Universitetet i Stavanger

DET TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE FAKULTET

EKSAMEN I: FYS320 Kvantemekanikk **DATO:** 17. desember 2013

TID FOR EKSAMEN: kl. 09.00-13.00 (4 timer)

TILLATTE HJELPEMIDDEL: Bestemt, enkel kalkulator (kode C)
Valgfri standard formelsamling
(f. eks. Rottmanns eller Knutsens)

OPPGAVESETTET BESTÅR AV 4 OPPGAVER, PÅ 4 SIDER INKL. DENNE FORSIDA

MERKNADER: —

OPPGITT: (Man skal vite hva uttrykkene står for)

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \qquad \cos y = \frac{1}{2}\left(e^{iy} + e^{-iy}\right)$

$E^{(1)} =< \psi_n|H_1|\psi_n > \qquad E^{(2)} = \sum_{i\neq n} \frac{|<\psi_n|H_1|\psi_i>|^2}{E_n - E_i} \qquad \delta(x) = 0$ (for $x \neq 0$)

$< \psi_a|O|\psi_b >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_a^*(x) O \psi_b(x)\, dx \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) f(x)\, dx = f(a)$

$n = 1, 2, 3, \ldots, \qquad l \leq n-1$ (H-atom)

$m_j = -j, -j+1, \ldots, 0, \ldots j-1, j$ (z-komponenter generelt, også for $j \to l$ og $j \to s$)

$j = |l-s|, |l-s|+1, \ldots, l+s-1, l+s$ (totaldreieimpuls)

$S_\pm = S_x \pm i S_y\ , \qquad S_i = \frac{1}{2}\hbar\sigma_i \qquad (i = x, y, z)$

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad |\uparrow> \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow> \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$P = -i\hbar D$ (impuls) , $\qquad D = \frac{\partial}{\partial x}\ , \qquad X = x$

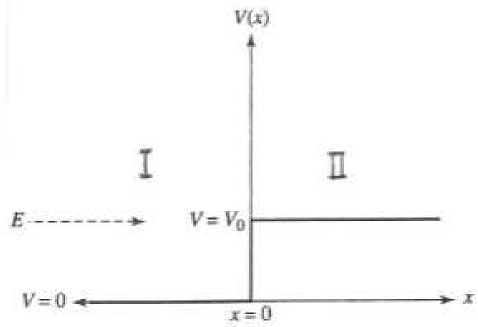
$|\rightarrow> \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$P = |<\mathrm{f}|\mathrm{i}>|^2$ (sannsynlighet, i for begynnelsestilstand, f for sluttilstand)

$(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y}) = x_1^* y_1 + x_2^* y_2 + \ldots + x_n^* y_n$

Oppgave 1

En partikkel med energi E og masse m beveger seg endimensjonalt fra venstre mot høyre. Ved $x = 0$ treffer den et potensialtrinn med høyde V_0 eksakt lik partikkelens innkommende energi E (altså $E = V_0$):



$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \quad \text{(I)} \\ V_0 & x \geq 0 \quad \text{(II)} \end{cases}$$

Du får oppgitt at bølgefunksjonene i områdene I og II er gitt ved

$$\psi_{\mathrm{I}} = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} \qquad (k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar})$$
$$\psi_{\mathrm{II}} = C + Dx$$

a) Vis ved innsetting i den tidsuavhengige Schrödingerlikninga at ψ_{I} og ψ_{II} er gyldige løsninger.

b) Bruk et fysisk krav til ψ for $x \to \infty$ i område II til å bestemme integrasjonskonstanten D. Bruk så kontinuitetskravet på $d\psi/dx$ ved grensen mellom områdene I og II til å uttrykke en av integrasjonskonstantene i ψ_{I} ved den andre. Og bruk til slutt kontinuitetskravet på ψ ved grensen til å uttrykke ψ_{I} og ψ_{II} ved en gjenværende konstant (for eksempel C). Vis regninga.

c) Regn ut verdien av refleksjonskoeffisienten $R = (B^*B)/(A^*A)$. Hva er den prosentvise sannsynligheten for at partikkelen blir kastet tilbake fra potensialtrinnet?

d) En mer konsistent regning med $E > V_0$ som i læreboka side 71/72, ville gitt at (det skal du ikke utlede)

$$A = \frac{1}{2}C\sqrt{1 + \frac{k_2}{k_1}}, \qquad B = \frac{1}{2}C\sqrt{1 - \frac{k_2}{k_1}} \qquad (k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar})$$

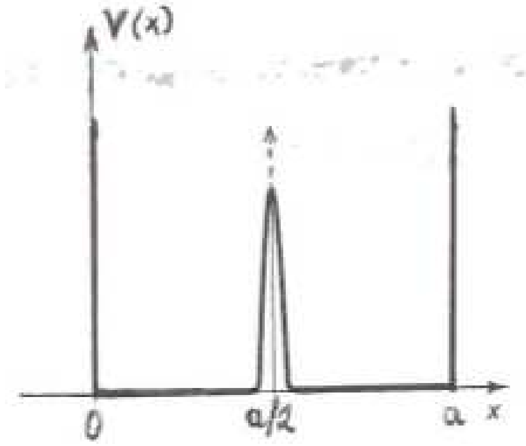
Hvordan stemmer våre resultater for ψ_{I} ovenfor med grenseverdiene for disse uttrykkene for A og B, når E der nærmer seg V_0 ovenfra?[1]

[1]Til etterretning for de nysgjerrige: – Regninga ville dessuten gi en antydning om i hvilken forstand ψ_{II} er normaliserbar. Men det er ikke meningen at du skal filosofere over *dette* akkurat her på eksamen, heller ikke over at resultatet du fant for ψ_{I} beskriver en stående bølge som dannes av innkommende og reflektert bølge.

Oppgave 2

En partikkel med energi E og masse m kan bevege seg i en uendelig dyp endimensjonal potensialbrønn med bredde a. Bunnen av potensialbrønnen kan betraktes som flat, bortsett fra en barriere midt i brønnen som kan approksimeres med en deltafunksjon:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x \leq 0 \cup x \geq a) \\ \lambda\, \delta(x - a/2) & (0 < x < a) \end{cases}$$



Du får oppgitt at tidsuavhengige løsninger for bølgefunksjon og energinivåer i tilfellet *uten* midtbarriere, dvs. helt flat brønnbunn for $0 < x < a$ med $V = 0$ overalt der, er

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \qquad (0 < x < a)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\, n^2\ , \qquad n = 1, 2, 3 \ldots$$

a) Bruk tidsuavhengig perturbasjonsteori med $H_1 = \lambda\, \delta(x - a/2)$ til å beregne laveste ordens energiforskyvning pga. barrieren, $E^{(1)}$, av energien til grunntilstanden.

b) Hva er dimensjonaliteten, evt. benevningen, til konstanten λ?

c) Hva kalles fenomenet som gjør at partikkelen kan spasere gjennom barrieren der potensialet er mye høyere enn dens energi?

d) I kurset har vi støtt på tilfeller der $E^{(1)} = 0$, men $E^{(2)} \neq 0$, for perturbasjonene av grunntilstanden $\psi = \psi_0$ (se uttrykkene på forsida). Begrunn, gjerne helt kort men konsist, hvorfor laveste ordens virkning av H_1 da er å *senke* grunntilstandsenergien.[2]

e) Til slutt i denne oppgaven:
Betrakt i stedet en kubisk *tredimensjonal* potensialbrønn med sidekantlengde a, *uten* barriere. Du blir minnet på om at energinivåene er gitt ved (det skal du ikke utlede)

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\, (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

med n_x, n_y og n_z positive heltall. Finn degenerasjonsgraden til energinivået $E = 7\, \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$.

[2]Forutsatt ikke-degenerert grunntilstand – noe som er tilfelle for alle kjente systemer, og som dessuten danner grunnlag for termodynamikkens tredje lov.

Oppgave 3

a) Hvis elektronet i et hydrogenatom er i en tilstand med $n = 2$, hva er da den mest mulig negative verdien av det totale magnetiske kvantetallet m_j?

b) Finn et matriseuttrykk for S_+, stigeoperatoren for $s = 1/2$. Regn ut $S_+|\downarrow>$ og $S_+|\uparrow>$. Hva er det fysiske innholdet av de to resultatene?

c) I fler-elektron-atomer blir subskallene fylt i rekkefølgen $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, \ldots$ Hva står s, p og d for? Nevn kort den fysiske grunnen til denne rekkefølgen av fylling av s-, p- og d-skallene for hver hovedkvantetallverdi, samt grunnen til at energitilstanden med $n = 4$, $l = 0$ blir dratt under den med $n = 3$, $l = 2$.

d) Et natriumatom (atomnummer 11) har elektronkonfigurasjonen $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s$ i grunntilstanden. Hva er tilsvarende elektronkonfigurasjon for et kaliumatom (atomnummer 19)?

Oppgave 4

Noen raskt besvarte (kort men konsist) hummer-og-kanari-spørsmål og regninger:

a) Hva er grunnen til at hermiteske operatorer ($A^\dagger = A$) er viktige i kvantemekanikk? Og hva er generelt $(AB)^\dagger$ uttrykt ved $A^\dagger$ og $B^\dagger$ lik (nok å skrive det, behøves ikke utledet)?

b) Regn ut kommutatoren $[D, X]$.

c) Hva er grunnen til at for $s = 1/2$ kan vi beskrive spinnet i en vilkårlig retning som en lineærkombinasjon av spinn opp og ned i z-retning?

d) Et elektron er opprinnelig i tilstanden $|\downarrow>$, dvs. med $m_s = -1/2$ i z-retning. Så måler vi spinnet langs x-aksen. Hva er sannsynligheten for å finne at elektronspinnet peker i $+x$-retning, dvs. at det er i tilstanden $|\rightarrow>$?

e) Betrakt to ikke-vekselvirkende identiske partikler, hver med $s = 1/2$, i en endimensjonal boks med lengde a. Hvis du finner at tilstanden har rombølgefunksjonen

$$\psi_{11} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)$$

som tilsvarer lavest mulig energi, hvorfor konkluderer du da med at spinnene må danne den antisymmetriske singlettilstanden

$$|0\,0> = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow> - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow>$$

f) Regn ut normaliseringskonstanten c for vektoren $\boldsymbol{x} = c \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 3i \end{pmatrix}$.

– Fortsatt god jul –