

FYS2140 Kvantefysikk, Oblig 12

Mitt **navn** og **gruppenummer**

3. mai 2012

Obliger i FYS2140 merkes med navn og gruppenummer!

Denne obligen var hele skriftlig eksamen våren 2007. Den første oppgaven studerer vibrasjon i diatomiske molekyl med et bestemt potensiale. Den andre oppgaven dreier seg igjen om partikkel i brønn/boks, denne gangen med to-partikkeltilstander. Husk at eksamensoppgaver gjerne har svar med lite regning!

Vi har plassert ukens tilleggsoppgave, Oppgave 4.33 fra Griffiths, bakerst i obligen slik at den er lett å finne, men denne er altså ikke en del av obligen. Merk at denne oppgaven er nokså utfordrende og krever full forståelse av store deler av pensum, inkludert litt kjennskap til spinn-matrisene som ligger helt i grenseland av pensum.

Oppgave 1 I denne oppgaven skal vi studere vibrasjoner i diatomiske molekyl. Den effektive, endimensjonale Schrödingerligningen for systemet kan skrives som

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + V(r)\psi(r) = E_{\text{vib}}\psi(r), \quad (1)$$

der $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ er den reduserte massen (m_1 og m_2 er massene til de to atomene i molekylet), r er den relative koordinaten, det vil si avstanden mellom atomene, og $V(r)$ er det effektive potensialet de to atomene opplever. For molekyl med kovalent binding brukes ofte det såkalte *Morsepotensialet*,

$$V(r) = A \left[e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)} \right], \quad (2)$$

der A , a og r_0 er parametre som har forskjellige verdier for ulike typer av molekyl. Figur 1 viser en skisse av dette potensialet.

- a) Vis at likevektsavstanden mellom atomene (altså avstanden med minst potensiell energi) er gitt ved $r = r_0$.

Vi skal nå studere små utslag rundt denne likevekten.

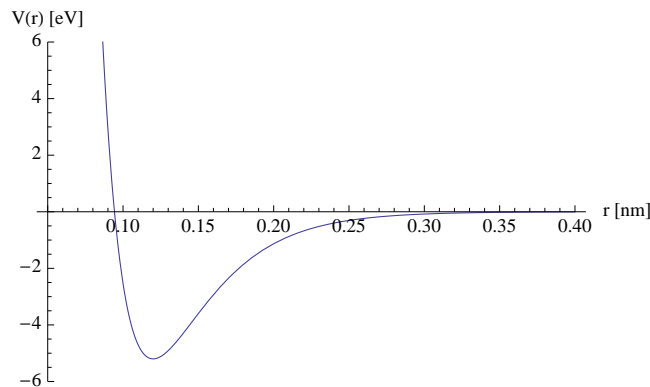
- b) Hvis vi antar at utslagene (det vil si $a(r - r_0)$) er små, kan vi tilnærme potensialet ved en Taylorutvikling til 2. orden rundt likevektspunktet. Vis at dette tilnærmede potensialet blir

$$\tilde{V}(r) = V(r_0) + \frac{1}{2}K(r - r_0)^2, \quad (3)$$

der $K = 2Aa^2$, og at Schrödingerligningen nå kan skrives som

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\tilde{\psi}(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}Ky^2\tilde{\psi}(y) = \epsilon\tilde{\psi}(y), \quad (4)$$

der $y = r - r_0$, $\tilde{\psi}(y) = \psi(y + r_0)$, og $\epsilon = E_{\text{vib}} - V(r_0)$. Hva kaller vi systemet som beskrives av denne typen Schrödingerligning?



Figur 1: Et plot av Morsepotensialet i oppgaven.

- c) Sett opp (uten utledning) det kvantiserte energispekteret som følger fra Schrödingerligningen (4), uttrykt ved konstantene a , A og μ . Hvorfor er ikke dette uttrykket gyldig for vilkårlig store kvantetall n ?

For oksygenmolekylet O_2 finner man følgende tilnærmede verdier for konstantene i Morsepotensialet: $A = 5.2 \text{ eV}$, $r_0 = 0.12 \text{ nm}$ og $a = 27 \text{ nm}^{-1}$.

- d) Beregn molekylets bindingsstyrke (“fjærkonstanten”) K , samt den karakteristiske energien for vibrasjonsoverganger, $\hbar\omega_0 = \hbar\sqrt{K/\mu}$ (massen til et oksygenatom er $16 u$; vi minner også om at $\hbar c = 197.3 \text{ eV nm}$). Sammenlign det siste svaret med den typiske størrelsen på rotasjonsenergien, som for O_2 er ca. 10^{-3} eV .

Oppgave 2 I denne oppgaven skal vi nok en gang bruke det uendelige bokspotensialet ($V(x) = 0$ for $0 < x < L$, ∞ ellers), som et eksempel på et enkelt, endimensjonalt kvantemekanisk system. Som kjent er energispekteret for en partikkel med masse m gitt ved

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5)$$

med tilhørende egenfunksjoner

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (6)$$

- a) Forklar hva som menes med en egenfunksjon og egenverdi for en operator. Vis at funksjonene ψ_n i (6) *ikke* er egenfunksjoner for bevegelsesmengden, det vil si at bevegelsesmengden ikke har en skarp verdi i disse tilstandene. Gi en enkel kvalitativ forklaring på hvorfor tilstandene i boksen ikke kan ha skarp bevegelsesmengde.

Vi skal nå se på en superposisjon av tilstandene i (6)

$$\psi(x) = \mathcal{N} [\psi_2(x) - 2\psi_4(x) + \psi_6(x) + 2\psi_8(x)]. \quad (7)$$

- b) Beregn normeringskonstanten \mathcal{N} .
- c) Anta at vi måler energien til en partikkel i tilstand (7). Hva er da sannsynligheten for at måleresultatet skal bli $(16\pi^2\hbar^2)/(2mL^2)$? Og hva er sannsynligheten for å finne partikkelen i grunntilstanden?
- d) Vi kan også tenke oss at vi utfører en posisjonsmåling på en partikkel som befinner seg i tilstanden (7). Hva er sannsynligheten (eller mer presist sannsynlighetstettheten) for å finne partikkelen i midten av boksen, $x = (L/2)$? Begrunn svaret. (*Hint*: Ingen regning nødvendig! Bruk de generelle egenskapene til egenfunksjonene ψ_n .)

La oss nå generalisere til en situasjon der det befinner seg to partikler i boksen, henholdsvis med $n = a$ og $n = b$. Vi antar at disse er identiske fermioner og at de befinner seg i en symmetrisk spinntilstand. Vi ser bort fra vekselvirkningen mellom dem.

- e) Vis at romdelen til to-partikkelbølgefunksjonen da kan uttrykkes som en 2×2 determinant,

$$\psi_{\text{rom}}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_a(x_1) & \psi_a(x_2) \\ \psi_b(x_1) & \psi_b(x_2) \end{vmatrix}. \quad (8)$$

Uttrykket (8) kan generaliseres til flere partikler. Antar at vi nå har tre identiske fermioner i boksen, med $n = a$, b og c , og at spinndelen av bølgefunksjonen igjen er symmetrisk. Da kan vi skrive

$$\psi_{\text{rom}}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_a(x_1) & \psi_a(x_2) & \psi_a(x_3) \\ \psi_b(x_1) & \psi_b(x_2) & \psi_b(x_3) \\ \psi_c(x_1) & \psi_c(x_2) & \psi_c(x_3) \end{vmatrix}. \quad (9)$$

- f) Vis at denne bølgefunksjonen er antisymmetrisk under ombytte av et hvilket som helst par av koordinater, og at den oppfyller Pauliprinsippet. (*Hint*: Direkte bruk av determinanters generelle matematiske egenskaper forenkler regningen betraktelig.)

Oppgave 3 Tilleggsoppgave — ikke oblig!

Et elektron er i ro i et oscillerende magnetfelt

$$\vec{B} = B_0 \cos(\omega t) \hat{z}, \quad (10)$$

hvor B_0 og ω er konstanter.

- a) Konstruer en matrise for Hamiltonoperatoren til dette systemet.
- b) Elektronet begynner (ved $t = 0$) i spinn-opp tilstanden i forhold til x -aksen, $\chi(0) = \chi_{\uparrow}$. Bestem $\chi(t)$ ved et vilkårlig senere tidspunkt. *Advarsel:* Dette er en tids-*avhengig* Hamiltonoperator. Du kan derfor ikke finne $\chi(t)$ på den vanlige måten via stasjonære tilstander. Heldigvis, i dette spesielle tilfellet, kan du løse den tids-avhengige Schrödingerlikningen,

$$\hat{H}\chi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\chi, \quad (11)$$

direkte.

- c) Finn sannsynligheten for å få $-\hbar/2$ når du måler S_x . *Svar:*

$$\sin^2\left(\frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t)\right). \quad (12)$$

- d) Hva er den minste verdien som kreves for feltet B_0 for å få en fullstendig flipp av S_x fra starttilstanden?