NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

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

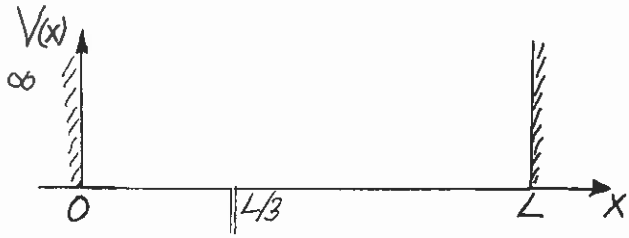
EKSAMEN I
TFY4250 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK

Lørdag 8. august 2009
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 2009.

Oppgave 1



En partikkel med masse m befinner seg i et endimensjonalt potensial som består av en deltafunksjonsbrønn i punktet $x = L/3$ samt to uendelig harde vegger ved $x = 0$ og $x = L$:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for} \quad x < 0 \ \text{ og for } \ x > L \\ -\beta\delta(x - L/3) & \text{for} \quad 0 < x < L. \qquad (\beta \geq 0) \end{cases}$$

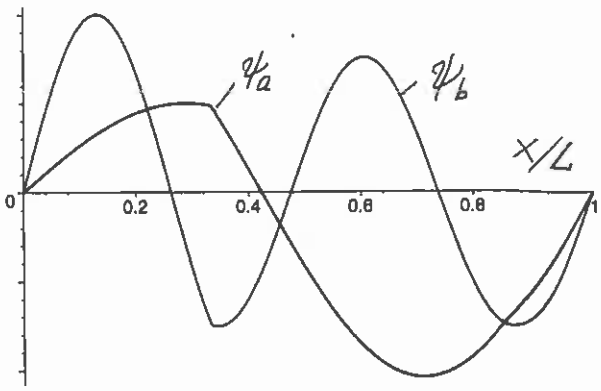
Det opplyses at energiegenfunksjoner i dette potensialet må oppfylle diskontinuitetsbetingelsen

$$\psi'/\psi|_{x=L/3^+} - \psi'/\psi|_{x=L/3^-} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}.$$

a. •Angi bølgetallene $k_n^{(0)}$ og energiene $E_n^{(0)}$ for energiegenfunksjonene for spesialtilfellet $\beta = 0$, og skissér egenfunksjonene for de tre laveste energiene for dette tilfellet. •Anta så at $\beta \neq 0$, og forklar hvilke av energiegentilstandene som er helt uberørt av deltafunksjonsbidraget til potensialet (dvs har samme bølgefunksjoner og energier som for $\beta = 0$).

b. For en viss β-verdi, β_0, blir grunntilstandsenergien E_1 lik null. •Skissér bølgefunksjonen (ψ_1) for dette tilfellet, og bestem β_0 uttrykt ved de oppgitte størrelsene. •Hva skjer med E_1 når β gjøres større enn β_0? (Prøv å begrunne svaret så godt du kan.) •Hvorfor har alle de *eksiterte* egentilstandene positive energier, uansett hvor stor vi gjør β? [Hint: Jf krumningsegenskaper.]

c.



Figuren viser to av de eksiterte energiegenfunksjonene for $\beta = 9\hbar^2/(2mL)$. •Angi hvilke tilstander dette er. •Bruk figuren til å bestemme omtrent hvor store bølgetallene og energiene er for disse to energiegenfunksjonene.

d. •Finn en ligning som gjør det mulig å bestemme bølgetallene for de eksiterte tilstandene (numerisk). [Hint: Det er praktisk å bruke den dimensjonsløse størrelsen kL som den ukjente.] •Bruk denne ligningen til å bestemme en mer nøyaktig verdi for bølgetallet k_2 og energien E_2 for første eksiterte tilstand.

Oppgave 2

I denne oppgaven betrakter vi en spinn-$\frac{1}{2}$-partikkel som befinner seg i et konstant og homogent magnetfelt $\mathbf{B}$ rettet i x-retningen. Når vi ser bort fra andre frihetsgrader, kan Hamilton-operatoren for dette spinnet skrives på formen

$$H = \omega S_x,$$

der vi antar at ω er positiv. Egentilstandene til denne Hamilton-operatoren er

$$\chi_{\hat{x}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{og} \qquad \chi_{-\hat{x}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

a. •Finn energiegenverdiene (E_+ og E_-). De tilsvarende stasjonære tilstandene er

$$\chi_\pm(t) = \chi_{\pm\hat{x}}\, e^{-\imath E_\pm t/\hbar}.$$

•Finn spinnretningene ($\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\pm}$) for disse stasjonære tilstandene, og kontrollér at disse retningene er tidsuavhengige. •Hvorfor er en lineærkombinasjon

$$\chi(t) = c_+\chi_+(t) + c_-\chi_-(t)$$

(med tidsuavhengige koeffisienter) av de stasjonære tilstandene en mulig tilstand for dette systemet? •Hvorfor er en slik lineærkombinasjon den *mest generelle* tilstanden vi kan ha for dette systemet?

b. Ved $t = 0$ foretas det en måling av en viss komponent $\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{S}$ av spinnet som etterlater dette i tilstanden

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

•Finn spinnretningen $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_0$ ved tiden $t = 0$ (dvs umiddelbart etter målingen). •Angi hvilken komponent som er målt (dvs retningen til enhetsvektoren $\hat{\mathbf{n}}$), og finn måleresultatet. •Finn forventningsverdien $\langle E \rangle$ av energien og usikkerheten ΔE i denne tilstanden.

c. •Finn også spinnretningen $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ ved tidene $t_1 = \pi/(2\omega)$ og $t_2 = \pi/\omega$.

d. •Beskriv hva som skjer hvis vi ved $t = 2\pi/\omega$ plutselig endrer $\mathbf{B}$-feltet, slik at den nye retningen blir langs y-aksen og størrelsen blir dobbelt så stor som opprinnelig.

e. Vi går nå tilbake til $t = 0$, og endrer begynnelsestilstanden til $\chi(0) = \chi_{-\hat{\mathbf{x}}}$. Anta at vi, denne gangen svært langsomt, igjen endrer retningen av feltet fra $\hat{\mathbf{e}}_x$ til $\hat{\mathbf{e}}_y$ og størrelsen til det dobbelte. •Beskriv hva som skjer. •Finn tilstanden og energien til spinnet etter at denne endringen er overstått.

Oppgave 3

En partikkel med masse m er i utgangspunktet i grunntilstanden i et tredimensjonalt harmonisk oscillatorpotensial $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$. Partikkelen utsettes så for en transient (forbigående) perturbasjon

$$V_1(t) = -x\, p_0\, \delta(t + \pi/2\omega) - y\, p_0\, \delta(t),$$

som svarer til to kraftstøt:

$$\mathbf{F}(t) = -\boldsymbol{\nabla} V_1(t) = \hat{\mathbf{e}}_x\, p_0\, \delta(t + \frac{\pi}{2\omega}) + \hat{\mathbf{e}}_y\, p_0\, \delta(t).$$

Her er p_0 størrelsen av impulsen som overføres i hvert av støtene.

Klassisk vil en partikkel som i utgangspunktet er i ro i potensialet $V(r)$ og så utsettes for disse støtene, for $t > 0$ havne i en sirkelbane

$$\mathbf{r}(t) = \frac{p_0}{m\omega}(\hat{\mathbf{e}}_x \cos\omega t + \hat{\mathbf{e}}_y \sin\omega t),$$

med impuls, dreieimpuls og energi gitt ved

$$\mathbf{p}(t) = p_0(-\hat{\mathbf{e}}_x \sin\omega t + \hat{\mathbf{e}}_y \cos\omega t), \qquad \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \hat{\mathbf{e}}_z \frac{p_0^2}{m\omega} \quad \text{og} \quad E = K + V = \frac{p_0^2}{m}.$$

I denne oppgaven skal dette problemet behandles kvantemekanisk, ved hjelp av 1.-ordens tidsavhengig perturbasjonsteori. Som uperturberte løsninger bruker vi produkttilstandene

$$\Psi^{(0)}_{n_x n_y n_z}(\mathbf{r}, t) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)e^{-iEt/\hbar}; \qquad E = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2),$$

som er ortogonale og normerte. Tilstanden til oscillatoren kan utvikles i dette settet:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z}(t)\, \Psi^{(0)}_{n_x n_y n_z}(\mathbf{r}, t). \qquad (*)$$

Før perturbasjonen (ved $t = t_0 < -\pi/2\omega$) er $a_{000} = 1$. *Etter* perturbasjonen er koeffisientene $a_{n_x n_y n_z}$ igjen tidsuavhengige, og det er disse koeffisientene som nå skal finnes.

<u>a.</u> •Sett $p_0 = \epsilon\sqrt{2\hbar m\omega}$ (der ϵ er dimensjonsløs), beregn overgangsamplitudene $a_{n_x n_y n_z}$ for $t > 0$ ved hjelp av 1.-ordens tidsavhengig perturbasjonsteori, og vis at det er bare to av overgangsamplitudene som er forskjellige fra null (i tillegg til amplituden a_{000} for å finne oscillatoren i den opprinnelige tilstanden). [Hint: $x\psi_0(x) = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}\,\psi_1(x)$.] •Finn også overgangssannsynlighetene. Hvilken betingelse må ϵ oppfylle for at 1.-ordens perturbasjonsteori skal gi en bra tilnærmelse her?

<u>b.</u> Utviklingen (*) kan skrives på formen $\Psi_a + \Psi_b$, hvor $\Psi_a = a_{000}\Psi^{(0)}_{000}(\mathbf{r}, t)$. •Påvis at Ψ_b er en egenfunksjon både til den uperturberte Hamilton-operatoren $\widehat{H}$ og til dreieimpulsoperatoren $\widehat{L}_z$. •Beregn forventningsverdien av energiøkningen på grunn av den transiente perturbasjonen, $\left\langle E - \frac{3}{2}\hbar\omega \right\rangle$, og sammenlign med den klassiske energien oppgitt ovenfor. •Gjennomfør en tilsvarende sammenligning for $\langle L_z \rangle$.

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

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

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

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**,

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

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

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

Harmonisk oscillator

Energiegenfunksjonene for potensialet $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ $(-\infty < x < \infty)$ oppfyller egenverdiligningen

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

med løsninger på formen

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

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

Sfæriske harmoniske

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

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}\,, \qquad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\,, \qquad Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}.$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1), \qquad Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}, \qquad Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}.$$

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

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

Det eksakte ligningssettet for utviklingskoeffisientene er

$$i\hbar\frac{da_k}{dt} = \sum_n e^{i\omega_{kn}t}V_{kn}(t)a_n(t); \qquad \omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar;$$

$$V_{kn}(t) = \langle\psi_k|\widehat{V}(t)|\psi_n\rangle = \int \psi_k^*\,\widehat{V}(t)\psi_n\, d\tau.$$

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 $a_f \equiv a_{i\to f}$ gitt ved

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

Tidsutvikling av forventningsverdier

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

δ-funksjonen og sprangfunksjonen

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