NS-202B Kwantummechanica 2016/17 Tentamen

Universiteit Utrecht, opleiding natuur-en sterrenkunde

3 februari 2017

Gebruik van een eenvoudige rekenmachine of een grafische rekenmachine zonder draadloze communicatie mogelijkheden is toegestaan. Een grafische rekenmachine is niet noodzakelijk. Een *handgeschreven* notitie van maximaal 1 zijde a4 mag bij deze toets gebruikt worden.
De tijdslimiet voor het tentamen is 180 minuten.
Er zijn 34 punten te behalen. Uw cijfer wordt berekend als 10× (aantal behaalde punten)/34. Lever a.u.b elke opgave op een apart blad in, en schrijf op alle bladen die u inlevert uw naam en inschrijfnummer.

1. Separatie van variabelen (9 pt.)

a) (1 pt)
Schrijf de tijdafhankelijke Schrödingervergelijking (met alle operatoren uitgeschreven in termen van afgeleiden en ∇) voor een spinloos elektron in 3 ruimtelijke dimensies. Noteer de grootheden die van de positie $\mathbf{x}$ en/of de tijd t af kunnen hangen expliciet als functies met hun argumenten, bijvoorbeeld $\psi(\vec{x}, t)$.

b) (3 pt)
Onder welke omstandigheid kunnen we de vergelijking separeren in een tijdafhankelijk en een plaatsafhankelijk deel? Wat is de separatieconstante en wat is haar fysische betekenis? Toon aan dat de vergelijking inderdaad separeerbaar is.

c) (1 pt)
Geef de tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking.

d) (2 pt)
Geef aan onder welke omstandigheid het mogelijk is de tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking nogmaals te separeren in een radiëel deel en een hoekafhankelijk deel $\Psi(r, \theta, \phi) = R_{n\ell m}(r)\Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi)$. (Geen bewijs gevraagd)

e) (2 pt)
Wat is de fysische betekenis van de separatieconstanten ℓ en m?

2. Twee neutronen (9 pt)

Neutronen zijn spin-1/2 kerndeeltjes zonder elektrische lading, met massa $m_n \approx 2000 m_e$. We beschouwen 2 neutronen in een 1-dimensionale oneindig diepe potentiaalput,

$$V = \begin{cases} 0 & (|x| < a) \\ \infty & (|x| > a) \end{cases}$$

We verwaarlozen de interacties tussen de neutronen.

a) (2 pt)
Geef de genormaliseerde grondtoestand $\psi_0(x)$ voor een enkel neutron, en de bijbehorende energie E_0

b) (2 pt)
Geef de genormaliseerde eerste aangeslagen toestand $\psi_1(x)$ voor een enkel neutron, en de bijbehorende energie E_1

c) (2 pt)
Wat is de spin singlet (S=0) toestand met de laagste energie? Geef de toestand en de energie in termen van de hierboven berekende golffuncties en energieën ψ_0, E_0, ψ_1, E_1. Vergeet niet het spin deel van de golffunctie. Is er sprake van ontaarding (degeneracy) ?

d) (2 pt)
Wat is de spin triplet (S=1) toestand met de laagste energie? Geef de toestand en de energie in termen van de hierboven berekende golffuncties en energieën ψ_0, E_0, ψ_1, E_1. Vergeet niet het spin deel van de golffunctie. Is er sprake van ontaarding (degeneracy) ?

e) (1 pt)
Leg in niet meer dan 4 zinnen uit waarom de singlet toestand de grondtoestand is.

3. De gestoorde harmonische oscillator (13 Pt.)

Beschouw een kwantum in een harmonische-oscillator potentiaal met een kleine verstoring, gegeven door

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x) + \hat{H}_1 \\ \hat{V}(x) &= \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \\ \hat{H}_1 &= \lambda \alpha x^2 \ . \end{aligned}$$

Neem aan dat $\lambda, m, \alpha, \omega > 0$. We bepalen eerst de eigentoestanden van de Hamiltoniaan voor $\lambda = 0$.

a) (1 Pt)
Laat zien dat de transformatie van variabelen $y = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ de Hamiltoniaan in de vorm brengt

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} y^2 \right) \ . \tag{1}$$

In deze vorm krijgen de ladderoperatoren de vorm:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y + \frac{d}{dy}\right) \;, \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y - \frac{d}{dy}\right) \;.$$

Het is gegeven dat $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ en $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$.

b) (2 Pt)
Gebruik deze eigenschappen om de ongestoorde ($\lambda = 0$) energie-eigenwaarden te bepalen.

c) (1 Pt)
Laat zien dat voor $\lambda > 0$,

$$E_n(\lambda) = \hbar\omega'(n + \frac{1}{2})$$

met $\omega' = \sqrt{\omega^2 + \lambda\frac{2\alpha}{m}}$

d) (1 Pt)
Geef de 2e orde Taylor ontwikkeling van de exacte energie van de grondtoestand.

e) (1 Pt)
Nu beschouwen we $\hat{H}_1$ als een verstoring van $\hat{H}_0$. Wat zijn de eenheden van α, als λ een klein reëel getal is?

f) (2 Pt)
Laat zien dat de storingsterm is uit te drukken met behulp van de ongestoorde ladderoperatoren, als

$$\hat{H}_1 = \lambda g\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1\right).$$

Hier is g een voorfactor die geen operatoren bevat, met waarde

$$g = \frac{\alpha\hbar}{2m\omega}.$$

g) (2 Pt)
Bereken de eerste-orde verstoring (first-order perturbation) van de energie van de grondtoestand, $E_0^{(1)}(\lambda)$.

h) (2 Pt)
Bereken de tweede-orde verstoring (second order perturbation) van de energie van de grondtoestand, $E_0^{(2)}(\lambda)$. Gebruik hiervoor de formule voor 2e orde storingsrekening:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

i) (1 Pt)
Vergelijk de Taylor ontwikkeling van de exacte oplossing met de resultaten van storingsrekening.

4. Waterstofatoom (3 Pt.)

Beschouw het waterstofatoom. Verwaarloos spin en de beweging van het proton. Het is gegeven dat de eigentoestanden voldoen aan

$$\psi_{n,\ell,m}(\mathbf{x}) = (-1)^\ell \psi_{n,\ell,m}(-\mathbf{x})$$

a) (1 Pt)

Bereken, zonder te integreren, de verwachtingswaarde van het electrisch dipoolmoment $\mathbf{p} = -e\mathbf{x}$ voor een atoom in de grondtoestand en voor de toestand $|n,\ell,m\rangle = |2,1,1\rangle$.

b) (1 Pt)

Is het plausibel dat de toestand $(|2,1,1\rangle + |1,0,0\rangle)/\sqrt{2}$ een verwachtingswaarde van het electrisch dipoolmoment ongelijk 0 heeft? Leg uit waarom, in maximaal 6 regels. U hoeft het dipoolmoment niet uit te rekenen.

c) (1 Pt)

We nemen aan dat de kern van het atoom een bolletje is met straal $r_p = 10^{-5}a_0$, en dat de bekende vorm van de golffunctie van het elektron ook binnen de kern geldig is. Hier is a_0 de Bohr straal (Bohr radius). Wat is de kans om bij een meting het elektron *binnen* de kern aan te treffen, als het atoom in de grondtoestand was? Het resultaat wordt gevraagd in 2 significante cijfers. Is het noodzakelijk hiervoor een integraal uit te rekenen?

Enkele mathematische identiteiten

Niet al deze mathematische identiteiten zijn nodig of nuttig bij het maken van de tentamenopgaven.

$$\cos\alpha\cos\beta = \frac{1}{2}\left(\cos(\alpha+\beta) + \cos(\alpha-\beta)\right) \tag{2}$$

$$\sin\alpha\sin\beta = -\frac{1}{2}\left(\cos(\alpha+\beta) - \cos(\alpha-\beta)\right) \tag{3}$$

$$\cos\alpha\sin\beta = \frac{1}{2}\left(\sin(\alpha+\beta) - \sin(\alpha-\beta)\right) \tag{4}$$

$$\int_0^x (x')^2 e^{-bx'}\, \mathrm{d}(x') = 2e^{-bx}\frac{e^{bx} - 1 - bx - b^2x^2/2}{b^3} \tag{5}$$