NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITET
Institutt for fysikk

# EKSAMEN I
# FY2045 KVANTEMEKANIKK I/
# TFY4250 KVANTEMEKANIKK I

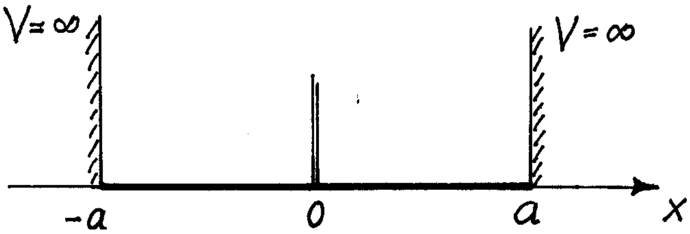
Tirsdag 10. august 2010
kl. 09.00 - 13.00

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 august 2010.

---

## Oppgave 1




Et elektron befinner seg i en endimensjonal boks med en deltafunksjonsbarriere i midten,

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for} \quad |x| > a, \\ \beta\,\delta(x) & \text{for} \quad |x| < a. \end{cases}$$

Her er

$$\beta = 200\,\hbar^2/(m_e a).$$

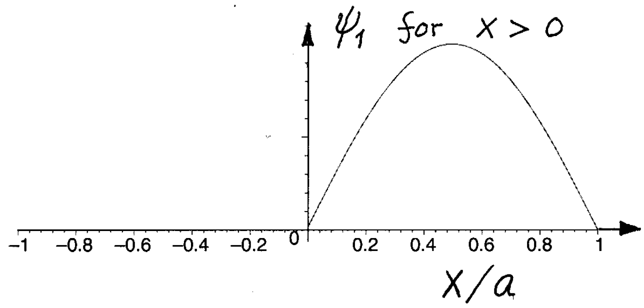
Det opplyses at energiegenfunksjoner i dette potensialet må oppfylle diskontinuitets-betingelsen

$$\psi'/\psi|_{x=0^+} - \psi'/\psi|_{x=0^-} = \frac{2m_e\beta}{\hbar^2}.$$

**a.** •Forklar hvorfor første eksiterte tilstand $\psi_2$ har samme energi og bølgefunksjon som for tilfellet $\beta = 0$, dvs i fravær av deltabarrieren. •Skissér $\psi_2$, og finn lengdeparameteren $a$ uttrykt ved Bohr-radien $a_0$, når det oppgis at energien til 1. eksiterte tilstand er en hundredel av en Rydberg,

$$E_2 = 0.01\,\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}.$$

**b.** Figuren viser hvordan bølgefunksjonen $\psi_1$ for grunntilstanden ser ut for dette systemet, for $x > 0$. Fordi $\beta$ er så stor, er $\psi_1(0)$ praktisk talt lik null (men positiv).



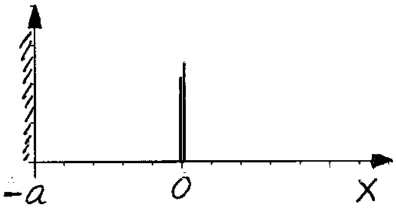

•Lag en skisse som viser $\psi_1$ for *alle* $x$, og angi hvilket prinsipp som ligger til grunn for skissen. •Forklar kort hvorfor $\psi_1$ for $0 < x < a$ kan skrives (f.eks) på formen $\psi_1 = -B\sin[k_1(x-a)]$, og angi formen til $\psi_1$ for $-a < x < 0$. •Finn (uten å gjennomføre beregningen) en ligning som kan brukes til å bestemme $k_1$.

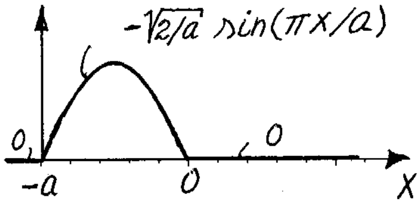
**c.** Anta nå at dette systemet prepareres i tilstanden

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

ved $t = 0$. •Hva blir da tilstanden $\Psi(x,t)$ for $t > 0$?
Vi antar at både $\psi_1$ og $\psi_2$ er normerte, og at fasevalget for $\psi_2$ er slik at $\psi_1 + \psi_2$ er praktisk talt lik null for $x < 0$. I tilstanden $\Psi(x,t)$ vil sannsynlighetstettheten da oscillere mellom høyre og venstre halvdel av potensialet. •Vis at periodetiden $T$ for denne oscillasjonen kan uttrykkes bl.a ved energidifferansen mellom 1. eksiterte tilstand og grunntilstanden, og finn $T$ i sekunder, når det oppgis at $E_2 - E_1 \approx 10^{-4}\hbar^2/(2m_e a_0^2)$. [Hint: Spalt av en faktor $\exp(-iE_1 t/\hbar)$ i bølgefunksjonen. Oppgitt: $\hbar^2/(2m_e a_0^2) = 13.6$ eV, $2\pi\hbar = 4.136 \cdot 10^{-15}$ eVs.]

**d.** La oss nå begynne på nytt, med å fjerne den harde veggen ved $x = a$, slik at vi står igjen med et potensial som er uendelig for $x < -a$, mens $\delta$-barrieren beholdes, slik at potensialet for $x > -a$ er lik $\beta\delta(x)$. Vi preparerer nå systemet slik at bølgefunksjonen ved $t = 0$ er $-\sqrt{2/a}\,\sin kx$ for $-a < x < 0$ og null ellers.




Her er bølgetallet $k = \pi/a$, slik at $\langle E \rangle = \hbar^2 k^2/2m_e = \hbar^2\pi^2/(2m_e a^2)$. Dersom vi tillater oss å tenke halvklassisk, vil elektronet sprette fram og tilbake mellom den harde veggen til venstre og den nesten ugjennomtrengelige $\delta$-barrieren med farten $v = \sqrt{2\langle E \rangle / m_e}$.
•Finn tidsintervallet $t_1$ mellom hver kollisjon med barrieren, i sekunder.
For hver kollisjon er det en viss sannsynlighet $T_{\text{tr}}$ for transmisjon gjennom barrieren. Ved å regne med en bølgefunksjon som er lik $e^{ikx} + Be^{-ikx}$ for $x < 0$ og lik $Ce^{ikx}$ for $x > 0$ kan det vises at

$$C = \left(1 + \frac{im_e\beta}{\hbar^2 k}\right)^{-1}.$$

•Bruk disse opplysningene til å finne den numeriske verdien av sannsynligheten $T_{\text{tr}}$ for transmisjon ved én enkelt kollisjon med barrieren. •Bruk disse resultatene til å finne et estimat av "levetiden" $\tau$ for begynnelsestilstanden, som vi definerer som den tiden det tar før sannsynligheten for å finne elektronet i intervallet $-a < x < 0$ er redusert med en faktor $1/e$. Finn $\tau$ i sekunder, og sammenlign med periodetiden $T$ funnet under pkt. c. [Hint: For $\epsilon << 1$ er $1 - \epsilon \approx \exp(-\epsilon)$.]

## Oppgave 2

I denne oppgaven betrakter vi et topartikkelsystem (eller snarere et ensemble av slike), der begge partiklene har spinn 1 (dvs $s_1 = s_2 = 1$):

$$|\mathbf{S}_1| = \hbar\sqrt{s_1(s_1+1)} = \hbar\sqrt{2} \quad \text{og} \quad |\mathbf{S}_2| = \hbar\sqrt{s_2(s_2+1)} = \hbar\sqrt{2}.$$

Ved en måling av $S_{1z}$ og $S_{2z}$ etterlates dette topartikkelsystemet i én av de 9 tilstandene $|m_1\rangle|m_2\rangle$, der $m_1 = -1, 0, 1$ og $m_2 = -1, 0, 1$. Her beskriver den første ket-vektoren spinnet til partikkel 1, mens den andre beskriver spinnet til partikkel 2.

Gjør vi i stedet en måling av størrelsen $|\mathbf{S}|$ og $z$-komponenten $S_z$ av det *totale* spinnet $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ for dette topartikkelsystemet, vil det havne i en tilstand av typen $|s, m\rangle$, slik at $|\mathbf{S}| = \hbar\sqrt{s(s+1)}$ og $S_z = \hbar m$. Vi antar at alle disse tilstandene er normerte.

a. •Skriv ned trekant-ulikheten som begrenser de mulige verdiene av kvantetallet $s$ for dette topartikkelsystemet, *angi* de mulige $s$-verdiene, og angi for hver av disse de mulige verdiene av $m$. Kontrollér at antallet tilstander av typen $|s, m\rangle$ er lik antallet av typen $|m_1\rangle|m_2\rangle$, som var lik 9. •Hvorfor kan hver av tilstandene $|s, m\rangle$ uttrykkes som lineærkombinasjoner av tilstandene $|m_1\rangle|m_2\rangle$? •Vis at tilstanden $|m_1\rangle|m_2\rangle$ er en egentilstand (ikke bare til $\widehat{\mathbf{S}}_1^2$, $\widehat{\mathbf{S}}_2^2$, $\widehat{S}_{1z}$ og $\widehat{S}_{2z}$, men også) til $\widehat{S}_z = \widehat{S}_{1z} + \widehat{S}_{2z}$ og bestem egenverdien.

**b.** I denne oppgaven skal vi fokusere spesielt på tilstandene $|s,0\rangle$ (med $m=0$) som er

$$|s=0,m=0\rangle, \quad |s=1,m=0\rangle \quad \text{og} \quad |s=2,m=0\rangle.$$

Disse tre tilstandene kan alle uttrykkes som lineærkombinasjoner av typen

$$|s,0\rangle = A\,|1\rangle|-1\rangle + B\,|0\rangle|0\rangle + C\,|-1\rangle|1\rangle,$$

der koeffisientene $A$, $B$ og $C$ selvsagt avhenger av $s$, og der $|1\rangle|-1\rangle$ står for $|m_1=1\rangle|m_2=-1\rangle$ osv. •Hvorfor opptrer ingen av de 6 øvrige tilstandene av typen $|m_1\rangle|m_2\rangle$ i disse lineærkombinasjonene?

Det oppgis at

$$\widehat{\mathbf{S}}^2\,(\,A\,|1\rangle|-1\rangle + B\,|0\rangle|0\rangle + C\,|-1\rangle|1\rangle\,)$$
$$= K\{\,(A+B)\,|1\rangle|-1\rangle + (A+2B+C)\,|0\rangle|0\rangle + (B+C)\,|-1\rangle|1\rangle\,\},$$

der $K$ er et helt multiplum av $\hbar^2$ ($\neq 0$). •Bruk denne relasjonen til å finne en formel for tilstanden $|0,0\rangle$ ($\equiv |s=0,m=0\rangle$). [Hint: Dette kan gjøres uten å kjenne $K$. Finn $B$ og $C$ uttrykt ved $A$, og velg $A$ slik at $|0,0\rangle$ blir normert.]

• *Vis* formelen ovenfor, og bestem dermed konstanten $K$. Hint: Fra formelarket følger det at $\widehat{\mathbf{S}}^2 = \widehat{S}_z^2 + \hbar\widehat{S}_z + \widehat{S}_-\widehat{S}_+$. Med $i=1$ (2) for partikkel 1 (2) følger det videre at

$$\widehat{S}_{i\pm}\,|\pm1_i\rangle = 0, \qquad \widehat{S}_{i\pm}\,|\mp1_i\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|0_i\rangle, \quad \text{og} \quad \widehat{S}_{i\pm}\,|0_i\rangle = \hbar\sqrt{2}\,|\pm1_i\rangle.$$

**c.** •Finn de normerte tilstandene $|1,0\rangle$ og $|2,0\rangle$, og kontrollér at disse sammen med $|0,0\rangle$ danner et ortogonalt sett. [Hint: Dersom du ikke har funnet konstanten $K$, kan du sette den lik $2\hbar^2$.]

## Oppgave 3

En partikkel med masse $m$ befinner seg i utgangspunktet (ved $t=0^-$) i grunntilstanden $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$ i et endimensjonalt harmonisk oscillatorpotensial $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Partikkelen utsettes så for en transient (forbigående) perturbasjon

$$V_1(t) = -x\,p_0\delta(t).$$

Denne svarer til et deltafunksjonsformet kraftstøt ("$\delta$-spark") $F_1(t) = -\partial V_1/\partial x = p_0\delta(t)$, og en impulsoverføring $p_0$. Det kan vises at kraftstøtet resulterer i en ekstra faktor $\exp(ip_0x/\hbar)$ i bølgefunksjonen, som dermed umiddelbart etter perturbasjonen får formen

$$\Psi(x,0^+) = e^{ip_0x/\hbar}\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{ip_0x/\hbar}e^{-m\omega x^2/2\hbar}.$$

Tilstanden for $t>0$ blir i realiteten en såkalt koherent tilstand, der usikkerhetene i posisjon og impuls hele tiden er de samme som ved $t=0^+$ (og ved $t=0^-$), nemlig

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \qquad \text{og} \qquad \Delta p_x = \sqrt{\tfrac{1}{2}\hbar m\omega}.$$

**a.** Problemstillingen i denne oppgaven kan også angripes ved hjelp av 1.-ordens tidsavhengig perturbasjonsteori: •Finn matrise-elementene

$$(V_1)_{n0}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\, V_1(t)\, \psi_0(x)\, dx \equiv \langle n|\widehat{V}_1(t)|0\rangle.$$

•Beregn overgangsamplitudene $a_{0\to n}$, og de tilsvarende overgangssannsynlighetene $P_{0\to n}$, etter at perturbasjonen er overstått, ved hjelp av 1.-ordens perturbasjonsteori. For å sette ting i perspektiv kan du uttrykke disse størrelsene ved det dimensjonsløse forholdet mellom $p_0$ og $2\Delta p_x$,

$$\alpha_0 \equiv \frac{p_0}{2\Delta p_x} = \frac{p_0}{\sqrt{2m\hbar\omega}}.$$

Oppgitt:

$$\widehat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a + a^\dagger)\,; \quad a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \quad a^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle.$$

•Hva er, ut fra disse resultatene, sannsynligheten for å finne oscillatoren i grunntilstanden etter perturbasjonen? •Hvilket krav må stilles til impulsoverføringen $p_0$ (ev. til $\alpha_0$) for at disse resultatene skal være gode tilnærmelser?

**b.** Fra den oppgitte tilstanden $\Psi(x,0^+)$ er det nokså enkelt å beregne de *eksakte* resultatene for amplitudene ($a_n^{\text{eks}}$) og sannsynlighetene ($P_n^{\text{eks}}$). Amplitudene bestemmes av

$$\Psi(x,0^+) = \sum_n a_n^{\text{eks}}\,\psi_n(x)\ , \qquad a_n^{\text{eks}} = \Big\langle\, \psi_n, \Psi(0^+)\,\Big\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\,\Psi(x,0^+)dx.$$

•Finn $a_0^{\text{eks}}$ ved hjelp av integralet

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-Ay^2 + By)\,dy = \left(\frac{\pi}{A}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{B^2}{4A}\right)\ , \qquad (\Re\text{e}A > 0),$$

og vis at sannsynligheten for å finne oscillatoren i grunntilstanden etter perturbasjonen er $P_0^{\text{eks}} = \exp(-\alpha_0^2)$. •Sammenlign $P_0^{\text{eks}}$ med resultatet for $P_0$ funnet i pkt. **a**. [Hint: $P_0^{\text{eks}}$ kan rekkeutvikles vha formelen $\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n/n!$.] For $\alpha_0^2 >> 1$ ser vi at $P_0^{\text{eks}}$ går veldig raskt mot null for økende $\alpha_0$. •Hva venter du vil skje med den eksakte sannsynligheten for å finne oscillatoren i 1. eksiterte tilstand når $\alpha_0$ er stor og økende?

**c.** Relasjonen $a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ tar i posisjonsrepresentasjonen formen

$$a_{\text{pr}}\,\psi_n(x) = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}(x)\,, \quad \text{der} \quad a_{\text{pr}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \frac{i\widehat{p}_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \qquad \left(\widehat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

•Vis eksplisitt at operatoren $a_{\text{pr}}$ anvendt på $\Psi(x,0^+) = \exp(ip_0x/\hbar)\psi_0(x)$ gir

$$a_{\text{pr}}\,\Psi(x,0^+) = \frac{ip_0}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\Psi(x,0^+) \equiv i\alpha_0\,\Psi(x,0^+).$$

•Sett inn $\Psi(x, 0^+) = \sum_n a_n^{\text{eks}} \psi_n(x)$ i denne egenverdiligningen, og vis at

$$a_n^{\text{eks}} = \text{konst} \cdot \frac{\alpha_0}{\sqrt{n}} \, a_{n-1}^{\text{eks}},$$

der konstanten skal bestemmes.

**d.** •Finn den eksakte sannsynlighetsamplituden $a_1^{\text{eks}}$ samt sannsynligheten $P_1^{\text{eks}}$, og sammenlign med resultatetene i pkt. **a** og siste spørsmål i pkt. **b**. •Finn også $P_2^{\text{eks}}$ og $P_3^{\text{eks}}$ og generalisér til $P_n^{\text{eks}}$. •Anta at $\alpha_0$ er stor, og finn ut for hvilken $n$ sannsynligheten $P_n^{\text{eks}}$ er størst.

## Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

**Sannsynlighets-strømtetthet**

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

**Stigeoperator-relasjoner for dreieimpuls**

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

**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 $\widehat{F}$, nemlig en egentilstand som svarer til den målte egenverdien $f_n$.

**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 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

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

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

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

**Noen fysiske konstanter**

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

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

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

**Tidsutvikling av forventningsverdier**

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

**$\delta$-funksjonen og sprangfunksjonen**

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