TENTAMEN QUANTUMMECHANICA II
21 JANUARI 1999, 14:00-17:00

1. Maak iedere opgave op een apart vel.
2. Schrijf op ieder vel uw naam en voorletters en op het eerste vel bovendien uw adres, postcode en studierichting.
3. Schrijf duidelijk; onduidelijk schrift wordt niet nagekeken!
4. Verdeel uw tijd evenrredig over de drie opgaven
5. Het gebruik van literatuur is niet toegestaan

Opgave 1 :Een halve harmonische oscillator met een tijdsafhankelijke storingsterm

Gegevens: De harmonische oscillator $\mathcal{H}_0 = \frac{\hat{p}^{\,2}}{2m} + \frac{m\omega\hat{x}^{\,2}}{2}$ kan ook geschreven worden als: $\mathcal{H}_0 = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$. Hierbij is de annihilatie-operator gedefinieerd door: $a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\,\right)$. De eigenwaarden van de harmonische oscillator zijn: $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, ...$ De bijbehorende (genormeerde) eigentoestanden noteren we als $|n\rangle$. Er geldt $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ en $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$. Verder geldt: $\langle -x|n\rangle = (-1)^n\langle x|n\rangle$.

In deze opgave beschouwen we een deeltje met massa dat zich in één dimensie beweegt. De Hamiltoniaan $\mathcal{H}$ voor het deeltje wordt gegeven door (in de plaatsrepresentatie):

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x), \text{ waarbij} \\ V(x) &= \begin{cases} \infty & \text{als } x < 0 \\ \\ \frac{1}{2}m\omega^2x^2 & \text{als } x \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

We hebben hier dus te maken met een halve harmonische oscillator. Verder is het duidelijk dat het deeltje *niet* door kan dringen het gebied $x < 0$. Voor iedere toestand $|\Psi(t)\rangle$ die het deeltje beschrijft moet dus gelden: $\langle x|\Psi(t)\rangle = 0$ voor $x \leq 0$. Het eigenwaardeprobleem $\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ kan opgelost worden met behulp van de oplossingen van de gewone harmonische oscillator. Beschouw namelijk de toestanden $|\phi_k\rangle$ (voor $k = 0, 1, 2, ...$), die als volgt in termen van de eigentoestanden $|n\rangle$ van de gewone harmonische oscillator gedefinieeerd zijn:

$$\langle x|\phi_k\rangle = \begin{cases} 0 & \text{als } x < 0 \\ \\ \sqrt{2}\langle x|2k+1\rangle & \text{als } x \geq 0 \end{cases}$$

a) Toon aan dat $\{|\phi_k\rangle\}$ een orthonormaal stelsel is :$\langle\phi_l|\phi_k\rangle = \delta_{l,k}$.

b) Toon aan dat $\{|\phi_k\rangle\}$ een eigentoestand is van de Hamiltoniaan $\mathcal{H}$ bij eigenwaarde $\hbar\omega(2k+\frac{3}{2})$.

In het onderstaande mag u zonder bewijs aannemen dat $\mathcal{H}$ geen andere onafhankelijke eigentoestanden heeft dan de de toestanden $|\phi_k\rangle$.

c) Laat f een even functie zijn. Toona aan dat geldt:

$$\langle\phi_l|f(\hat{x}\,)|\phi_k\rangle = \langle 2l+1|f(\hat{x}\,)|2k+1\rangle \tag{1}$$

d) Bereken met behulp van (1) dat geldt:

$$\langle\phi_l|\hat{x}^{\,2}|\phi_k\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{2k(2k+1)}\delta_{l,k-1} + (4k+3)\delta_{l,k} + \sqrt{(2k+2)(2k+3)}\delta_{l,k+1}\right)$$

Op tijdstip $t = 0$ wordt een meting van de energie verricht, die de waarde $\frac{3}{2}\hbar\omega$ oplevert. Voorts wordt vanaf $t = 0$ een tijdsafhankelijke storingsterm toegevoegd, die gegeven wordt door (in de plaatsrepresentatie):

$$V_Q(x,t) = Qe^{-t/\tau}x^2$$

e) Beschouw nu $V_Q(x,t)$ als een storing op $\mathcal{H}$ (met Q als storingsparameter). Bepaal met behulp van tijdsafhankelijke storingsrekening de oplossing van de Schrödingervergelijking tot op eerste orde in Q.

Hint: Schrijf $|\Psi(t)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(t)e^{-i\omega(2k+\frac{3}{2})t}|\phi_k\rangle$. Wat zijn dan de beginwaarde-problemen voor de $c_k(t)$? Los die beginwaarde-problemen pertunbatief op (tot in eerste orde in Q).

Opgave 2: Identieke deeltjes op een cirkel

Gegevens:Voor een vrij deeltje dat op een cirkel met straal a beweegt geldt de Hamiltoniaan $\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}$. De energie eigenwaarden van $\mathcal{H}_0$ worden gegeven door; $E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2ma^2}$ waarbij $n = 0, 1, 2, ...$ Het grondniveau E_0 is niet ontaard. Verder geldt dat wanneer we golffuncties $\Phi_k(k \in \mathbb{Z})$ invoeren door $\Phi_k(\theta) = \frac{e^{ik\theta}}{\sqrt{2\pi}}$, dat dan de eigenruimte van E_0 opgespannen wordt door $\Phi_0$en de eigenruimte van $E_n(n = 1, 2, 3, ...)$ door Φ_n en Φ_{-n}.
Er geldt dat de golffuncties Φ_k orthonormaal zijn, waneer we als inprodukt nemen:$\langle\phi|\psi\rangle = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta\phi(\theta)^*\psi(\theta)$. Verder geldt de volgende identiteit:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta_1 \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta_2 e^{in_1\theta_1}e^{in_2\theta_2}\cos(\theta_1+\theta_2) = 2\pi^2(\delta_{n_1,1}\delta_{n_2,1} + \delta_{n_1,-1}\delta_{n_2,-1}).$$

Voor een systeem van twee spin-$\frac{1}{2}$deeltjes, tenslotte, is gegeven dat de totaalimpulsmoment toestanden en de direct-product toestanden als volgt aan elkaar gerelateerd zijn:

$$\begin{array}{ll}
|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle & \\
|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \qquad & |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \\
|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle &
\end{array}$$

In deze opgave bekijken we een systeem van twee *identieke* spin-$\frac{1}{2}$deeltjes die langs een cirkel met straal a bewegen. De Hamiltoniaan van het systeem wordt gegeven door:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + B\cos(\theta_1+\theta_2)(S_{1,z}+S_{2,z}), \text{ met} \\
\mathcal{H}_i &= -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta_i^2} \qquad (\ i = 1,2)
\end{aligned}$$

Daar de Hamiltoniaan commuteerd met $\vec{S}^2_{\text{tot}}$ en $S_{\text{tot},z}$, kunnen we de eigentoestanden van $\mathcal{H}$ altijd zo kiezen dat het ook de eigentoestanden zijn van $\vec{S}^2_{\text{tot}}$ en $S_{\text{tot},z}$. We kunnen dus eigentoestanden van $\mathcal{H}$ gaan zoeken met $|1,1\rangle$ als spindeel, met $|1,0\rangle$ als spindeel, met $|1,-1\rangle$ als spindeel en met $|0,0\rangle$ als spindeel. Wanneer we het baandeel van een toestand met spindeel $|S,M\rangle$ noteren als $\psi_{S,M}(\theta_1,\theta_2)$, resulteren de volgende eigenwaarde-vergelijkingen voor de respectieve baandelen:

$$\begin{aligned}
\{\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + B\hbar\cos(\theta_1+\theta_2)\}\psi_{1,1}(\theta_1,\theta_2) &= E\psi_{1,1}(\theta_1,\theta_2) \\
\{\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2\}\psi_{1,0}(\theta_1,\theta_2) &= E\psi_{1,0}(\theta_1,\theta_2) \\
\{\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 - B\hbar\cos(\theta_1+\theta_2)\}\psi_{1,-1}(\theta_1,\theta_2) &= E\psi_{1,-1}(\theta_1,\theta_2) \\
\{\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2\}\psi_{0,0}(\theta_1,\theta_2) &= E\psi_{0,0}(\theta_1,\theta_2)
\end{aligned}$$

Bedenk bij deze opgave steeds goed dat we te maken hebben met identieke fermionen.

a) Geef een basis van eigentoestanden die $|0,0\rangle$ als spindeel hebben.

b) Geef een basis van eigentoestanden die $|1,0\rangle$ als spindeel hebben.

We gaan nu met behulp van storingsrekening de laagste energie-eigenwaarde bepalen die hoort bij een toestand met als spindeel $|1,1\rangle$. Zoals al eerder aangegeven, wordt de Hamiltoniaan voor het baandeel dan gegeven door $\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + B\hbar\cos(\theta_1+\theta_2)$.

c) We beschouwen eerst het ongestoorde probleem, dus $B = 0$.
Wat is de laagst mogelijke (toegestane) waarde voor de energie, en wat is de bijbehoreende ontaardingsgraad? Geef ook de toestand/toestanden die de bijbehorende eigenruimte opspant/opspannen.

d) Op het, bij onderdeel c) gevonden laagste energie-niveau gaan we nu storingsrekening toepassen. Bepaal de verschuiving(en) van dat niveau ten gevolge van de storingsterm $B\hbar\cos(\theta_1 + \theta_2)$ tot op eerste orde in B.

Opgave 3: Variatierekening voor een veel-deeltjes systeem

Bij variatiekening speelt de volgende functionaal een belangrijke rol:

$$E(|\Psi\rangle) = \frac{\langle\Psi|\mathcal{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

We zullen eerst algemeen gaan afleiden dat de toestanden waarbij deze functionaal een lokaal extremum heeft preccies de eigentoestanden zijn van $\mathcal{H}$. Vervolgens zullen we deze methode gaan toepassen op een systeem van veel deeltjes.

De functionaal E heeft een lokaal extremum bij de toestanden $|\Psi\rangle$, als voor naburige toestanden de waarde van de functionaal tot op eerste orde niet afwijkt. Deze voorwaarde kunnen we als volgt formaliseren:

$$\text{voor elke toestand}|\phi\rangle\ :\ E(|\Psi\rangle + \epsilon|\phi\rangle) = E(|\phi\rangle) + O(\epsilon^2) \qquad (2)$$

a) Leidt af dat voorwaarde (2) voor een lokaal extremum van E bij de toestand $|\Psi\rangle$ ook als volgt geformuleerd kan worden:

$$\text{voor elke toestand } |\phi\rangle\ \langle\phi|\mathcal{H} - E(|\Psi\rangle)|\Psi\rangle + \langle\Psi|\mathcal{H} - E(|\Psi\rangle)|\phi\rangle = 0 \qquad (3)$$

b) Leid vervolgens af dat de voorwaarde voor een lokaal extremum van E bij de toestand $|\Psi\rangle$ ook geformuleerd kan worden als:

$$\text{voor elke toestand } |\phi\rangle\ :\langle\phi|\mathcal{H} - E(|\Psi\rangle)|\Psi\rangle = 0 \qquad (4)$$

<u>Hint</u>; Zij gegeven een toestand$|\phi\rangle$. De voorwaarde (2) geldt voor elke toestand, dus ook voor de toestand $i|\phi\rangle$. Bepaal die voorwaarde voor de toestand $i|\phi\rangle$, en vergelijk dit met de voorwaarde voor $|\phi\rangle$.

Het hierboven aangekondigde resultaat dat de extrema aangenomen worden bij eigentoestanden is nu aangetoond. aan (3) kan immers alleen maar door alle $|\phi\rangle$ voldaan worden, als $\{\mathcal{H} - E(|\Psi\rangle)\}|\Psi\rangle = 0$, dus als $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E(|\Psi\rangle)|\Psi\rangle$, dus als $|\Psi\rangle$ een eigentoestand is van $\mathcal{H}$ (bij eigenwaarde $E(|\Psi\rangle)$).

We gaan nu een soortgelijke procedure toepassen op een systeem van N identieke spin-0 deeltjes, met massa m, die zich in een externe harmonische potentiaal bevinden, en bovendien wisselwerken volgens een puntinteractie met sterkte$P(>0)$. De Hamiltoniaan $\mathcal{H}_{ww}$ van dit N deeltjes systeem wordt dus gegeven door :

$$\mathcal{H}_N = \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m\omega^2}{2}x_i^2\right) + \frac{P}{2}\sum_{(i,j=1),(i\neq j)}^{N}\delta(x_i - x_j)$$

Voor dit systeem willen we nu een benadering gaan zoeken voor de grondtoestandsfunctie en de bijbehorende grondtoestandsenergie, Indien de deeltjes geen onderlinge inteactie hadden, zou de grondtoestandsfunctie van het systeem gegeven worden door het direkt-produkt: $\Phi_0(x_1)\Phi_0(x_2)\cdots\Phi_0(x_N)$, met Φ_0 de grondtoestandsfuncie van de 1-dimensinale harmonische oscilator. Hierdoor geïnspireerd proberen we als benadering van de grondtoestandsfunctie van $\mathcal{H}_{ww}$ Het direkt-produkt:

$$\Psi_\Phi(x_1, x_2, \ldots, x_N) \stackrel{\text{def}}{=} \Phi(x_1)\Phi(x_2)\ldots\Phi(x_N),$$

met een nader te bepalen functie Φ. merk op dat een direct-produkt toestand van deze vorm is toegestaan voor het systeem van spin-0 bosonen.

c) Leid af dat geldt:

$$E(\Psi_\Phi) = \frac{N}{\|\Phi\|^2}\int \mathrm{d}x\Phi(x)^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\Phi(x) + \frac{N(N-1)P}{2\|\Phi\|^4}\int \mathrm{d}x|\Phi(x)|^4$$

waarbij $\|\Phi\|^2 = \int \mathrm{d}x|\Phi(x)|^2$.

Een geschikte funktie $\Phi(x)$ kan bepaald worden door te eisen dat de energiefunctionaal $E(\Psi_\Phi)$ een lokaal minimum heeft in Φ, dus door te eisen:

$$\text{voor alle functies } \chi(x)\text{: } E\left(\Psi_{\Phi+\epsilon\chi}\right) = E(\Psi_\Phi) + O(\epsilon^2)$$

Het uitwerken van deze eis levert uiteindelijk op dat Ψ_Φ een geschikte kandidaat is voor de grondtoestandsfuncyie (bij grondtoestandsenergie $E(\Psi_\Phi)$), indien geldt:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \frac{(N-1)P}{\|\Phi\|^2}|\Phi(x)|^2 - \frac{(N-1)P}{2\|\Phi\|^4}\int \mathrm{d}y|\Phi(y)|^4 - \frac{1}{N}E(\Psi_\Phi)\right)\Phi(x) = 0 \quad (5)$$

d) Verklaar, zonder gedetaileerde berekeningen te geven, de herkomst van de derde term in (5) , dus de herkomst van een term van de vorm $|\Phi(x)|^2\Phi(x)$.

We nemen nu aan dat voor de grondtoestandsfunctie de eerste term van (5) verwaarloosbaar is ten opzichte van de andere termen. Wanneer we verder het (positieve) getal C definiëren door:

$$C = \frac{(N-1)P}{2\|\Phi\|^4}\int \mathrm{d}y|\Phi(y)|^4 + \frac{1}{N}E(\Psi_\Phi)$$

volgt dus als vergelijking:

$$\left(\frac{m\omega^2}{2}x^2 + \frac{(N-1)P}{\|\Phi\|^2}|\Phi(x)|^2 - C\right)\Phi(x) = 0$$

e) Leid af dat dan moet gelden:

$$\begin{aligned}
\frac{|\Phi(x)|^2}{\|\Phi^2\|} &= \begin{cases} \frac{C-\frac{m\omega^2}{2}x^2}{(N-1)P} & \text{als } |x| \leq \sqrt{\frac{2C}{m\omega^2}} \\ \\ 0 & \text{als } |x| \geq \sqrt{\frac{2C}{m\omega^2}} \end{cases} \\
E(\Psi_\Phi) &= N\left[C - \frac{1}{(N-1)P}\int_0^{\sqrt{\frac{2C}{m\omega^2}}} \mathrm{d}x\left(C - \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)^2\right]
\end{aligned}$$

Opmerking; Er volgt dat wanneer we het getal C kennen, we een benadering voor zowel de grondtoestandsfunctie (of in ieder geval de absolute waarde daarvan) als de grondtoestandsenergie hebben. Het getal C is te bepalen m.b.v. de zelfconsistentie-eis:$\|\Phi\|^2 = \int \mathrm{d}x|\Phi(x)|^2$. Dat rekenwerk laten we hier echter achterwege.