NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

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

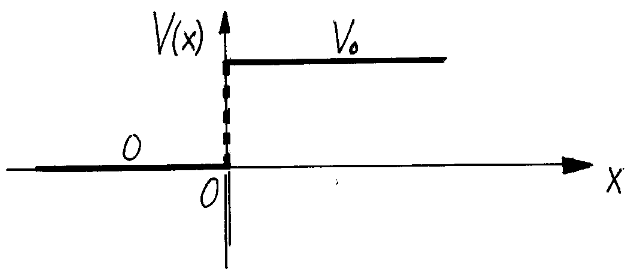
EKSAMEN I
FY2045/TFY4250 KVANTEMEKANIKK I

Mandag 8. august 2011
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 uke 35.

Oppgave 1



En partikkel med masse m beveger seg i et endimensjonalt potensial som er en overlagring av en deltafunksjonsbrønn og et potensialsprang:

$$V(x) = -\beta\,\delta(x) + V_0\,\Theta(x)\;; \qquad \beta > 0, \;\; V_0 > 0.$$

Her er

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x < 0 \\ 1 & \text{for} \quad x \geq 0 \end{cases}$$

sprangfunksjonen. I denne oppgaven skal vi studere energiegenfunksjoner for dette systemet.

a. Innledningsvis får du tre små oppdrag: ♠*Finn* hvilken form en egenfunksjon med energi $E < V_0$ må ha i området $x > 0$. ♠*Vis* deretter at en egenfunksjon med energi $E > 0$ beskriver en ubunden tilstand. ♠*Angi* hvor stor sannsynligheten er for at partikler som kommer inn fra venstre med $0 < E < V_0$ blir reflektert.

b. ♠Skriv ned skjøtebetingelsene (for $x = 0$) som alle energiegenfunksjoner for dette systemet må oppfylle, ved hjelp av diskontinuitetsbetingelsen oppgitt på formelarket. Som anført i pkt. **a** er egentilstander med $E > 0$ ubundne. ♠Hvorfor må eventuelle *bundne* egentilstander i dette potensialet ha $E < 0$? [Hint: Finn ut hvilken form en egentilstand med $E = 0$ må ha for $x < 0$, om den eksisterer.] ♠Hva blir formen for $x < 0$ for en eventuell egentilstand med $E < 0$?

c. Vi setter nå

$$V_0 = v_0 \,\mathrm{Ry} = v_0 \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \qquad \text{og} \qquad \frac{\beta}{a_0} = b \,\mathrm{Ry} = b \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2},$$

der tallfaktorene $v_0 \geq 0$ og $b > 0$ er dimensjonsløse. I tillegg innfører vi en dimensjonsløs energivariabel ϵ ved å sette

$$E = \epsilon \,\mathrm{Ry} = \epsilon \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}.$$

Vi antar dessuten at partikkelen med masse m er et elektron ($m = m_e$). For en bunden tilstand ($\epsilon < 0$) må ϵ da oppfylle betingelsen

$$\sqrt{v_0 - \epsilon} + \sqrt{-\epsilon} = \sqrt{v_0 + |\epsilon|} + \sqrt{|\epsilon|} = b \qquad (v_0 \geq 0, \;\; b > 0)\,.$$

♠Utled denne betingelsen.
♠Hvor mange bundne tilstander eksisterer det ifølge denne betingelsen (for en gitt $b > 0$) i grensen $v_0 \to 0$ (dvs når potensialet forenkler seg til en enkel δ-brønn), og hva er eventuelt ϵ-verdiene (energiene i Rydberg-enheter) til disse bundne tilstandene?
♠Hvor stor må b minst være for at det skal eksistere en bunden tilstand når $v_0 > 0$, og hvor mange bundne tilstander har vi når b oppfyller dette kravet? [Hint: Ligningen ovenfor kan løses grafisk.]

d. Anta nå at $E > V_0$, dvs $\epsilon > v_0$. Spredningsprosessen der elektroner som kommer inn fra venstre med energien $E = \epsilon\, \hbar^2/(2m_e a_0^2)$ og enten blir reflektert eller transmittert, kan beskrives ved hjelp av en egenfunksjon på formen

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & \text{for} \quad x < 0, \\ t e^{ik_1 x} & \text{for} \quad x > 0, \end{cases}$$

der r og t er komplekse koeffisienter. Det kan vises at

$$r = \frac{\sqrt{\epsilon} - \sqrt{\epsilon - v_0} + ib}{\sqrt{\epsilon} + \sqrt{\epsilon - v_0} - ib}\;; \qquad (\epsilon \geq v_0 \geq 0, \;\; b \text{ vilkårlig}),$$

og at sannsynligheten for at elektronet blir reflektert er $R = |r|^2$. ♠Finn R i grensen der E nærmer seg V_0 ovenfra. Finn også ut hvilke krav ϵ må oppfylle for at refleksjonssannsynligheten R skal være mye mindre enn 1 for spesialtilfellene

♠ (i) $v_0 = 0$ (og $b \neq 0$, enkelt delta-potensial),
♠ (ii) $b \to 0$ (og $v_0 > 0$; enkelt potensialsprang).

Oppgave 2

En spinn-$\frac{1}{2}$-partikkel befinner seg i utgangspunktet i et konstant og homogent magnetfelt $\mathbf{B} = B_0\hat{\mathbf{n}}$, der $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{x}}\sin\theta + \hat{\mathbf{z}}\cos\theta$, med $0 < \theta < \pi$. Når vi ser bort fra andre frihetsgrader, kan Hamilton-operatoren for dette systemet skrives på formen

$$\widehat{H} = \omega\,\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{n}},$$

der vi antar at ω er positiv.

a. ♠Angi de mulige egenverdiene til $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$. Ved $t = 0$ foretas det en energimåling som etterlater spinnet i tilstanden

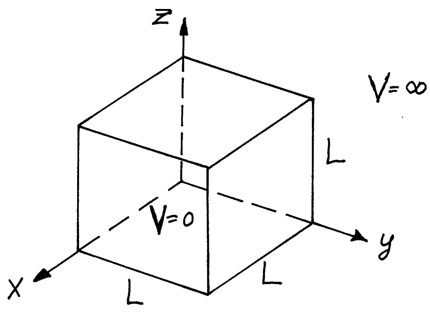
$$\chi(0) = \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}.$$

♠Finn den målte energiverdien. ♠Hva er spinnretningen ($\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle_0$) umiddelbart etter målingen? ♠Hva er $\chi(t)$ og spinnretningen $\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle_t$ i tiden etter denne målingen (og fram til systemet eventuelt forstyrres på nytt)?

b. Ved tiden $t_1 = 4\pi/\omega$ er $\chi(t_1) = \chi(0)$. Ved dette tidspunktet endres **B**-feltets retning plutselig, slik at feltet ved $t = t_1^+$ er $\mathbf{B} = B_0\hat{\mathbf{z}}$, og slik at den nye Hamilton-operatoren blir $\widehat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega\,\sigma_z$. Endringen skjer så raskt at vi kan sette $\chi(t_1^+) = \chi(0)$. ♠Finn forventningsverdiene $\langle\,E\,\rangle$ og $\langle\,E^2\,\rangle$ og usikkerheten ΔE for $t = t_1^+$. ♠Hvorfor er disse størrelsene tidsuavhengige (helt til systemet eventuelt forstyrres på nytt)?

c. ♠Finn forventningsverdien $\langle\,\mathbf{S}\,\rangle_t$ som funksjon av tiden for $t > t_1$.

Oppgave 3



Figuren viser et kubisk bokspotensial som inneholder et elektron i grunntilstanden. Ved $t = 0$ utsettes dette systemet for et elektrisk felt i form av en deltafunksjonspuls. Denne svarer til et perturberende ledd $V(t) = -zp_0\delta(t)$, en perturberende kraft $\mathbf{F}(t) = \hat{\mathbf{z}}\,p_0\,\delta(t)$ og en impulsoverføring p_0 i z-retningen. Denne problemstillingen skal angripes ved hjelp av første-ordens tidsavhengig perturbasjonsteori. Som (normerte) energiegentilstander for det uperturberte systemet kan vi bruke

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z), \quad \text{med} \quad \psi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(n_x\pi x/L), \quad n_x = 1, 2, \cdots, \text{ osv.}$$

For $t > 0$ (etter at perturbasjonen er overstått) kan bølgefunksjonen i prinsippet skrives på formen

$$\Psi = \sum_{n_x n_y n_z} a_{n_x n_y n_z} \, \psi_{n_x n_y n_z} \, \exp(-iE_{n_x n_y n_z} t/\hbar),$$

der amplitudene $a_{n_x n_y n_z}$ er tidsuavhengige. Det oppgis at

$$I_{k,n} \equiv \int_0^L \psi_k^*(z)\, z\, \psi_n(z) dz = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad k-n = 0, \pm 2, \pm 4, \cdots \\ -\dfrac{8knL}{\pi^2(k^2-n^2)^2} & \text{for} \quad k-n = \pm 1, \pm 3, \cdots . \end{cases}$$

<u>a.</u> ♠Finn først matrise-elementene $V_{fi}(t)$ [av perturbasjonen $V(t)$] som inngår i amplitudene for overganger fra grunntilstanden $\psi_i = \psi_{111}$ til tilstandene $\psi_f = \psi_{11n_z}$, med $n_z \geq 2$, uttrykt ved integralene $I_{n_z,1}$ (se ovenfor). ♠Beregn så disse overgangsamplitudene ($a_{111 \to 11n_z}$) og de tilsvarende sannsynlighetene, uttrykt ved p_0 og L.

<u>b.</u> ♠Hvorfor er alle amplitudene $a_{111 \to n_x n_y n_z}$ med $n_x \geq 2$ og/eller $n_y \geq 2$ lik null? ♠Hva er betingelsen for at første-ordens-resultatene funnet hittil skal være en god tilnærmelse?

<u>c.</u> Anta nå at elektronet i boksen er eksitert til tilstanden ψ_{222} (ved hjelp av en passende perturbasjon), og at de-eksitasjonen skjer via spontan emisjon av fotoner. (Vi antar at denne prosessen ikke påvirkes av veggene i boksen.) Den spontane overgangsraten (sannsynligheten pr tidsenhet) kan da i dipoltilnærmelsen beregnes ved hjelp av formelen

$$w_{i \to f} = \alpha \, \frac{4\omega_{if}^3}{3c^2} \, |\mathbf{d}_{fi}|^2,$$

der

$$\mathbf{d}_{fi} \equiv \int \psi_f^* \, \mathbf{r} \, \psi_i \, d^3r \equiv \hat{\mathbf{e}}_x d_x + \hat{\mathbf{e}}_y d_y + \hat{\mathbf{e}}_z d_z \qquad \text{og} \qquad \omega_{if} = \frac{E_i - E_f}{\hbar}.$$

♠Beregn x-komponenten d_x av dipolmomentet $\mathbf{d}_{fi}$ for overgangen fra $\psi_i = \psi_{222}$ til $\psi_f = \psi_{n_x n_y n_z}$, uttrykt ved integralet $I_{n_x,2}$. ♠Finn ut hvilke spontane overganger som bidrar til den samlede overgangsraten w_{222} for tilstanden ψ_{222}. ♠Finn et uttrykk for w_{222} og avgjør hvordan denne skalerer som funksjon av L.

<u>d.</u> ♠Anta at $L = 4\, a_0$, og finn tallverdier for (i) dipolmomentet d_x, (ii) energien til det emitterte fotonet, (iii) Bohr-frekvensen ω_{if} og (iv) overgangsraten w_{222}. ♠Avgjør om dipoltilnærmelsen er en god tilnærmelse for dette tilfellet.

Oppgitt:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \; ; \quad \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = 13.6 \text{ eV} \; ; \quad \hbar = 0.6582 \cdot 10^{-15} \text{ eVs} \; ;$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.036} \; ; \quad c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}.$$

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Diskontinuitetsbetingelse, med potensial $V(x) = \alpha\delta(x-a)$

$$\psi'(a^+) - \psi'(a^-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\,\psi(a).$$

Endimensjonal boks, $V(x) = 0$ **for** $0 < x < L$, **uendelig utenfor**

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin k_n x; \qquad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}; \quad k_n = n\pi/L; \qquad \langle\,\psi_k, \psi_n\,\rangle = \delta_{kn}.$$

Sannsynlighets-strømtetthet

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

Binomialutviklingen

$$(1+\delta)^a = 1 + \frac{a}{1}\,\delta + \frac{a(a-1)}{1\cdot 2}\,\delta^2 + \cdots; \quad |\delta| < 1.$$

Målepostulatet

(i) De eneste mulige verdiene som en måling av observabelen F kan gi er <u>en av egenverdiene f_n</u>.

(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

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

Noen formler

$$\sin(a+b) = \sin a\,\cos b + \cos a\,\sin b; \qquad \sin 2a = 2\sin a\,\cos a;$$

$$\cos(a+b) = \cos a\,\cos b - \sin a\,\sin b; \qquad \cos(2a) = \cos^2 a - \sin^2 a = 2\cos^2 a - 1 = 1 - 2\sin^2 a.$$

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

$$\tan y = \frac{1}{\cot y} = \tan(y + n\pi), \quad n = 0, \pm 1, \cdots;$$

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

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

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

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

Det eksakte ligningssettet for utviklingskoeffisientene er

$$i\hbar\,\frac{da_k}{dt} = \sum_n e^{i\omega_{kn}t}V_{kn}(t)a_n(t); \qquad \omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar;$$

$$V_{kn}(t) = \langle \psi_k | \widehat{V}(t) | \psi_n \rangle = \int \psi_k^*\,\widehat{V}(t)\psi_n\,d\tau.$$

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

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

Til første orden i perturbasjonen er da amplituden $a_f \equiv a_{i\to f}$ gitt ved

$$a_{i\to f} = \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{fi}t'}V_{fi}(t')dt'.$$