NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

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

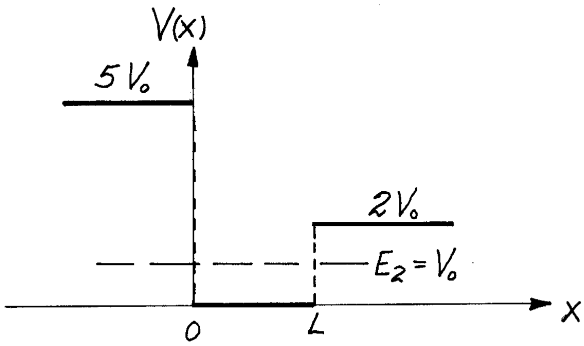
EKSAMEN I TFY4250
ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK

7. august 2006
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.

Sensuren faller i uke 35.

Oppgave 1



En partikkel med masse m befinner seg i et éndimensjonalt, asymmetrisk brønnpotensial

$$V(x) = \begin{cases} 5V_0 & \text{for} \quad x < 0, \\ 0 & \text{for} \quad 0 < x < L, \\ 2V_0 & \text{for} \quad x > L. \end{cases}$$

Brønnvidden L er valgt slik at 1. eksiterte tilstand, $\psi_2(x)$, har en energi som er akkurat lik halvparten av brønndybden $2V_0$, dvs $E_2 = V_0$.

a. Av opplysningene ovenfor skjønner en at dette systemet har minst to bundne energiegentilstander (én for hver energiegenverdi). •Angi uten bevis hvor mange nullpunkter grunntilstanden $\psi_1(x)$ og 1. eksiterte tilstand $\psi_2(x)$ har. •Hvilke kontinuitetsegenskaper har disse energiegenfunksjonene (når potensialet er endelig som her)?

I brønnområdet må energiegenfunskjonen $\psi_2(x)$ være sinusformet og kan skrives på formen

$$\psi_2(x) = A\sin[k_2(x-a)] \qquad (0 < x < L).$$

•Finn bølgetallet k_2 uttrykt ved V_0. (Husk at $E_2 = V_0$.)

b. For $x > L$ har $\psi_2(x)$ formen $C\exp(-k_2 x)$ (der k_2 ble fastlagt ovenfor). •Vis dette. •Finn tilsvarende formen av $\psi_2(x)$ for $x < 0$. •Forklar ut fra disse resultatene hvorfor nullpunktet (noden) til egenfunksjonen ψ_2 (for $x = a$) må ligge i brønnområdet (for $0 < x < L$).

c. •Finn, fra resultatene ovenfor, den "relative helningen", $(d\psi_2/dx)/\psi_2$, for $x \geq L$, og vis at den relative helningen for $x \leq 0$ har motsatt fortegn og er dobbelt så stor i tallverdi. •Bruk informasjonen som nå er kommet fram til å tegne en prinsippskisse av energiegenfunksjonen $\psi_2(x)$. •Ligger nullpunktet (punktet $x = a$) for funksjonen $\psi_2(x)$ til høyre eller til venstre for midtpunktet av brønnen ($x = L/2$)? [Hint: Begrunn svaret ut fra at helningen av en sinuskurve er størst ved nullpunktene; dette gjelder også for den "relative helningen".]

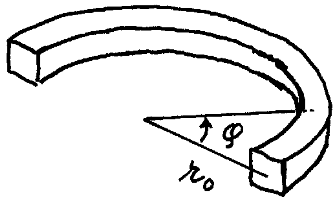
d. Fra prinsippskissen av $\psi_2(x)$ framgår det at bølgelengden $\lambda_2 = 2\pi/k_2$ er større enn brønnvidden L, samt at $\lambda_2/2$ er *mindre* enn L:

$$\lambda_2/2 < L < \lambda_2.$$

•Lag en prinsippskisse som viser hvordan en 3. eksiterte bunden tilstand $\psi_4(x)$ må se ut dersom den eksisterer, og finn tilsvarende ulikheter (som denne gangen involverer bølgelengden $\lambda_4 = 2\pi/k_4$ for tilstanden ψ_4). Fra disse ulikhetene følger det at forholdet λ_4/λ_2 er nødt til å være mindre enn et visst tall. •Finn denne øvre skranken for λ_4/λ_2, og avgjør ut fra dette om det eksisterer en bunden tilstand $\psi_4(x)$. [Hint: Tenk over hva som er kriteriet for at tilstanden ψ_4 skal være bunden.]

Oppgave 2

En partikkel med masse μ beveger seg i et bokspotensial som har form av et tynt rør som danner en halvsirkel med radius r_0. ($V = 0$ inne i røret, $V = \infty$ utenfor.)



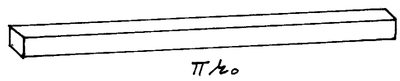
a. Se først bort fra bevegelsen på tvers av røret (transversalt). For et tynt rør beskrives bevegelsen *langs* røret (longitudinalt) med god tilnærmelse av Hamilton-operatoren

$$\hat{H}^{\rm long} = \frac{\hat{p}_\phi^2}{2\mu}, \qquad \text{der } \hat{p}_\phi = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r_0}\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

•Finn (uten å bry deg om normeringen) energiegenfunksjonene $\Phi(\phi)$ knyttet til den longitudinale bevegelsen, og vis at de longitudinale energiegenverdiene er

$$E_m^{\text{long}} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \cdot m^2, \qquad \text{der} \;\; m = 1, 2, 3, \cdots.$$

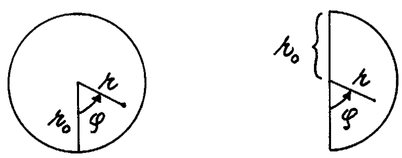
•Kontrollér at resultatet for de longitudinale energiegenverdiene blir akkurat det samme om du tenker deg røret bøyd ut til <u>rett</u> fasong (med lengde πr_0):



b. Anta at rørtverrsnittet er kvadratisk med sidekanter $L = \pi r_0/100$. •Finn de kvantiserte energibeløpene knyttet til hver av de to transversale bevegelsesretningene, og skriv ned en formel for den totale energien til energiegenfunksjonene for denne boksen, uttrykt ved r_0 og nødvendige kvantetall.

I dette røret plasserer vi nå 10 identiske spinn-$\frac{1}{2}$-partikler med masse μ. (Vi antar at det ikke virker noen krefter mellom partiklene.) Anta at dette systemet er i grunntilstanden (tilstanden der summen av én-partikkel-energiene er så lav som mulig). •Hva er da den høyeste én-partikkel-energien?

c.



Figuren viser to 2-dimensjonale bokser, den ene en sirkelflate med radius r_0, den andre halvsirkelformet med samme radius r_0. ($V = 0$ inne i boksene, $V = \infty$ utenfor.) For den sirkulære boksen (til venstre) opplyses det at en partikkel med masse μ har et energiegenfunksjonssett

$$\psi_n^{(m)}(r, \phi) = A_n^{(m)} J_{|m|} \left(\Pi_n^{|m|} r/r_0 \right) e^{im\phi}; \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots; \quad n = 1, 2, \cdots,$$

med tilhørende energiegenverdier

$$E_n^{(m)} = \frac{(\hbar \Pi_n^{|m|})^2}{2\mu r_0^2}.$$

I disse formlene er $J_{|m|}(...)$ Bessel-funksjoner, og $\Pi_n^{(|m|)}$ er nullpunktene i disse (som sørger for at $\psi = 0$ for $r = r_0$). Tabellen angir noen av nullpunktene, $\Pi_n^{(|m|)}$, for disse funksjonene, for de laveste verdiene av n og $|m|$.

J_0	J_1	J_2	J_3
$\Pi_1^{(0)} = 2.4048$	$\Pi_1^{(1)} = 3.8317$	$\Pi_1^{(2)} = 5.1356$	$\Pi_1^{(3)} = 6.3802$
$\Pi_2^{(0)} = 5.5201$	$\Pi_2^{(1)} = 7.0156$	$\Pi_2^{(2)} = 8.4172$	$\Pi_2^{(3)} = 9.7610$
$\Pi_3^{(0)} = 8.6537$	$\Pi_3^{(1)} = 10.1735$	$\Pi_3^{(2)} = 11.6198$	$\Pi_3^{(3)} = 13.0152$

Det oppgis at

$$\Pi_{n_2}^{(m)} > \Pi_{n_1}^{(m)} \quad \text{for} \quad n_2 > n_1 \qquad \text{og} \qquad \Pi_{n}^{(m_2)} > \Pi_{n}^{(m_1)} \quad \text{for} \quad m_2 > m_1.$$

•<u>For den sirkulære boksen</u> (til venstre) skal du nå angi energiene til grunntilstanden og første eksiterte energinivå, og skrive ned energiegenfunksjonene som hører til disse to nivåene.
•<u>For den halvsirkelformede boksen</u> (til høyre) skal du bruke opplysningene ovenfor til å finne energien til grunntilstanden og den tilhørende energiegenfunksjonen. [Hint: *Inne* i boksen til høyre oppfylles energiegenverdiligningen av alle løsningene for boksen til venstre. Det er bare randkravene som er forskjellige.]

<u>Oppgave 3</u>

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 $\pm\frac{1}{2}\hbar$. (Disse tilstandene kalles gjerne "spinn opp" og "spinn ned" i forhold til z-aksen.)

I denne oppgaven antar vi at et ensemble av slike spinn er preparert i en tilstand som er en lineærkombinasjon av de to Pauli-spinorene:

$$\chi = 1/\sqrt{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{i\alpha}/\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix}.$$

<u>**a.**</u> •Vis at tilstanden χ er normert. Anta at S_z måles for dette ensemblet. •Hva er sannsynlighetene for å måle henholdsvis $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$ og $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$? •Gir disse målingene informasjon om vinkelen α? •Hva skjer med tilstanden til spinnet etter målingen av S_z?

<u>**b.**</u> Forventningsverdien av spinnvektoren $\mathbf{S}$ er

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

For en normert spinntilstand $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ kan det vises at

$$\langle\, \sigma_x \,\rangle = \Re\mathrm{e}(2a^*b), \qquad \langle\, \sigma_y \,\rangle = \Im\mathrm{m}(2a^*b), \qquad \langle\, \sigma_z \,\rangle = |a|^2 - |b|^2.$$

•Bruk disse formlene til å finne spinnretningen $\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle$ for de to Pauli-spinorene χ_+ og χ_-.
•Finn også spinnretningen $\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle$ for den oppgitte spinntilstanden χ, og dermed den fysiske betydningen av vinkelen α.
•Hvordan ville du gå fram for å teste resultatet for $\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle$ for tilstanden χ eksperimentelt (det vil bl.a si å finne vinkelen α)? [Hint: Du får lov å gjenta prepareringen av tilstanden χ så mye du vil, og du står fritt til å måle hvilke som helst komponenter av $\mathbf{S}$.]

c. Etter prepareringen av tilstanden χ står vi som nevnt fritt til å måle hvilken som helst komponent $\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{S}$ av spinnet. •Hva blir forventningsverdien om vi måler komponenten i retningen $\hat{\mathbf{n}} = \langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle$, altså komponenten $\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle\cdot\mathbf{S}$, der $\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle$ er retningsvektoren funnet ovenfor?

Det opplyses at de mulige måleresultatene er $\pm\frac{1}{2}\hbar$, uansett hvilken komponent av $\mathbf{S}$ vi måler. •Argumentér for at den oppgitte tilstanden χ da må være en egentilstand til operatoren $\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle\cdot\mathbf{S}$, og angi egenverdien.

• *Utled* formlene $\langle\,\sigma_x\,\rangle = \Re\mathrm{e}(2a^*b)$ osv, som ble oppgitt i pkt. **b**.

$- - - * * * - - -$

Formler og uttrykk **(Noe av dette kan du få bruk for.)** **Vedlegg**

Usikkerhet

$$(\Delta A)^2 = \left\langle (A - \langle A \rangle)^2 \right\rangle = \left\langle A^2 \right\rangle - \langle A \rangle^2; \qquad \Delta A \cdot \Delta B \geq \tfrac{1}{2} \left| \left\langle i[\hat{A}, \hat{B}] \right\rangle \right|;$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \tfrac{1}{2}\hbar.$$

Laplace-operatoren og dreieimpulsoperatorer i kulekoordinater

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

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

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

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

Vinkelfunksjoner

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

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

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

Noen konstanter

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \qquad \text{(Bohr-radien);}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137.0360} \qquad \text{(finstrukturkonstanten);}$$

$$\tfrac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6 \text{ eV} \qquad \text{(Rydberg-energien).}$$

Noen formler

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

$$\sin(a-b) = \sin a \cos b - \cos a \sin b; \qquad \cos(a-b) = \cos a \cos b + \sin a \sin b.$$