$\mathcal{TBC}$A-E s^2
Naar het
Instituut voor Theoretische Fysica
Universiteit Utrecht

TENTAMEN QUANTUMMECHANICA II
4 MAART 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 bovedien 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 em niet toegestaan.

Opgave 1 : Een systeem van twee onderscheidbare spin-$\frac{1}{2}$deeltjes

Gegevens: Voor een impulsmoment $\vec{J}$geldt in het algemeen (d.w.z. , onderstaande geldt voor baanimpulsmoment, spinimpulsmoment, totaalimpulsmoment, etc.):

$$\begin{aligned} J_z|j,m\rangle &= m\hbar|j,m\rangle \\ J_\pm|j,m\rangle &= \sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\hbar|j,m\pm 1\rangle \end{aligned}$$

waarbij $J_\pm = J_x \pm iJ_y$.
Voor een systeem van twee spin-$\frac{1}{2}$-deeltjes geldt dat de totaal impulsmoment toestanden als volgt aan elkaar gerelateerd zijn:

$$\begin{aligned} &|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ &|1,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle) \qquad |0,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)\,, \\ &|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

In deze opgave beschouwen we een systeem van twee onderscheidbare spin-$\frac{1}{2}$deeltjes. Onder $\vec{S}_i$ verstaan we de spinimpulmomentoperator voor deeltje $i(i=1,2)$, onder $\vec{S}_{\text{tot}}$ de spinimpulsmomentoperator voor het systeem van de twee deeltjes: $\vec{S}_{\text{tot}} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$.

a) Wat zijn de mogelijke uitkomsten van een meting van $S_{\text{tot},x}$? Licht uw antwoord kort (zonder berekeningen) toe.

b) Leidt af dat de matrixgedaante van $S_{\text{tot},x}$ ten opzichte van de basis $\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle, |0,0\rangle\}$ van totaal-impulsmomentoestanden wordt gegeven door

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

c) Bij een meting van $S_{\text{tot},x}$ wordt de hoogst mogelijke uitkomst gemeten.
Leidt af dat het systeem zich onmiddelijk na de meting bevindt in de toestand: $\frac{1}{2}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle|\downarrow\downarrow\rangle)$.

De Hamiltoniaan voor het systeem wordt gegeven door:

$$\mathcal{H} = gS^2_{\text{tot},z},$$

waarbij g een reële constante is.

d) Op tijdstip $t = 0$ bevindt het systeem zich in de onder **c)** genoemde toestand. Leid af dat de toestand op tijdstip t gegeven door;

$$\tfrac{1}{2}e^{-ig\hbar t}\left(|1,1\rangle + |1,-1\rangle\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle$$

e) Op tijdstip t wordt $S_{1,z}$ gemeten.
Wat zijn de mogelijke uitkomsten? Bepaal ook de kans op elk van die uitkomsten.

f) Bereken voor de toestand waarin het deeltje zich op het tijdstip t bevindt de verwachtingswaarde $S_{\text{tot},z}$.

Opgave 2: Waterstof en helium

In deze opgave bekijken we de invloed van een klein, homogeen en constant magneetveld op de energieniveau's van een electron in het veld van een kern met een positieve lading Ze. (Voor $Z = 1$ hebben we dus te maken met een waterstofatoom.) De Hamiltoniaan wordt gegeven door:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 - \frac{ie}{\hbar mc}\left[\vec{S}\cdot\left(\vec{p}\times\vec{A} + \vec{A}\times\vec{p}\right)\right] - \frac{e}{2mc}\left(\vec{p}\cdot\vec{A} + \vec{A}\cdot\vec{p}\right).$$

Hierin is $\vec{A}$de vectorpotentiaal. Het magneetveld $\vec{B}$kiezen we langs de z-as, zodat de vectorpotentiaal geschreven kan worden als $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r} = \frac{1}{2}\vec{B}\hat{e}_z \times \vec{r}$.
Er geldt dan:

$$\begin{aligned} \frac{e^2\vec{A}^2}{2mc^2} &= \frac{e^2}{8mc^2}B^2\left(x^2+y^2\right); \\ \frac{ie}{\hbar mc}\vec{S}\cdot\left(\vec{p}\times\vec{A} + \vec{A}\times\vec{p}\right) &= \frac{e}{mc}BC_z. \end{aligned} \tag{1}$$

a) Leid voor de laatste term in de Hamiltoniaan af dat: $\vec{p}\cdot\vec{A} + \vec{A}\times\vec{p} = BL_z$.
<u>Gegeven:</u> $(\vec{v}\times\vec{w})_i = \sum_{j,k}\epsilon_{ijk}v_j w_k$.

De Hamiltoniaan kan dus ook als volgt geschreven worden:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_B, \quad \text{met} \\ \mathcal{H}_0 &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad \text{en} \\ \mathcal{H}_B &= -\frac{eB}{2mc}\left(L_z + 2S_z\right) + \frac{e^2B^2}{8mc^2}\left(x^2+y^2\right) \end{aligned}$$

Zoals u weet is $\mathcal{H}_0$ invariant onder willekeurige rotaties. Voor $\mathcal{H}_B$ geldt dat niet. H_B is echter wel invariant onder rotaties om de z-as. Zoals bekend transformeert een operator O onder een rotatie om de z-as over een hoek α als volgt: $O \to e^{\frac{i}{\hbar}\alpha J_z} O e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z}$.

b) i) Toon aan dat $\mathcal{H}_B$ invariant is onder rotaties om de z-as.
ii) Kunt u deze invariantie fysisch begrijpen? licht uw antwoord *kort* toe.

De eigentoestanden van $\mathcal{H}_0$ noteren we als de direkt-producten $|nlm_l\rangle|m_s\rangle$, waarbij $|nlm_l\rangle$ het baanstuk voorstelt en $|m_s\rangle$ het spinstuk. De bijbehorende (discrete) eigenwaarden van $\mathcal{H}_0$ zijn:

$$E_n^0 = -\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\frac{1}{n^2}, \quad n = 1,2,3,...$$

Vanwege de vrijheidsgraden in de quantumgetallen l, m_l en m_s, is de ontaardingsgraad van E_n^0 : $2n^2$. Voor de baantoestand $|n=1, l=0, m_l=0\rangle$ is verder het volgende matrixelement gegeven:

$$\langle 100|\hat{x}^2 + \hat{y}^2|100\rangle = \frac{2a_0^2}{Z^2}, \text{ met de Bohr straal } a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}.$$

Voor het waterstofatoom geldt, zoals al eerder vermeld: $Z = 1$.

c) Bepaal met behulp van eerste orde storingsrekening het effect van $\mathcal{H}_B$ op het (tweevoudig ontaarde) grondniveau ($n = 1$) van het ongestoorde waterstofatoom.

   Wordt de ontaarding opgeheven door de storing?

We beschouwen nu een Heliumatoom. Helium bestaat uit twee electronen die gebonden zijn aan een kern met lading $2e$ ($Z = 2$). Wanneer we de wisselwerking tussen de twee electronen verwaarlozen, neemt de Hamiltoniaan de volgende vorm aan (er is geen magneetveld) :

$$\mathcal{H}_{\text{He}} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}.$$

d) Bepaal de energie eigenwaarden van $\mathcal{H}_{\text{He}}$ in het discrete regime.

e) Kunt u verklaren dat, ondanks het feit dat we hier te maken hebben met *twee* spin -$\frac{1}{2}$deeltjes, het grondniveau van $\mathcal{H}_{\text{He}}$ *niet* ontaard is?

   Licht uw antwoord toe met het vermelden van de grondtoestand (zowel baan- als spin-deel).

Opgave 3: l=0 verstrooiing aan een bolsschil

In deze opgave beschouwen we een deeltje(met massa m) dat met impuls $\hbar k$ langs de positieve z-as invalt en verstrooid wordt aan een bolschil met straal r_0. De (bolsymmetrische) potentiaal wordt dus gegeven door:

$$V(r) = V_0\;\delta(r - r_0)$$

a) Leg uit dat om de golffunctie te vinden die het deeltje beschrijft, we *die* (alleen van r en θ afhankelijke) oplossing van het eigenwaarde probleem $\mathcal{H}\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$ moeten vinden die het volgende asymptotische gedrag heeft voor $r \to \infty$

$$e^{ikr\cos\theta} + f(k,\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{2}$$

   Geef bij uw uitleg ook de fysische interpretatie van de termen in (2) .

In deze opgave gaan we het verstrooiingsprobleem oplossen voor $l = 0$ verstrooiing. We gaan als volgt te werk:

- In de onderdelen b), c) en d) bepalen we eerst de $l = 0$ component van de meest algemene fysische oplossing van $\mathcal{H}\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$.
- Vervolgens leggen we het asymptotische gedrag (2) op, en bepalen we in onderdeel e) de $l = 0$ verstrooiingsamplitude.

Daar de golffunctie geen φ-afhankelijkheid heeft, kan deze als volgt ontwikkelt worden in termen van Legendre polynomen:

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r} U_l(k,r) P_l(\cos\theta)$$

De vergelijking $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V_0\delta(r-r_0)\right)\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$ is dan equivalent aan de volgende vergelijkingen ($l = 0, 1, 2, ...$) voor de functies $U_l(k,r)$:

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2}V_0\delta(r-r_0) + k^2\right)U_l(k,r) = 0$$

Zoals gezegd zijn we alleen geïnterreseerd in de $l = 0$ component van $\psi(r, \theta)$: $\frac{1}{r}U_0(k, r)$. Voor $U_0(k, r)$ geldt de volgende vergelijking:

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \delta(r - r_0) + k^2 \right) U_0(k, r) = 0 \tag{3}$$

b) Leid middels integratie van (3) over het interval $[r_0 - \varepsilon, r_0 + \varepsilon]$ af dat moet gelden:

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \left(\frac{\mathrm{d}U_0}{\mathrm{d}r}(k, r_0 + \varepsilon) - \frac{\mathrm{d}U_0}{\mathrm{d}r}(k, r_0 - \varepsilon) \right) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} U_0(k, r_0)$$

c) Welke randvoorwaarden moet u nog meer opleggen aan $U_0(k, r)$?

d) Leidt af dat de $l = 0$ componenten van oplossingen van $\mathcal{H}\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$ gegeven worden door:

$$\frac{1}{r} U_0(k, r) = C \begin{cases} \frac{\sin kr}{kr} & \text{als } r < r_0 \\ (1 + A(k)) \frac{\sin kr}{kr} - B(k) \frac{\cos kr}{kr} & \text{als } r > r_0 \end{cases} \tag{4}$$

met C een willekeurige constante, en met:

$$A(k) = \frac{2mV_0}{\hbar^2 k} \sin kr_0 \cos kr_0; \quad B(k) = \frac{2mV_0}{\hbar^2 k} \sin^2 kr_0$$

In (4) wordt de $l = 0$ component van de meest algemene oplossing van $\mathcal{H}\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$ gegeven. Daar de constante C daarin willekeurig is, vormen die $l = 0$ componenten een 1-dimensionale deelruimte. gaan uit deze deelruimte nu *die* $l = 0$ component bepalen die past bij een asymptotisch gedrag voor $r \to \infty$ van de vorm (2) . (Dit komt dus neer op het vastleggen van de constante C.) Om te zien wat deze eis oplevert, moeten we de θ-afhankelijkheid van $e^{ikr\cos\theta}$ en $f(k, \theta)$ Ook in Legendere-polynomen ontwikkelen:

$$\begin{aligned} e^{ikr\cos\theta} &\to \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) P_l(\cos\theta) \text{ , voor } r \to \infty \\ f(k, \theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} f_l(k) P_l(\cos\theta) \end{aligned}$$

Invullen in (2) geeft dat voor de gezochte $l = 0$ component het asymptotisch gedrag voor $r \to \infty$ als volgt moet zijn:

$$\frac{\sin kr}{kr} + f_0(k) \frac{e^{ikr}}{r}$$

e Bepaal de constante C *en* de partiële golfamplitude $f_0(k)$ voor $l = 0$ verstrooiing, d.w.z. , druk beide uit in de bekende $A(k)$ en $B(k)$.