# Kwantummechanica 2

## Tentamen 29 Juni 2009

| |
|---|
| ◇ *Schrijf je naam en studentennummer op elk tentamenblad.* |
| ◇ *Het tentamen heeft 5 opdrachten.* |
| ◇ *Lees de opdrachten nauwkeurig en geef volledige antwoorden.* |

## Opdracht 1

a) Geef de Pauli spin-matrices. Hoe zijn deze gerelateerd aan de spin operatoren $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, en $\hat{S}_z$?*[3 punten]*

De Pauli matrices zijn: $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.
Ze zijn gerelateerd door $\hat{\sigma} = \frac{2}{\hbar}\hat{S}$.

b) Wat zijn de eigenwaardes van de impulsmoment operatoren $\hat{J}_z$ en $\hat{J}^2$?*[2 punten]*

$J_z|jm_j\rangle = m_j|jm_j\rangle$, dus $m_j$. $J^2|jm_j\rangle = j(j+1)|jm_j\rangle$, dus $j(j+1)$.

c) De toestanden van een waterstof atoom behorend bij quantumgetal $n$ zijn gedegenereerd. Wat is de degeneratie van deze toestanden?*[3 punten]*

$E_{nlm}$ schaalt met $1/n^2$ en is onafhankelijk van $l$ en $m$. $l$ loopt van 0 tot $n-1$, elke $l$ heeft $2l+1$ $m_l$ subtoestanden. $\sum_{l=0}^{n-1} 2l+1 = n^2$, dus de deneracy is $n^2$. Spin degeneratie voegt nog een factor 2 toe.

d) Druk de ladder operatoren $\hat{L}_-$ en $\hat{L}_+$ uit in termen van $\hat{L}_x$ en $\hat{L}_y$*[2 punten]*

$L_\pm = L_x \pm iL_y$

e) Bereken de commutator $\left[\left[\hat{L}_+, \hat{L}_z\right], \hat{L}_-\right]$*[3 punten]*

$$[L_+, L_z] = [L_x, L_z] + i[L_y, L_z] = -i\hbar L_y - \hbar L_x = -\hbar L_+$$

$$-\hbar[L_+, L_-] = -\hbar[L_x + iL_y, L_x - iL_y] = -\hbar(-i[Lx, Ly] + i[L_y, L_x]) = -2\hbar^2 L_z$$

f) Heeft de commutator $\left[\left[\hat{L}_+, \hat{L}_-\right], \hat{L}_z\right]$ dezelfde waarde als die in probleem e)? Toon aan dat dit wel/niet zo is.*[2 punten]*

Heeft niet dezelfde waarde. $[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$ dus de commutator heeft de waarde 0.

g) 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?*[3 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.

## Probleem 2

Beschouw een systeem met totaal impulsmoment $J = 1$. De dichtheidsmatrix van een ensemble op de eigenbasis van de eigenvectoren van de $z$-component van het impulsmoment, $J_z$ (eigenwaardes 1, 0, -1, respectievelijk) is gegeven door:

$$\rho = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

a) Is dit een fysisch toegestane dichtheidsmatrix? Waarom wel/niet?
Neem voor het vervolg van dit probleem aan dat de matrix toegestaan is. *[8 punten]*

De matrix is hermitisch (reëel *en* symmetrisch).
De trace is 1 (diagonaal elementen zijn waarschijnlijkheden). Dit is bijna voldoende om te laten zien dat de matrix OK is. Echter, bovenop bovenstaande voorwaardes moeten ook de individuele kansen om in een bepaalde toestand te zijn positief zijn. Dit is o.a. na te gaan door de matrix te diagonaliseren. Het is ook voldoende om te laten zien dat de kans om in een willekeurige toestand $|\psi\rangle = |a, b, c\rangle$ te zijn groter dan 0 is:

$$\langle\psi|\rho|\psi\rangle = 2|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + 2\mathcal{R}(a^*b) + 2\mathcal{R}(a^*c)$$

Dit is groter dan nul omdat

$$|x|^2 + |y|^2 + 2\mathcal{R}(x^*y) = |x + y|^2 \geq 0$$

Dus $\rho$ is een goede density operator

b) Wat is voor de bovenstaande dichtheidsmatrix het ensemble gemiddelde voor de waarde van $J_z$? *[5 punten]*

De density matrix was gedefinieerd op de basis van $J_z$, dus

$$J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Dan

$$\langle J_z\rangle = Tr(\rho J_z) = \frac{1}{4}(2 + 0 - 1) = \frac{1}{4}$$

c) Wat is de spreiding (standaard afwijking) in de gemeten waardes van $J_z$ *[5 punten]*

$$\Delta J_z = \sqrt{\langle J_z^2\rangle - \langle J_z\rangle^2}$$

We hebben dus de gemiddelde waarde van $J_z^2$ nodig:

$$\langle J_z^2\rangle = Tr(\rho J_z^2) = \frac{1}{4}(2 + 0 + 1) = \frac{3}{4}$$

Zodat

$$\Delta J_z = \frac{\sqrt{11}}{4}.$$

## Probleem 3

a) Beschouw een spin 1/2 systeem. What zijn de eigenwaardes en eigenvectors van de operator $(\hat{s}_x + \hat{s}_y)/\sqrt{2}$.*[8 punten]*

$$\frac{s_x + s_y}{\sqrt{2}} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix}$$

Diagonaliseren:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1-i \\ 1+i & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (1-i)(1+i) = 0 \rightarrow \lambda = \pm\sqrt{2}$$

Eigenwaardes: $\pm\hbar/2$
Eigenvectors
$\lambda = \sqrt{2}:$

$$\begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 1-i \\ 1+i & -\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \rightarrow a = \frac{1-i}{\sqrt{2}} b$$

Eigenvector:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$\lambda = -\sqrt{2}:$

$$\begin{pmatrix} +\sqrt{2} & 1-i \\ 1+i & +\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \rightarrow a = -\frac{1-i}{\sqrt{2}} b$$

Eigenvector:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} i-1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

b) Een meting levert op dat het systeem zich in de toestand bevindt met de kleinste eigenwaarde. Wat is de waarschijnlijkheid dat een opvolgende meeting van $s_z$ de eigenwaarde $-\hbar/2$ oplevert?*[5 punten]*

$$P(s_z = -\hbar/2) = \left| \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i-1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

c) Hoe verandert het antwoord op vraag b) als in plaats van $s_z$ de eigenwaarde van $s_x$ gemeten wordt?*[5 punten]*

$$P(s_x = -\hbar/2) = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i-1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{8}(4 + 2\sqrt{2})$$

## Probleem 4

Beschouw een systeem met twee onderscheidelijke deeltjes met spin $s_1$ and $s_2$.

a) Geeft de algemene vorm (in ket notatie) van de twee deeltjes spin golffunctie voor de *gekoppelde* en voor de *ongekoppelde* representatie.*[4 punten]*

$$|s_1, m_{s1}\rangle|s_2, m_{s2}\rangle = |s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}\rangle \qquad \text{ongekoppeld}$$

$$|S, m_S, s_1, s_2\rangle \qquad \text{gekoppeld, met} \quad \mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$$

b) Beide deeltjes hebben spin 1/2. Op tijdstip $t = 0$ wordt een meting gedaan van de $z$-component van de spins. Het resultaat is $\hbar/2$ voor deeltje 1 en $-\hbar/2$ voor deelje 2. Geef de golffunctie $|\psi_0\rangle$ van de toestand op $t = 0$ in de gekoppelde en in de ongekoppelde representatie. *[4 punten]*

$$|\psi_0\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle_1|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle_2 \qquad \text{ongekoppeld}$$

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + |1, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle) \qquad \text{gekoppeld}$$

De Hamilton operator voor het systeem wordt beschreven door

$$\hat{H} = \eta(\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2),$$

met $\eta$ a reëele parameter.

c) Wat is de Hamilton operator in termen van de operatoren $\hat{s_1}^2$, $\hat{s_2}^2$, en $\hat{S}^2$, waarbij $S$ de totale spin van het systeem is. *[5 punten]*

Maak gebruik van de operator

$$\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2,$$

en bedenk dat

$$\hat{S}^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2,$$

De Hamilton operator kan dan geschreven worden als

$$\hat{H} = \frac{\eta}{2}(\hat{S}^2 - \hat{s}_1^2 - \hat{s}_2^2)$$

.

d) What is waarschijnlijkheid dat op tijdstip $t = \frac{\pi}{2\hbar\eta}$ het systeem zich in dezelfde toestand bevindt als op tijdstip $t = 0$? *[5 punten]*

Er geldt:

$$H|0,0\rangle = \frac{-3\eta}{4}\hbar^2|0,0\rangle$$

$$H|1,0\rangle = \frac{\eta}{4}\hbar^2|1,0\rangle.$$

De vector $|\psi_0\rangle$ op tijd $t > 0$ wordt:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{iHt}{\hbar}\right]|\psi_0\rangle = \exp\left[-\frac{i\eta\hbar t}{4}\right]\frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{i\eta\hbar t}|0,0\rangle + |1,0\rangle\right).$$

De tijdsafhankelijke waarschijnlijkheid is dan

$$P = |\langle\psi_0\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{4}\left|e^{i\eta\hbar t} + 1\right|^2 = \frac{1}{2}[1 + \cos(\eta\hbar t)].$$

Op $t = \pi/(2\hbar\eta)$ geeft dit $P = 1/2$.

## Problem 5

Een een-dimensionale anharmonische oscillator wordt beschreven door een Hamilton operator van de volgende vorm:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + Ax^3 + Bx^4,$$

met

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

a) Geef de algemene uitdrukking voor de eerste orde correctie voor de energie van het $n$-de energie niveau van het ongestoorde probleem.*[4 punten]*

De eerste orde correctie voor het $n$-de niveau zijn gelijk aan de diagonaal componenten van $\hat{H}'$: $\left\langle n\middle|\hat{H}'\middle|n\right\rangle$.

b) Bereken de eerste orde correctie van de $n$-de energie niveaus ten gevolge van de storing.*[6 punten]*

De operator $\hat{x}$ kan uitgedrukt worden in termen van creatie en annihilatie operatoren: $\hat{x} = \frac{1}{\beta\sqrt{2}}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)$, where $\beta^2 = \frac{m\omega_0}{\hbar}$. Hiervan gebruikmakend wordt de uitdrukking voor $\hat{x}^3$:

$$\hat{x}^3 = \left(\frac{1}{\beta\sqrt{2}}\right)^3\left[\left(\hat{a}^\dagger\right)^3 + \hat{a}^\dagger\hat{a}^2 + \left(\hat{a}^\dagger\right)^2\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\left(\hat{a}^\dagger\right)^2 + \hat{a}^3 + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2\hat{a}^\dagger\right]$$

Voor de eerste orde correcties moeten we de diagonaal elementen uitrekenen:

$$\left\langle n|\hat{H}'|n\right\rangle = A\left\langle n|\hat{x}^3|n\right\rangle + B\left\langle n|\hat{x}^4|n\right\rangle.$$

Omdat de kubische term altijd een oneven aantal creatie/annihilatie operatoren bevat zijn de bijdrages aan de diagonaal elementen hiervan gelijk aan nul.
Voor de andere bijdrage ($x^4$ term) geldt:

$$\begin{aligned}
\left\langle n|\hat{x}^4|n\right\rangle = \left(\frac{1}{\beta\sqrt{2}}\right)^4 \Big[ & \left\langle n\middle|\left(\hat{a}^\dagger\right)^2\hat{a}^2\middle|n\right\rangle + \left\langle n\middle|\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\middle|n\right\rangle + \left\langle n\middle|\hat{a}^\dagger\hat{a}^2\hat{a}^\dagger\middle|\right\rangle + \\
& \left\langle n\middle|\hat{a}\left(\hat{a}^\dagger\right)^2\hat{a}\middle|n\right\rangle + \left\langle n\middle|\hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger\middle|n\right\rangle + \left\langle n\middle|\hat{a}^2\left(\hat{a}^\dagger\right)^2\middle|n\right\rangle\Big] = \\
\left(\frac{1}{\beta\sqrt{2}}\right)^4 \Big[ & \sqrt{n(n-1)(n-1)n} + \sqrt{nnnn} + \sqrt{(n+1)(n+1)nn} + \\
& \sqrt{nn(n+1)(n+1)} + \sqrt{(n+1)(n+1)(n+1)(n+1)} + \\
& \sqrt{(n+1)(n+2)(n+2)(n+1)}\Big] = \\
& \left(\frac{1}{\beta\sqrt{2}}\right)^4\left(6n^2 + 6n + 3\right) = \frac{3}{4\beta^4}\left(2n^2 + 2n + 1\right)
\end{aligned}$$

Dus de energie correctie voor het $n$-de niveau is $\frac{3B}{4\beta^4}\left(2n^2 + 2n + 1\right)$.

c) Onder welke voorwaarde is de eerste orde correctie een goede benadering (let op, deze voorwaarde hangt af van het quantum getal $n$).*[8 punten]*

Storingsrekening is een goede benadering als geldt:

$$\left|\hat{H}'_{nn}\right| << E_n^0$$

en

$$\left|\hat{H}'_{nn}\right| << \left|E_n^0 - E_{n\pm1}^0\right|.$$

De niveauopsplitsing tussen opeenvolgende niveaus voor de harmonische oscillator is $E_n^0 - E_{n-1}^0 = \hbar\omega$. Verder geldt $\left|\hat{H}'_{nn}\right| \approx \frac{3B}{2\beta^4}n^2$, dus

$$\frac{3B}{2\beta^4}n^2 << \hbar\omega.$$