

TENTAMEN TEORETISK FYSIK SI1155/SI1151

Måndag 2021-05-31 kl 14:00-19:00

Skriv på varje sida	Namn och problemnummer
Motivera noga	Otillräckliga motiveringar leder till poängavdrag
Hjälpmedel	BETA, miniräknare, formelblad på skrivningens sida 3-5
Poängsättning	6 poäng per problem
Examinator	Mats Wallin tel 073 765 2000

1. En väteatom är i tillståndet

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{10}}(\psi_{100} + 2\psi_{211} + 2i\psi_{210} + \psi_{21-1})$$

där ψ_{nlm} är energiegentillstånden.

- (a) Bestäm möjliga mätvärdena på energin samt sannolikheterna att få dessa värden.
- (b) Beräkna väntevärdet av L_z .
- (c) Beräkna väntevärdet av L_x .

2. Den harmoniska oscillatorn kan användas för att modellera vibrationer hos molekyler. Morse-potentialen för vibrationer kring jämviktsbindningslängden x_0 hos en diatomär molekyl är

$$V = D(e^{-2\alpha(x-x_0)} - 2e^{-\alpha(x-x_0)})$$

där D, α är positiva konstanter. Bindningsenergin är $-D$ och $\alpha^2 = \omega^2\mu/(2D)$ där μ är molekylen effektiva massa.

- (a) Visa att en harmonisk oscillatorpotential fås för små vibrationer dvs när $|x - x_0|$ är liten och ange energinivåerna.
- (b) Bestäm den kubiska korrekturen till Morse-potentialen. Behandla denna som en störning och beräkna första ordningens korrektion till energinivåerna.

3. Tre partiklar kan ockupera ortogonala enpartikeltillstånd ψ_a, ψ_b, ψ_c . Enpartikeltillstånden innehåller även spinn om partiklarna har spinn. Beroende på partikelslag kan enpartikeltillstånden ockuperas av mer än en partikel.

- (a) Hur många olika oberoende trepartikeltillstånd finns om partiklarna är särskiljbara?
- (b) Ange samtliga trepartikeltillstånd om partiklarna är identiska bosoner.
- (c) Ange samtliga trepartikeltillstånd om partiklarna är identiska fermioner.

VÄND!

4. Vid låg temperatur kan rotationsrörelse hos en diatomär molekyl modelleras som en rotor med Hamiltonoperator

$$H^0 = \frac{L^2}{2I}$$

där $\mathbf{L}$ är rörelsemängdsmomentet och konstanten I är tröghetsmomentet. I ett svagt elektriskt fält $\mathbf{E} = \mathcal{E}\mathbf{e}_z$ störs systemet av potentialen

$$V = -D\mathcal{E} \cos \theta$$

där konstanten D är dipolmomentet. Antag att störningen slås på vid tiden $t = 0$ när rotorn är i grundtillståndet. Bestäm vilka tillstånd som kan exciteras och sannolikheten för att hitta rotorn i dessa tillstånd vid tiden t .

5. En väteatom störs av en kombination av ett pålagt magnetfält och av hyperfinstruktur. Störningen ges av

$$V = \frac{\mu_B}{\hbar} B(L_z + 2S_z) + \frac{A}{\hbar^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{I}$$

där L_z är rörelsemängdsmomentets z-komponent, S_z elektronspinnets z-komponent, $\mathbf{S}$ elektronspinnets, och $\mathbf{I}$ vätekärnans protonspinn. Övriga kvantiteter i V är konstanter. Beräkna första ordningens korrektion till grundtillståndsenergin.

LYCKA TILL!

Lösning

1. En väteatom är i tillståndet

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{10}}(\psi_{100} + 2\psi_{211} + 2i\psi_{210} + \psi_{21-1})$$

där ψ_{nlm} är energiegentillstånden.

(a) Bestäm möjliga mätvärdena på energin samt sannolikheterna att få dessa värden.

(b) Beräkna väntevärdet av L_z .

(c) Beräkna väntevärdet av L_x .

(a) Möjliga mätvärden är E_1, E_2 med sannolikheter

$$P_1 = 1/10, P_2 = (2^2 + 2^2 + 1)/10 = 9/10$$

(b)

$$\langle L_z \rangle = \sum_{nlm} m\hbar |c_{nlm}|^2 = (0 + 1 \cdot 4/10 + 0 \cdot 4/10 - 1 \cdot 1/10)\hbar = \frac{3}{10}\hbar$$

(c) Stegoperatorer:

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$$

$$L_{\pm}|lm\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\hbar|l, m\pm 1\rangle$$

Detta ger:

$$L_+(|100\rangle + 2|211\rangle + 2i|210\rangle + |21-1\rangle) = (2i|211\rangle + |210\rangle)\sqrt{2}\hbar$$

$$L_- (|100\rangle + 2|211\rangle + 2i|210\rangle + |21-1\rangle) = (2|210\rangle + 2i|21-1\rangle)\sqrt{2}\hbar$$

$$(L_+ + L_-)(|100\rangle + 2|211\rangle + 2i|210\rangle + |21-1\rangle) = (2i|211\rangle + 3|210\rangle + 2i|21-1\rangle)\sqrt{2}\hbar$$

Beräkna väntevärdet:

$$\langle L_x \rangle = \frac{1}{2 \cdot 10}(\langle 100| + 2\langle 211| - 2i\langle 210| + \langle 21-1|)(L_+ + L_-)(|100\rangle + 2|211\rangle + 2i|210\rangle + |21-1\rangle)$$

$$= \frac{\sqrt{2}\hbar}{20}(\langle 100| + 2\langle 211| - 2i\langle 210| + \langle 21-1|)(2i|211\rangle + 3|210\rangle + 2i|21-1\rangle)$$

$$= \frac{\sqrt{2}\hbar}{20}(4i - 6i + 2i) = 0$$

2. Den harmoniska oscillatoren kan användas för att modellera vibrationer hos molekyler. Morse-potentialen för vibrationer kring jämviktsbindningslängden x_0 hos en diatomär molekyl är

$$V = D(e^{-2\alpha(x-x_0)} - 2e^{-\alpha(x-x_0)})$$

där D, α är positiva konstanter. Bindningsenergin är $-D$ och $\alpha^2 = \omega^2\mu/(2D)$ där μ är molekylen effektiva massa.

(a) Visa att en harmonisk oscillatorpotential fås för små vibrationer dvs när $|x - x_0|$ är liten och ange energinivåerna.

(b) Bestäm den kubiska korrekturen i Morse-potentialen. Behandla denna som en störning och beräkna första ordningens korrektion till energinivåerna.

(a) Skifta origo till $x = x_0$. Då fås potentialen $V = D(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$. Serieutveckla exponentialfunktionerna:

$$\begin{aligned} V &= D \left(1 - 2\alpha x + \frac{1}{2}(2\alpha x)^2 - \frac{1}{6}(2\alpha x)^3 + \dots - 2 \left(1 - \alpha x + \frac{1}{2}(\alpha x)^2 - \frac{1}{6}(\alpha x)^3 + \dots \right) \right) \\ &= -D + D\alpha^2 x^2 - D\alpha^3 x^3 + \dots = -D + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 - D\alpha^3 x^3 + \dots \end{aligned}$$

Om endast termer upp till x^2 behålls fås en HO:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - D + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$$

Energinivåerna blir

$$E_n = -D + (n + 1/2)\hbar\omega = -D + (n + 1/2)\hbar\alpha\sqrt{2D/\mu}, n = 0, 1, 2, \dots$$

(b) Den anharmoniska kubiska termen i expansionen ovan är $V_a = -D\alpha^3 x^3$. Första ordningens korrektion:

$$E_0^1 = \langle n | V_a | n \rangle = -D\alpha^3 \langle n | x^3 | n \rangle = -D\alpha^3 \int_{-\infty}^{\infty} x^3 |\psi_n(x)|^2 dx = 0$$

eftersom integranden är udda då x^3 är udda och $|\psi_n(x)|^2$ är jämn.

Alternativt kan inre produkten beräknas med stegoperatorer:

$$\langle n | x^3 | n \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \langle n | (a^\dagger + a)^3 | n \rangle = 0$$

eftersom termerna i produkten $(a^\dagger + a)^3$ innehåller olika antal faktorer $a^\dagger$ och a .

Alltså blir första ordningens korrektion från den kubiska potentialen

$$E_n^1 = 0$$

3. Tre partiklar kan ockupera ortogonala enpartikeltillstånd ψ_a, ψ_b, ψ_c . Enpartikeltillstånden innehåller även spinnet om partiklarna har spinn. Beroende på partikelslag kan enpartikeltillstånden ockuperas av mer än en partikel.

(a) Hur många olika oberoende trepartikeltillstånd finns om partiklarna är särskiljbara?

(b) Ange samtliga trepartikeltillstånd om partiklarna är identiska bosoner.

(b) Ange samtliga trepartikeltillstånd om partiklarna är identiska fermioner.

(a) De oberoende tillstånden är $\psi_a(1)\psi_a(2)\psi_a(3)$, $\psi_b(1)\psi_a(2)\psi_a(3)$, osv. Med tre tillstånd för tre särskiljbara partiklar fås $(3 \text{ tillstånd för partikel 1}) \times (3 \text{ tillstånd för partikel 2}) \times (3 \text{ tillstånd för partikel 3}) = 3^3 = 27$ olika tillstånd.

(b) Bosoner: Det finns 10 oberoende tillstånd som är symmetriska under utbyte av par av partiklar:

$$\begin{aligned} & \psi_a(1)\psi_a(2)\psi_a(3) \\ & \psi_b(1)\psi_b(2)\psi_b(3) \\ & \psi_c(1)\psi_c(2)\psi_c(3) \\ & \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_a(1)\psi_a(2)\psi_b(3) + \psi_a(1)\psi_b(2)\psi_a(3) + \psi_b(1)\psi_a(2)\psi_a(3)) \\ & \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_a(1)\psi_a(2)\psi_c(3) + \psi_a(1)\psi_c(2)\psi_a(3) + \psi_c(1)\psi_a(2)\psi_a(3)) \\ & \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_b(1)\psi_b(2)\psi_a(3) + \psi_b(1)\psi_a(2)\psi_b(3) + \psi_a(1)\psi_b(2)\psi_b(3)) \\ & \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_b(1)\psi_b(2)\psi_c(3) + \psi_b(1)\psi_c(2)\psi_b(3) + \psi_c(1)\psi_b(2)\psi_b(3)) \\ & \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_c(1)\psi_c(2)\psi_a(3) + \psi_c(1)\psi_a(2)\psi_c(3) + \psi_a(1)\psi_c(2)\psi_c(3)) \\ & \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_c(1)\psi_c(2)\psi_b(3) + \psi_c(1)\psi_b(2)\psi_c(3) + \psi_b(1)\psi_c(2)\psi_c(3)) \\ & \frac{1}{\sqrt{6}}(\psi_a(1)\psi_b(2)\psi_c(3) + \psi_b(1)\psi_c(2)\psi_a(3) + \psi_c(1)\psi_a(2)\psi_b(3) \\ & \quad + \psi_a(1)\psi_c(2)\psi_b(3) + \psi_b(1)\psi_a(2)\psi_c(3) + \psi_c(1)\psi_b(2)\psi_a(3)) \end{aligned}$$

Notera att ockupationstalsrepresentationen ger en kompakt notation för dessa tillstånd:

$$|n_a, n_b, n_c\rangle = |300\rangle, |030\rangle, |003\rangle, |210\rangle, |201\rangle, |120\rangle, |021\rangle, |102\rangle, |012\rangle, |111\rangle$$

(c) Fermioner: Det finns ett antisymmetriskt tillstånd:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_b(1) & \psi_c(1) \\ \psi_a(2) & \psi_b(2) & \psi_c(2) \\ \psi_a(3) & \psi_b(3) & \psi_c(3) \end{vmatrix} = \\ & = \frac{1}{\sqrt{6}}(\psi_a(1)\psi_b(2)\psi_c(3) + \psi_b(1)\psi_c(2)\psi_a(3) + \psi_c(1)\psi_a(2)\psi_b(3) \\ & \quad - \psi_a(1)\psi_c(2)\psi_b(3) - \psi_b(1)\psi_a(2)\psi_c(3) - \psi_c(1)\psi_b(2)\psi_a(3)) \end{aligned}$$

4. Vid låg temperatur kan rotationsrörelse hos en diatomär molekyl modelleras som en rotor med Hamiltonoperator

$$H^0 = \frac{L^2}{2I}$$

där $\mathbf{L}$ är rörelsemängdsmomentet och konstanten I är tröghetsmomentet. I ett svagt elektriskt fält $\mathbf{E} = \mathcal{E}\mathbf{e}_z$ störs systemet av potentialen

$$V = -D\mathcal{E} \cos \theta$$

där konstanten D är dipolmomentet. Antag att störningen slås på vid tiden $t = 0$ när rotorn är i grundtillståndet. Bestäm vilka tillstånd som kan exciteras och sannolikheten för att hitta rotorn i dessa tillstånd vid tiden t .

De ostörda egenfunktionerna är klotfunktioner: Y_l^m och det ostörda grundtillståndet är Y_0^0 . Tidsberoende störningsräkning:

$$c_{lm}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle lm|V|00\rangle e^{i\omega_0 t'} dt'$$

där $\hbar\omega_0 = E_{lm} - E_{00}$. Beräkna matriselementet för störningen. Ur formelsamlingen:

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \Rightarrow V = -D\mathcal{E} \cos \theta = -D\mathcal{E} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0$$

Inre produkten blir

$$\langle lm|V|00\rangle = -D\mathcal{E} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle lm|Y_1^0|00\rangle$$

Använd att $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ är en konstant:

$$\begin{aligned} \langle lm|Y_1^0|00\rangle &= \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi (Y_l^m)^* Y_1^0 Y_0^0 = Y_0^0 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi (Y_l^m)^* Y_1^0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \langle lm|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \delta_{l,1} \delta_{m,0} \end{aligned}$$

eftersom egenfunktionerna Y_l^m är ON. Detta ger

$$\langle lm|V|00\rangle = -\frac{D\mathcal{E}}{\sqrt{3}} \delta_{l,1} \delta_{m,0}$$

Alltså kan bara Y_1^0 exciteras i första ordningens störningsräkning. Excitationssannolikheten blir

$$P_{10}(t) = |c_{10}(t)|^2 = \frac{D^2 \mathcal{E}^2}{3\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega_0 t} - 1}{i\omega_0} \right|^2 = \frac{4D^2 \mathcal{E}^2}{3\hbar^2 \omega_0^2} \left| \frac{e^{i\omega_0 t/2} - e^{-i\omega_0 t/2}}{2i} \right|^2 = \frac{4D^2 \mathcal{E}^2}{3\hbar^2 \omega_0^2} \sin^2(\omega_0 t/2)$$

5. En väteatom störs av en kombination av ett pålagt magnetfält och av hyperfinstruktur. Störningen ges av

$$V = \frac{\mu_B}{\hbar} B(L_z + 2S_z) + \frac{A}{\hbar^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{I}$$

där L_z är rörelsemängdsmomentets z-komponent, S_z elektronspinnets z-komponent, $\mathbf{S}$ elektronspinnets, och $\mathbf{I}$ vätekärnans protonspinn. Övriga kvantiteter i V är konstanter. Beräkna första ordningens korrektion till grundtillståndensenergin.

I grundtillståndet är banrörelsemängdsmomentet noll så L_z -termen ger inget bidrag. Störningen är inte diagonal i någon av de vanliga baserna så vi behöver bestämma störningsmatrisen i en bas. Använd kopplad bas där hyperfinkopplingen är diagonal: $|j, m_j\rangle = |11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle, |00\rangle$. Hyperfinkorrektionerna beräknas mha totala spinnets $J^2 = (\mathbf{S} + \mathbf{I})^2 = S^2 + I^2 + 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{I} \Rightarrow \mathbf{S} \cdot \mathbf{I} = \frac{1}{2}(J^2 - S^2 - I^2)$. Detta ger

$$\langle 1m_j | V_{HF} | 1m_j \rangle = \frac{A}{2\hbar^2} \langle 11 | J^2 - S^2 - I^2 | 11 \rangle = \frac{A}{2} (1(1+1) - 2(1/2)(1/2+1)) = \frac{A}{4}$$

$$\langle 00 | V_{HF} | 00 \rangle = \frac{A}{2} (0 - 3/2) = -\frac{3A}{4}$$

Beräkna Zeemantermens matriselement i kopplade basen. Notation: i $\uparrow\uparrow$ är den första faktorn elektronspinnets, och den andra faktorn protonspinnets. Nu blir

$$S_z |11\rangle = \underbrace{S_z \uparrow\uparrow}_{=\frac{\hbar}{2}\uparrow} = \frac{\hbar}{2} |11\rangle$$

$$S_z |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (S_z \uparrow\downarrow + S_z \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar}{2} |00\rangle$$

$$S_z |1-1\rangle = S_z \downarrow\downarrow = -\frac{\hbar}{2} |1-1\rangle$$

$$S_z |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (S_z \uparrow\downarrow - S_z \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar}{2} |10\rangle$$

Störningsmatrisen blir

$$W = \begin{pmatrix} \mu_B B + A/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A/4 & 0 & \mu_B B \\ 0 & 0 & -\mu_B B + A/4 & 0 \\ 0 & \mu_B B & 0 & -3A/4 \end{pmatrix}$$

Första ordningens energikorrektioner är rötterna till sekulära ekvationen:

$$\det \begin{pmatrix} \mu_B B + A/4 - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A/4 - E & 0 & \mu_B B \\ 0 & 0 & -\mu_B B + A/4 - E & 0 \\ 0 & \mu_B B & 0 & -3A/4 - E \end{pmatrix} =$$

$$= (\mu_B B + A/4 - E)(-\mu_B B + A/4 - E)((A/4 - E)(-3A/4 - E) - (\mu_B B)^2) = 0$$

Lösningarna blir

$$E^1 = \pm \mu_B B + A/4$$

samt

$$(E - A/4)(E + 3A/4) = ((E + A/4) - A/2)((E + A/4) + A/2) = (E + A/4)^2 - (A/2)^2 = (\mu_B B)^2 \Rightarrow$$

$$E^1 = -A/4 \pm \sqrt{(A/2)^2 + (\mu_B B)^2}$$

Alternativt kan W beräknas i produktbasen: $|1\rangle = \uparrow\uparrow, |2\rangle = \uparrow\downarrow, |3\rangle = \downarrow\uparrow, |4\rangle = \downarrow\downarrow$. Använd $S_{\pm} = S_x \pm iS_y \Rightarrow S_x = (S_+ + S_-)/2, S_y = (S_+ - S_-)/2i$ vilket ger

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{I} = \frac{1}{4}(S_+ + S_-)(I_+ + I_-) - \frac{1}{4}(S_+ - S_-)(I_+ - I_-) + S_z I_z = \frac{1}{2}(S_+ I_- + S_- I_+) + S_z I_z$$

Detta ger matriselementen $W_{ij} = \langle i|V|j\rangle$:

$$W_{11} = \langle \uparrow\uparrow | \frac{2\mu_B}{\hbar}BS_z + \frac{A}{\hbar^2}S_z I_z | \uparrow\uparrow \rangle = \mu_B B + \frac{A}{4}$$

$$W_{22} = \langle \uparrow\downarrow | \frac{2\mu_B}{\hbar}BS_z + \frac{A}{\hbar^2}S_z I_z | \uparrow\downarrow \rangle = \mu_B B - \frac{A}{4}$$

$$W_{33} = \langle \downarrow\uparrow | \frac{2\mu_B}{\hbar}BS_z + \frac{A}{\hbar^2}S_z I_z | \downarrow\uparrow \rangle = -\mu_B B - \frac{A}{4}$$

$$W_{44} = \langle \downarrow\downarrow | \frac{2\mu_B}{\hbar}BS_z + \frac{A}{\hbar^2}S_z I_z | \downarrow\downarrow \rangle = -\mu_B B + \frac{A}{4}$$

Det finns ytterligare två nollskilda matriselement:

$$W_{23} = \langle \uparrow\downarrow | \frac{A}{\hbar^2} \frac{1}{2}(S_+ I_- + S_- I_+) | \downarrow\uparrow \rangle = \frac{A}{2} = W_{32}$$

mha $S_+ \downarrow = \hbar \uparrow, S_- \uparrow = \hbar \downarrow, S_+ \uparrow = 0, S_- \downarrow = 0$, och pss för protonspinnets. Första ordningens korrekationer fås med

$$\det \begin{pmatrix} \mu_B B + A/4 - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_B B - A/4 - E & A/2 & 0 \\ 0 & A/2 & -\mu_B B - A/4 - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mu_B B + A/4 - E \end{pmatrix} =$$

$$= (\mu_B B + A/4 - E)(-\mu_B B + A/4 - E)((\mu_B B - A/4 - E)(-\mu_B B - A/4 - E) - (A/2)^2) = 0$$

Detta ger lösningen

$$E^1 = \pm \mu_B B + A/4$$

samt

$$(\mu_B B - A/4 - E)(-\mu_B B - A/4 - E) - (A/2)^2 = -(\mu_B B)^2 + (A/4 + E)^2 - (A/2)^2 = 0 \Rightarrow$$

$$E^1 = -A/4 \pm \sqrt{(A/2)^2 + (\mu_B B)^2}$$