

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
 Institutt for fysikk

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

EKSAMEN I
TFY4250 ATOM- OG MOLEKYLFYSIKK
FY2045 KVANTEFYSIKK

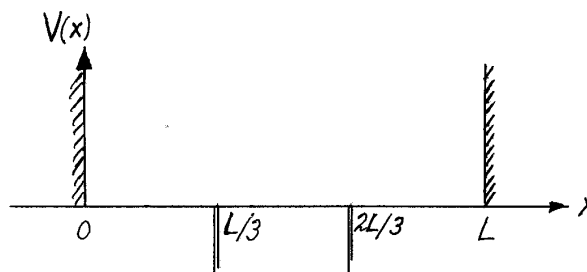
Tirsdag 1. desember 2009
 kl. 09.00 - 13.00

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 22. desember.

Oppgave 1



En partikkel med masse m befinner seg i et endimensjonalt potensial som består av to deltafunksjonsbrønner i punktene $x = L/3$ og $x = 2L/3$ samt to uendelig harde vegger ved $x = 0$ og $x = L$:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x < 0 \text{ og for } x > L, \\ -\beta[\delta(x - L/3) + \delta(x - 2L/3)] & \text{for } 0 < x < L. \quad (\beta \geq 0) \end{cases}$$

Det opplyses at energieigenfunksjoner i dette potensialet må oppfylle diskontinuitetsbetingelsen

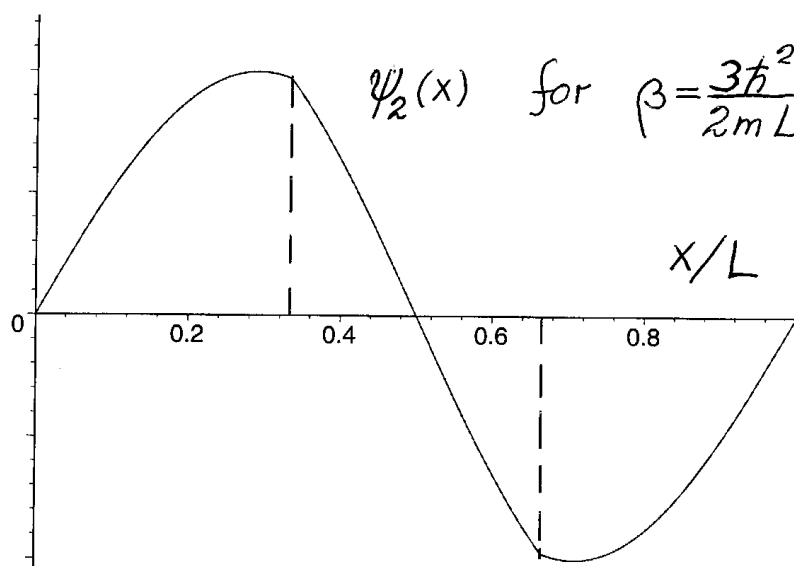
$$\psi'/\psi|_{x=L/3+} - \psi'/\psi|_{x=L/3-} = -\frac{2m\beta}{\hbar^2},$$

samt en tilsvarende betingelse i punktet $x = 2L/3$.

a. For $\beta = 0$ er det lett å se at energieigenfunksjonene er $\psi_n^{(0)}(x) = A \sin(n\pi x/L)$. For $\beta \neq 0$ er energieigenfunksjonene $\psi_3(x)$, $\psi_6(x)$, $\psi_9(x)$ osv identiske med henholdsvis $\psi_3^{(0)}(x)$, $\psi_6^{(0)}(x)$, $\psi_9^{(0)}(x)$ osv (dvs at både energieigenfunksjoner og energier for $n = 3j$ er de samme som for $\beta = 0$). •Forklar dette. •Skissér $\psi_3(x)$ og finn energien E_3 for denne tilstanden.

b. For en viss β -verdi, β_0 , blir grunntilstandsenergien E_1 lik null. •Skissér bølgefunksjonen (ψ_1) for dette tilfellet. •Bestem β_0 uttrykt ved de oppgitte størrelsene. •Hva skjer med grunntilstandsenergien E_1 når β gjøres større enn β_0 ? (Prøv å begrunne svaret så godt du kan.)

c.



Figuren viser første eksiterte tilstand $\psi_2(x)$ for $\beta = 3\hbar^2/(2mL)$. •Bruk figuren til å bestemme omtrent hvor stort bølgetallet og dermed energien er for denne energieigenfunksjonen, og sammenlign med den tilsvarende energien for tilfellet $\beta = 0$. To spørsmål til slutt: •Kan β gjøres så stor at energien E_2 for første eksiterte tilstand blir negativ? •Kan β gjøres så stor at energien E_4 for tredje eksiterte tilstand blir negativ? (Begrunn svarene.)

Oppgave 2

En partikkel med masse m befinner seg ved $t = 0$ i grunntilstanden i et endimensjonalt harmonisk oscillatorpotensial $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Partikkelen utsettes så for en transient (forbigående) perturbasjon i form av et kraftstøt med varighet t_0 :

$$F(t) = \begin{cases} F_0 & \text{for } 0 < t < t_0, \\ 0 & \text{ellers.} \end{cases}$$

Denne svarer til et perturberende ledd

$$V_1(t) = -xF(t),$$

og en impulsoverføring $\Delta p = F_0 t_0$ til partikkelen.

a. • Finn matrise-elementene

$$(V_1)_{n0}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* V_1(t) \psi_0 dx,$$

når det opplyses at $x\psi_0(x) = \sqrt{\hbar/(2m\omega)} \psi_1(x)$. • Beregn overgangsamplitudene $a_{0 \rightarrow n}(t)$ ved tiden t ved hjelp av førsteordens perturbasjonsteori. Hint: Resultatet kan uttrykkes ved integralet

$$I(t) = \int_0^{\tau} e^{i\omega t'} dt',$$

der $\tau = t$ for $0 < t < t_0$ og $\tau = t_0$ for $t > t_0$.

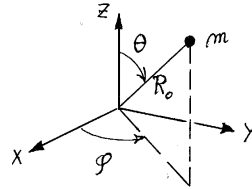
b. Anta først at $t > t_0$, og at t_0 er så liten ($\ll 1/\omega$) at vi kan sette $e^{i\omega t'} \approx 1$ i integranden ovenfor. • Vis at overgangssannsynligheten til 1. eksiterte tilstand da er proporsjonal med forholdet $(\Delta p/p_{\text{rms}})^2$, der $\Delta p = F_0 t_0$ er impulsoverføringen til partikkelen på grunn av perturbasjonen, og

$$p_{\text{rms}}^2 \equiv \langle p_x^2 \rangle_0 = 2m \langle K \rangle_0 = mE_0 = \frac{1}{2} \hbar m \omega$$

er den midlere kvadratiske impulsen i oscillatorens grunntilstand. • Hvilket krav må stilles til impulsoverføringen Δp for at det beregnede førsteordensresultatet for overgangssannsynligheten skal være en god tilnærming?

c. • Anta fortsatt at $t > t_0$, men at t_0 nå ikke nødvendigvis er liten (i forhold til $1/\omega$), og finn et uttrykk for overgangssannsynligheten $P_{0 \rightarrow 1}$. Hint: Det opplyses at $|e^{i\omega t_0} - 1| = |2 \sin(\omega t_0/2)|$. • Kontrollér at dette resultatet stemmer med resultatet under pkt. **b** i grensen $\omega t_0 \ll 1$. • Lag en rask skisse som viser hvordan $P_{0 \rightarrow 1}$ avhenger av t_0 (for fastholdt F_0) når t_0 varierer fra null til $2\pi/\omega \equiv T$. • Angi den t_0 -verdien, t_0^{max} , som gir maksimal overgangssannsynlighet, og finn denne maksimalverdien.

Oppgave 3



Som en modell for rotasjonsbevegelsen til et to-atomig molekyl betrakter vi en fri rotator, der en partikkel med den reduserte massen m og ladning e beveger seg fritt på en kuleflate med radius R_0 . Rotasjonsbevegelsen beskrives da av Hamilton-operatoren

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{L}}^2}{2mR_0^2}.$$

Vi antar at et ensemble av slike rotatorer er preparert i en av egentilstandene $Y_i = Y_{lm}$ til $\widehat{\mathbf{L}}^2$. I dipoltilnærmelsen er sannsynligheten pr tidsenhet for spontan emisjon av et foton og overgang til en tilstand $Y_f = Y_{l'm'}$ da

$$w_{i \rightarrow f} = \alpha \frac{4\omega^3}{3c^2} |\mathbf{d}_{fi}|^2.$$

Her er $\omega \equiv (E_i - E_f)/\hbar$ Bohr-frekvensen og

$$\mathbf{d}_{fi} = \int Y_{l'm'}^* \mathbf{r} Y_{lm} d\Omega$$

er dipolmomentet for overgangen. Dipolmomentet er lik null unntatt for overganger som oppfyller utvalgsreglene

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1.$$

a. •Forklar med utgangspunkt i paritetsegenskaper (dvs uten å støtte deg på utvalgsreglene) at dipolmomentet \mathbf{d}_{fi} generelt er lik null for alle overganger $Y_{lm} \rightarrow Y_{l'm'}$ med like $\Delta l = l' - l$. •Vis også at $\mathbf{d}_{fi} = 0$ for overganger med $\Delta m = m' - m \neq 0, \pm 1$. Hint: Se på ϕ -avhengigheten i integranden ovenfor, og bruk at

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= R_0(\hat{\mathbf{e}}_x \sin \theta \cos \phi + \hat{\mathbf{e}}_y \sin \theta \sin \phi + \hat{\mathbf{e}}_z \cos \theta) \\ &= R_0 \sqrt{4\pi/3} \left[\hat{\mathbf{e}}_z Y_{10} - \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{11} + \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + i\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1} \right]. \end{aligned}$$

Figuren viser hvordan vi kan tegne et nivåskjema for rotatortilstandene Y_{lm} , der vi skiller mellom de forskjellige m -verdiene:

$$\begin{array}{ccccc} \overline{Y_{2,-2}} & \overline{Y_{2,-1}} & \overline{Y_{2,0}} & \overline{Y_{2,1}} & \overline{Y_{2,2}} \\ & \overline{Y_{1,-1}} & \overline{Y_{1,0}} & \overline{Y_{1,1}} & \\ & & \overline{Y_{0,0}} & & \end{array}$$

•Lag et slikt nivåskjema, og markér med piler de spontane overgangene som er "tillatte" ifølge utvalgsreglene når begynnelsestilstanden Y_i er henholdsvis Y_{20} og Y_{21} .

- b.** Anta at $R_0 = 3a_0$, der a_0 er Bohr-radien, og at den reduserte massen m er $2000 m_e$.
 • Finn tallverdier for fotonenergien $\hbar\omega$ og Bohr-frekvensen ω for de spontane overgangene fra en begynnelsestilstand Y_{2m} . Påvis at gyldighetskriteriet for dipoltilnærmelsen, $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \sim kR_0 \ll 1$, er oppfylt med god margin. [Her er $k = \omega/c$ bølgetallet for de emitterte fotonene.]

Oppgave 4

Anta at vi måler energien E og størrelsen $|\mathbf{L}|$ av banedreieimpulsen for en samling av eksiterte hydrogenatomer. Ved å sortere ut atomer med en bestemt energi E_n og en bestemt dreieimpuls $|\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ kan vi da danne et ensemble med veldefinert energi og et kvantetall l som vi her antar er ≥ 1 . Måler vi i tillegg L_z og S_z for atomene i dette ensemblet, må hvert enkelt atom etter målingen havne i én av et antall $2(2l+1)$ egentilstander til $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{S}}^2$, \hat{L}_z og \hat{S}_z , av typen

$$|l, m_l\rangle|\frac{1}{2}, m_s\rangle; \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}.$$

Et alternativ til å måle L_z og S_z er å måle $|\mathbf{J}| = |\mathbf{L} + \mathbf{S}|$ og J_z . En slik måling vil etterlate atomene i tilstander av typen $|j, m\rangle$, med egenverdier lik henholdsvis $\hbar^2 j(j+1)$ og $\hbar m$ for \mathbf{J}^2 og J_z .

- a.** • Vis at alle tilstandene $|l, m_l\rangle|\frac{1}{2}, m_s\rangle$ er egentilstander til \hat{J}_z og finn egenverdiene.
 • Vis at tilstanden $|l, l\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ også er en egentilstand til $\hat{\mathbf{J}}^2$ med kvantetall $j = l + \frac{1}{2}$, dvs en tilstand av typen $|j, m\rangle = |l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}\rangle$. Oppgitt:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z + \hat{J}_-\hat{J}_+; \quad \hat{J}_\pm|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j + 1 \pm m)}|j, m \pm 1\rangle,$$

der stigeoperator-relasjonene kan brukes både for $\hat{\mathbf{J}}$, $\hat{\mathbf{L}}$ og $\hat{\mathbf{S}}$.

- b.** • Finn tilstanden $|l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}\rangle$ ved hjelp av stigeoperator-relasjonene. Som en kontroll opplyses det at denne skal komme ut ortogonal på tilstanden

$$|\text{ort}\rangle \equiv \sqrt{\frac{1}{2l+1}} |l, l-1\rangle|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} |l, l\rangle|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle.$$

- Finn egenverdien til \hat{J}_z for denne tilstanden $|\text{ort}\rangle$ og angi (eller helst: finn om du kan) også egenverdien til $\hat{\mathbf{J}}^2$.

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Målepostulatet

- (i) De eneste mulige verdiene som en måling av observabelen F kan gi er en av egenverdiene f_n .
- (ii) Umiddelbart etter målingen av F er systemet i en egentilstand til den tilhørende operatoren \hat{F} , nemlig en egentilstand som svarer til den målte egenverdien f_n .

Harmonisk oscillator

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

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

med løsninger på formen

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

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

Sfæriske harmoniske

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

$$\hat{P} Y_{lm} = (-1)^l Y_{lm}, \quad Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}.$$
$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}.$$

Utgangspunktet for tidsavhengig perturbasjonsteori

Med en Hamilton-operator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ 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

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

Det eksakte ligningssettet for utviklingskoeffisientene er

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

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

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 $a_f \equiv a_{i \rightarrow f}$ gitt ved

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

Noen konstanter

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

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

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

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

Tidsutvikling av forventningsverdier

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

δ -funksjonen og sprangfunksjonen

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