Tentamen QME1a en QME1b (Vrijdag 9 mei 2003)

Algemeen:
— er zijn vier opgaven. De generieke studenten dienen opgaven 1, 2 en 3 te maken. Duur van het tentamen 3 uur.
— Voor speciale gevallen geldt:

De geo–wetenschappen studenten maken 1 en 2. Duur van het tentamen 2 1/2 uur;
Wie QME1a al heeft gehaald dient 3 en 4 te maken. Duur van het tentamen 2 1/2 uur;
Wie QME1b al heeft gehaald dient 1 en 2 te maken. Duur van het tentamen 2 1/2 uur.

— De “**bonus–vragen**” kunnen uw cijfer alleen verhogen (als U de reguliere opgaven foutloos gemaakt heeft krijgt U ook een 10 zonder een bounus–vraag gemaakt te hebben).
— Bij het tentamen mag U het boek van Griffiths “*Introduction to quantum mechanics*” gebruiken. (Natuurlijk alléén het boek!)
— Alle (deel–)vragen kunnen vrij kort beantwoord worden (met het overschrijven van delen uit het boek kunt U uw cijfer niet verhogen). Licht alle niet–triviale manipulaties met een kort zinnetje toe.
— Maak iedere opgave op een afzonderlijk blad.
— Schrijf boven het eerste blad welk type tentamen U doet en welke opgaven U hebt gemaakt.

Vraag 1. Gegeven de één–dimensionale tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\,\psi(x) + V(x)\,\psi(x) = E\,\psi(x), \qquad x \in (-\infty, +\infty) \tag{1}$$

waarin $V(x)$ constante waarden V_1 en V_2 aanneemt voor respectievelijk $x < X_1$ en $x > X_2$, waarbij $0 < X_1 < X_2$. Voor de oplossingen van vergelijking (1) geldt

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < X_1, \\ Fe^{ik'x} + Ge^{-ik'x}, & x > X_2. \end{cases} \tag{2}$$

1a. Geef de uitdrukkingen voor k en k' in termen van E, V_1 en V_2.

De zogenaamde $\boldsymbol{M}$–matrix is gedefinierd als

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \tag{3}$$

1b. Bepaal de matrix elementen van de $\boldsymbol{M}$–matrix behorende bij de volgende potentiaal

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < -a, \\ \\ V_0, & x > -a, \end{cases} \tag{4}$$

waarbij $a > 0$ en de constante V_0 zowel positief als negatief kan zijn. U wordt aangeraden om het profiel van de potentiaal te schetsen voorafgaande aan Uw berekeningen.

1c. Bepaal, uitgaande van het antwoord op vraag **(1a)** (d.w.z. *zonder* expliciete berekening), de $\boldsymbol{M}$-matrix behorende bij de volgende potentiaal

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x < a, \\ \\ 0, & x > a, \end{cases} \tag{5}$$

waar a en V_0 dezelfde grootheden voorstellen als in vergelijking (4). Indien U vraag **(1a)** niet óf gedeeltelijk beantwoord heeft, dient U expliciet de operaties aan te geven die U uitgevoerd zou hebben op de variabelen waarvan de $\boldsymbol{M}$–matrix afhangt als U vraag **(1a)** volledig beantwoord had.

Gegeven de potentiaal

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| < a, \\ \\ 0, & |x| > a, \end{cases} \tag{6}$$

waar a en V_0 dezelfde grootheden voorstellen als in vergelijkingen (4) en (5).

1d. Ga uit van de $\boldsymbol{M}$–matrices van de deelvragen **(1b)** en **(1c)** en bepaal de $\boldsymbol{M}$–matrix behorend bij de potentiaal in vergelijking (6). Verklaar Uw antwoord. Indien U één of beide van de laatstgenoemde deelvragen niet beantwoord heeft, kunt U gebruik maken van abstracte notaties $\boldsymbol{M}^{\mathrm{b}}$ en $\boldsymbol{M}^{\mathrm{c}}$ waar 'b' en 'c' naar deelvragen **(1b)** en **(1c)** verwijzen.

1e. Onder welke voorwaarde(n) heeft de vergelijking (1) met daarin $V(x)$ zoals aangegeven in vergelijking (6) tenminste één gebonden eigentoestand? Licht Uw antwoord toe.

Veronderstel nu dat

$$V_0 = -\frac{\alpha}{2a}, \tag{7}$$

waar a dezelfde grootheid voorstelt als in de bovenstaande vergelijkingen en α een reële grootheid is.

1f. Door welke distributie kan $V(x)$ zoals aangegeven in vergelijking (6), met daarin V_0 zoals aangegeven in vergelijking (7), vervangen worden wanneer $a \downarrow 0$ (d.w.z. voor a positief en infinitesimaal klein)?

1g. In het boek van Griffiths, twee gevallen betreffende "The Finite Square Well" zijn expliciet besproken, t.w. (i) de "Wide, deep well" en (ii) de "Shallow, narrow well". Laat nu $\alpha > 0$. In welke van de twee genoemde categorieën van potentialen valt de potentiaal in vergelijking (6), met daarin V_0 zoals aangegeven in vergelijking (7), wanneer $a \downarrow 0$? Onderbouw Uw antwoord aan de hand van een korte berekening.

Bonusvraag 1A. Bepaal in de laagste orde in a, voor $a \downarrow 0$, de energie van de laagstgelegen toestand behorende bij de potentiaal in vergelijking (6) met daarin V_0 zoals gedefiniëerd in vergelijking (7) aan de hand van de algemene beschouwingen in Sectie 2.6 van het boek van Griffiths . Becommentarieer Uw antwoord in het licht van Uw antwoord op deelvraag **(1f)**.

Vraag 2. Gegeven de tijdonafhankelijke Schrödinger vergelijking voor een deeltje met massa m dat zich op het twee-dimensionale x, y-vlak bevindt:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\right) + V(x,y)\right] \psi(x,y) = E\, \psi(x,y), \tag{8}$$

waarbij

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & x \in (0,a),\ y \in (0,a), \\ \\ \infty, & x \notin (0,a),\ y \notin (0,a), \end{cases} \tag{9}$$

waarin $a > 0$.

2a. Bepaal de eigenwaarden en de daarbijbehorende genormeerde eigenfuncties van vergelijking (8). U wordt aangeraden een schets van de potentiaal in vergelijking (9) te maken alvorens U berekeningen uitvoert.

Gegeven twee niet-wisselwerkende deeltjes met gelijke massas, aangeduid als deeltje 1 en deeltje 2, die zich op het x, y-vlak bevinden; we noteren de ruimtelijke coordinaten van deze deeltjes met $\boldsymbol{r}_1$ en $\boldsymbol{r}_2$, waar $\boldsymbol{r}_i = x_i\, \mathbf{e}_{\mathrm{x}} + y_i\, \mathbf{e}_{\mathrm{y}}$, $i = 1, 2$, met $\mathbf{e}_x$ en $\mathbf{e}_{\mathrm{y}}$ de orthonormale basis vectoren van het x, y-vlak.

2b. Schrijf de tijdonafhankelijke Schrödinger vergelijking behorende bij deze twee deeltjes op en leid de algemene expressie voor de eigenenergieën van deze vergelijking af.

2c. Geef de eigenfuncties (desgewenst op de normalisatie na) en de daarbijbehorende energieën van de drie laagstliggende eigentoestanden van het bovengenoemde twee-deeltjes systeem, aangenomen dat de deeltjes

2c.1 — ononderscheidbare bosonen zijn;
2c.2 — ononderscheidbare fermionen zijn;
2c.3 — onderscheidbaar zijn.

2d. Veronderstel voor een moment dat de bovengenoemde deeltjes verschillende massas bezaten, zeg m_1 en m_2 met $m_1 \neq m_2$. Hoe zou U deelvraag **(2c)** herformuleren voor deze deeltjes? Licht Uw herformulering kort toe.

We gaan er opnieuw vanuit dat de bovengenoemde deeltjes dezelfde massas bezitten. We veronderstellen nu echter dat deze deeltjes zijn met spin-quantumgetal $s = 1$.

2e. Zijn de genoemde deeltjes bosonen of fermionen of geen van beide? Aangenomen dat $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ een eigentoestand is van de twee-deeltjes Schrödinger vergelijking (zoals voorgesteld onder deelvraag **(2b)**), geef de reden(en) waarom een algemene toestand van het systeem onder behandeling in de volgende multiplicatieve vorm geschreven kan worden

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{r}_2\boldsymbol{s}_2) = \psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\, \chi(\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{s}_2). \tag{10}$$

De scalaire functie $\chi(\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{s}_2)$ staat hier voor de spin-toestand van het twee-deeltjes systeem met $\boldsymbol{s}_i$ de spin-coordinaat van deeltje i, $i = 1, 2$. Aan welke strikte eis dient $\chi(\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{s}_2)$ te voldoen als we veronderstellen dat $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1)$?

Laat nu $\boldsymbol{S}_i$ de spin-operator voorstellen die op deeltje i werkt, met $i = 1, 2$. We gaan er vanuit dat voor de totale spin operator van het twee-deeltjes systeem geldt $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_1 + \lambda \boldsymbol{S}_2$ waarbij λ een constante voorstelt.

2f. Bepaal de toegestane waarde(n) van λ (op $\lambda = 0$ na), gebruikmakend van de vereiste commutatierelaties tussen de Cartesische componenten S_x, S_y en S_z van $\boldsymbol{S}$ (en zonodig die van $\boldsymbol{S}_1$ en $\boldsymbol{S}_2$).

2g. Toon aan dat $S^2 \equiv \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{S}$ commuteert met de z-component S_z van $\boldsymbol{S}$. U wordt verwacht hierbij gebruik te maken van de commutatie relaties die gelden tussen $S_{i;x}$, $S_{i;y}$ en $S_{i;z}$, de Cartesische componenten van de vectorwaardige operator $\boldsymbol{S}_i$, met $i = 1, 2$. Merk op dat $[S_{1;\alpha}, S_{2;\beta}] = 0$ voor alle $\alpha, \beta = x, y, z$ (dus bijvoorbeeld $[S_{1;x}, S_{2;y}] = 0$). Merk ook op dat voor drie algemene operatoren A, B en C de relatie $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ geldt.

2h. Wat zijn de mogelijke waarden die de eigenwaarde $s_{i;z}$ kan aannemen, gesteld dat $\chi_i(s_{i;z})$, $i = 1, 2$, een eigentoestand van $S_{i;z}$ voorstelt? Merk op dat we hier te maken hebben met spin-1 deeltjes.

2i. Welke elementaire vorm heeft een eigentoestand van S_z (de z-component van $\boldsymbol{S}$) in termen van $\chi_i(s_{i;z})$, $i = 1, 2$? Merk op dat $S_z = S_{1;z} + \lambda S_{2;z}$ wanneer $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_1 + \lambda \boldsymbol{S}_2$, waarin λ is geïntroduceerd hierboven (U dient hier de juiste waarde(n) van λ te gebruiken zoals bepaald onder de deelvraag **(2f)**). Geef de volledige lijst van alle mogelijke eigenwaarden van S_z.

2j. Geef de volledige lijst van de eigenwaarden van S^2.

Bonusvraag 2A. Bewijs de geldigheid van de relatie $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$.

Laat $|s, m\rangle_2$ een gezamenlijke twee-deeltjes-eigentoestand van S^2 en S_z zijn (de index 2 duidt op het feit dat we hier te maken hebben met een twee–deeltjes toestand).

Bonusvraag 2B. Ga uit van het feit dat wij hier te maken hebben met spin-1 deeltjes (d.w.z. $s_1 = s_2 = 1$). Maak gebruik van de gegevens betreffende de Clebsch-Gordon coefficienten in Tafel 4.7 van het boek van Griffiths (op pagina 168). Bepaal nu $|2, 1\rangle_2$ in termen van de som van produkten van de één-deeltjes toestanden $|s, m\rangle_1$ (de index 1 duidt op aan dat deze één-deeltjes toestanden zijn, d.w.z. $|s, m\rangle_1$ is een gezamenlijke eigentoestand van S_i^2 en $S_{i;z}$, waar $i = 1, 2$, met eigenwaarden $\hbar^2 s(s + 1)$ en $\hbar m$, respectievelijk). Is de door U bepaalde gezamenlijke eigentoestand $|2, 1\rangle_2$ van S^2 een S_z symmetrisch, antisymmetrisch of geen van beiden?

Vraag 3. We beschouwen een één–dimensionaal vrije deeltje, beschreven door de Hamiltoniaan

$$H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}, \tag{11}$$

onder de periodieke randvoorwaarde $\psi(x) = \psi(x + a)$, $a > 0$.

3a. Toon aan dat $\psi_1(x) = A\cos(kx)$ en $\psi_2(x) = B\sin(kx)$ eigenfuncties van de Hamiltoniaan in vergelijking (11) zijn. Voor welke waarden van k is aan de bovenstaande periodieke randvooraarde voldaan?

3b. Bepaal de energie–niveaus en de corresponderende ontaardingsgraden.

3c. Normeer de oplossingen (die zowel aan vergelijking (11) als aan de periodieke randvoorwaarde voldoen) en controleer de orthogonaliteitsrelaties.

Beschouw nu de verstoorde Hamiltoniaan $H = H_0 + H_1$ met

$$H_1 = \frac{\beta^2}{2ma^2} - \frac{\beta}{ma} \frac{\hbar}{i} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \qquad \beta \in \mathbf{R}. \tag{12}$$

3d. Controleer Hermiticiteit van H_1 in de ruimte van periodieke functies op het interval $[0, a)$ en laat zien dat $[H, H_0] = 0$. Wat is de dimensie van β?

3e. Gebruik eerste orde storingsrekening met H_1 als verstoring om de correcties op de energieniveaus van H_0 te vinden voor voldoend kleine $\beta/\hbar$.

3f. Wat zijn de "goede" lineaire combinaties van $\psi_1(x)$ en $\psi_2(x)$ voor de verstoring H_1?

3g. Bespreek het resultaat van deelvraag **(3f)** aan de hand van het theorema op pagina 229 van het boek van Griffiths.

3h. Toon aan dat de via storingsrekening gevonden oplossingen overeenkomen met de exacte oplossingen van het probleem.

Bonusvraag 3A. Bereken de waarschijnlijkheidsstromen

$$J(x) \equiv \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi(x)\frac{\mathrm{d}\psi^*(x)}{\mathrm{d}x} - \psi^*(x)\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right), \tag{13}$$

voor de oplossingen van het ongestoorde en het verstoorde probleem. Geef commentaar op Uw bevinding(en).

Vraag 4. Beschouw een spin–$\frac{1}{2}$ deeltje in een tijd–onafhankelijk magneetveld

$$\boldsymbol{B} = B_y \boldsymbol{e}_\mathrm{y}, \tag{14}$$

waar de eenheidsvectoren $\{\mathbf{e}_\mathrm{x}, \mathbf{e}_\mathrm{y}, \mathbf{e}_\mathrm{z}\}$ een rechtshandig Cartesisch coördinaten systeem vormen. De Hamiltoniaan van het systeem is

$$H = -\gamma \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{S}, \tag{15}$$

waar $\boldsymbol{S}$ de vector van spinmatrices voorstelt en γ de gyromagnetische verhouding van het electron. Neem aan dat ten tijde $t = 0$ het systeem zich in toestand

$$\boldsymbol{\chi}(t=0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \qquad \text{met} \qquad |a|^2 + |b|^2 = 1, \tag{16}$$

bevindt. Merk op dat $\boldsymbol{\chi}(t=0)$ geen eigenvector van H is. Merk verder op dat U “Fourier’s trick” kunt gebruiken om de coefficienten van de ontwikkeling van een vector in een orthonormale basis te vinden.

4a. Bepaal de toestand van het deeltje ten tijde t in termen van a, b en de eigenenergieën van de Hamiltoniaan in vergelijking (15).

Ten tijde $t_0 > 0$ wordt het magneetveld plotseling veranderd in

$$\boldsymbol{B} = B_y \mathbf{e}_\mathrm{y} + B_z \mathbf{e}_\mathrm{z}, \tag{17}$$

waar B_z momenteel een willekeurige (eveneens tijd–onafhankelijke) waarde heeft.

4b. Analoog aan **(4.a)** bepaal de toestand van het deeltje ten tijde t_1, waar $t_1 > t_0$, in termen van a en b. Bedenk hierbij dat voor het verstoorde systeem ($B_z \neq 0$) de begintoestand verschillend is dan die gegeven in vergelijking (16).

4c. Nu nemen we aan dat $|B_z| \ll |B_y|$. Gebruik storingstheorie om in de laagste niet triviale orde

4c.1 — de eigenenergieën van het systeem

4c.2 — de eigentoestanden van het systeem

te bepalen ten tijde t_1 waarbij t_1 een tijdstip infinitesimaal kort na t_0 voorstelt.

Bonusvraag 4A. Vergelijk de resultaten van **(4.b)** en **(4.c)** en geef commentaar.