Tentamen NS202B: Quantum Mechanica 1b (31 Januari 2013)

Algemeen:
— de duur van het tentamen is 3 uur.
— er mag geen boek en geen eigen formuleblad worden gebruikt (sommige formules vind je wel op het laatste opgavenblaadje.

Niet vergeten:
- *Schrijf leesbaar en identificeer alles wat je opschrijft duidelijk met (deel–)vraag nummers!*
- *Lever iedere opgave op een afzonderlijk vel in!*
- *Schrijf op ieder vel je naam!*
- *Totaal zijn er 30 punten.*

Opgave 1 – Waterstof in de $n = 2$ toestand

We beschouwen waterstof in de $n = 2$ toestand, waarbij de eigenfuncties gegeven worden door $\psi_{n\ell m}(\vec{r}) \equiv R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$. De radiële golffuncties worden gegeven door

$$
\begin{aligned}
R_{20}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2} {a_0}^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \\
R_{21}(r) &= \frac{1}{\sqrt{24} {a_0}^{3/2}} \frac{r}{a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right),
\end{aligned}
$$

met $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(me^2)$ de straal van de eerste Bohrse baan. Voor deze golffuncties willen we de verwachtingswaarden $\langle r^k \rangle$ bepalen met k een geheel getal.

a) Waarom is de hoekafhankelijkheid van de golffuncties niet belangrijk voor de bepaling van $\langle r^k \rangle$? *(1 punt)*

b) Bepaal $\langle r \rangle$ voor de toestand $\psi_{21\,+1}(\vec{r})$. *(1 punt)*

c) Bepaal $\langle r^2 \rangle$ voor de toestand $\psi_{200}(\vec{r})$. *(1 punt)*

d) Bepaal $\langle x \rangle$ and $\langle x^2 \rangle$ voor de toestand $\psi_{200}(\vec{r})$ zonder opnieuw te integreren. Geef duidelijk aan, waarom opnieuw integreren in dit geval niet nodig is. *(1 punt)*

e) Wat is de meest waarschijnlijke waarde voor r voor de toestand $\psi_{21\,+1}(\vec{r})$? *(2 punten)*

f) Vergelijk uw antwoord onder e) met het resultaat onder b) en bespreek eventuele verschillen. *(1 punt)*

g) Bepaal in de toestand $\psi_{200}(\vec{r})$ de verwachtingswaarde $\langle V \rangle$ van de potentiële energie $V = -e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$. *(2 punten)*

De verwachtingswaarde $\langle T \rangle$ van de kinetische energie in de toestand $\psi_{200}(\vec{r})$ is gegeven door $\langle T \rangle = \hbar^2/(8m{a_0}^2)$.

h) Controleer uw antwoord op onderdeel g) door de verhouding te bepalen van $\langle V \rangle$ en $\langle T \rangle$ en verklaar uw antwoord. *(1 punt)*

Opgave 2 – Elektron met spin $\hbar/2$

Voor een elektron met spin $1/2$ zijn de matrix-representaties van S_+, S_- en S_z in de basis van S_z is gegeven door

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

a) Bepaal de matrix-representaties van S_x en S_y. (*1 punt*)

b) Bepaal de eigenwaarden en eigenvectoren van S_y. (*2 punten*)

De toestand van het elektron met spin $1/2$ wordt gegeven door de spinor χ, die gegeven is in de basis van S_z:

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

met a en b complexe getallen, die voldoen aan $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

c) Bereken de waarschijnlijkheid om bij een meting van S_y de eigenwaarde $+\hbar/2$ te meten, of de eigenwaarde $-\hbar/2$. (*2 punten*)

d) Wat moet de som van de waarschijnlijkheden zijn onder c) en waarom? Voldoet uw resultaat hieraan? (*1 punt*)

Het elektron bevindt zich in de toestand χ, als we een meting doen van S_z. Bij deze meting hebben we de waarde $+\hbar/2$ bepaald.

e) Wat is de waarschijnlijkheid om vervolgens bij een meting van S_y de waarde $\pm\hbar/2$ te meten? (*1 punt*)

f) Waarom verschilt uw antwoord onder e) van uw antwoord onder c)? Wat voor conclusie kunt u daaruit trekken voor de gevolgen van een meting in de quantum-mechanica? (*1 punt*)

We leggen een magneetveld B_0 aan in de y-richting en de Hamiltoniaan wordt dan gegeven door

$$\mathcal{H} = -\gamma B_0 S_y.$$

Het elektron bevindt zich op $t = 0$ in de toestand χ.

g) Geef de tijdsafhankelijkheid van de waarschijnlijkheid om op tijdstip t bij een meting van S_y de waarde $+\hbar/2$ te meten. (*2 punten*)

Opgave 3 – Spin-baan wisselwerking

We beschouwen de spin-baan wisselwerking voor waterstof. De storing door de spin-baan wisselwerking is gegeven door

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{\vec{S}\cdot\vec{L}}{m^2c^2r^3}.$$

We willen nu de verschuiving door de spin-baan wisselwerking berekenen in eerste-orde storingsrekening.

a) Geef het matrix-element, dat in eerste-orde storingsrekening geëvalueerd moet worden om de verschuiving van de toestanden te bepalen. (*1 punt*)

b) Laat zien dat $\vec{L}$ niet commuteert met de storingsterm $\mathcal{H}_{\text{SO}}$ door de commutator uit te rekenen van bijvoorbeeld L_x met $\mathcal{H}_{\text{SO}}$. (*2 punten*)

c) Laat zien dat $\vec{S}$ niet commuteert met de storingsterm $\mathcal{H}_{\text{SO}}$ door de commutator uit te rekenen van bijvoorbeeld S_x met $\mathcal{H}_{\text{SO}}$. (*1 punt*)

d) Laat zien dat $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ wel commuteert met de storingterm $\mathcal{H}_{\text{SO}}$ door de commutator uittereken van bijvoorbeeld J_x met $\mathcal{H}_{\text{SO}}$. (*1 punt*)

e) Geef aan, waarom uit het commuteren van $\vec{J}$ en $\mathcal{H}_{\text{SO}}$ volgt, dat de basis $|JLSM_J\rangle$ een goede basis is om spin-baan wisselwerking te beschrijven. (*1 punt*)

f) Geef aan, waarom we voor het matrix-element onder a) afzonderlijk de verwachtingswaarde van $\vec{S}\cdot\vec{L}$ en $1/r^3$ mogen bepalen. (*1 punt*)

g) Bepaal de verwachtingswaarde van $\vec{S}\cdot\vec{L}$ in de basis $|JLSM_j\rangle$. (*2 punten*)

De verwachtingswaarde van $1/r^3$ is gegeven door

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle = \frac{1}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)n^3{a_0}^3}.$$

h) Geef aan, waarom de toestanden met $j = \ell \pm 1/2$ verschillend verschuiven door de spin-baan wisselwerking. (*1 punt*)

Formuleblad

Onderstaande relaties kunnen gebruikt worden, maar het is niet *noodzakelijk* er één of meer te gebruiken!

Goniometrie:

$$\sin(a \pm b) = \sin a \cos b \pm \cos a \sin b$$
$$\cos(a \pm b) = \cos a \cos b \mp \sin a \sin b$$

Integraal:

$$\int x \sin(ax) dx = \frac{1}{a^2} \sin(ax) - \frac{x}{a} \cos(ax)$$
$$\int x \cos(ax) dx = \frac{1}{a^2} \cos(ax) + \frac{x}{a} \sin(ax)$$

Wet van de cosinus:

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos\theta$$

Exponentiële integraal:

$$\int_0^\infty x^n e^{-x/a} \mathrm{d}x = n!\, a^{n+1}$$

Gaussische integraal:

$$\int_0^\infty x^{2n} e^{-x^2/a^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\pi}\, \frac{(2n)!}{n!} \left(\frac{a}{2}\right)^{2n+1}$$

$$\int_0^\infty x^{2n+1} e^{-x^2/a^2} \mathrm{d}x = \frac{n!}{2} a^{2n+2}$$

Partiële integratie:

$$\int_a^b f \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}\, \mathrm{d}x = -\int_a^b \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} g\, \mathrm{d}x + fg\Big|_a^b$$