2 kan vi kalle henholdsvis $\mathbf{S}_1$ og $\mathbf{S}_2$. Hvis begge komponentene S_{1z} og S_{2z} måles separat, vil dette spinnsystemet bli etterlatt i en av de fire tilstandene

$$\chi_+(1)\chi_+(2), \quad \chi_+(1)\chi_-(2), \quad \chi_-(1)\chi_+(2), \quad \chi_-(1)\chi_-(2),$$

definert ved at

$$S_{1z}\chi_{\pm}(1) = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\,\chi_{\pm}(1) \qquad \text{og} \qquad S_{2z}\chi_{\pm}(2) = \pm\tfrac{1}{2}\hbar\,\chi_{\pm}(2)$$

for henholdsvis partikkel 1 og partikkel 2.

<u>a.</u> Anta at systemet er prepartert i tilstanden

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{+}(1)\chi_{-}(2) + \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{-}(1)\chi_{+}(2).$$

•Hva er da sannsynligheten for å måle $S_{1z} = \frac{1}{2}\hbar$, og hvilken tilstand havner systemet i etter en måling med dette resultatet? •Hva blir resultatet dersom en måler S_{2z} samtidig med at en måler $S_{1z} = \frac{1}{2}\hbar$? •Hva er forventningsverdien $\langle S_{1z} \rangle$ og usikkerheten ΔS_{1z} i tilstanden χ?

<u>b.</u> Tilstanden χ ble preparert ved en måling av $\mathbf{S}^2$ og S_z, der $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ er summen av de to spinnene. •Angi de mulige måleverdiene for observablene $\mathbf{S}^2$ og S_z for dette systemet. •Hva var måleverdien for S_z ved prepareringen av tilstanden χ? (Svaret skal begrunnes.)

<u>c.</u> •Hva var måleverdien for $\mathbf{S}^2$ ved prepareringen av tilstanden χ? (Svaret skal begrunnes.)

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Endimensjonal harmonisk oscillator

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi_n(x)=\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})\psi_n(x); \qquad \langle\,\psi_n,\psi_k\,\rangle=\delta_{nk};$$

$$\psi_0(x)=C_0\,e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \qquad C_0=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4};$$

$$\psi_1(x)=C_0\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,x\,e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \qquad \psi_2(x)=\frac{C_0}{2}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2-1\right)e^{-m\omega x^2/2\hbar},\cdots;$$

$$\widehat{\mathcal{P}}\psi_n(x)\equiv\psi_n(-x)=(-1)^n\psi_n(x).$$

Laplace-operatoren og dreieimpulsoperatorer i kulekoordinater

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2r^2};$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right), \qquad \hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi};$$

$$\hat{L}_x=\frac{\hbar}{i}\left(-\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\,\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \qquad \hat{L}_y=\frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\,\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\,\sin\phi\,\frac{\partial}{\partial\phi}\right);$$

$$[\widehat{\mathbf{L}}^2,\widehat{L}_z]=0, \qquad [\widehat{L}_x,\widehat{L}_y]=i\hbar\widehat{L}_z, \quad \text{osv.}$$

Vinkelfunksjoner

$$\left\{\begin{array}{c}\hat{\mathbf{L}}^2\\ \hat{L}_z\end{array}\right\}Y_{lm}=\left\{\begin{array}{c}\hbar^2l(l+1)\\ \hbar m\end{array}\right\}Y_{lm}\,, \quad l=0,1,2,...; \qquad \int_0^{2\pi}d\phi\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)Y^*_{l'm'}Y_{lm}=\delta_{l'l}\delta_{m'm};$$

$$Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{z}{r}\equiv Y_{p_z}, \qquad Y_{1\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\,e^{\pm i\phi};$$

$$Y_{p_x}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{x}{r}=\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1,-1}-Y_{11}), \qquad Y_{p_y}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{y}{r}=\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11}+Y_{1,-1});$$

$$\widehat{\mathcal{P}}Y_{lm}=(-1)^lY_{lm}.$$

Dreieimpuls generelt

$$\widehat{\mathbf{J}}^2\,|j,m\rangle=\hbar^2j(j+1)\,|j,m\rangle, \qquad \widehat{J}_z\,|j,m\rangle=\hbar m\,|j,m\rangle;$$

$$\widehat{J}_\pm=\widehat{J}_x\pm i\widehat{J}_y, \qquad \widehat{\mathbf{J}}^2=\widehat{J}_z^2+\hbar\widehat{J}_z+\widehat{J}_-\widehat{J}_+=\widehat{J}_z^2-\hbar\widehat{J}_z+\widehat{J}_+\widehat{J}_-;$$

$$\widehat{J}_\pm\,|j,m\rangle=\hbar\sqrt{(j\mp m)(j+1\pm m)}\,|j,m\pm1\rangle.$$

Noen formler

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

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

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

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

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

Noen fysiske konstanter

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

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

$$\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6\ \mathrm{eV}; \qquad 1\,\mathrm{MeV} = 10^6\mathrm{eV}.$$

Spinn $\frac{1}{2}$

For en partikkel med spinn $\frac{1}{2}$ kan en bruke spinnoperatoren

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

der

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

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,

$$\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle = \chi^\dagger\boldsymbol{\sigma}\chi = \hat{\mathbf{e}}_x\,\Re\mathrm{e}(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_y\,\Im\mathrm{m}(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_z\,(|a|^2 - |b|^2).$$

Matrisene $S_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x$ osv oppfyller dreieimpulsalgebraen,

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \qquad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \qquad [S_z, S_x] = i\hbar S_y.$$

Videre er

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

For en enhetsvektor med retningsvinkler θ og ϕ,

$$\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{e}}_x\sin\theta\cos\phi + \hat{\mathbf{e}}_y\sin\theta\sin\phi + \hat{\mathbf{e}}_z\cos\theta,$$

er

$$\sigma\cdot\hat{\mathbf{n}}\begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta\, e^{i\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta\, e^{i\phi} \end{pmatrix}.$$