NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

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

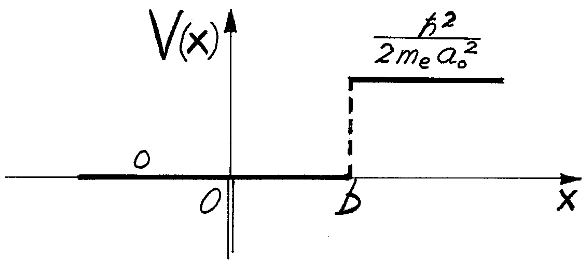
EKSAMEN I
FY2045 KVANTEMEKANIKK I/
TFY4250 KVANTEMEKANIKK I

Torsdag 20. desember 2012
kl. 15.00 - 19.00

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 januar 2012.

Oppgave 1



Et elektron (med masse m_e) beveger seg i et endimensjonalt potensial som består av en deltafunksjonsbrønn og et potensialsprang:

$$V(x) = \begin{cases} -\dfrac{g\hbar^2}{m_e a_0}\delta(x) & \text{for} \quad -\infty < x < b, \qquad (b > 0,\ g > 0) \\[2ex] \dfrac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \equiv V_0 & \text{for} \quad b < x < \infty. \end{cases}$$

Anta at $\psi_E(x)$ er en energiegenfunksjon med energi E for dette systemet. ♠Bruk den tidsuavhengige Schrödingerligningen til å finne ut hvordan ψ_E må oppføre seg for negative x dersom (i) $E > 0$, (ii) $E = 0$. ♠(iii) Finn også formen til ψ_E for negative x dersom $E < 0$, og forklar ut fra drøftingen av disse tre tilfellene hvorfor en *bunden* tilstand må ha $E < 0$. [Hint: En bunden tilstand skal være kvadratisk integrerbar.] ♠Finn også formen til en eventuell bunden tilstand ψ_E for $x > b$.

<u>**b.**</u> Forutsetningen for at dette systemet *har* en bunden tilstand $\psi(x)$ er at faktoren g (som bestemmer "styrken" av delta-brønnen) er større enn en viss grenseverdi g_0. Anta nå at betingelsen $g > g_0$ er oppfylt, og at vi velger $\psi(x)$ reell og "normert" slik at $\psi = 1$ i origo.

Oppførselen til $\psi(x)$ for $x < 0$ og for $x > b$ er funnet ovenfor. ♠Angi hvordan ψ krummer, både i disse områdene og ellers.

For $0 < x < b$ kan den generelle løsningen av den tidsuavhengige Schrödingerligningen skrives på formen

$$\psi = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x},$$

der A og B er reelle konstanter. <u>Isolert sett</u> kan dette uttrykket ha et nullpunkt i intervallet $0 < x < b$. ♠Forklar hvorfor egenfunksjonen ψ likevel ikke kan ha noe nullpunkt. [Hint: Prøv å skissere en løsning med et nullpunkt for $0 < x < b$, og forklar hva som blir galt med denne "løsningen".]

♠Lag så en prinsippskisse som viser hvordan egenfunksjonen ψ for den bundne tilstanden (uten nullpunkter) *må* se ut, og forklar hvorfor denne egenfunksjonen er unik, slik at vi har bare én slik bunden tilstand (for en gitt $g > g_0$). [Hint: Hvor mange ukjente har vi i denne problemstillingen?]

<u>**c.**</u> I grensetilfellet $g = g_0$ har dette systemet en (ubunden) energiegentilstand med energien $E = 0$. ♠Forklar hvilken form denne energiegenfunksjonen har i de tre områdene $x < 0$, $0 < x < b$ og $x > b$, og lag en skisse av den. ♠Bruk de nødvendige betingelsene til å bestemme g_0. ♠Er resultatet fornuftig i grensen $b \to \infty$?

<u>Oppgave 2</u>

En spinn-$\frac{1}{2}$-partikkel med masse m, ladning q og magnetisk moment $\boldsymbol{\mu} = g(q/2m)\mathbf{S}$ befinner seg (i utgangspunktet) i et konstant og homogent magnetfelt $\mathbf{B}_0 = B_0\hat{\mathbf{z}}$ rettet i z-retningen. Når vi ser bort fra andre frihetsgrader, kan Hamilton-operatoren for dette (uperturberte) systemet skrives på formen

$$\widehat{H}_0 = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}_0 \equiv \boldsymbol{\omega}_0\cdot\mathbf{S} = \omega_0 S_z, \quad \text{der} \quad \boldsymbol{\omega}_0 = -qB_0\,\frac{g}{2m}\,\hat{\mathbf{z}} \equiv \omega_0\hat{\mathbf{z}}.$$

Her antar vi at ω_0 er positiv, slik at vektoren $\boldsymbol{\omega}_0$ peker i positiv z-retning. Dette systemet velger vi å perturbere med et tidsavhengig magnetfelt

$$\mathbf{B}_1 = \epsilon B_0(\hat{\mathbf{x}}\cos\omega_0 t + \hat{\mathbf{y}}\sin\omega_0 t)$$

som ligger i xy-planet og roterer med samme vinkelfrekvens ω_0 som inngår i $\widehat{H}_0$. Dette magnetfeltet svarer til et perturberende ledd

$$\widehat{V}(t) = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B_1} = \epsilon\,\omega_0(\hat{\mathbf{x}}\cos\omega_0 t + \hat{\mathbf{y}}\sin\omega_0 t)\cdot\mathbf{S} \equiv \boldsymbol{\omega}_1\cdot\mathbf{S} \qquad (\omega_1 = \epsilon\omega_0),$$

og en total Hamilton-operator

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t) = (\boldsymbol{\omega}_0 + \boldsymbol{\omega}_1)\cdot\mathbf{S} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \tfrac{1}{2}\hbar\omega_1\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega_0 t} \\ e^{i\omega_0 t} & 0 \end{pmatrix}.$$

a. ♠Finn energiegenverdiene ($E_\pm$) for det uperturberte systemet (dvs for $\epsilon = 0$) uttrykt ved ω_0, og vis at de tilhørende stasjonære tilstandene kan skrives på formen

$$\chi_\pm^{(0)}(t) = \chi_\pm \, e^{\mp i\omega_0 t/2}, \qquad \text{der} \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Siden tilstandene $\chi_\pm^{(0)}(t)$ danner en basis, kan tilstanden for spinn-systemet generelt utvikles i disse:

$$\chi(t) = a_+(t)\chi_+^{(0)}(t) + a_-(t)\chi_-^{(0)}(t).$$

♠Hva er den fysiske tolkningen av koeffisientene $a_+(t)$ og $a_-(t)$?

Ved innsetting i Schrödingerligningen $i\hbar\frac{d}{dt}\,\chi(t) = \widehat{H}\,\chi(t)$ finner en at utviklingskoeffisientene oppfyller det koblede ligningssettet

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} \qquad (\omega_1 = \epsilon\omega_0).$$

♠Hva sier dette ligningssettet om tidsavhengigheten til koeffisientene $a_+(t)$ og $a_-(t)$ når det perturberende magnetfeltet er lik null (dvs når $\epsilon = 0$)?

b. Anta at $\epsilon > 0$, slik at det perturberende feltet er forskjellig fra null. ♠Bruk ligningssettet ovenfor til å vise at

$$a_+(t) = -i\sin\tfrac{1}{2}\omega_1 t \qquad \text{og} \qquad a_-(t) = \cos\tfrac{1}{2}\omega_1 t,$$

når det oppgis at spinnet ved $t = 0$ var i grunntilstanden; $\chi(0) = \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

c. ♠Skriv den resulterende spinntilstanden $\chi(t) = a_+(t)\chi_+^{(0)}(t) + a_-(t)\chi_-^{(0)}(t)$ på formen

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix},$$

og finn komponentene $\langle\, \sigma_x \,\rangle$, $\langle\, \sigma_y \,\rangle$ og $\langle\, \sigma_z \,\rangle$ av spinnretningen $\langle\, \boldsymbol{\sigma} \,\rangle$ som funksjoner av t, ved hjelp av formelarket.

Fra disse resultatene følger det at komponenten av $\langle\, \boldsymbol{\sigma} \,\rangle$ vinkelrett på z-aksen kan skrives på formen

$$\langle\, \boldsymbol{\sigma}_\perp \,\rangle = \sin\omega_1 t\,[\hat{\mathbf{x}}\cos(\omega_0 t + \pi/2) + \hat{\mathbf{y}}\sin(\omega_0 t + \pi/2)].$$

Denne roterer som du ser med samme vinkelfrekvens som det perturberende $\mathbf{B}$-feltet, men 90 grader foran dette hele tiden mens t øker fra 0 til π/ω_1. Sammen med formelen $d\,\langle\, \boldsymbol{\sigma} \,\rangle/dt = (\boldsymbol{\omega}_0 + \boldsymbol{\omega}_1) \times \langle\, \boldsymbol{\sigma} \,\rangle$ (som kan utledes fra dreieimpulsalgebraen), forklarer dette hvorfor $\langle\, \sigma_z \,\rangle$ øker hele tiden mens $\sin\omega_1 t > 0$, dvs helt til $\langle\, \sigma_z \,\rangle$ blir lik 1. Anta nå at $\epsilon \ll 1$, slik at $\omega_1 \ll \omega_0$. ♠Beskriv kvalitativt hva som da vil skje med $\langle\, \sigma_z \,\rangle$ dersom vi lar det perturberende feltet rotere med en vinkelfrekvens ω som ligger langt unna resonansfrekvensen ω_0?

d. ♠Anta igjen at det perturberende feltet $\mathbf{B}_1$ roterer med vinkelfrekvensen ω_0, og beregn overgangsamplituden $a_+(t)$ ved tiden t ved hjelp av 1.-ordens tidsavhengig perturbasjonsteori. ♠Sammenlign 1.-ordens-resultatet for $a_+(t)$ med det eksakte resultatet oppgitt i pkt. **b**, og finn på den måten hva som i dette tilfellet kreves for at 1.-ordens perturbasjonsteori skal gi en god tilnærmelse.

Oppgave 3

En partikkel med masse m beveger seg i det tredimensjonale oscillatorpotensialet $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$. Som energiegentilstander for dette systemet kan vi bruke enten (i) produkttilstander av den "kartesiske" typen,

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \equiv (n_x n_y n_z), \qquad E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2),$$

der $\psi_{n_x}(x)$ osv er ordinære endimensjonale oscillatorløsninger (se formel-arket), eller (ii) "dreieimpulstilstander" av typen $\psi_{Nlm} = R_{Nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ (der hver slik tilstand er en lineærkombinasjon av "kartesiske" tilstander med $n_x + n_y + n_z = N$).

a. Anta at oscillatoren ved $t = 0$ er preparert i følgende lineærkombinasjon av "kartesiske" tilstander,

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{6}}[(200) + (020) + (002)] + \frac{1}{\sqrt{2}}(000).$$

♠Vis at denne er normert.

Anta at vi straks etter prepareringen (dvs ved $t = 0^+$) måler energien E. ♠Hva er sannsynligheten for at målingen gir (i) resultatet $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ og etterlater systemet i grunntilstanden $\psi_{000} \equiv (000)$, (ii) resultatet $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$? ♠Hva blir (den normerte) tilstanden umiddelbart etter en måling med resultatet $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$?

♠Vis ved hjelp av formelarket at tilstanden $[(200) + (020) + (002)]/\sqrt{3}$ er vinkeluavhengig, dvs avhenger bare av r, og derfor er en tilstand av typen ψ_{Nlm}, der N, l og m skal angis.

b. Anta nå at oscillatoren er i tilstanden $\psi_{N=2,l=m=0} = R_{N=2,l=0}Y_{00}$ ved $t = 0$. Vi vil studere strålingsoverganger fra denne tilstanden via absorpsjon og spontan og stimulert emisjon. Om vi bruker "dreieimpulsegentilstander" ψ_{Nlm} som basis, ser nivåskjemaet for denne oscillatoren slik ut (for $N \leq 4$):

I dipoltilnærmelsen er overgangsratene for absorpsjon og stimulert emisjon proporsjonale med $|\mathbf{e}_k\cdot\mathbf{d}_{fi}|^2$, der $\mathbf{e}_k$ er polarisasjonsvektoren for strålingen og vektoren

$$\mathbf{d}_{fi} = \int \psi_f^* \, \mathbf{r} \, \psi_i d^3r$$

er dipolmomentet for overgangen. Overgangsraten for spontan emisjon er proporsjonal med $|\mathbf{d}_{fi}|^2$.

♠Vis direkte (ut fra integralet over) at overganger fra $\psi_{N=2,l=m=0}$ i dipoltilnærmelsen bare skjer til p-tilstander ($\psi_{N'l'm'}$ med $l'=1$), i tråd med utvalgsregelen $\Delta l = \pm 1$. Hint: Bruk at

$$\mathbf{r} = r\sqrt{4\pi/3}\left[\hat{\mathbf{e}}_z\, Y_{10} - \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}}\, Y_{11} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}}\, Y_{1-1}\right],$$

og se på vinkeldelen av integralet over.

♠Vis at de tillatte overgangene i dipoltilnærmelsen for dette systemet generelt begrenser seg til $\Delta N = \pm 1$. Hint: I dipolmomentet

$$\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle$$

er ket-vektoren $|\psi_i\rangle$ en superposisjon av "kartesiske" tilstander som alle har $n_x + n_y + n_z = N$. Betrakt

$$\hat{\mathbf{r}}|\psi_i\rangle = (\hat{\mathbf{e}}_x\hat{x} + \hat{\mathbf{e}}_y\hat{y} + \hat{\mathbf{e}}_x\hat{z})|\psi_i\rangle,$$

og undersøk hvordan operatorene

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a_x + a_x^\dagger) \quad \text{etc}$$

virker på $|\psi_i\rangle$. Husk at $a_x|n_x\rangle = \sqrt{n_x}\,|n_x - 1\rangle$ og $a_x^\dagger|n_x\rangle = \sqrt{n_x+1}\,|n_x+1\rangle$.

c. Fra resultatene ovenfor følger det at *spontane* overganger fra tilstanden $\psi_{N=2,l=m=0}$ i dipoltilnærmelsen bare skjer til tilstander med $N = 1$. For de sistnevnte kan vi like godt velge å bruke de "kartesiske". Raten (sannsynligheten pr tidsenhet) for spontan overgang fra tilstanden $\psi_{N=2,l=m=0}$ til den "kartesiske" tilstanden $\psi_{100} \equiv (100)$ er i dipoltilnærmelsen gitt ved formelen

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

♠Hva er Bohr-frekvensen ω_{if} for denne overgangen? ♠Forklar ut fra symmetriegenskapene til de aktuelle tilstandene hvorfor dipolmoment-vektoren $\mathbf{d}_{fi}$ for denne overgangen ikke kan ha komponenter i y- og z-retningene. ♠Forklar også hvorfor *lengden* av $\mathbf{d}_{fi}$ må være av størrelsesorden $\sqrt{\hbar/m\omega}$. ♠Forklar dessuten hvorfor $|\mathbf{d}_{fi}|$ er like stor for alle de tre slutt-tilstandene (100), (010) og (001).

d. Det opplyses at $|\mathbf{d}_{fi}| = \sqrt{\hbar/(3m\omega)}$ for hver av de tre nevnte overgangene. ♠Anta at $m = m_e$ og $\omega = 10^{16}\,\mathrm{s}^{-1}$, og finn (i dipoltilnærmelsen) tallverdier for den totale raten for spontan overgang fra tilstanden $\psi_{N=2,l=m=0}$ og den tilsvarende levetiden τ. ♠Avgjør om dipoltilnærmelsen er en god tilnærmelse i dette tilfellet.

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

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

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

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

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

Harmonisk oscillator

Energiegenfunksjonene for potensialet $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ $(-\infty < x < \infty)$ oppfyller egenverdiligningen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2 - (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\right]\psi_n(x) = 0, \qquad n = 0, 1, 2, ...,$$

med normerte løsninger på formen

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\,e^{-m\omega x^2/2\hbar}H_n(\xi), \qquad \xi = \frac{x}{\sqrt{\hbar/m\omega}}\;;$$

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad \cdots.$$

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

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

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

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

Sfæriske harmoniske

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

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

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2\theta - 1), \qquad Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}, \qquad Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}.$$

Noen fysiske konstanter

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

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

$$\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6\ \text{eV}.$$

Tidsutvikling av forventningsverdier

$$\frac{d}{dt}\langle\, F\,\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\, [\widehat{H}, \widehat{F}]\,\right\rangle + \left\langle\, \frac{\partial}{\partial t}\widehat{F}\,\right\rangle.$$

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

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

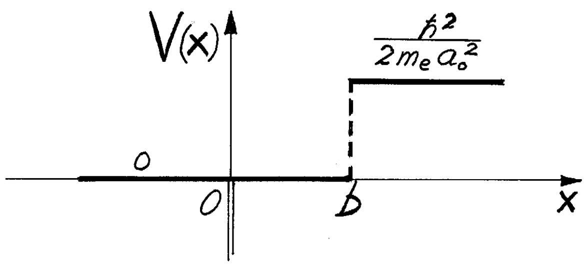
EKSAMEN I
FY2045/TFY4250 KVANTEMEKANIKK I

Torsdag 20. desember 2012
kl. 15.00 - 19.00

Tillatte hjelpemidler: Godkjent kalkulator
Rottmann: Matematisk formelsamling
Øgrim & Lian: Størrelser og enheter i fysikk og teknikk, eller
Lian og Angell: Fysiske størrelser og enheter

The questions are given in English on pages 1–5. The Norwegian version is also attached.
A sheet with expressions and formulae is attached Sensuren faller i januar 2013.

Problem 1



An electron (of mass m_e) is moving in a one-dimensional potential consisting of a delta-function well and a potential step:

$$V(x) = \begin{cases} -\dfrac{g\hbar^2}{m_e a_0}\delta(x) & \text{for} \quad -\infty < x < b, \qquad (b > 0,\ g > 0) \\[2ex] \dfrac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \equiv V_0 & \text{for} \quad b < x < \infty. \end{cases}$$

Suppose that $\psi_E(x)$ is an energy eigenfunction with energy E for this system. ♠Use the time-independent Schrödinger equation to find out how ψ_E must behave for negative x for (i) $E > 0$, (ii) $E = 0$. ♠(iii) Find the form of ψ_E for negative x also for $E < 0$ and, based on the discussion of these three cases, explain why a *bound* state must have $E < 0$. [Hint: A bound state must be quadratically integrable.] ♠Find also the form of a possible bound state ψ_E for $x > b$.

b. The condition for this system to *have* a bound state $\psi(x)$ is that the factor g (which determines the "strength" of the delta well) is larger than a certain limiting value g_0. Assume now that the condition $g > g_0$ is satisfied, and that we choose $\psi(x)$ to be real and "normalized" in such a way that $\psi = 1$ at the origin.

The behaviour of $\psi(x)$ for $x < 0$ and for $x > b$ was found above. ♠State how ψ curves, both in these regions and elsewhere.

For $0 < x < b$ the general solution of the time-independent Schrödinger equation can be written on the form

$$\psi = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x},$$

where A and B are real constants. From an "isolated point of view, this expression can have a zero in the interval $0 < x < b$. ♠Explain why the eigenfunction ψ still can not have a zero. [Hint: Try to sketch a solution with a zero for $0 < x < b$, and explain what goes wrong with this "solution".]

♠Then make a sketch which shows how the eigenfunction ψ of the bound state (without zeros) *must* look, and explain why this eigenfunction is unique, so that we have only one such bound state (for a given $g > g_0$). [Hint: How many unknown quantities do we have in this problem?]

c. In the limiting case $g = g_0$, this system has an (unbound) energy eigenstate with the energy $E = 0$. ♠Explain which forms this eigenfunction has in the three regions $x < 0$, $0 < x < b$ og $x > b$, and make a sketch of it. ♠Use the necessary conditions to determine g_0. ♠Is the result reasonable in the limit $b \to \infty$?

Problem 2

A spin-$\frac{1}{2}$ particle of mass m, charge q and magnetic moment $\boldsymbol{\mu} = g(q/2m)\mathbf{S}$ is (from the outset) in a constant and homogeneous magnetic field $\mathbf{B}_0 = B_0\hat{\mathbf{z}}$ pointing in the z-direction. When other degrees of freedom are neglected, the Hamiltonian of this (unperturbed) system can be written as

$$\widehat{H}_0 = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}_0 \equiv \boldsymbol{\omega}_0\cdot\mathbf{S} = \omega_0 S_z, \quad \text{where} \quad \boldsymbol{\omega}_0 = -qB_0\,\frac{g}{2m}\,\hat{\mathbf{z}} \equiv \omega_0\hat{\mathbf{z}}.$$

Here we assume that ω_0 is positive, so that the vector $\boldsymbol{\omega}_0$ points in the positive z-direction. We choose to perturb this system with a time-dependent magnetic field

$$\mathbf{B}_1 = \epsilon B_0(\hat{\mathbf{x}}\cos\omega_0 t + \hat{\mathbf{y}}\sin\omega_0 t)$$

which lies in the xy-plane and rotates with the same angular frequency ω_0 that occurs in $\widehat{H}_0$. This magnetic field corresponds to a perturbing term

$$\widehat{V}(t) = -\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B_1} = \epsilon\omega_0(\hat{\mathbf{x}}\cos\omega_0 t + \hat{\mathbf{y}}\sin\omega_0 t)\cdot\mathbf{S} \equiv \boldsymbol{\omega}_1\cdot\mathbf{S} \qquad (\omega_1 = \epsilon\omega_0),$$

and a total Hamiltonian

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t) = (\boldsymbol{\omega}_0 + \boldsymbol{\omega}_1)\cdot\mathbf{S} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \tfrac{1}{2}\hbar\omega_1\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega_0 t} \\ e^{i\omega_0 t} & 0 \end{pmatrix}.$$

a. ♠Find the energy eigenvalues ($E_\pm$) of the unperturbed system (that is, for $\epsilon = 0$) expressed in terms of ω_0, and show that the corresponding stationary states can be written on the form

$$\chi_\pm^{(0)}(t) = \chi_\pm \, e^{\mp i\omega_0 t/2}, \qquad \text{where} \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Since the states $\chi_\pm^{(0)}(t)$ form a basis, the state of the spin system may in general be expanded in terms of these states:

$$\chi(t) = a_+(t)\chi_+^{(0)}(t) + a_-(t)\chi_-^{(0)}(t).$$

♠What is the physical interpretation of the coefficients $a_+(t)$ and $a_-(t)$?

Inserting into the Schrödinger equation $i\hbar \frac{d}{dt}\chi(t) = \widehat{H}\,\chi(t)$ one finds that the expansion coefficients satisfy the coupled set of equations

$$i\hbar \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\hbar\omega_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_+(t) \\ a_-(t) \end{pmatrix} \qquad (\omega_1 = \epsilon\omega_0).$$

♠What does this set of equations tell us about the time dependence of the coefficients $a_+(t)$ and $a_-(t)$ in the case when the perturbing magnetic field is equal to zero (that is, when $\epsilon = 0$)?

b. Assume that $\epsilon > 0$, so that the perturbing field is different from zero. ♠Use the set of equations above to show that

$$a_+(t) = -i \sin \tfrac{1}{2}\omega_1 t \qquad \text{and} \qquad a_-(t) = \cos \tfrac{1}{2}\omega_1 t,$$

given that the spin was in the ground state at $t = 0$; $\chi(0) = \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

c. ♠Write the resulting spin state $\chi(t) = a_+(t)\chi_+^{(0)}(t) + a_-(t)\chi_-^{(0)}(t)$ on the form

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix},$$

and find the components $\langle \sigma_x \rangle$, $\langle \sigma_y \rangle$ and $\langle \sigma_z \rangle$ of the spin direction $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ as functions of t, using the formula sheet.

From these results it follows that the component of $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ perpendicular to the z-axis can be written on the form

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_\perp \rangle = \sin\omega_1 t \,[\hat{\mathbf{x}}\cos(\omega_0 t + \pi/2) + \hat{\mathbf{y}}\sin(\omega_0 t + \pi/2)].$$

As you will observe, this component rotates with the same angular frequency as the perturbing **B**-field, but 90 degrees ahead of the latter the whole time when t increases from 0 to π/ω_1. Together with the formula $d\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle/dt = (\boldsymbol{\omega}_0 + \boldsymbol{\omega}_1) \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ (which can be derived from the angular-momentum algebra), this explains why $\langle \sigma_z \rangle$ increases the whole time while $\sin\omega_1 t > 0$, that is, until $\langle \sigma_z \rangle$ becomes equal to 1. Suppose now that $\epsilon \ll 1$, so that $\omega_1 \ll \omega_0$. ♠Describe qualitatively what will then happen with $\langle \sigma_z \rangle$ if we let the perturbing field rotate with an angular frequency ω which lies far away from the resonance frequency ω_0?

d. ♠Assume once again that the perturbing field $\mathbf{B}_1$ rotates with the angular frequency ω_0, and calculate the transition amplitude $a_+(t)$ at time t using first-order time-dependent perturbation theory. ♠Compare the first-order result for $a_+(t)$ with the exact result given above (in point b), and find in this way what is required in order that first-order perturbation theory give a good approximation in this case.

Problem 3

A particle of mass m is moving in the three-dimensional oscillator potential $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$. As energy eigenstates of this system we can use either (i) product states of "Cartesian" type,

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \equiv (n_x n_y n_z), \qquad E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2),$$

wher $\psi_{n_x}(x)$ etc are ordinary one-dimensional oscillator solutions (see the formula sheet), or (ii) "angular-momentum states" of the type $\psi_{Nlm} = R_{Nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$ (where each such state is a linear combination af "Cartesian" states with $n_x + n_y + n_z = N$).

a. Assume that the oscillator is at $t = 0$ prepared in the following linear combination of "Cartesian" states,

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{6}}[(200) + (020) + (002)] + \frac{1}{\sqrt{2}}(000).$$

♠Show that this state is normalized.

Suppose that we immediately after the preparation (that is, at $t = 0^+$) measure the energy E. ♠What is the probability that the measurement gives (i) the result $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ and leaves the system in the ground state $\psi_{000} \equiv (000)$, (ii) the result $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$? ♠What is (the normalized) state immediately after a measurement with the result $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$?

♠Use the formula sheet to show that the state $[(200) + (020) + (002)]/\sqrt{3}$ is independent of angles, that is depends only on r, and therefore is a state of the type ψ_{Nlm}. What are the values of N, l and m for this state.

b. Assume now that the oscillator is in the state $\psi_{N=2,l=m=0} = R_{N=2,l=0}Y_{00}$ at $t = 0$. We want to study radiative transitions from this state via absorption and stimulated and spontaneous emission. If we use "angular-momentum states" ψ_{Nlm} as a basis, the level scheme for this oscillator looks like this (for $N \leq 4$):

In the dipole approximation, the transition rates for absorption and stimulated emission are proporstional to $|\mathbf{e}_k\cdot\mathbf{d}_{fi}|^2$, where $\mathbf{e}_k$ is the polarization vector of the radiation and the vector

$$\mathbf{d}_{fi} = \int \psi_f^*\,\mathbf{r}\,\psi_i d^3r$$

is the dipole moment of the transition. The spontaneous transition rate is proportional to $|\mathbf{d}_{fi}|^2$.

♠Show directly (from the integral above) that transitions from $\psi_{N=2,l=m=0}$ in the dipole approximation only occur to p-states ($\psi_{N'l'm'}$ with $l'=1$), in accordance with the selection rule $\Delta l = \pm 1$. Hint: Use that

$$\mathbf{r} = r\sqrt{4\pi/3}\left[\hat{\mathbf{e}}_z\,Y_{10} - \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}}\,Y_{11} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}}\,Y_{1-1}\right],$$

and consider the angular part of the above integral.

♠Show that in the dipole approximation the allowed transitions for this system are in general limited to $\Delta N = \pm 1$. Hint: In the dipole moment

$$\langle \psi_f|\mathbf{r}|\psi_i\rangle,$$

the ket $|\psi_i\rangle$ is a superposition of "Cartesian" states which all have $n_x + n_y + n_z = N$. Consider

$$\widehat{\mathbf{r}}|\psi_i\rangle = (\hat{\mathbf{e}}_x\widehat{x} + \hat{\mathbf{e}}_y\widehat{y} + \hat{\mathbf{e}}_x\widehat{z})|\psi_i\rangle,$$

and investigate how the operators

$$\widehat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a_x + a_x^\dagger) \quad \text{etc}$$

act on $|\psi_i\rangle$. Remember that $a_x|n_x\rangle = \sqrt{n_x}\,|n_x-1\rangle$ and $a_x^\dagger|n_x\rangle = \sqrt{n_x+1}\,|n_x+1\rangle$.

c. From the above results it follows that *sponataneous* transitions from the state $\psi_{N=2,l=m=0}$ in the dipole approximation occur only for final states with $N=1$. For the latter we may just as well use the "Cartesian" ones. The rate (probability per unit time) for spontaneos transition from the state $\psi_{N=2,l=m=0}$ to the "Cartesian" state $\psi_{100} \equiv (100)$ is in the dipole approximation given by the formula

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

♠What is the Bohr frequency ω_{if} for this transition? ♠Using the symmetry properties of the states in question, explain why the dipole moment vector $\mathbf{d}_{fi}$ of this transition can not have components in the y- and z-directions. ♠Explain also why the *length* of $\mathbf{d}_{fi}$ must be of the order of $\sqrt{\hbar/m\omega}$. ♠Explain in addition why the length $|\mathbf{d}_{fi}|$ of the dipole moment vector has the same value for all of the three final states (100), (010) og (001).

d. Actually, we have $|\mathbf{d}_{fi}| = \sqrt{\hbar/(3m\omega)}$ for each of the three transitions. ♠Assume that $m = m_e$ and $\omega = 10^{16}\,\mathrm{s}^{-1}$, and find (in the dipole approximation) numerical values for the total rate for spontaneous transition from the state $\psi_{N=2,l=m=0}$ and the corresponding lifetime τ. ♠Decide if the dipole approximation is a good approximation in this case.

Attachment: Formulae and expressions

Some of this may turn out to be useful.

Discontinuity condition, with potential $V(x) = \alpha\delta(x-a)$

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

Spinn $\frac{1}{2}$

For a particle with spin $\frac{1}{2}$ one may use the spin operator

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

where

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

are the so-called Pauli matrices. The Pauli *spinors* $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ and $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ then are eigenstates of $S_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z$ with the eigenvalues $\pm\frac{1}{2}\hbar$. A normalized spin state $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ may be charcterized by the **spin direction**,

$$\langle\,\boldsymbol{\sigma}\,\rangle = \chi^\dagger\boldsymbol{\sigma}\chi = \hat{\mathbf{e}}_x\,\Re\mathrm{e}(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_y\,\Im\mathrm{m}(2a^*b) + \hat{\mathbf{e}}_z\,(|a|^2 - |b|^2).$$

The matrices $S_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x$ etc satisfy the angular momentum algebra,

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \qquad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \qquad [S_z, S_x] = i\hbar S_y.$$

Furthermore,

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

Harmonic oscillator

The energy eigenfunctions for the potential $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ $(-\infty < x < \infty)$ satisfy the eigenvalue equation

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2 - (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\right]\psi_n(x) = 0, \qquad n = 0, 1, 2, ...,$$

with normalized solutions on the form

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\,e^{-m\omega x^2/2\hbar}H_n(\xi), \qquad \xi = \frac{x}{\sqrt{\hbar/m\omega}}\;;$$

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad \cdots.$$

Starting point for time-dependent perturbation theory

With a Hamiltonian $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t)$, the exact solution can be expanded in terms of the unperturbed stationary solutions:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \Psi_n^{(0)}(\mathbf{r}, t),$$

where

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

The exact set of equations for the expansion coefficients is

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_n e^{i\omega_{kn} t} V_{kn}(t) a_n(t); \qquad V_{kn}(t) = \langle \psi_k | \widehat{V}(t) | \psi_n \rangle, \quad \omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar.$$

With $a_n(t_0) = \delta_{ni}$, the exact amplitude satisfies the equation

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

To first order in the perturbation the amplitude $a_f \equiv a_{i \to f}$ is then given by

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

Spherical harmonics

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

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

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\theta - 1), \qquad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\theta \cos\theta\, e^{\pm i\phi}, \qquad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}.$$

Some physical constants

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

$$c = 2.998 \times 10^8 \text{m/s}; \qquad \hbar = 0.6582 \times 10^{-15} \text{eVs}; \qquad m_e = 0.5110\ \text{MeV}/c^2.$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} \approx 13.6\ \text{eV}.$$