NORSK TEKST

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 og
FY2045 KVANTEFYSIKK

Mandag 1. desember 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 desember 2008.

Oppgave 1

En partikkel med masse m befinner seg i et endimensjonalt potensial som består av en deltafunksjonsbrønn,

$$V(x) = -\beta\delta(x) \qquad (\beta > 0).$$

Det opplyses at energiegenfunksjoner i dette potensialet må oppfylle diskontinuitets-betingelsen

$$\psi'/\psi|_{x=0^+} - \psi'/\psi|_{x=0^-} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}.$$

a. •Vis at dette systemet har bare én bundet tilstand, med energien

$$E \equiv -E_B = -\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}.$$

b. Anta at partikler med (masse m og) energi $E > 0$ sendes fra venstre inn mot denne deltafunksjons-brønnen. Dette spredningsproblemet kan beskrives ved hjelp av en energiegenfunksjon som har formen

$$\psi_I(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx} \equiv \psi_i + \psi_r \quad \text{for} \quad x < 0.$$

•Finn bølgetallet k uttrykt ved energien E.
Sannsynlighets-strømtettheten kan for $x < 0$ skrives på formen

$$j = \Re\text{e}\left[\psi_I^* \frac{\hbar}{im}\frac{d}{dx}\psi_I\right] = j_i + j_r = j_i - |j_r|.$$

•Finn j_i og j_r uttrykt ved k og den komplekse koeffisienten B. [Hint: $z - z^* = 2i\Im\text{m}(z)$.]
•Hvilken form skal energiegenfunksjonen ha for $x > 0$ i dette spredningsproblemet?

c. Det kan vises at koeffisienten B er

$$B = -\left(1 + i\,\frac{\hbar^2 k}{m\beta}\right)^{-1}.$$

•Finn energien E når det oppgis at 25 % av partiklene reflekteres av potensialbrønnen.
•Utled formelen ovenfor for B.

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 z-retningen. Når vi ser bort fra andre frihetsgrader, kan Hamilton-operatoren for dette spinnet skrives på formen

$$H = \omega S_z,$$

der vi antar at ω er positiv.

a. •Finn energiegenverdiene og de (tidsavhengige) stasjonære tilstandene for dette systemet, og pass på at disse skal oppfylle ligningen

$$i\hbar\frac{d}{dt}\chi(t) = H\chi(t) = E\chi(t),$$

der E er de respektive egenverdiene. •Finn spinnretningene ($\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$) for de stasjonære tilstandene, og kontrollér at disse retningene er tidsuavhengige. •Hvorfor er en lineærkombinasjon (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 komponenten S_y av spinnet. •Finn måleresultatet dersom spinnet umiddelbart etter målingen befinner seg i tilstanden

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

•Finn spinnretningen $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_0$ ved tiden $t = 0$ (dvs umiddelbart etter målingen). •Finn også spinnretningen $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$ ved tidene $t = \pi/(2\omega)$ og $t = \pi/\omega$.

Oppgave 3

I denne oppgaven betrakter vi et topartikkelsystem (eller snarere et *ensemble* av slike), der begge partiklene har spinn 1 (dvs $s_1 = s_2 = 1$):

$$|\mathbf{S}_1| = \hbar\sqrt{s_1(s_1+1)} = \hbar\sqrt{2} \quad \text{og} \quad |\mathbf{S}_2| = \hbar\sqrt{s_2(s_2+1)} = \hbar\sqrt{2}.$$

Ved en måling av S_{1z} og S_{2z} etterlates spinn nummer 1 i en av triplett-tilstandene $|1_1\rangle$, $|0_1\rangle$, $|-1_1\rangle$ og spinn nummer 2 i en av tilstandene $|1_2\rangle$, $|0_2\rangle$, $|-1_2\rangle$. Vi bruker her de magnetiske kvantetallene m_1 og m_2 som merkelapper, sammen med partikkelindeksene $_1$ og $_2$. Topartikkelsystemet havner altså i en av 9 mulige produkt-tilstander av typen $|m_1\rangle|m_2\rangle$, der $m_1 = 1, 0, -1$ og $m_2 = 1, 0, -1$. Disse 9 tilstandene danner en basis for dette spinnsystemet, som vi godt kan kalle den "gamle" basisen.

Gjør vi i stedet en måling av størrelsen $|\mathbf{S}|$ og z-komponenten S_z av det *totale* spinnet $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ for dette topartikkelsystemet, havner systemet i en tilstand av typen $|s, m\rangle$ (slik at $|\mathbf{S}| = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ og $S_z = \hbar m$), der det oppgis at

$$|s_1 - s_2| \leq s \leq s_1 + s_2.$$

Disse tilstandene $|s, m\rangle$ velger vi å kalle "nye".

<u>a.</u> •Kontrollér at antallet av "nye" tilstander er lik antallet "gamle". •Hvorfor kan de "nye" tilstandene $|s, m\rangle$ uttrykkes som lineærkombinasjoner av de "gamle", $|m_1\rangle|m_2\rangle$? •Vis at den "gamle" tilstanden $|1_1\rangle|1_2\rangle$ er en egentilstand til $\widehat{S}_z = \widehat{S}_{1z} + \widehat{S}_{2z}$ med egenverdien $2\hbar$. •Hvorfor er den "nye" tilstanden $|2, 2\rangle$ lik den "gamle" $|1_1\rangle|1_2\rangle$, og hvorfor er $|2, -2\rangle = |-1_1\rangle|-1_2\rangle$?

<u>b.</u> Fra de generelle stigeoperator-relasjonene (se formelarket) følger det at vi for hvert av spinnene har

$$\widehat{S}_{n-}|1_n\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|0_n\rangle; \qquad \widehat{S}_{n-}|0_n\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|-1_n\rangle; \qquad n = 1, 2,$$

mens vi for de "nye" tilstandene har

$$\widehat{S}_-|2, 2\rangle = 2\hbar\,|2, 1\rangle, \quad \text{osv.}$$

•Bruk disse relasjonene til å vise at den "nye" tilstanden $|2, 1\rangle$, med $s = 2$ og $m = 1$, er

$$|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1_1\rangle|0_2\rangle + |0_1\rangle|1_2\rangle\,).$$

•Vis at den "nye" tilstanden med $s = 2$ og $m = 0$ er

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(\,|1_1\rangle|-1_2\rangle + 2\,|0_1\rangle|0_2\rangle + |-1_1\rangle|1_2\rangle\,).$$

•Hva er den fysiske tolkningen av koeffisientene i denne utviklingsformelen?

<u>c.</u> "Topp-trinnet" $|1, 1\rangle$ i triplett-"stigen" for $s = 1$ skal være en lineærkombinasjon av de to "gamle" tilstandene med $m = 1$, samtidig som den er ortogonal på $|2, 1\rangle$ (fordi s-kvantetallene er forskjellige for tilstandene $|2, 1\rangle$ og $|1, 1\rangle$). Disse kriteriene oppfylles av

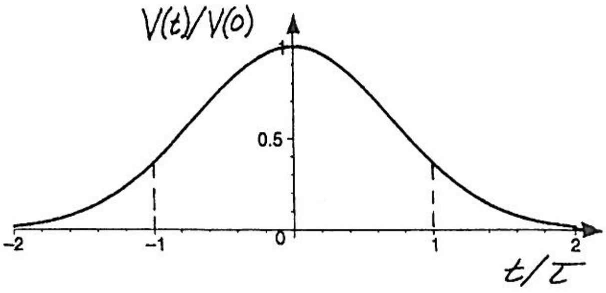
$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1_1\rangle|0_2\rangle - |0_1\rangle|1_2\rangle\,).$$

•Vis med utgangspunkt i tilstanden $|1, 1\rangle$ at

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\,|1_1\rangle|-1_2\rangle - |-1_1\rangle|1_2\rangle\,).$$

•Finn til slutt (den normerte) singletten $|0, 0\rangle$ uttrykt ved de "gamle" tilstandene med $m = 0$.

Oppgave 4



Et elektron som ved tiden $t = -\infty$ befinner seg i grunntilstanden i et hydrogenatom, utsettes for en transient (forbigående) perturbasjon, i form av et homogent tidsavhengig elektrisk felt som svarer til et perturberende ledd

$$V(t) = -ze\mathcal{E}_0 \exp(-t^2/\tau^2)$$

i Hamilton-operatoren. Ifølge 1.-ordens tidsavhengig perturbasjonsteori er overgangssannsynligheten fra grunntilstanden $\psi_i = \psi_{100} = (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/a_0)$ (ved $t = -\infty$) til en bundet slutt-tilstand

$$\psi_f = \psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

(ved $t = \infty$) gitt ved

$$P_{i\to f} = |a_{i\to f}|^2 = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{fi} t) \langle \psi_f | V(t) | \psi_i \rangle \, dt \right|^2 ,$$

der $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$.

a. •Vis at denne overgangssannsynligheten kan skrives på formen

$$P_{i\to f} = f(\tau) \left| \int \psi_f^* \, (z/a_0) \, \psi_i \, d^3r \right|^2 \equiv f(\tau) \left| \frac{d_{fi}}{a_0} \right|^2 ,$$

der integralet er dimensjonsløst, og finn funksjonen $f(\tau)$ uttrykt ved de oppgitte størrelsene.
Oppgitt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ay^2 + by) dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp(b^2/4a); \qquad (\Re\mathrm{e}(a) > 0).$$

•Vis at overganger bare er mulig til slutt-tilstander med $l = 1$ og $m = 0$ (til 1. orden).
[Hint: $z = r\cos\theta = r\sqrt{4\pi/3}\, Y_{10}$.]

b. Figuren ovenfor viser at "mesteparten" av perturbasjonen foregår i løpet av et tidsintervall 2τ. •Finn den τ-verdien (τ_m) som gir den maksimale overgangssannsynligheten $P_{i\to f}$ for fastholdt $\mathcal{E}_0$, og sammenlign $2\tau_m$ med den naturlige perioden $T_{fi} = 2\pi/\omega_{fi}$.
•Lag en rask skisse av $P_{i\to f}(\tau)/P_{i\to f}(\tau_m)$ som funksjon av τ/τ_m (for fastholdt $\mathcal{E}_0$), og kommentér spesielt oppførselen for tilfellene $\tau << \tau_m$ og $\tau >> \tau_m$.

c. Dipolmomentene $d_{fi} = \langle \psi_f | z | \psi_i \rangle$ for overganger fra ψ_{100} til tilstandene ψ_{n10} er av størrelsesorden a_0 (Bohr-radien) eller mindre. F.eks er

$$\langle \psi_{210} | z | \psi_{100} \rangle \approx 0.745 \, a_0 \qquad \text{og} \qquad \langle \psi_{310} | z | \psi_{100} \rangle \approx 0.298 \, a_0.$$

La oss anta at $\mathcal{E}_0$ har samme styrke som feltet fra protonet i en avstand a_0, dvs $\mathcal{E}_0 = e/(4\pi\epsilon_0 a_0^2)$, slik at $e\mathcal{E}_0 a_0 = e^2/(4\pi\epsilon_0 a_0) = 27.2$ eV. Ser vi da på overgangen $\psi_{100} \to \psi_{210}$, med $\hbar\omega_{21} = E_2 - E_1 = 10.2$ eV, så følger det fra resultatene ovenfor og formelen

$$f(\tau_m) = \frac{2\pi}{e} \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar\omega_{21}} \right)^2 ,$$

at

$$P_{100\to 210}(\tau) = P_{100\to 210}(\tau_m) \, \frac{f(\tau)}{f(\tau_m)} \approx 9.12 \, (\tau/\tau_m)^2 \exp[1 - (\tau/\tau_m)^2].$$

Dette resultatet har for å si det mildt en alvorlig svakhet for $\tau \sim \tau_m$. •Forklar *hva* svakheten består i, og *hvordan* feilen har kommet inn.

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Sannsynlighets-strømtetthet

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

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 $\widehat{F}$, 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

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

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

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

Stigeoperator-relasjoner for dreieimpulser

$$\hat{J}_+|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+1+m)}\,|j,m+1\rangle; \quad \hat{J}_-|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j+1-m)}\,|j,m-1\rangle.$$

Sfæriske harmoniske

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

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

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

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

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

Det eksakte ligningssettet for utviklingskoeffisientene er

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

Med $a_n(t_0) = \delta_{ni}$ oppfyller den eksakte amplituden ligningen

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

Noen fysiske konstanter

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

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

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

Tidsutvikling av forventningsverdier

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

δ-funksjonen og sprangfunksjonen

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