Julius Instituut, Faculteit Natuur- en Sterrenkunde, UU.
In elektronische vorm beschikbaar gemaakt door de $\mathcal{TBC}$ van A–Eskwadraat.
Het college NS-356b werd in 2004/2005 gegeven door dr. C.J.W.M. Klaassen.

Quantummechanica 2 (NS-356b)
3 februari 2005

Opgave 1. Twee harmonische oscillatoren met een afstotende storingsterm

Gegevens: De Hamiltoniaan van een 1-dimensionale harmonische oscillator wordt gegeven door $\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}$. De eigenwaarden hiervan zijn niet ontaard en worden gegeven door $\hbar\omega(n+\frac{1}{2}), n = 0,1,2,\ldots$. De bijbehorende genormeerde eigentoestanden noteren we als $|n\rangle$. Er geldt:

$$\begin{aligned} \hat{x}\ |n\rangle &= \sqrt{\tfrac{\hbar}{2m\omega}}\ \left(\sqrt{n}\mid n-1\rangle + \sqrt{n+1}\mid n+1\rangle\right); \\ \hat{x}^2\ |n\rangle &= \tfrac{\hbar}{2m\omega}\ \left(\sqrt{n(n-1)}\mid n-2\rangle + (2n+1)|n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle\right). \end{aligned}$$

Tenslotte mag u in deze opgave gebruik maken van de theorie van storingsrekening zonder deze eerst af te leiden.

In deze opgave beschouwen we een systeem van twee onderscheidbare één-dimensionale harmonische oscillatoren (beide met massa m en hoekfrequentie ω) die wisselwerken volgens een zwakke harmonische afstoting. De Hamiltoniaan H van het systeem wordt dus gegeven door:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \alpha V \text{ met :} \\ H_0 &= \tfrac{1}{2m}\ (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2) + \tfrac{m\omega^2}{2}\ (\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2); \\ V &= -\tfrac{m\omega^2}{2}(\hat{x}_2 - \hat{x}_1)^2; \\ 0 &< \alpha \ll 1. \end{aligned}$$

De eigentoestanden van H_0 worden gegeven door de direct-product toestanden $|m,n\rangle = |m\rangle_1\ |n\rangle_2$. De bijbehorende eigenwaarden zijn: $\hbar\omega(m+n+1)$. Er volgt dat het grondniveau van H_0 gegeven wordt door $\varepsilon_0 = \hbar\omega$. Dit niveau is niet-ontaard, en de bijbehorende eigenruimte wordt opgespannen door $|0,0\rangle$. Verder wordt het eerste aangeslagen energieniveau van H_0 gegeven door $\varepsilon_1 = 2\hbar\omega$. Dit niveau is tweevoudig ontaard, en de bijbehorende eigenruimte wordt opgespannen door $|1,0\rangle$ en $|0,1\rangle$.

a) Bepaal met storingsrekening het eerste aangeslagen energieniveau van H tot op eerste orde in α.

   Let op: Er wordt *niet* gevraagd naar het grondniveau van H.

   De eigenwaarden van H kunnen ook exact bepaald worden, namelijk door over te gaan op nieuwe coördinaten met bijbehorende impulsen.

$$\begin{aligned} \hat{X} &= \tfrac{1}{2}\ (\hat{x}_1 + \hat{x}_2); & \hat{P} &= \hat{p}_1 + \hat{p}_2; \\ \hat{x} &= \hat{x}_2 - \hat{x}_1; & \hat{p} &= \tfrac{1}{2}\ (\vec{p}_2 - \vec{p}_1). \end{aligned}$$

   In deze nieuwe coördinaten en impulsen luidt de Hamiltoniaan:

$$H = \tfrac{1}{4m}\hat{P}^2 + \tfrac{1}{m}\hat{p}^2 + m\omega^2\hat{X}^2 + \tfrac{m\omega^2}{4}\hat{x}^2 - \alpha\tfrac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2.$$

b) Bepaal de exacte waarde van het eerste aangeslagen energieniveau van H.

   Bespreek tevens of dit exacte resultaat in overeenstemming is met uw met storingsrekening gevonden resultaat uit onderdeel a.

   Gegeven: $(1+x)^\beta = 1 + \beta x + \mathcal{O}(x^2)$.

Opgave 2. Variatierekening voor een deeltje in een Yukawa-potentiaal

Beschouw een deeltje dat in drie dimensies beweegt in een zogenaamde Yukawa-potentiaal V_Y:

$$V_Y = -g^2 \frac{\mathrm{e}^{-\mu r}}{r}.$$

Hierin is g een soort van lading, analoog aan de elektrische lading in de Coulomb-potentiaal. Verder is μ een positieve constante: $\mu > 0$.

In deze opgave gaan we voor een speciaal geval met behulp van variatierekening het grondniveau benaderen in de Yukawa-potentiaal. Beschouw dus de Hamiltoniaan van een deeltje in een Yukawa-potentiaal in drie dimensies:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V_Y.$$

De Hamiltoniaan kan ook geschreven worden als:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + V_s, \text{ met} \\ H_0 &= -\tfrac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 - \tfrac{g^2}{r}; \\ V_s &= g^2 \tfrac{1-\mathrm{e}^{-\mu r}}{r}. \end{aligned}$$

Merk op dat H_0 in feite de Hamiltoniaan is voor een deeltje in een Coulombpotentiaal. Het grondniveau ε_0 van H_0 wordt daarom gegeven door:

$$\varepsilon_0 = -\tfrac{g^2}{2a}, \text{waarbij } a = \tfrac{\hbar^2}{mg^2}.$$

Verder weten we dat het grondniveau van een Hamiltoniaan $\tilde{H}$ gegeven wordt door het minimum over de hele toestandsruimte van de bij $\tilde{H}$ horende energie-functionaal $E_{\tilde{H}}[\psi] = \dfrac{\langle\psi|\tilde{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$. Er geldt dus:

$$\varepsilon_0 = \min \frac{\langle\psi|H_0|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}; \quad E_0 = \min \frac{\langle\psi|H_0|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle},$$

met E_0 het grondniveau van H.

a) Toon aan dat geldt: $E_0 \geq \varepsilon_0$.

We gaan nu de energie-functionaal E_H bepalen voor de probeer-golffuncties:

$$\psi_\sigma(\vec{r}) = \mathrm{e}^{-\sigma\frac{r}{a}}, \text{met } \sigma > 0$$

b) Toon aan dat $E_H[\psi_\sigma]$ gegeven wordt door:

$$E_H[\psi_\sigma] = \frac{g^2}{a}\left(\frac{\sigma^2}{2} - \frac{4\sigma^3}{(2\sigma + a\mu^2)}\right).$$

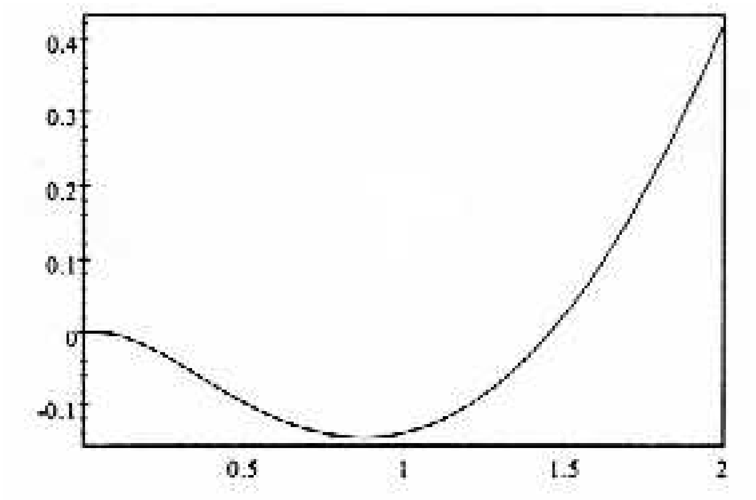
Gegevens: Er geldt: $\vec{\nabla}^2\mathrm{e}^{-\beta r} = \left(\beta^2 - \frac{2\beta}{r}\right)\mathrm{e}^{-\beta r}$. Verder geldt voor $\beta > 0$:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^n e^{-\beta x} = \frac{n!}{\beta^{n+1}}.$$

In de navolgende figuur is $\frac{a}{g^2}E_H[\psi_\sigma]$ uitgezet als functie van σ voor $a\mu = \frac{1}{2}$.

c) Dit onderdeel heeft betrekking op het geval $a\mu = \frac{1}{2}$.

1. Geef een energie-interval waarin zich het grondniveau van H bevindt. Kies dit interval zo smal mogelijk (zo smal als de resultaten tot nu toe mogelijk maken), en licht uw antwoord toe.
2. Heeft de Yukawa-potentiaal een gebonden toestand? Licht uw antwoord toe.



Opgave 3. Tijdsafhankelijke storingsrekening

We beschouwen in deze opgave een systeem waarvan de Hilbertruimte twee-dimensionaal is. De tijdsafhankelijke Hamiltoniaan $H(t)$ van het systeem wordt gegeven door:

$$H(t) = H_0 + \lambda V(t).$$

De eigentoestanden van H_0 worden gegeven door $|\phi_1\rangle$ en $|\phi_2\rangle$, de bijbehorende energieniveaus door E_1 resp. E_2 (waarbij $E_2 > E_1$). Verder geldt voor de storingsterm ten opzichte van de basis $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$:

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & V_0 e^{i\omega t} \\ V_0 e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}.$$

Op tijdstip $t = 0$ bevindt het systeem zich in de toestand $|\phi_1\rangle$.

In deze opgave gaan we het beginwaardeprobleem

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle \\ \\ |\Psi(0)\rangle = |\phi_1\rangle \end{cases}$$

oplossen met behulp van tijdsafhankelijke storingsrekening.

We schrijven allereerst:

$$|\Psi(t)\rangle = c_1(t)\ e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|\phi_1\rangle + c_2(t)\ e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}|\phi_2\ ,$$

met nader te bepalen $c_1(t)$ en $c_2(t)$.

a) Leid af dat $c_1(t)$ en $c_2(t)$ moeten voldoen aan de volgende beginwaarde-problemen:

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}c_1}{\mathrm{d}t}(t) = -\mathrm{i}\lambda \dfrac{V_0}{\hbar} e^{\mathrm{i}(\Delta\omega)t} c_2(t); \\ \\ c_1(0) = 1; \end{cases} \qquad \begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}c_2}{\mathrm{d}t}(t) = -\mathrm{i}\lambda \dfrac{V_0}{\hbar} e^{\mathrm{i}(\Delta\omega)t} c_1(t); \\ \\ c_0 = 0, \end{cases}$$

waarbij: $\Delta\omega = \omega - \omega'$; $\omega' = \dfrac{E_2 - E_1}{\hbar}$.

De beginwaardeproblemen voor $c_1(t)$ en $c_2(t)$ gaan we perturbatief oplossen (in λ). Daartoe schrijven we (voor $k = 1, 2$):

$$c_k(t) = c_k^{(0)}(t) + \lambda c_k^{(1)}(t) + \lambda^2 c_k^{(2)}(t) + \ldots$$

b) Toon aan dat voor de coëfficiënten $c_1^{(m)}(t)$ moet gelden:

1. voor $m = 0$: $\frac{\mathrm{d}c_1^{(0)}}{\mathrm{d}t}(t) = 0;\ c_1^{(0)}(0) = 1;$
2. voor $m = 1, 2, \ldots$: $\frac{\mathrm{d}c_1^{(m)}}{\mathrm{d}t}(t) = 0;\ -\mathrm{i}\frac{V_0}{\hbar} e^{i(\Delta\omega)t} c_2^{(m-1)}(t);\ c_1^{(0)}(0) = 0.$

Zonder bewijs mag u ervan uitgaan dat voor de coëfficiënten $c_2^{(m)}(t)$ moet gelden:

- voor $m = 0$: $\frac{\mathrm{d}c_2^{(0)}}{\mathrm{d}t}(t) = 0; c_2^{(0)}(0) = 0;$
- voor $m = 1, 2, \ldots$: $\frac{\mathrm{d}c_2^{(m)}}{\mathrm{d}t}(t) = 0;\ -\mathrm{i}\frac{V_0}{\hbar} e^{-i(\Delta\omega)t} c_1^{(m-1)}(t);\ c_2^{(0)}(0) = 0.$

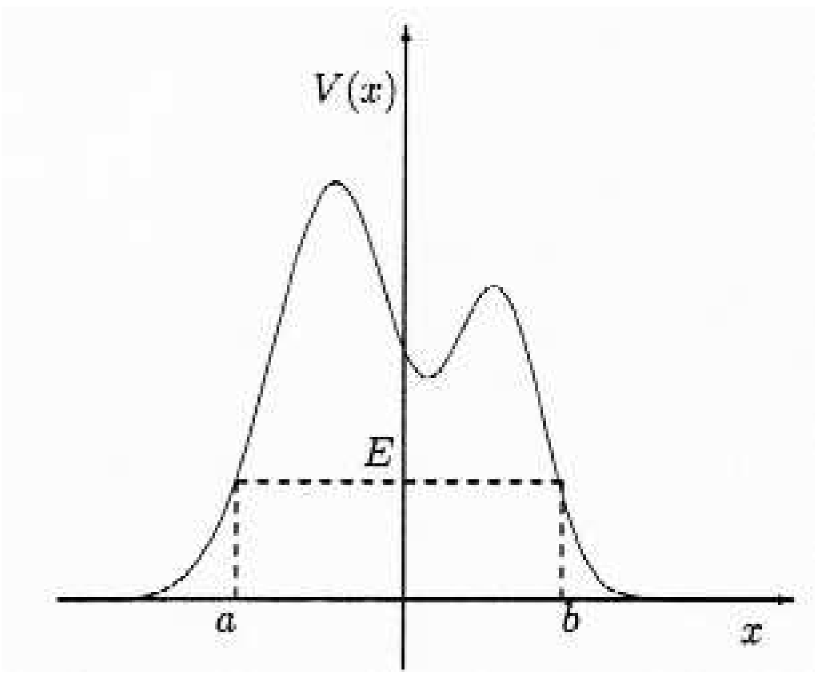
We kiezen nu de frequentie ω zodanig dat $\Delta\omega \neq 0$. Zij $P_2(t)$ de kans dat het systeem zich op tijdstip t in de toestand $|\phi_2\rangle$ bevindt.

c) Leidt af dat volgens tijdsafhankelijke storingsrekening geldt:

$$P_2(t) = \lambda^2 \frac{4V_0^2}{\hbar^2(\Delta\omega)^2} \sin^2 \frac{1}{2}(\Delta\omega)t + \mathcal{O}(\lambda^3).$$

Opgave 4. Verstrooiing met de WKB-methode

In deze opgave gaan we met behulp van de WKB-methode verstrooiing aan een 1-dimensionale potentiaalbarrière bestuderen. De potentiaalbarrière is nergens negatief en verdwijnt voor voldoende grote $|x|$: $V(x) \geq 0$ voor alle x en $V(x) = 0$ voor $|x| \geq R$. Zie de figuur op pagina 4.



We gaan eerst in de WKB-benadering een oplossing vinden van het eigenwaarde-probleem $H\psi = E\psi$. Hierbij kiezen we een energiewaarde E zodanig dat er twee klassieke omkeerpunten zijn. (Een deeltje dat van links invalt met energie E zou klassiek in punt a terugkaatsen; een deeltje dat van rechts invalt in punt b.)

Verder definiëren we:

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\{E - V(x)\}};$$

$$\kappa(x) \quad = \quad \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\{V(x)-E\}}.$$

In de WKB-benadering geldt dan dat de algemene oplossing van $H\psi = E\psi$ in het gebied links van a, maar niet te dicht bij a, gegeven wordt door:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left(A_1\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_x^a \mathrm{d}x' k(x')} + A_2\ \mathrm{e}^{-\mathrm{e}\int_x^a \mathrm{d}x' k(x')}\right).$$

In het gebied tussen a en b, maar ver genoeg van zowel a als b, kan de algemene oplossing op twee alternatieve manieren worden weergegeven:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left(B_1\ \mathrm{e}^{\int_a^x \mathrm{d}x'\kappa(x')} + B_2\ \mathrm{e}^{-\int_a^x \mathrm{d}x'\kappa(x')}\right);\\ &= \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\left(C_1\ \mathrm{e}^{\int_x^b \mathrm{d}x'\kappa(x')} + C_2\ \mathrm{e}^{-\int_x^b \mathrm{d}x'\kappa(x')}\right).\end{aligned}$$

In het gebied rechts van b, maar niet te dicht bij b, tenslotte, wordt de algemene oplossing gegeven door:

$$\psi(x) \quad = \quad \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\left(D_1\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_b^x \mathrm{d}x' k(x')} + D_2\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_b^x \mathrm{d}x' k(x')}\right).$$

a) Toon aan dat de volgende consistentie-eisen gelden:

$$B_1 = \frac{1}{\Theta}\ C_2; \qquad B_2 = \Theta\ C_1,$$

waarbij $\Theta = \mathrm{e}^{\int_a^b \mathrm{d}x\kappa(x)}$.

Om de algemene oplossing op het hele domein te krijgen, moeten de oplossingen uit de drie gebieden op de juiste manier op elkaar aangesloten worden. De regulariteitseisen in de punten a en b leggen via connectieformules eisen op aan de coëfficiënten A_i, B_i, C_i en D_i. Zonder bewijs mag u ervan uitgaan dat deze eisen gegeven worden door:

$$\begin{aligned}A_1 &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}B_1 + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}B_2; \quad & C_1 &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}D_1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}D_2;\\ A_2 &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}B_2; & C_2 &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}D_2.\end{aligned}$$

We gaan nu over tot de bestudering van het verstrooiingsprobleem waarbij een deeltje van links invalt met impuls $\hbar k = \sqrt{2mE}$. In dat geval moeten we additionele voorwaarden opleggen aan het asymptotisch gedrag van de algemene oplossing.

Het asymptotisch gedrag van de algemene oplossing wordt gegeven door:

- voor $x < -R$:

$$\frac{1}{\sqrt{k}}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kR+\mathrm{i}\int_{-R}^a \mathrm{d}x' k(x')}A_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} + \frac{1}{\sqrt{k}}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}kR-\mathrm{i}\int_{-R}^a \mathrm{d}x' k(x')}A_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}; \tag{1}$$

- voor $x > R$:

$$\frac{1}{\sqrt{k}}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kR+\mathrm{i}\int_b^R \mathrm{d}x' k(x')}D_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + \frac{1}{\sqrt{k}}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}kR-\mathrm{i}\int_b^R \mathrm{d}x' k(x')}D_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}; \tag{2}$$

b) Toon (2) aan.

c) Leg vervolgens de juiste randvoorwaarden op om tenslotte als WKB-benadering voor de reflectiecoëfficiënt R en de transmissiecoëfficiënt T te vinden:

$$R = 1; \qquad T = \frac{1}{\Theta^2} = \mathrm{e}^{-2\int_a^b \mathrm{d}x\kappa(x)}.$$

d) Onder welke voorwaarde op de integraal $\int_a^b \mathrm{d}x\kappa(x)$ vallen de met de WKB-methode gevonden verstrooiingsresultaten zeker *niet* te vertrouwen? Licht uw antwoord kort toe.