Kwantummechanica 2

Tentamen 7 November 2008

◇ *Schrijf je naam en studentennummer op elk tentamenblad.*
◇ *Het tentamen heeft 4 opdrachten.*
◇ *Lees de opdrachten nauwkeurig en geef volledige antwoorden.*

Opdracht 1

a) Bereken de commutator $[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm]$. *[4 punten]*

$\pm\hbar\hat{J}_\pm$

b) Een deeltje heeft een impulsmoment met z-component $L_z = m\hbar$ en grootte $\sqrt{l(l+1)}\hbar$. Laat zien dat $\langle lm|\hat{L}_x|lm\rangle = \langle lm|\hat{L}_y|lm\rangle = 0$.*[4 punten]*

$\langle lm|\hat{L}_x|lm\rangle = (1/2)\langle lm|\hat{L}_+ + \hat{L}_-|lm\rangle = 0$

c) Een deeltje heeft een impulsmoment met z-component $L_z = m\hbar$ en grootte $\sqrt{l(l+1)}\hbar$. Laat zien dat $\langle\hat{L}_x^2\rangle = \langle\hat{L}_y^2\rangle = \frac{\hbar^2 l(l+1) - m^2\hbar^2}{2}$ *[4 punten]*

Er geldt:

$$\langle lm|\hat{L}_x^2|lm\rangle = \langle lm|\hat{L}^2|lm\rangle - \langle lm|\hat{L}_y^2|lm\rangle - \langle lm|\hat{L}_z^2|lm\rangle$$

Gebruik makend van $\hat{L}_y^2 = -(1/2)(\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2) + \hat{L}_x^2$ geeft dit

$$\hat{L}_x^2 = \frac{1}{2}(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2) + \frac{1}{4}(\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2),$$

hetgeen tot het gevraagde antwoord leidt (analoog voor $\hat{L}_y$)

c) De golffunctie van het waterstof atoom kan geschreven worden als $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)$. Schets het radiale deel $R_{00}(r)$, $R_{20}(r)$, en $R21(r)$.*[4 punten]*

R00 is eindig voor r=0 en heeft geen nuldoorgangen; R10 is eindig voor r=0 en heeft een nuldoorgang; R10 is 0 voor R=0 en heeft geen nuldoorgangen

d) Geef de Pauli spin-matrices. Hoe zijn deze gerelateerd aan de spin operatoren S_x, S_y, en S_z?*[4 punten]*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Related via $S_\alpha = \frac{\hbar}{2}\sigma_\alpha$.

e) Een molekuul bevindt zich in een rotationele toestand

$$\frac{3Y_1^1 + 4Y_7^3 + Y_7^1}{\sqrt{26}}.$$

Welke waardes kunnen meting van $\hat{L}$ en $\hat{L}_z$ opleveren, met welke waarschijnlijkheden?*[4 punten]*

$\hat{L}$ kan gelijk zijn aan 1 of aan 7 met waarschijnlijkheden 9/26 en 17/26
$\hat{L}_z$ kan gelijk zijn aan 1 of 3 met waarschijnlijkheden 10/26 en 16/26.

f) Wat beschrijven Clebsch-Gordan coefficienten?*[4 punten]*

Clebsch-Gordan coefficienten: $C_{m1,m2}(l_1, l_2)$
$|C_{m1,m2}(l_1, l_2)|^2$ geeft de waarschijnlijkheid om dat bij een systeem van twee momenta voor het eerste een waarde m_1 gemeten wordt, en voor de tweede m_2. Ook wel

$$|l_1 l_2 LM\rangle = \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} C_{m1,m2}(l_1, l_2)|l_1 m_1\rangle|l_2 m_2\rangle$$

Opdracht 2: Storingsrekening

Een deeltje met massa m zit in een 1 dimensionale potentiaal

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{voor } x < 0 \text{ en } x > a \\ \beta \sin^2(\pi x/a) & \text{voor } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

a) Dit probleem is op te vatten als een 'standaard' probleem met een storing. Geef de Hamilton operator voor het 'standaard' probleem en voor de storing.*[4 punten]*

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0(x)$$

$$V_0(x) = \begin{cases} \infty & \text{voor } x < 0 \text{ en } x > a \\ 0 & \text{voor } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

$$\hat{H}' = V(x)$$

b) Geef de golffuncties en eigenwaardes voor de schrödinger vergelijking van het ongestoorde probleem.*[4 punten]*

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

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

c) Bereken de 1^e orde correctie voor de energie van de eigentoestanden ten gevolge van de storing.*[4 punten]*

$$E_n^{(1)} = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \beta \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

geeft:

$$E_n^{(1)} == \begin{cases} \frac{3}{4}\beta & \text{voor } n = 1 \\ \frac{1}{2}\beta & \text{voor } n > 1 \end{cases}$$

d) Onder welke *twee* voorwaarden is het voorgaande antwoord een goede benadering van de echte energie eigenwaarden van het probleem?*[4 punten]*

β kleiner dan de energie van de toestanden; β kleiner dan de energie verschillen tussen de toestanden.*[4 punten]*

e) Bereken de 2^e orde correctie voor de energie van de eigentoestanden ten gevolge van de storing. *[4 punten]*

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|H_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \frac{2ma^2}{\hbar^2 \pi^2} \sum_{k \neq n} \frac{|H_{nk}|^2}{n^2 - k^2}$$

$$H_{nk} = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \beta \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right) dx$$

Bijmenging treedt op met toestanden $n \pm 2$, dus voor $n = 1$ alleen $n = 3$; voor $n = 2$ alleen $n = 4$ voor alle andere zowel $n - 2$ als $n + 2$.

$$E_1^{(2)} = \frac{1}{32} \beta \frac{2ma^2}{\hbar^2 \pi^2}$$

$$E_2^{(2)} = \frac{1}{48} \beta \frac{2ma^2}{\hbar^2 \pi^2}$$

voor $n > 2$:

$$E_n^{(2)} = \frac{1}{8 - 8n^2} \beta \frac{2ma^2}{\hbar^2 \pi^2}$$

f) Stel dat β tijdsafhankelijk is met $\beta(t) = 2\cos(\omega t)$, wat zijn dan de selectieregels voor overgangen ten gevolge van deze tijdsafhankelijke storing?*[4 punten]*

$\Delta n = \pm 2$

Opmerking:

$$\int_0^1 \sin^2(\pi x) \sin(n\pi x) \sin(m\pi x) dx = \begin{cases} \frac{1}{8}(2 + \delta_{n1}) & \text{voor } n = m \text{ en } n, m \in \mathbb{N} \\ -\frac{1}{8} & \text{voor } n = m \pm 2 \text{ en } n, m \in \mathbb{N} \\ 0 & \text{in alle andere gevallen voor } n, m \in \mathbb{N} \end{cases}$$

Opdracht 3: Heisenberg representatie

Een systeem wordt beschreven door de volgende Hamilton operator:

$$\hat{H}_0 = \epsilon \left(\hat{r}_{1,+}\hat{r}_{1,-} + \hat{r}_{2,+}\hat{r}_{2,-} \right).$$

Het systeem heeft 4 eigenstoestanden toestanden: $|00>$, $|10>$, $|01>$, en $|11>$. Deze toestanden zijn orthonormaal.
$\hat{r}_{i,\pm}$ zijn operatoren waarvoor geldt:
$\hat{r}_{1,+}|00>=|10>$; $\hat{r}_{1,+}|01>=|11>$;$\hat{r}_{1,+}|11>=\hat{r}_{1,+}|10>=0$
$\hat{r}_{1,-}|10>=|00>$; $\hat{r}_{1,-}|11>=|01>$;$\hat{r}_{1,-}|01>=\hat{r}_{1,-}|00>=0$
En analoog voor $\hat{r}_{2,\pm}$, bijvoorbeeld $\hat{r}_{2,-}|11>=|10>$ en $\hat{r}_{2,+}|10>=|11>$

a) Geef de Hamiltonoperator voor $\hat{H}_0$ in de Heisenberg (matrix) notatie. Wat zijn de energieen van de vier eigentoestanden?*[4 punten]*

De ruimte wordt opgespannen door de eigenvectoren $||00\rangle, 0, 0, 0\rangle$, . $|0, |10\rangle, 0, 0\rangle$, etc. De Hamilton operator is dan diagonaal:

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\epsilon \end{pmatrix},$$

Stel dat er een interactie is die gegeven wordt door

$$\hat{H}' = \alpha \left(\hat{r}_{1,+}\hat{r}_{2,-} + \hat{r}_{2,+}\hat{r}_{1-} \right).$$

b) Wat doet deze interactie?*[4 punten]*

Introduceert niet diagonal termen in de hamiltoniaan, het mengt de toestanden $|01\rangle$ en $|10\rangle$.

c) Geef de Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ in de Heisenberg representatie.*[4 punten]*

$$H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & \alpha & 0 \\ 0 & \alpha & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\epsilon \end{pmatrix},$$

d) Bereken de energie eigenwaarden van $\hat{H}$*[4 punten]*

We hebben voor de toestanden $|01\rangle$ en $|10\rangle$

$$\begin{pmatrix} \epsilon - \lambda & \alpha \\ \alpha & \epsilon - \lambda \end{pmatrix},$$

Met det=0 krijgen we $\lambda = \epsilon \pm \alpha$. De toestanden $|00\rangle$ en $|11\rangle$ blijven ongestoord.

e) Geef de orthonormale eigentoestanden van $\hat{H}$ *[4 punten]*

$(1,0,0,0)$, $(0,1,1,0)/\sqrt{2}$,$(0,1,-1,0)/\sqrt{2}$, en $(0,0,0,1)$

f) Wat is de grondtoestand voor $\alpha > \epsilon > 0$ *[4 punten]*

De toestand $(0,-1,1,0)/\sqrt{2}$ met energie $\epsilon - \alpha$

Opdracht 4

De Hamilton operator voor een rotor (traagheidsmoment I) in een magnetisch veld ($B > 0$) word gegeven door

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} + \mu B \hat{L}_z$$

Stel het magnetisch veld gelijk aan $B = 3\hbar/(\mu I)$

a) Vindt de grondtoestand(en).*[6 punten]*

$$\hat{H} = \frac{1}{2I}\left(\hat{L}^2 + 6\hbar\hat{L}_z\right)$$

$$E_{l,m} = \frac{\hbar^2}{2I}\left(l(l+1) + 6m\right)$$

Minimaliseren: in ieder geval m=-l

$$E_{l,-l} = \frac{\hbar^2}{2I}\left(l(l+1) - 6l\right) = \frac{\hbar^2}{2I} l\left(l-5\right)$$

Dit minimaliseren levert $l = 2.5$. Dat is natuurlijk niet mogelijk, moet 2 of 3 zijn, of beide. In dit geval beide, er zijn dus twee gedegenereerde grondtoestanden met energie.

$$E_{2,-2} = E_{3,-3} = -6\frac{\hbar^2}{2I}$$

b) Als op $t = 0$ de rotor zich in toestand $(|1,-1\rangle - |1,1\rangle)/\sqrt{2}$ bevindt, wat is zijn dan de mogelijke waarden die een meting van $\hat{L}_x$ op een later tijdstip t_1 kan opleveren. Met welke waarschijnlijkheden?*[6 punten]*

$$
\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle &= e^{-i\hat{H}t/\hbar}(|1,-1\rangle - |1,1\rangle)/\sqrt{2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-\frac{\hbar}{2I}(2-6)t}|1,-1\rangle - e^{-\frac{\hbar}{2I}(2+6)t}|1,1\rangle\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{\hbar}{I}t}\left(e^{3\frac{\hbar}{I}t}|1,-1\rangle - e^{-3\frac{\hbar}{I}t}|1,1\rangle\right)
\end{aligned}
$$

Nu moeten we naar een basis met $\hat{L}_x$ eigenfuncties overgaan (zie opmerking onder), verder laten we de overall fase factor weg (doet niets voor de waarschijnlijkheden).

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left[e^{3\frac{\hbar}{I}t}\left(|1,-1\rangle_x - \sqrt{2}|1,0\rangle_x + |1,1\rangle_x\right)\right. \\
&\qquad \left.-e^{-3\frac{\hbar}{I}t}\left(|1,-1\rangle_x + \sqrt{2}|1,0\rangle_x + |1,1\rangle_x\right)\right] \\
&= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left[2i\sin(3\hbar t/I)\left(|1,-1\rangle_x + |1,1\rangle_x\right) - 2\sqrt{2}\cos(3\hbar t/I)|1,0\rangle_x\right]
\end{aligned}
$$

De waarschijnlijkheden zijn dus

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}\sin^2\left(\frac{3\hbar}{I}t_1\right) &\quad \text{voor} \quad \langle\hat{L}_x\rangle = 1 \text{ of } -1 \\
\cos^2\left(\frac{3\hbar}{I}t_1\right) &\quad \text{voor} \quad \langle\hat{L}_x\rangle = 0
\end{aligned}
$$

c) Als het resultaat van de meting van $\hat{L}_x$ op t_1 gelijk is aan 0, wat zijn dan de mogelijke uitkomsten van een meting van $\hat{L}_z$ op een later tijdstip t_2. Met welke waarschijnlijkheden?*[6 punten]*

Toestand is $|1,0\rangle_x$, terug naar basis voor $\hat{L}_z$

$$
|\psi(t=t_1)\rangle = |1,0\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,1\rangle - |1,-1\rangle\right)
$$

$\hat{L}_z$ commuteert met de Hamilton operator en is dus behouden, dus op alle tijdstippen $t_2 > t_1$ zijn de mogelijke uitkomsten van meting van $\hat{L}_z$ 1 of -1, met ieder een kans 1/2.

Opmerking: Expansie van enige eigenfuncties Y_l^m van $\hat{L}_z$ in eigenfuncties X_l^m van $\hat{L}_x$:

$$
Y_1^1 = \frac{1}{2}\left(X_1^{-1} + \sqrt{2}X_1^0 + X_1^1\right)
$$

$$
Y_1^{-1} = \frac{1}{2}\left(X_1^{-1} - \sqrt{2}X_1^0 + X_1^1\right)
$$