Kwantummechanica 2018-2019 Eindtentamen NS202B 1 Feb 2019

Bij deze toets mag uitsluitend het verstrekte formuleblad worden gebruikt. Een grafische calculator is toegestaan, tenzij deze signalen kan verzenden of ontvangen. De reguliere tijd voor de toets is 90 minuten. Antwoorden voor elk van de drie onderdelen op een **apart antwoordblad**, dit i.v.m. scannen niet vouwen, kreuken of scheuren. Vermeld op ieder blad uw NAAM en STUDENTNUMMER. Onduidelijke of onleesbare antwoorden worden fout gerekend. Deze toets heeft 18 vragen, voor een totaal van 33 punten. Motiveer al uw antwoorden, en vergeet niet, waar van toepassing, de (SI) eenheden van uw antwoord te vermelden!

1 Larmor precessie

We beschouwen een spin $S = 1/2$ systeem in een magnetisch veld langs de x-as. De Hamiltoniaan is

$$H = \frac{\mu}{2} B \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

met μ het magnetisch moment, en B de magnetische veldsterkte in Tesla. Beide zijn positief.

1. (3 points) Laat zien dat H de eigenwaarden $E_\pm = \pm\frac{\mu B}{2}$ heeft met de eigenvectoren $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)^T$ and $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)^T$.

We wiullen nu de tijdevolutie berekenen van een systeem dat op $t = 0$ begint als spin-up, d.w.z., $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle = (1,0)^T$. De tijdafhanlıkelijke Schrödingervergelijking voor dit systeem leidt tot $|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}|\psi(t=0)\rangle$.

2. (2 points) Laat zien hoe $|\psi(t=0)\rangle$ uit te drukken is in $|+\rangle$ en $|-\rangle$.

3. (3 points) Laat zien dat $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{\mu B}{2\hbar}t}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\frac{\mu B}{2\hbar}t}|-\rangle$ (dit mag eventueel ook door invullen in de Schrödingervergelijking)

4. (2 points) Wat is de kans om bij een meting $|\uparrow\rangle$ te vinden op een bepaalde tijd $t > 0$?

2 Symmetrie van de golffunctie (gebruik een nieuw antwoordblad!)

Het Helium atoom wordt beschreven door

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\right). \tag{2}$$

We versimpelen het probleem door de electron-electron wisselwerking te negeren, wat leidt tot

$$H' = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2}\right) \tag{3}$$

H' beschrijft twee onafhankelijke electronen die interactie hebben met een kern met lading $2e$. Een enkel electron in de potentiaal van een kern met lading $2e$ heeft een grondtoestandsenergie van $E_1' = 4E_1$, met $E_1 = -13.6eV$ de waterstof grondtoestandsenergie.

De golffunctie van een systeem van twee electronen moet antisymmetrisch zijn onder verwisseling van de deeltjes. Hier beschouwen we het Schrödinger atoom, dta wil zeggen we verwaarlozen spin-baan (spin-orbit) koppeling, en ander spin- of impulsmoment afhankelijke termen. Daardoor blijven de 2s en 2p golffuncties ontaard. De waterstof golffuncties die we hieronder gebruiken zijn aangepast aan de kernlading $2e$.

5. (2 points) Laat zien dat als de spins in de singlet toestand zijn, de laagste-energie ruimtelijke golffunctie gegeven wordt door $\psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2)$.

6. (1 point) Laat zien dat de golffunctie $\psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{200}(\vec{r}_2) - \psi_{100}(\vec{r}_2)\psi_{200}(\vec{r}_1)\right)$ met een spin triplet toestand correspondeert.

7. (1 point) Is er een spin triplet toestand met lagere energie?

8. (2 points) Wat is de energie van $\psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ en $\psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$? Antwoord in termen van E_1.

3 Harmonisce Oscillator (Nieuw antwoordblad a.u.b.)

We beschouwen een harmonische oscillator met een verstoring,

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + H_1 \tag{4}$$

waarbij de verstoring

$$H_1 = \lambda\alpha(\hat{x} - x_0)^2 \,. \tag{5}$$

Hier is λ een dimensieloze parameter, α heeft eenheden kg/s^2, en x_0 is een verschuiving van positie. We gebruiken nu verschillende benaderingsmethoden om dit probleem op te lossen.

3.1 Storingsrekening

Het startpunt van storingsrekening is

$$H_0 = H - H_1 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \,. \tag{6}$$

H_0 kunnen we oplossen in een serie van stappen

9. (1 point) Vind een gechikte transformatie $y = \beta x$ om H_0 in de volgende vorm te brengen:

$$H_0 = \hbar\omega\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2}y^2\right) \,, \tag{7}$$

   en bepaal hierbij β.

10. (2 points) We introduceren de ladderoperatoren $a_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y + \frac{d}{dy}\right)$ en $a_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y - \frac{d}{dy}\right)$. Laat zien dat $[a_-, a_+] = 1$.

11. (2 points) Laat zien dat H_0 kan worden geschreven als

$$H_0 = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right) \,. \tag{8}$$

12. (2 points) De operatoren a_- and a_+ hebben de volgende ac tie op de eigentoestanden van H_0: $|n\rangle$: $a_-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ ($a_-|0\rangle = 0$) en $a_+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$. Leid hieruit de eigenwaarden van H_0 af.

We herschrijven H_1 in termen van de operatoren a_- and a_+. Als een startpunt kunt u gebruiken$H_1 = \frac{\lambda\alpha}{\beta^2}(y - y_0)^2$, waar β hioerboven bepaald is (u mag β in uw antwoord laten staan).

13. (4 points) Leid een uitdrukking af voor de eerste orde storing op de energie $\Delta E_n^{(1)} = \langle n|H_1|n\rangle$.

3.2 Variatierekening

We beschouwen H in variatierekening (met Vgl.(~~1~~ 4) as uitgangspunt). Een Ansatz voor de golffunctie is $\psi(x) = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} e^{-bx^2}$.

14. (2 points) Laat zien dat

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 + \lambda\alpha\right)\frac{1}{4b} + \lambda\alpha x_0^2 \,. \tag{9}$$

   Om u rekenwerk te besparen is gegeven dat $\langle\psi|\frac{d^2}{dx^2}|\psi\rangle = -b$ en $\langle\psi|x^2|\psi\rangle = \frac{1}{4b}$. Gebruik voor de overige integralen symmetriebeschouwingen.

15. (1 point) Vind de optimale b_{opt} en daarmee de variationele energie $\langle\psi|H|\psi\rangle$.

3.3 Exacte oplossing

De Hamiltoniaan H van Vgl.(4) kan exact opgelost worden door middel van een verschuiving van het coördinatensysteem $x \rightarrow x + \bar{x}_0$. (Deze hoeft u niet te berekenen)

De eigenenergieën die we uit de variationele- en storingsrekening vinden verschillen enigszins van de exacte oplossing.

16. (1 point) Zonder een berekening uit te voeren, beargumenteer dat de exacte Hamiltoniaan de vorm heeft van een harmonische oscillator (dit mag in woorden of schetsen).

17. (1 point) Zonder een berekening uit te voeren, beragumenteer of het resultaat van variatierekening een hogere of lagere energie oplevert dan de exacte oplossing.

18. (1 point) Als we de exacte oplossing niet kunnen vinden, hoe kunnen we dan de precisie van het resultaat van storingsrekening dat we hierboven bepaald hebben nog verbeteren?

kusjes Simone