NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

Faglig kontakt under eksamen:

Professor Per Hemmer, tel. 73 59 36 48 eller 99 27 70 26

EKSAMEN I SIF4045 KVANTEMEKANIKK

Mandag 19. mai 2003
kl. 09.00 – 15.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator
Rottmann: Matematisk formelsamling

En side med uttrykk og formler er vedlagt.

Sensuren faller 7. juni 2003.

Oppgave 1

En partikkel med masse m befinner seg i det éndimensjonale harmonisk-oscillator-potensialet

$$V(x) = K + \frac{1}{2}kx^2,$$

der K definerer potensialets minimumsverdi og k er kraftkonstanten.

Bruk heve- og senke-operatorer til å vise at i grunntilstanden $|0\rangle$ er forventningsverdien (middelverdien) $\langle x^4 \rangle$ lik

$$\langle 0|x^4|0\rangle = \frac{3\hbar^2}{4mk}.$$

Oppgave 2

Vi ser nå på en partikkel med masse m som befinner seg i det éndimensjonale anharmoniske potensialet

$$V(x) = \frac{\hbar^2 v_0}{2ma^2}\; e^{x^2/a^2}, \tag{1}$$

der a er en lengde og v_0 en dimensjonsløs parameter. Av dimensjonsgrunner kan energiegenverdiene E_n skrives på formen

$$E_n = \frac{\hbar^2}{ma^2}\,\epsilon_n, \tag{2}$$

der ϵ_n er dimensjonsløs.

Vi kan ikke finne energiegenverdiene eksakt, men i resten av denne oppgaven skal du finne approksimative verdier for den dimensjonsløse grunntilstandsenergien ϵ_0.

a) 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

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

b) Ved å utvikle potensialet i potenser av x fås

$$V(x) = \frac{\hbar^2 v_0}{2ma^2} + \frac{\hbar^2 v_0}{2ma^4}\, x^2 + \frac{\hbar^2 v_0}{4ma^6}\, x^4 + \ldots \tag{3}$$

La det uperturberte systemet svare til de to første leddene, og betrakt det siste leddet i (3) som perturbasjon. Hva blir da den dimensjonsløse grunntilstandsenergien ϵ_0 i første ordens perturbasjonsteori? Bestem også den numeriske verdien av ϵ_0 for verdien $v_0 = \sqrt{320}$.

c) Vis at grunntilstandsenergien E_0 for en partikkel med masse m i et éndimensjonalt potensial $V(x)$ aldri er større enn Rayleigh-Ritz-estimatet

$$E_{RR} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} f^* \widehat{H} f \; dx}{\int_{-\infty}^{\infty} f^* f \; dx} \equiv \frac{\langle f|\widehat{H}|f\rangle}{\langle f|f\rangle}. \tag{4}$$

d) Benytt prøvefunksjonen

$$f(x) = e^{-\frac{1}{2}\beta x^2/a^2},$$

til å beregne Rayleigh-Ritz-estimatet for den dimensjonsløse grunntilstanden ϵ_0 i potensialet (1).

Vis at verdien av variasjonsparameteren β som gir den beste approksimasjon for grunntilstandsenergien (med denne formen på prøvefunksjonen) er gitt ved likningen

$$\beta(\beta - 1)^3 = v_0^2.$$

Hva er den numeriske verdien for denne beste approksimasjonen for ϵ_0 når $v_0 = \sqrt{320}$?

e) Bruk av prøvefunksjonen

$$f(x) = x\, e^{-\frac{1}{2}\beta x^2/a^2}$$

i (4) vil gi et energiestimat E_{RR} som ikke kan være mindre enn energien av første eksiterte tilstand i potensialet (1). Forklar hvorfor. (Du skal <u>ikke</u> beregne denne verdien!)

Oppgave 3

Vi betrakter elastisk spredning av partikler med en gitt energi $E = \hbar^2 k^2/(2m)$ mot et fiksert spredningssenter med vekselvirkning $V(r)$.

a) Gi en fysisk definisjon av det differensielle spredningstverrsnittet $\dfrac{d\sigma}{d\Omega}$.

b) Spredningsamplituden kan skrives som en sum av partialbølger,

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left(e^{2i\delta_\ell}-1\right)\,P_\ell(\cos\vartheta),$$

der P_ℓ er Legendre-polynomer. Argumenter halvklassisk for at for et potensial med en endelig rekkevidde a vil bare ledd med $\ell \le ka$ bidra vesentlig til summen ovenfor. Hva kan en derfor slutte om vinkelavhengigheten for spredning på et potensial med endelig rekkevidde når energien er så lav at $E \ll \hbar^2/(2ma^2)$?

Oppgave 4

a) Et kvantemekanisk system med Hamilton-operator $\widehat{H}_0$ har stasjonære tilstander

$$\psi_n(\vec{r})\,e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Systemet utsettes så for en forstyrrelse slik at den totale Hamilton-operatoren er

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \lambda\widehat{V}(t).$$

Når den eksakte bølgefunksjonen $\Psi(\vec{r},t)$ utvikles i de stasjonære tilstandene for det uperturberte systemet,

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_k a_k(t)\;\psi_k(\vec{r})\,e^{-iE_k t/\hbar},$$

vil utviklingskoeffisientene a_n tilfredsstille den eksakte likningen

$$\frac{da_n(t)}{dt} = \frac{\lambda}{i\hbar}\sum_k V_{nk}(t)\,e^{i\omega_{nk}t}a_k(t), \tag{5}$$

der

$$V_{nk}(t) \equiv \int \psi_n^*\,\widehat{V}\psi_k\;d^3r \qquad \text{og} \quad \omega_{nk} \equiv (E_n - E_k)/\hbar.$$

Vis det.

b) Et system er med sikkerhet i tilstanden ψ_b av det uperturberte systemet før forstyrrelsen slås på ved tida t_0. Vis at en beregning av $a_n(t)$ til første orden i parameteren λ gir sannsynligheten for å finne systemet ved tida t i en *annen* tilstand ψ_s av det uperturberte systemet lik

$$P_{\mathrm{b}\to\mathrm{s}} = \left|\frac{\lambda}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{sb}(\tau)\,e^{i\omega_{sb}\tau}\,d\tau\right|^2 \qquad\qquad (s \neq b).$$

c) En partikkel med masse m befinner seg i en stasjonær tilstand $\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$ i en éndimensjonal boks,

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x \leq -L/2 \\ 0 & \text{for } -L/2 < x < L/2 \\ \infty & \text{for } x \geq L/2. \end{cases} \tag{6}$$

Ved tida $t = 0$ begynner bunnen i potensialet å synke, fra verdien $V = 0$ til verdien $V = V_0$ ved tida t, slik at inni boksen er $V = V(t)$ (uavhengig av x) i dette tidsrommet.

Løs likningsettet (5) eksakt for dette tilfellet, og vis at $|a_n(t)| = 1$ for alle t.

d) La så partikkelen befinne seg i grunntilstanden ψ_1 i potensialet (6), og la et elektrisk felt $\mathcal{E}$ virke i tidsrommet $(0, t)$, slik at potensialet i boksens indre i dette tidsrommet får tillegget

$$-q\mathcal{E}x,$$

der q er partikkelens ladning.

Vis at første ordens tidsavhengig perturbasjonsteori gir at sannsynligheten $P_{1\to 3}$ for å finne partikkelen i andre eksiterte tilstand ψ_3 ved tida t er null. Hva er sannsynligheten $P_{1\to 2}$ for å finne partikkelen i første eksiterte tilstand ψ_2 etter tida t, i første ordens tidsavhengig perturbasjonsteori?

Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Harmonisk oscillator

Med det konvensjonelle uttrykk for potensialet, $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, har de to laveste energiegentilstandene disse energiverdier og posisjonsbølgefunksjoner:

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \qquad \langle x|0\rangle = \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

$$E_1 = \tfrac{3}{2}\hbar\omega \qquad \langle x|1\rangle = \psi_1(x) = \left(\frac{4m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} y e^{-\frac{1}{2}y^2},$$

der $y = x\sqrt{m\omega/\hbar}$.

Uttrykt ved posisjons- og impuls-operatorene er senke- og heve-operatorene definert ved

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} \end{aligned}$$

Disse stigeoperatorene har egenskapene

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\;|n-1\rangle \qquad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle,$$

der $|n\rangle$ er egentilstand nr. n. All tidsavhengighet er neglisjert.

Partikkel i boks

For en partikkel med masse m i potensialet som er uendelig for $|x| \geq L/2$ og null for $|x| < L/2$ er energinivåene og energiegentilstandene:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}, \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots),$$

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{2/L}\cos(n\pi x/L) & \text{for } n = 1, 3, 5, \ldots \\ \sqrt{2/L}\sin(n\pi x/L) & \text{for } n = 2, 4, 6, \ldots \end{cases}$$

Legendre-polynomer

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}\left(x^2-1\right)^\ell; \qquad P_0(x) = 1; \qquad P_1(x) = x$$

Integraler

$$\int_0^y x\sin x\,\cos^2 x\,dx = -\frac{1}{3}y\cos^3 y + \frac{1}{3}\sin y - \frac{1}{9}\sin^3 y.$$

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

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