Institute for Theoretical Physics
Utrecht University

Retake Exam Advanced Quantum Mechanics (total 70 points)

Tuesday, March 10, 2015, 13:30-16:30

1. *Write your name and initials on all sheets, on the first sheet also your student ID number.*
2. *Write clearly, unreadable work cannot be corrected.*
3. *Give the motivation, explanation, and calculations leading up to each answer and/or solution.*
4. *Do not spend a large amount of time on finding (small) calculational errors. If you suspect you have made such an error, point it out in words.*
5. *Note the appendix at the end of this exercise!*

We beschouwen een (in eerste instantie) spinloos deeltje met massa m in twee dimensies in een isotrope harmonische potentiaal, waarbij het minimum van de potentiële energie zich bevindt op positie $\mathbf{R} = (R_x, R_y)$. Dat wil zeggen, het deeltje voelt een potentiaal die gegeven wordt door $V(x - R_x, y - R_y)$ met $V(x, y) = m\omega^2(x^2 + y^2)/2$.

De tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking voor de golffunctie $\chi(x, y)$ van het deeltje is gegeven door

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V(x - R_x, y - R_y)\right]\chi(x, y) = \epsilon\chi(x, y) \ ,$$

met ϵ de energie van de toestand waarin het deeltje zich bevindt.

a) *(10 points)* Beschouw de situatie $\mathbf{R} = (R, 0)$ met $R > 0$ en laat zien dat de grondtoestandsgolffunctie dan gegeven wordt door

$$\chi_1(x, y) = \psi_0(x - R)\psi_0(y) \ ,$$

waarbij $\psi_0(x) = Ce^{-m\omega x^2/(2\hbar)}$ de grondtoestandsgolffunctie van de een-dimensionale harmonische oscillator (met eigenenergie $\hbar\omega/2$), met C een normeringsconstante. Geef ook de energie behorend bij $\chi_1(x, y)$.

b) *(5 points)* Beschouw het geval met $\mathbf{R} = (0, R)$ met $R > 0$ en beargumenteer dat de grondtoestand dan gegeven wordt door

$$\chi_2(x, y) = \psi_0(x)\psi_0(y - R) \ .$$

c) *(10 points)* Het resultaat bij b) resulteert ook uit een rotatie van het systeem beschreven door $\chi_1(x, y)$ over een hoek $\pi/2$ rond de z-as. Op het college heeft u geleerd dat onder een rotatie rond de z-as over een hoek ϕ een algemene toestand $|\psi\rangle$ overgaat in $e^{-i\phi\hat{L}_z/\hbar}|\psi\rangle$, met $\hat{L}_z$ de z-component van de impulsmomentoperator $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$ (met $\hat{\mathbf{x}}$ de plaatsoperator en $\hat{\mathbf{p}}$ de impulsoperator). Pas dit toe, door expliciet te werken met de operator $e^{-i\phi\hat{L}_z/\hbar}$ in de plaatsrepresentatie op $\chi_1(x, y)$, om $\chi_2(x, y)$ te verkrijgen. Hint: schrijf hiertoe zowel de toestanden als de impulsmomentoperator uit in poolcoordinaten (r, θ) die bepaald worden door $(x, y) = (r\cos\theta, r\sin\theta)$.

We beschouwen nu hetzelfde systeem, maar dan met $\mathbf{R} = R(\cos(\Omega t), \sin(\Omega t))$, d.w.z., het systeem wordt met een constante hoekfrequentie Ω geroteerd. De tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking wordt dan gegeven door

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,y,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x - R\cos(\Omega t), y - R\sin(\Omega t)) \right] \Psi(x,y,t) \ .$$

We beschouwen nu een coordinaat transformatie naar coordinaten (x', y') bepaald door $x' = \cos(\Omega t)x + \sin(\Omega t)y$ and $y' = \cos(\Omega t)y - \sin(\Omega t)x$, welke dus correspondeert met een transformatie naar het roterende (met hoekfrequentie Ω) stelsel.

d) *(5 points)* Laat zien dat de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking in dit roterende stelsel gegeven wordt door

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x',y',t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \right) - \Omega \hat{L}'_z + V(x' - R, y') \right] \Psi(x',y',t) \ ,$$

met L'_z de z-component van de impulsmoment operator in het roterende stelsel.

e) *(10 points)* Laat zien dat deze vergelijking kan worden herschreven als de tijdsafhankelijke Schrödinger vergelijking voor een deeltje in een magneetveld met lading q, d.w.z., kan worden herschreven tot

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x',y',t)}{\partial t} = \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}}' - q\mathbf{A})^2}{2m} + V(x' - R, y') + V_\Omega(x', y') \right] \Psi(x',y',t) \ ,$$

met $\mathbf{A} = m\Omega \mathbf{e}_z \times (x', y', 0)/q$ een effectieve vector potentiaal, $\mathbf{e}_z$ de eenheidsvector in de z-richting, en $V_\Omega(x', y') = -m\Omega^2(x'^2 + y'^2)/2$. Voorts is $\hat{\mathbf{p}}'$ de impuls operator in het roterende stelsel.

In het vervolg van deze opgave laten we tijdsafhankelijke rotatie buiten beschouwing, en nemen we aan dat het deeltje spin $S = 1/2$ heeft. Voorts nemen we aan dat het deeltje zich bevindt in een radieel gericht Zeeman magneetveld met een component in de z-richting, d.w.z., dat het gedeelte van de hamiltoniaan dat het spingedeelte van de toestand bepaalt gegeven wordt door:

$$\hat{H}_Z = -\frac{\Delta}{\hbar} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{\Omega} \ ,$$

waarbij de energie $\Delta > 0$, $\hat{\mathbf{S}}$ de spinoperator, en de eenheidsvector $\mathbf{\Omega}$ gegeven wordt door $\mathbf{\Omega} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$, met ϕ de hoek tussen $\mathbf{\Omega}$ en de x-as, θ tussen $\mathbf{\Omega}$ en de z-as.

f) *(10 points)* Laat zien dat de genormaliseerde grondtoestand van $\hat{H}_Z$ energie $-\Delta/2$ heeft en (op een fasefactor na) gegeven wordt door

$$|\psi_\theta\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\uparrow\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\downarrow\rangle \ ,$$

waarbij $|\uparrow\rangle$ en $|\downarrow\rangle$ de eigenstoestanden van $\hat{S}_z$ zijn. NB: alhoewel niet noodzakelijk voor dit onderdeel kan het met het oog op het volgende onderdeel (i) handig zijn om ook de aangeslagen toestand en de energie daarvan alvast te berekenen.

g) *(10 points)* Bereken $\langle\psi_\theta|\hat{\mathbf{S}}|\psi_\theta\rangle$. Geef tevens de verwachtingswaarde van de spin in het kanonieke ensemble met temperatuur T.

h) *(10 points)* Neem nu $R_x = R_y = 0$. i) Welke behouden grootheid (of grootheden) karakteriseert (of karakteriseren) in deze situatie het systeem en waarom? ii) Indien het deeltje zich in een toestand bevindt met impulsmoment $l = 3$, wat zijn dan de toegestane waarden voor het totale impulsmoment $\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$?

Appendix — Mogelijk, maar niet noodzakelijk, wilt u gebruik maken van de volgende gegevens.

- Voor $S = 1/2$ en met betrekking tot de basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, heeft de spinoperator de matrix representatie $\hat{\mathbf{S}} = \hbar\boldsymbol{\tau}/2$, waarbij $\boldsymbol{\tau}$ de Pauli matrices

$$\tau_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \; \tau_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \; \tau_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \tag{1}$$

- In het kanoniek ensemble bij temperatuur T is de verwachtingswaarde van een operator $\hat{O}$ gegeven door $\mathrm{Tr}\left[e^{-\hat{H}/(k_B T)}\hat{O}\right]/Z$ met $Z = \mathrm{Tr}\left[e^{-\hat{H}/(k_B T)}\right]$ de partitiefunctie. Hier bij is $\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\right]$ het spoor van de operator $\hat{A}$ over de Hilbertruimte.

Uitwerkingen retake exam advanced QM

a) Omdat de hamiltoniaan $\hat{H}$ de sum is van twee één-deeltjes hamiltonianen, $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$

met $\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(x-R)^2$ en $H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2$

schrijven we $\psi(x,y) = \psi(x)\,\psi(y)$
(scheiding van variablen) 3 pt

Hieruit vinden we: $H_1\,\psi_1(x) = \varepsilon_1\,\psi_1(x)$

en $H_2\,\psi_2(y) = \varepsilon_2\,\psi_2(y)$ 2 pt

Dit zijn de tijdsonafhankelijke Schrödinger vgl-en voor de 1D harmonische oscillator zodat $\underbrace{\psi_2(y) = \psi_0(y)}_{\text{(voor de grondtoestand)}}$

met $\varepsilon_2 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ 2 pt

en $\psi_1(x) = \psi_0(x-R)$ omdat deze harmonische oscillator met R verplaatst is, en $\varepsilon_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega$.
1 pt

De energie is dan $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \hbar\omega$ 2pt

b) Dit geval is identiek aan onderdeel a) maar nu
5pt
is de hamiltoniaan de som van een harmonische oscillator
in de x-richting en een verschoven harmonische oscillator
in de y-richting.

c)
We hebben: $$\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial r} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial r} = \cos\theta \frac{\partial f}{\partial x} + \sin\theta \frac{\partial f}{\partial y}$$

(voor functie f)

$$\frac{\partial f}{\partial \theta} = -r\sin\theta \frac{\partial f}{\partial x} + r\cos\theta \frac{\partial f}{\partial y}$$

Dus $$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -r\sin\theta & r\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}$$ en

$$\begin{pmatrix}\frac{\partial}{\partial x}\\ \\ \frac{\partial}{\partial y}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\theta & -\frac{\sin\theta}{r}\\ \\ \sin\theta & \frac{\cos\theta}{r}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\partial}{\partial r}\\ \\ \frac{\partial}{\partial\theta}\end{pmatrix}$$

Voorts $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ dus $\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

Dus $\hat{L}_z = -i\hbar\left(r\cos\theta\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - r\sin\theta\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right.$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}$$

3 pt

Verder is $\chi_1(x,y) = c^2\, e^{-\frac{(x-R)^2}{2\ell^2} - \frac{y^2}{2\ell^2}}$

$$= c^2\, e^{-\frac{r^2}{\ell^2} - \frac{R\cdot\cos\theta}{\ell^2} - R^2/\ell^2} \equiv \chi_1(r,\theta)$$

2 pt

Dus (voor rotatie over hoek $\phi = \pi/2$ rond z-as:)

$$e^{-i\phi L_z/\hbar}\chi_1 = e^{-\frac{\pi}{2}\frac{\partial}{\partial\theta}}\chi_1(r,\theta)$$

3 pt

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-\pi}{2}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)^2\chi_1(r,\theta) = \chi_1\left(r,\theta-\frac{\pi}{2}\right)$$

En:

$$\chi_1(r, \theta + \pi/2) = C^2 e^{-r^2/\ell^2 - \frac{R}{\ell^2}\cos(\theta - \pi/2) - R^2/\ell^2}$$

$$= C^2 e^{-r^2/\ell^2 - R^2/\ell^2 \sin\theta - R^2/\ell^2}$$

$$= C^2 e^{\frac{-x^2}{2\ell^2} - \frac{(y-R)^2}{2\ell^2}} = \chi_2(x, y-R)$$

2pt

d) MOGELIJKE UITWERKING:

We willen $i\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{x}' | \psi(t) \rangle$ weten terwijl, met $\langle \vec{x}' | \psi(t) \rangle = \psi(x', y', t)$

we weten dat $i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = \hat{H} | \psi(t) \rangle$

We hebben: $| \vec{x}' \rangle = e^{-i/\hbar \Omega t \hat{L}_z} | \vec{x} \rangle$

Dan:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{x}' | \psi(t) \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{x} | e^{i/\hbar \hat{L}_z \Omega t} | \psi(t) \rangle$$

$$= \langle \vec{x} | e^{\frac{i}{\hbar}\Omega t \hat{L}_z} [-\Omega \hat{L}_z + \hat{H}] | \psi(t) \rangle = \langle \vec{x}' | [-\Omega L_z + \hat{H} | \psi(t) \rangle$$

3pt

$$= \left(-\Omega L_z' + H'\right)\psi(\vec{x}',t)$$

$\hat{L}_z$ in plaatsrepresentatie $\vec{x}'$

$\hat{H}$ in plaatsrepresentatie $\vec{x}'$.

Hierbij is $V(x - R\cos\Omega t,\ y - R\sin\Omega t)$

$$= V(x'\cos\Omega t - y'\sin\Omega t - R\cos\Omega t,\ \cos\Omega t\, y' + \sin\Omega t\, x')$$

$$= V(x' - R, y') \quad 2\text{ pt}$$

e) $$A = \frac{m\omega}{q}\hat{z} \times \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{m\omega}{q}\begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \quad 2\text{ pt}$$

So

$$(p - qA)^2 = p^2 - q\vec{p}\cdot\vec{A} - q\vec{A}\cdot\vec{p} + q^2A^2$$

$$= p^2 - 2q\vec{A}\cdot\vec{p} + q^2A^2 \quad 3\text{ pt}$$

$$\vec{A}\cdot\vec{p} = \left(\frac{m\omega}{q}\right)\begin{pmatrix} -y' \\ x' \\ 0 \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'} \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial y'} \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{m\omega}{q}L_z' \quad 2\text{ pt}$$

and $q^2A^2 = \frac{q^2 m\omega^{22}}{q^2}(x^2+y^2)$ 1 pt

So $\frac{(p'-qA)^2}{2m} = \frac{p'^2}{2m} - \omega L_z' + \frac{m\omega^2}{2}(x'^2+y'^2)$ 2pt

Cancels against V_Ω

f) $\hat{H}_z = -\frac{\Delta}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$

Eigenwaarden:

$$\det\begin{pmatrix} -\frac{\Delta}{2}\cos\theta - \lambda & -\frac{\Delta}{2}\sin\theta e^{-i\phi} \\ -\frac{\Delta}{2}\sin\theta e^{i\phi} & +\frac{\Delta}{2}\cos\theta - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$\Longrightarrow \quad \lambda^2 - \frac{\Delta^2}{4}\cos^2\theta - \frac{\Delta^2}{4}\sin^2\theta = 0$$

$$\Rightarrow \lambda = \pm\frac{\Delta}{2}$$ dus grondtoestands energie $E_- = -\frac{\Delta}{2}$

$E_+ = +\frac{\Delta}{2}$ 3pt

Eigentoestand bij E_-:

$$H_z\begin{pmatrix}\chi_\uparrow\\ \chi_\downarrow\end{pmatrix} = -\frac{\Delta}{2}\begin{pmatrix}\chi_\uparrow\\ \chi_\downarrow\end{pmatrix}$$

$\cos\theta\,\chi_\uparrow + \sin\theta\, e^{-i\phi}\chi_\downarrow = \chi_\uparrow$

take $\chi_\uparrow = 1$ dan $\chi_\downarrow = \left(\frac{1-\cos\theta}{\sin\theta}\right)e^{i\phi}$

4pt

Dus: $|\psi_-\rangle = |\uparrow\rangle + \left(\frac{1-\cos\theta}{\sin\theta}\right)e^{i\phi}\,|\downarrow\rangle$

normaliseren $|\psi_-\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|\uparrow\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|\downarrow\rangle$

3pt

Analoog $|\psi_+\rangle = \begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}\,e^{i\phi}\end{pmatrix}$

g) We hebben

$$\vec{S}_- \equiv \langle \psi_- | \hat{\vec{S}} | \psi_- \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow 2\text{ pt} \\ \leftarrow 2\text{ pt} \\ \leftarrow 2\text{ pt} \end{matrix}$$

$$\vec{S}_+ \equiv \langle \psi_+ | \hat{\vec{S}} | \psi_+ \rangle = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \leftarrow 2\text{ pt}$$

en $$\frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H}\hat{\vec{S}}\right] = \left(e^{+\beta\Delta/2}\vec{S}_- + e^{-\beta\Delta/2}\vec{S}_+\right) \Big/ \left(e^{+\beta\Delta/2} + e^{-\beta\Delta/2}\right)$$

2 pt

h) i) Impulsmoment (rotatie-invariantie) 3 pt
Energie (H onafhankelijk tijd) 3 pt

ii) $l = 3$ $\quad F = l + s = 3\frac{1}{2}$ 2 pt

$s = \frac{1}{2}$ $\quad$ óf $F = l - s = 2\frac{1}{2}$ 2 pt