NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:

Professor Per Hemmer, tel. 73 59 36 48

EKSAMEN I SIF4045 KVANTEMEKANIKK

Fredag 10. mai 2002
kl. 09.00 – 15.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator
Rottmann: Matematisk formelsamling

En side med uttrykk og formler er vedlagt.

Sensuren faller 31. mai 2002.

Oppgave 1

En partikkel med masse m befinner seg i det éndimensjonale potensialet

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{for} \quad x < 0 \\ 0 & \text{for} \quad 0 \leq x \leq \frac{1}{2}L \\ V_0 & \text{for} \quad \frac{1}{2}L < x \leq L \\ +\infty & \text{for} \quad x > L \end{cases}$$

a) Vis for spesialtilfellet $V_0 = 0$ at bølgefunksjonen i grunntilstanden er

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

Hva er grunntilstandsenergien E_g for spesialtilfellene $V_0 = 0$ og $V_0 = +\infty$? (Begrunn svaret.)

b) Gi et tilnærmet uttrykk for grunntilstandsenergien E_g for store *negative* verdier for V_0. (Begrunn svaret.)

c) I Rayleigh-Schrödinger tidsuavhengig perturbasjonsteori for et system med Hamilton-operator $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \lambda\widehat{H}_1$ løses egenverdiproblemet $\widehat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ ved rekkeutvikling i parameteren λ:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots \\ |\psi_n\rangle &= |n\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \ldots. \end{aligned}$$

Løsningen av det uperturberte problemet, $\widehat{H}_0|n\rangle = E_n^0|n\rangle$, $n = 1,2,3,\ldots$, forutsettes kjent, og det forutsettes at egenverdiene E_n^0 ikke er degenererte.

Vis at til første orden i λ er egenverdiene gitt ved

$$E_n = E_n^0 + \lambda\langle n|\widehat{H}_1|n\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2).$$

Andreordensresultatet

$$E_n = E_n^0 + \lambda\langle n|\widehat{H}_1|n\rangle + \lambda^2 \sum_{k(\neq n)} \frac{|\langle k|\widehat{H}_1|n\rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0} + \ldots$$

skal du ikke bevise.

d) For små verdier av V_0 i potensialet som er gitt i starten på denne oppgaven kan en benytte perturbasjonsteori slik at det uperturberte systemet har $V_0 = 0$. Beregn grunntilstandsenergien E_g til første orden i V_0. Hva er fortegnet på bidraget til andre orden i V_0? (Begrunn svaret.)

e) For en helt bestemt verdi av V_0 vil grunntilstandsenergien E_g bli lik V_0. Hvilken form har da bølgefunksjonen for $\frac{1}{2}L \leq x \leq L$? Vis at dette inntreffer når

$$V_0 = \frac{2\hbar^2\kappa^2}{mL^2},$$

der tallet κ er den minste positive løsning av den transcendente likningen

$$\tan\kappa = -\kappa.$$

Denne løsningen er tilnærmet $\kappa = 2.0288$.

Bruk alle resultatene i denne oppgaven til å skissere en graf av grunntilstandsenergien $E_\mathrm{g}(V_0)$ som funksjon av V_0, med alle energier uttrykt i enheter $\hbar^2\pi^2/(2mL^2)$.

Oppgave 2

Et kvantemekanisk system har energiegenverdier E_n og energiegentilstander $|n\rangle$. Fra og med tidspunktet t_0 påvirkes systemet av en svak tidsavhengig forstyrrelse, gitt ved tilleggsleddet $\widehat{V}(\vec{r},t)$ i Hamiltonoperatoren. Vi antar at systemet før forstyrrelsen inntreffer befinner seg i den stasjonære tilstanden nr. j. I første ordens tidsavhengig perturbasjonsteori er sannsynligheten for å finne systemet i tilstand nr. k ($k \neq j$) ved et senere tidspunkt t lik

$$P_{j\to k} = \left|\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\langle k|\widehat{V}(\vec{r},\tau)|j\rangle\, e^{i(E_k-E_j)\tau/\hbar}\, d\tau\right|^2.$$

a) Bruk dette til å bevise at sannsynligheten for en overgang er like stor som sannsynligheten for den motsatte overgangen (detaljbalanse),

$$P_{j\to k}(t) = P_{k\to j}(t).$$

b) La så systemet være et elektron som befinner seg i grunntilstanden (notasjon $1s$ eller $|100\rangle$) i Coulombpotensialet, og la forstyrrelsen være et elektrisk felt $\mathcal{E}_0$ i z-retning i form av en puls beskrevet ved

$$\widehat{V}(\vec{r},t) = -e\mathcal{E}_0 z\, e^{-t^2/T^2},$$

som virker fra $t_0 = -\infty$ til $t = +\infty$. T er en konstant.

I første ordens tidsavhengig perturbasjonsteori kan denne forstyrrelsen eksitere elektronet til flere tilstander, deriblant én spesiell $2p$-tilstand. Hvilken $2p$-tilstand er det? (Begrunn svaret.) Beregn overgangssannsynligheten $P_{1s\to 2p}$ for dette.

Oppgave 3

a) Gi en fysisk definisjon av det differensielle spredningstverrsnittet $\dfrac{d\sigma}{d\Omega}$ for spredning av partikler mot et fast spredende potensial $V(\vec{r})$.

b) I Bornapproksimasjonen (første Bornapproksimasjon) er spredningsamplituden gitt som

$$f(\vartheta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{qr}\, V(r)\, 4\pi r^2\, dr,$$

med $q = 2k\, \sin(\vartheta/2)$.

Beregn i Bornapproksimasjonen det differensielle spredningstverrsnitt for spredning av partikler med energi $E = \hbar^2 k^2/(2m)$ mot potensialet

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & \text{for } r \le R \\ 0 & \text{for } r > R. \end{cases}$$

c) Når ventes Bornapproksimasjonen å være en god tilnærmelse? (Gi bare en meget kort kvalitativ besvarelse.)

Oppgave 4

a) To spinn $\vec{J}_1$ og $\vec{J}_2$ har begge kvantetallet $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ knyttet til henholdsvis $\vec{J}_1^2$ og $\vec{J}_2^2$. Systemets totale spinn $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ har kvantetallet j knyttet til $\vec{J}^2$. Hvilke verdier er mulige for j i dette tilfellet?

Kall egentilstandene for operatorene $\widehat{\vec{J}_1^2}$ o g $\widehat{J}_{1z}$ for $|\frac{1}{2}, m_1\rangle_1$, og tilsvarende for spinn nr. 2. Uttrykk egentilstandene $|j,m\rangle$ for $\vec{J}^2$ og J_z ved produkttilstander $|\frac{1}{2}, m_1\rangle_1 |\frac{1}{2}, m_2\rangle_2$ for de to enkelt-spinnene. (Hjelp: Disse tilstandene for totalt spinn er enten symmetriske eller antisymmetriske under ombytte av indeksene 1 og 2.)

I denne deloppgave a) trenger du ikke begrunne svarene.

b) En spinn-$\frac{1}{2}$-partikkel med masse m befinner seg i et potensial der énpartikkelenergiegenverdiene er

$$E_n = n^2\, E_1 \qquad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

der E_1 er en konstant. Til hver energiverdi svarer én romlig egenfunksjon ψ_n, og det er ingen spinn-bane-vekselvirkning.

Så bringes en annen spinn-$\frac{1}{2}$-partikkel, identisk med den første, inn i potensialet. Det er ingen vekselvirkning mellom de to partiklene.

Hva er de tre laveste energiegenverdiene for dette topartikkelsystemet, uttrykt ved konstanten E_1, og hva er de tilhørende degenerasjonsgradene? (Begrunn svaret.)

Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Energiegenverdier og egenfunksjoner i Coulombfeltet

$$E_n^0 = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\,\frac{1}{n^2}.$$

Med konvensjonen $x = r\sin\vartheta\cos\varphi$, $y = r\sin\vartheta\sin\varphi$ og $z = r\cos\vartheta$ har vi følgende normerte egenfunksjoner:

	$\langle\vec{r}\vert n\ell m\rangle$	$= \psi_{n\ell m}$	$= R_{n\ell}(r)\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi)$
$1s$	$\langle\vec{r}\vert 100\rangle$	$= \psi_{100}$	$= (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}}\, e^{-r/a_0}$
$2s$	$\langle\vec{r}\vert 200\rangle$	$= \psi_{200}$	$= (32\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}}\,(2 - r/a_0)\, e^{-r/(2a_0)}$
$2p$	$\langle\vec{r}\vert 210\rangle$	$= \psi_{210}$	$= (32\pi a_0^5)^{-\frac{1}{2}}\, r\, e^{-r/(2a_0)}\,\cos\vartheta$
$2p$	$\langle\vec{r}\vert 211\rangle$	$= \psi_{211}$	$= (64\pi a_0^5)^{-\frac{1}{2}}\, r e^{-r/(2a_0)}\,\sin\vartheta\, e^{i\varphi}$
$2p$	$\langle\vec{r}\vert 21\,{-1}\rangle$	$= \psi_{21-1}$	$= (64\pi a_0^5)^{-\frac{1}{2}}\, r e^{-r/(2a_0)}\,\sin\vartheta\, e^{-i\varphi}$

Spinnoperatorer

Operatoren for spinn-$\frac{1}{2}$ er $\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\,\vec{\sigma}$, med Paulimatrisene gitt ved

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

Heve- og senkeoperatorer for dreieimpuls

$$\begin{aligned} J_+|j,m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\;|j,m+1\rangle \\ J_-|j,m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\;|j,m-1\rangle \end{aligned}$$

Integraler

$$\int_0^a x\sin x\; dx = \sin a - a\cos a.$$

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax}\; dx = n!\; a^{-n-1} \qquad (a > 0).$$

$$\int_{-\infty}^\infty x^{2n}\, e^{-ax^2}\; dx = c_n\sqrt{\pi}\; a^{-n-\frac{1}{2}}, \qquad \text{der} \quad c_0 = 1, \quad c_1 = \tfrac{1}{2}, \quad c_2 = \tfrac{3}{4}$$

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-ax^2+ibx}\; dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\; e^{-b^2/(4a)} \qquad (a > 0)$$

$$\int\!\!\int Y_{\ell m}^*(\vartheta,\varphi)\, Y_{\ell',m'}(\vartheta,\varphi)\; d\Omega = \delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'}.$$