



Universitetet
i Stavanger

DET TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE FAKULTET

EKSAMEN I: FYS320 Kvantemekanikk **DATO:** 10. februar 2014

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: **Feite** typer angir vektorer

OPPGITT: (Man skal vite hva uttrykkene står for)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad \cos y = \frac{1}{2} (e^{iy} + e^{-iy})$$
$$E^{(1)} = \langle \psi_n | H_1 | \psi_n \rangle \quad E^{(2)} = \sum_{i \neq n} \frac{|\langle \psi_n | H_1 | \psi_i \rangle|^2}{E_n - E_i} \quad \delta(x) = 0 \quad (\text{for } x \neq 0)$$

$$\langle \psi_a | O | \psi_b \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_a^*(x) O \psi_b(x) dx \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) f(x) dx = f(a)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad l \leq n - 1 \quad (\text{H-atom})$$

$$m_j = -j, -j + 1, \dots, 0, \dots, j - 1, j \quad (z\text{-komponenter generelt, også for } j \rightarrow l \text{ og } j \rightarrow s)$$

$$j = |l - s|, |l - s| + 1, \dots, l + s - 1, l + s \quad (\text{totaldreieimpuls})$$

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

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

$$P = -i\hbar D \quad (\text{impuls}), \quad D = \frac{\partial}{\partial x}, \quad X = x, \quad Z = z$$

$$|\swarrow\rangle \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$P = |\langle f | i \rangle|^2 \quad (\text{sannsynlighet, } i \text{ for begynnelsestilstand, } f \text{ for slutttilstand})$$

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle = x_1^* y_1 + x_2^* y_2 + \dots + x_n^* y_n$$

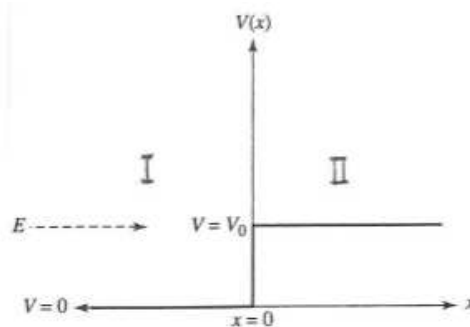
Oppgave 1

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

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}} &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & (k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}) \\ \psi_{\text{II}} &= C + Dx \end{aligned}$$



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 $x \rightarrow \infty$ 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)

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

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

¹Til 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

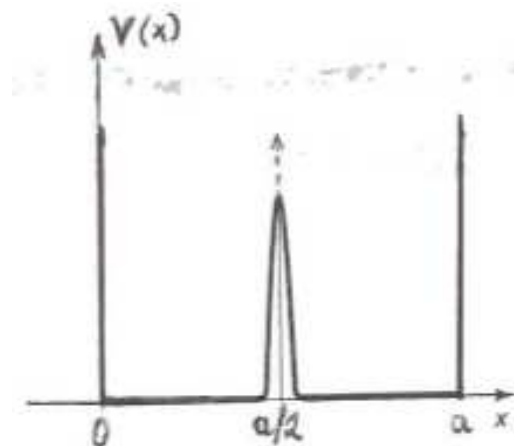
En partikkel med energi E og masse m kan bevege seg i en uendelig dyp endimensjonal potensialbrønn med bredde a . Bunnen av potensialbrønnen kan betraktes som flat, bortsett fra en barriere midt i brønnen som kan approksimeres med en deltafunksjon:

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

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

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

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



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. benevnningen, 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 uendelig dyp *to-dimensjonal* kvadratisk potensialbrønn med sidekantlengde a , *uten* barriere. Du blir minnet på om at energinivåene er gitt ved (det skal du ikke utlede)

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

med n_x og n_y positive heltall. Finn degenerasjonsgraden til energinivået $E = \frac{5}{2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}$.

²Forutsatt 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 $n = 3$, hva er da den mest mulig negative verdien av det totale magnetiske kvantetallet m_j ?

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

c) I fler-elektron-atomer blir subskallene fylt i rekkefølgen $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, \dots$. 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 Na-atom (atomnummer 11) har elektronkonfigurasjonen $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ i grunntilstanden. Hva er tilsvarende elektronkonfigurasjon for et Ca-atom (atomnummer 20)?

Oppgave 4

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

a) En partikkel er i tilstanden $|\phi\rangle$, som har $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ som ortonormal basis, med $H|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle$ for alle j . Basisvektorene oppfyller relasjonen $\sum_{j=1}^n |\psi_j\rangle\langle\psi_j| = 1$. La Z stå for posisjonsoperatoren i z -retning. Betrakt en operator Q som oppfyller

$$\langle Q \rangle = \sum_{m=1}^n E_m |\langle\phi|Z|\psi_m\rangle|^2$$

Utleid et uttrykk for denne operatoren Q som funksjon av H og Z , men som ikke inneholder E_m .

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

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

d) Et elektron er opprinnelig i tilstanden $|\downarrow\rangle$, dvs. med $m_s = -1/2$ i z -retning. Så måler vi spinn langs y -aksen. Hva er sannsynligheten for å finne at elektronspinnets peker i $-y$ -retning, dvs. at det er i tilstanden $|\swarrow\rangle$?

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

$$\psi_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2}{a} \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) - \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \right]$$

(som tilsvarer nest laveste energinivå), hvorfor konkluderer du da med at spinnene må danne en av triplettilstandene $|11\rangle, |10\rangle$ eller $|1-1\rangle$?

f) Regn ut normaliseringskonstanten c for vektoren $\mathbf{x} = c \begin{pmatrix} -1 \\ 4i \end{pmatrix}$.