NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

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

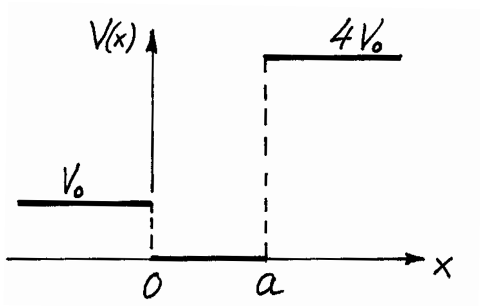
EKSAMEN I
FY2045 KVANTEFYSIKK

Fredag 27. mai 2005
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 4. januar 2005.

Oppgave 1



En partikkel med masse m befinner seg i et éndimensjonalt potensial

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for} \quad -\infty < x < 0, \qquad (V_0 > 0) \\ 0 & \text{for} \quad 0 < x < a, \qquad (a > 0) \\ 4V_0 & \text{for} \quad a < x < \infty. \end{cases}$$

a. For visse verdier av "brønn-vidden" a har dette systemet en energiegenfunksjon $\psi_E(x)$ som for $x < 0$ har formen $\psi_E(x) = C =$ konstant. Anta at a har én av disse verdiene, og vis ved hjelp av den tidsuavhengige Schrödingerligningen at energiegenverdien for tilstanden $\psi_E(x)$ er $E = V_0$. Angi hvordan denne energiegenfunksjonen vil krumme i forhold til x-aksen i områdene $0 < x < a$ og $a < x < \infty$. Den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen for området $-\infty < x < 0$, (hvor $E = V$) er egentlig $Bx + C$. Hvorfor må vi ha $B = 0$ for energiegenfunksjonen $\psi_E(x)$?

b. Vis at energiegenfunksjonen $\psi_E(x)$ må ha formen $C\cos kx$ for området $0 < x < a$. Her skal k uttrykkes ved de oppgitte størrelsene. Vis at $\psi_E(x)$ samtidig må ha formen $De^{-\kappa x}$ for $a < x < \infty$, og bestem κ uttrykt ved de oppgitte størrelsene. Alt dette er som nevnt i pkt. **a** bare mulig for visse verdier av a. Vis at disse a-verdiene må oppfylle betingelsen

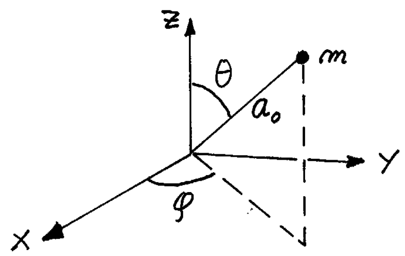
$$\tan ka = \sqrt{3}.$$

c. Bestem den minste a-verdien, a_1, som oppfyller betingelsen $\tan ka = \sqrt{3}$, og skissér kvalitativt $\psi_E(x)$ for dette tilfellet. Argumentér for at denne energiegenfunksjonen $\psi_E(x)$ beskriver en ubundet tilstand. Argumentér også for at $\psi_E(x)$ er grunntilstanden for potensialet $V(x)$ når a er lik a_1.

d. Anta så at a er 10 ganger så stor som den minste a-verdien som oppfyller betingelsen $\tan ka = \sqrt{3}$ (dvs $a = 10\,a_1$). Hvor mange bundne energiegentilstander har en da for potensialet $V(x)$? Begrunn svaret. Lag en prinsippskisse av *grunntilstanden* for dette tilfellet, og gjør et veldig grovt overslag over energien til denne tilstanden.

e. For hver energi E i intervallet $V_0 < E < 4V_0$ finnes det én energiegenfunksjon $\psi_E(x)$ for potensialet $V(x)$. Finn formen på denne funksjonen for $x > a$, og argumentér for at sannsynlighetsstrømtettheten for denne tilstanden er lik null, for alle x. Anta at partikler (med masse m og en energi E i intervallet $V_0 < E < 4V_0$) sendes inn mot dette potensialet (fra venstre). Hva er sannsynligheten for refleksjon, når vi ser bort fra muligheten for at brønnen kan "fange inn" slike partikler?

Oppgave 2



Som en modell for rotasjonsbevegelsen til et to-atomig molekyl betraktes her en **fri rotator**, hvor en partikkel med masse m og ladning e beveger seg fritt på en kuleflate med en radius som vi for enkelhets skyld setter lik Bohr-radien a_0.

a. Forklar hvorfor vi kan bruke de sfæriske harmoniske som energiegenfunksjoner for rotatoren, angi energinivåene, og angi også degenerasjonsgraden for disse nivåene.

b. Anta at et ensemble av slike rotatorer er preparert i tilstanden

$$Y_i = Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2\theta - 1).$$

Hva er pariteten til denne (begynnelses-)tilstanden Y_i?
I dipoltilnærmelsen er overgangssannsynligheten pr tidsenhet for spontan de-eksitasjon (under emisjon av et foton) fra en begynnelsestilstand $Y_i(\theta, \phi)$ til en slutt-tilstand $Y_f(\theta, \phi)$ gitt som

$$w_{fi} = \alpha\,\frac{4\omega^3}{3c^2}|\mathbf{d}_{fi}|^2,$$

hvor $\omega = (E_i - E_f)/\hbar$ og

$$\mathbf{d}_{fi} = \langle\, Y_f, \mathbf{r}\, Y_i \,\rangle \equiv \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) Y_f^*\, \mathbf{r}\, Y_i.$$

Forklar hvorfor overgangen fra $Y_i = Y_{20}$ til slutt-tilstanden $Y_f = Y_{00}$ er "forbudt" i dipoltilnærmelsen.

c. Beregn matrise-elementet $\mathbf{d}_{fi}$ for overgangen fra Y_{20} til tilstanden Y_{10}. Ved tilsvarende beregninger kan det vises at matrise-elementene $\mathbf{d}_{fi}$ for overgang fra Y_{20} til tilstandene

$$Y_{p_x} \equiv \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\sin\theta\cos\phi \qquad \text{og} \qquad Y_{p_y} \equiv \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\sin\theta\sin\phi$$

er hhvis $-a_0\hat{\mathbf{e}}_x/\sqrt{15}$ og $-a_0\hat{\mathbf{e}}_y/\sqrt{15}$. Hva blir da matrise-elementene $\langle\, Y_{1,\pm1}, \mathbf{r}\, Y_{20} \,\rangle$ for overgang fra Y_{20} til tilstandene Y_{11} og $Y_{1,-1}$? [Hint: $Y_{1,\pm1}$ er lineærkombinasjoner av Y_{p_x} og Y_{p_y}.]

d. Vis at sannsynligheten pr tidsenhet, w_i, for spontan de-eksitasjon (via fotonemisjon) av rotatoren i tilstanden $Y_i = Y_{20}$ kan skrives på formen

$$w_i = \text{tallfaktor} \cdot \alpha \cdot \omega \cdot \left(\frac{\omega a_0}{c}\right)^2,$$

og finn tallfaktoren. Størrelsen $\omega a_0/c = k a_0 = 2\pi a_0/\lambda$ er egentlig "litenhetsparameteren" som avgjør i hvilken grad dipoltilnærmelsen er gyldig. Uttrykk $\omega a_0/c$ ved forholdet m_e/m, der m_e er elektronmassen. Anta at $m = 1000\, m_e$ og finn tallverdier for $\omega a_0/c$, fotonenergien $\hbar\omega$ og overgangssannsynligheten pr tidsenhet, w_i.

Oppgave 3

Anta at en måling av E, $|\mathbf{L}|$, L_z og S_z etterlater et hydrogenatom i tilstanden

$$\psi_{211}^{\uparrow} \equiv R_{21}(r)\, Y_{11}(\theta,\phi)\, |\uparrow\rangle,$$

der $|\uparrow\rangle$ er en egentilstand til spinnoperatoren $\hat{S}_z$ med egenverdien $\frac{1}{2}\hbar$.

a. Vis at tilstanden $\psi_{211}^{\uparrow}$ også er en egentilstand til z-komponenten $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$ av operatoren ($\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$) for den totale dreieimpulsen til elektronet, med egenverdien $\frac{3}{2}\,\hbar$.

b. Bruk relasjonene

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z + \hat{J}_-\hat{J}_+, \qquad \hat{L}_+\, Y_{11} = 0, \qquad \hat{S}_+|\uparrow\rangle = 0$$

til å vise at tilstanden $\psi_{211}^{\uparrow}$ også er en egentilstand til operatoren $\hat{\mathbf{J}}^2$ med egenverdi $\hbar^2\frac{3}{2}(\frac{3}{2}+1)$, dvs en tilstand av typen $R_{21}(r)|j=\frac{3}{2}, m=\frac{3}{2}\rangle$.

c. Ved hjelp av den generelle stigeoperator-relasjonen

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

kan en vise at

$$|j=\tfrac{3}{2}, m=\tfrac{1}{2}\rangle = \left(\sqrt{2/3}\,Y_{10}\,|\uparrow\rangle + \sqrt{1/3}\,Y_{11}\,|\downarrow\rangle\right)$$

er en egentilstand til $\hat{\mathbf{J}}^2$ og $\hat{J}_z$ med egenverdier $\hbar^2\frac{3}{2}(\frac{3}{2}+1)$ og $\frac{1}{2}\hbar$. Anta at H-atomet er preparert i tilstanden

$$\psi = R_{21}(r)\left(\sqrt{2/3}\,Y_{10}\,|\uparrow\rangle + \sqrt{1/3}\,Y_{11}\,|\downarrow\rangle\right)$$

ved en måling av E, $|\mathbf{J}|$ og J_z. Hva er sannsynligheten for å måle spinn opp ($S_z = \frac{1}{2}\hbar$) i denne tilstanden, og hva blir atomets tilstand etter en måling med dette resultatet?

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Sannsynlighets-strømtetthet

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \Re\text{e}\left[\Psi^*(\mathbf{r},t)\frac{\hbar}{im}\boldsymbol{\nabla}\Psi(\mathbf{r},t)\right], \qquad \frac{\partial\rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j} = 0.$$

Laplace-operatoren og dreieimpulsoperatorer i kulekoordinater

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

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

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_i] = 0 \;\; (i = x, y, z), \qquad [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad \text{etc.}$$

Sfæriske harmoniske

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

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

Utvikling i ortonormert egenfunksjonssett

$$\psi = \sum_n c_n\psi_n, \qquad \langle\,\psi_k,\psi_n\,\rangle = \delta_{nk}, \qquad c_n = \langle\,\psi_n,\psi\,\rangle\,.$$

Noen fysiske konstanter

$$\frac{\hbar}{m_e c} = \alpha a_0; \quad a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529\times10^{-10}\text{m}; \quad \alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137.036}; \qquad \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6\text{ eV};$$

$$c = 2.998\times10^8\text{m/s}; \qquad \hbar = 0.6582\times10^{-15}\text{eVs}; \qquad m_e = 0.5110\text{ MeV/c}^2.$$