Departement Natuur- en Sterrenkunde, Faculteit Bètawetenschappen, 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)
24 maart 2005

1. Maak iedere opgave op een apart vel.
2. Schrijf op ieder vel uw naam, voorletters en tentamennummer.
3. Schrijf duidelijk; onduidelijk schrift wordt niet nagekeken!
4. Het gebruik van literatuur is niet toegestaan.
5. Geef duidelijk aan welke herkansing u doet:
   a) over het eerste deeltentamen;
   b) over het tweede deeltentamen;
   c) het volledige hertentamen
6. Hieronder staat aangegeven welke opgaven voor welke herkansing gemaakt moeten worden, en hoeveel punten die opgaven dan waard zijn.

VOLLEDIG TENTAMEN		EERSTE DEEL		TWEEDE DEEL	
opgave	punten	opgave	punten	opgave	punten
1	$3\frac{1}{3}$	4	4	3	4
2	$3\frac{1}{3}$	5	3	7	3
3	$3\frac{1}{3}$	6	4	8	2
				9	1

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

Gegevens: Wanneer de eigenwaarden ε_j en eigentoestanden $|\phi_j\rangle$ van een ongestoordde Hamiltoniaan H_0 bekend zijn, gelden voor een niet-ontaarde eigenwaarde ε_k van H_0 de volgende verschuivingen ten gevolge van een storingsterm V:

$$\begin{aligned} E_k^{(1)} &= \langle\phi_k|V|\phi_k\rangle \\ E_k^{(2)} &= \sum_{j\neq k} \frac{|\langle\phi_j|V|\phi_k\rangle|^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_j} \end{aligned}$$

Verder geldt voor een systeem van twee spin-$\frac{1}{2}$ deeltjes dat de totaalimpulsmoment toestanden en de direct-produkt toestanden als volgt aan elkaar gerelateerd zijn.

$$\begin{aligned} &|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle; \\ &|1,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle); \quad |0,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle); \\ &|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Verder geldt dat als v een eigenvector is van A bij eigenwaarde λ, dat v dan ook een eigenvector is van e^A, en wel bij eigenwaarde e^λ.
Tenslotte geldt voor elk impulsmoment $\vec{J}$ (d.w.z., onderstaande geldt voor een baanimpulsmoment, spinimpulsmoment, totaal impulsmoment, etc.):

$$\begin{aligned} \vec{J}^2|j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \\ J_z|j,m\rangle &= m\hbar|j,m\rangle \end{aligned}$$

In deze opgave beschouwen we twee onderscheidbare spin-$\frac{1}{2}$ deeltjes, waarvan we de baanbeweging buiten beschouwing laten. De deeltjes bevinden zich in een constant en homogeen magneetveld dat langs de z-as gericht is: $\vec{B} = B\hat{e}_z$. De bijbehorende Hamiltoniaan is de som van twee Zeeman-interacties en een spin-spin interactie:

$$H = g_1 B S_{1,z} + g_2 B S_{2,z} + A\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \text{ waarbij } g_1, g_2, A, B > 0.$$

In de onderdelen a), b) en c) beschouwen we de situatie dat $g_1 = g_2$.

a) Ga na dat de totaal-impulsmoment toestanden eigentoestanden van H zijn en geef de bijbehorende energie-eigenwaarden.

b) Op $t = 0$ worden zowel $S_{1,z}$ als $S_{2,z}$ gemeten, met als uitkomsten $\frac{\hbar}{2}$ resp. -$\frac{\hbar}{2}$. Daarna ontwikkelt het systeem zich volgens de Hamiltoniaan H.

   Leid af dat de toestand voor $t > 0$ gegeven wordt door:

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-\frac{i}{4}A\hbar t}|1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{\frac{3i}{4}A\hbar t}|0,0\rangle.$$

c) Op tijdstip $t > 0$ wordt $S_{1,z}$ gemeten.

   Wat zijn de mogelijke meetuitkomsten? Bepaal de kans op elk van die meetuitkomsten.

   We bekijken tenslotte het geval dat $g_1 \neq g_2$, en gaan de eigenwaarden van H bepalen m.b.v. storingsrekening. Daartoe schrijven we:

$$H = g_1 B S_{1,z} + g_1 B S_{2,z} + A\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + (g_2 - g_1) B S_{2,z},$$

   en vatten we de laatste term op als een storingsterm op het bij onderdeel a) beschouwde probleem. (Neem daarbij aan dat de constanten A en B zodanig zijn dat de ongestoorde niveaus allemaal niet-ontaard zijn.)

d) Bepaal met storingsrekening de energie-eigenwaarden van H tot en met de tweede orde in $(g_2 - g_1)$.
   Gegeven: Er geldt t.o.v. de basis $\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle, |0,0\rangle\}$:

$$S_{2,z} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Opgave 2. Drie harmonische oscillatoren

We beschouwen allereerst drie niet-wisselwerkende 1-dimensionale harmonische oscillatoren. De Hamiltoniaan wordt dus gegeven door:

$$H_0 = H_1 + H_2 + H_3 = \sum_{i=3}^{3}\left(\frac{1}{2m}\hat{p}_i^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}_i^2\right)$$

De Hilbertruimte wordt opgespannen door de direct-produkt toestanden

$$|n', n'', n'''\rangle = |n'\rangle_1 |n''\rangle_2 |n'''\rangle_3,$$

waarbij de $|n\rangle_i$ eigentoestanden zijn van H_i bij eigenwaarde $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

a) Bepaal het grondniveau en de eerste twee aangeslagen niveaus van H_0, alsmede de bijbehorende ontaardingsgraden, in het geval het gaat om:

I) drie identieke spin-0 deeltjes
II) twee identieke spin-$\frac{1}{2}$ deeltjes en één spin-0 deeltje.

In de rest van de opgave beschouwen we het geval van drie *onderscheidbare* spinloze deeltjes, en voegen de volgende storingsterm toe:

$$\lambda V(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3) = \lambda \frac{m^2\omega^3}{\hbar}(\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2 + \hat{x}_3^2)^2, \text{met } \lambda \ll 1.$$

De totale Hamiltoniaan wordt dan dus:

$$H = H_0 + \lambda V.$$

U gaat met storingsrekening het effect van de storingsterm op het grondniveau bepalen. Daarbij kunt u gebruik maken van de theorie van storingsrekening zonder deze eerst af te leiden.

b) Bepaal de eerste orde verschuiving van het grondniveau ten gevolge van de storing.

Gegevens: U mag zonder bewijs gebruiken:

$$\begin{aligned} \hat{x}_i^2|0\rangle_i &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(|0\rangle_i + \sqrt{2}|2\rangle_i\right); \\ \hat{x}_i^2|2\rangle_i &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{2}|0\rangle_i + 5|2\rangle_i + 2\sqrt{3}|4\rangle_i\right). \end{aligned}$$

Mathematisch gezien is het bovenstaande probleem met drie onderscheidbare deeltjes in een 1-dimensionale harmonische potentiaal plus de gegeven storing, identiek aan het probleem met één spinloos deeltje in een 3-dimensionale isotrope harmonische potentiaal plus een bolsymmetrische storingsterm. H kan dus ook (in de plaatsrepresentatie) geschreven worden als:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \lambda V, \text{met} \\ H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + \frac{m\omega^2}{2}r^2; \\ V &= \frac{m^2\omega^3}{\hbar}r^4 \end{aligned}$$

De grondtoestandsfunctie $\psi_0(\vec{r})$ van H_0 wordt gegeven door:

$$\psi_0(\vec{r}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2}.$$

c) Bepaal opnieuw de eerste orde verschuiving van het grondniveau.

Gegevens:

$$\int_0^\infty dx\ x^n e^{-bx^2} = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}(n+1)\right)}{2b^{\frac{(n+1)}{2}}};\ \Gamma(z+1) = z\Gamma(z);\ \Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}.$$

Opgave 3. Verstrooiing in één dimensie

In deze opgave bespreken we een systematische aanpak om een één-dimensionaal verstrooiingsprobleem op te lossen. Daarbij gaan we allereerst het eigenwaardeprobleem

$$\left(\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + gV\right)|\psi\rangle = \frac{p^2}{2m}|\psi\rangle \tag{1}$$

oplossen via de Lippmann-Schwinger vergelijking:

$$|\psi_\varepsilon\rangle = |p\rangle + gG_\varepsilon\left(\frac{p^2}{2m}\right)V|\psi_\varepsilon\rangle. \tag{2}$$

Zoals gebruikelijk is V een hermitische operator die alleen maar afhangt van de plaatsoperator $\hat{x} : V(\hat{x})$. Verder is de werking van de operator $G_\varepsilon(E)$ op een willekeurige toestand $|\psi\rangle$ als volgt gedefinieerd.

$$G_\varepsilon(E)|\psi\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int dp \frac{\langle p|\psi\rangle}{E - \frac{\hat{p}^2}{2m} + i\varepsilon}|p\rangle.$$

Voor deze operator geldt, en dit mag u zonder bewijs aannemen:

$$G_\varepsilon(E) = (E - \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + i\varepsilon)^{-1}.$$

Zij nu $|\psi_\varepsilon\rangle$ een oplossing van de Lippmann-Schwinger vergelijking (2). Definieer dan:

$$|\psi_{\text{LS}}\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\varepsilon\downarrow 0}|\psi_\varepsilon\rangle.$$

a) Toon aan dat $|\psi_{\text{LS}}\rangle$ een oplossing is van het eigenwaarde-probleem (1).
Hint: Laat de operator $\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + i\varepsilon\right)$ werken op beide leden van (2).

We gaan nu over tot het oplossen van de Lippmann-Schwinger vergelijking om vervolgens de limiet $\varepsilon \downarrow 0$ te nemen.

b) Ga door invullen na dat de *Born-reeks* (3) een oplossing is van Lippmann-Schwinger vergelijking.

$$|\psi_\varepsilon\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} g^n \left\{G_\varepsilon\left(\frac{p^2}{2m}\right)V\right\}^n |p\rangle. \tag{3}$$

In de rest van deze opgave zullen we alleen de eerste twee termen uit deze reeks beschouwen (de Bornbenadering). Daarvoor geldt (in de plaatsrepresentatie):

$$(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}\psi_\varepsilon(x) = e^{\frac{i}{\hbar}xp} + g\int dx'\langle x|G_\varepsilon\left(\frac{p^2}{2m}\right)|x'\rangle V(x')e^{\frac{i}{\hbar}x'p} + \mathcal{O}(g^2),$$

$$\text{waarbij } \langle x|G_\varepsilon\left(\frac{p^2}{2m}\right)|x\rangle = \frac{m}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp' \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(x-x')p'}}{p^2 - p'^2 + 2mi\varepsilon}.$$

De laatste integraal kan expliciet berekend worden met behulp van complexe contourintegratie. Er blijkt uiteindelijk te volgen:

$$\lim_{\varepsilon\downarrow 0}\langle x|G_\varepsilon\left(\frac{p^2}{2m}\right)|x'\rangle = -i\frac{m}{\hbar p}e^{\frac{i}{\hbar}|x-x'|p}.$$

We gaan nu naar een verstrooiingssituatie toewerken. We veronderstellen daartoe dat we te maken hebben met een potentiaal van eindige dracht, zeg $V(x) = 0$ voor $|x| \geq R$. Voor de oplossing ψ_{LS} geldt dan (in de Bornbenadering) op het gebied $|x| \geq R : (2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}\psi_{LS}(x) =$

$$\begin{cases} e^{\frac{i}{\hbar}xp} - ig\frac{m}{\hbar p}e^{-\frac{i}{\hbar}xp}\int_{-R}^{R} dx' V(x') e^{\frac{2i}{\hbar}x'p}, & \text{voor } x \leq -R; \\ e^{\frac{i}{\hbar}xp}\left(1 - ig\frac{m}{\hbar p}\int_{-R}^{R} dx' V(x')\right), & \text{voor } x \geq R. \end{cases} \tag{4}$$

c) Toon aan dat het asymptotische gedrag van $\psi_{LS}(x)$ gegeven wordt door (4).

d) Leg uit waarom $\psi_{\text{LS}}(x)$ fysisch geïnterpreteerd kan worden als de toestand die ontstaat wanneer deeltjes met impuls p van links invallen en verstrooid worden aan de potentiaal V, en dat in die interpretatie de reflectiecoëfficiënt R in de Bornbenadering gegeven wordt door:

$$R = g^2\left(\frac{m}{\hbar p}\right)^2 \left|\left(\int_{-R}^{R} dx' V(x') e^{\frac{2i}{\hbar}x'p}\right)\right|^2 + \mathcal{O}(g^3).$$

Bij *Quantummechanica 1* heeft u verstrooiing bestudeerd aan een simpele blokpotentiaal V_{b}:

$$V_{\text{b}}(x) = \begin{cases} V_0 \geq 0, & \text{als } 0 \leq x \leq a; \\ 0 & \text{elders.} \end{cases}$$

Een exacte berekening van de reflectiecoëfficiënt leverde toen op (voor het geval $\frac{p^2}{2m} > V_0$):

$$R = \left[1 + \frac{p^2(p^2 - 2mV_0)}{m^2 V_0^2 \sin^2\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{(p^2 - 2mV_0)}\right)}\right]^{-1} \tag{5}$$

e) I) Bepaal de reflectiecoëfficiënt voor de verstrooiing aan de blokpotentiaal in de Bornbenadering (dus tot en met de tweede orde in V_0).

II) Is het in onderdeel eI) gevonden resultaat in overeenstemming met (5)? Licht uw antwoord toe.

Opgave 4. Een systeem van twee onderscheidbare spin-$\frac{1}{2}$ deeltjes

Gegevens: Er geldt voor een systeem van twee spin-$\frac{1}{2}$ deeltjes dat de totaal-impulsmoment toestanden en de direct-produkt toestanden als volgt aan elkaar gerelateerd zijn.

$$\begin{aligned} &|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle; \\ &|1,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle); \quad |0,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle); \\ &|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Verder geldt dat als v een eigenvector is van A bij eigenwaarde λ, dat v dan ook een eigenvector is van e^A, en wel bij eigenwaarde e^λ.
Tenslotte geldt voor elk impulsmoment $\vec{J}$ (d.w.z., onderstaande geldt voor een baanimpulsmoment, spinimpulsmoment, totaal impulsmoment, etc.):

$$\begin{aligned} \vec{J}^2|j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \\ J_z|j,m\rangle &= m\hbar|j,m\rangle \end{aligned}$$

In deze opgave beschouwen we twee onderscheidbare spin-$\frac{1}{2}$ deeltjes, waarvan we de baanbeweging buiten beschouwing laten. De deeltjes bevinden zich in een constant en homogeen magneetveld dat langs de z-as gericht is: $\vec{B} = B\hat{e}_z$. De bijbehorende Hamiltoniaan is de som van twee Zeeman-interacties en een spin-spin interactie:

$$H = B(S_{1,z} + S_{2,z}) + A\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \text{waarbij } A, B > 0.$$

a) Ga na dat de totaal-impulsmoment toestanden eigentoestanden van H zijn, en geef de bijbehorende energie-eigenwaarden.

b) Op $t = 0$ worden zowel $S_{1,z}$ als $S_{2,z}$ gemeten, met als uitkomsten $\frac{\hbar}{2}$ resp. $-\frac{\hbar}{2}$. Daarna ontwikkelt het systeem zich volgens de Hamiltoniaan H.

   Leid af dat de toestand voor $t > 0$ gegeven wordt door:

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{i}{4} A\hbar t} |1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{3i}{4} A\hbar t} |0,0\rangle.$$

c) Op tijdstip $t > 0$ wordt $S_{1,z}$ gemeten.

   Wat zijn de mogelijke meetuitkomsten? Bepaal de kans op elk van die meetuitkomsten.

Opgave 5. Drie harmonische oscillatoren

We beschouwen drie niet-wisselwerkende 1-dimensionale harmonische oscillatoren. De Hamiltoniaan wordt dus gegeven door:

$$H = H_1 + H_2 + H_3 = \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_i^2 + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}_i^2 \right)$$

De Hilbertruimte wordt opgespannen door de direct-produkt toestanden

$$|n', n'', n'''\rangle = |n'\rangle_1 |n''\rangle_2 |n'''\rangle_3,$$

waarbij de $|n\rangle_i$ eigentoestanden zijn van H_i bij eigenwaarde $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.
Bepaal het grondniveau en de eerste twee aangeslagen niveaus van H, alsmede de bijbehorende ontaardingsgraden, in het geval het gaat om:

a) drie identieke spin-0 deeltjes;

b) twee identieke spin-0 deeltjes en één spin-$\frac{1}{2}$deeltje;

c) twee identieke spin-$\frac{1}{2}$ deeltjes en één spin-0 deeltje.

Opgave 6. Optellen van spin-1 en spin-1

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

$$J_k^\dagger = J_k; \qquad \vec{J}^2 |j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j,m\rangle;$$

$$[J_k, J_l] = \textstyle\sum_{m=1}^{3} i\hbar\varepsilon_{klm} J_m; \qquad J_z |j,m\rangle = m\hbar |j,m\rangle;$$

$$\left[\vec{J}^2, J_k\right] = 0; \qquad J_\pm |j,m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\hbar |j, m \pm 1\rangle,$$

waarbij $J_\pm = J_x \pm J_y$.
In deze opgave gaan we voor twee spin-1 deeltjes de totaal-impulsmoment toestanden op een andere dan de standaard manier proberen uit te drukken in direct-produkt toestanden, namelijk door gebruik te maken van de verwisselingsoperator $P_{1\leftrightarrow 2}$.
De toestandsruimte van het systeem van de twee spin-1 deeltjes wordt opgespannen door de direct-produkt toestanden $|m, m'\rangle = |m\rangle_1 |m'\rangle_2$, met $m, m' = 0, \pm 1$.
Op deze basistoestanden is $P_{1\leftrightarrow 2}$ gedefinieerd als:

$$P_{1\leftrightarrow 2} |m, m'\rangle = |m', m\rangle.$$

Hiermee is $P_{1\leftrightarrow 2}$ dus ook gedefinieerd op de hele toestandsruimte van het systeem van de twee spin-1 deeltjes.

Het totale impulsmoment $\vec{S}_{\mathrm{tot},z}$ van het systeem definiëren we uiteraard door: $\vec{S}_{\mathrm{tot},z} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$.

a) toon aan dat geldt:

$$\text{I)} \quad [P_{1\leftrightarrow 2}, S_{\mathrm{tot},z}]\,|m, m'\rangle = 0;$$
$$\text{II)} \quad [P_{1\leftrightarrow 2}, S_{\mathrm{tot},+}]\,|m, m'\rangle = 0;$$

Analoog aan onderdeel aII) kan ook aangetoond worden dat geldt:

$$[P_{1\leftrightarrow 2}, S_{\mathrm{tot},-}]\,|m, m'\rangle = 0$$

Hiervan mag u zonder bewijs gebruik maken.

b) Leg uit waarom er een volledig orthonormale basis van de toestandsruimte is bestaande uit eigentoestanden van zowel $\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}_{\mathrm{tot}}^2, S_{\mathrm{tot},z}$ als $P_{1\leftrightarrow 2}$.

We richten ons nu eerst op $S_{\mathrm{tot},z}$ en $P_{1\leftrightarrow 2}$.

			Eigenwaarden	$S_{\mathrm{tot},z}$		
		$2\hbar$	$\hbar$	0	$-\hbar$	$-2\hbar$
Eigenwaarden	1	$\|1,1\rangle$	$\|1,0\rangle + \|0,1\rangle$			
$P_{1\leftrightarrow 2}$	-1	—				

In de tabel staan links de eigenwaarden van $P_{1\leftrightarrow 2} : \pm 1$. Bovenaan staan de eigenwaarden van $S_{\mathrm{tot},z} : \pm 2\hbar, \pm\hbar, 0$. Het is de bedoeling dat de tabel ingevuld wordt met gemeenschappelijke eigentoestanden van $S_{\mathrm{tot},z}$ en $P_{1\leftrightarrow 2}$. Dit is gedeeltelijk gebeurd. De direct-produkt toestand $|1,1\rangle$ is een gemeenschappelijke eigentoestand van $S_{\mathrm{tot},z}$ en $P_{1\leftrightarrow 2}$, bij eigenwaarden $2\hbar$ resp. 1. De lineaire combinatie $|1,0\rangle + |0,1\rangle$ van direct-produkt toestanden is een gemeenschappelijke eigentoestand van $S_{\mathrm{tot},z}$ en $P_{1\leftrightarrow 2}$, bij eigenwaarde $\hbar$ resp. 1. Er is geen gemeenschappelijke eigentoestand van $S_{\mathrm{tot},z}$ en $P_{1\leftrightarrow 2}$, bij eigenwaarden $2\hbar$ resp. -1. Etc.

c) Complementeer de tabel met gemeenschappelijke eigentoestanden van $S_{\mathrm{tot},z}$ en $P_{1\leftrightarrow 2}$. U hoeft hierbij niet op de normering van de toestanden te letten.

Zoals bekend wordt de toestandsruimte van het systeem van de twee spin-1 deeltjes ook opgespannen door totaal-impulsmoment toestanden $|S, M\rangle$, waarbij $S = 2, 1, 0$, en M bij gegeven S van $-S$ tot S loopt. Hierbij volgen de toestanden $|S, M\rangle$ uit de toestand $|S, M = S\rangle$ door herhaalde toepassing van $S_{\mathrm{tot},-}$.

d) Veronderstel dat de totaal-impulsmoment toestand $|S, M = S\rangle$ een eigentoestand is van $P_{1\leftrightarrow 2}$. Toon aan dat dan ook de overige totaal-impulsmoment toestanden $|S, M\rangle$ bij dezelfde waarde van S eigentoestanden zijn van $P_{1\leftrightarrow 2}$, en wel bij dezelfde eigenwaarde als die van de toestand $|S, M = S\rangle$.
<u>Hint</u>: $[P_{1\leftrightarrow 2}, S_{\mathrm{tot},-}] = 0$.

Op grond van voorgaande redenering is een deel van de totaal-impulsmoment toestanden uit te drukken in de direct-produkt toestanden. (Om verwarring te voorkomen, zullen we de totaal-impulsmoment toestanden voorzien van de subindices S, M en de direct-produkt toestanden van de subindices m_1, m_2.

e) Leg uit waarom op grond van het voorgaande geconcludeerd kan worden (op normeringsconstante na):

$$
\begin{aligned}
|2,2\rangle_{S,M} &= |1,1\rangle_{m_1,m_2}; \\
|2,1\rangle_{S,M} &= |1,0\rangle_{m_1,m_2} + |0,1\rangle_{m_1,m_2}; \\
|2,-1\rangle_{S,M} &= |-1,0\rangle_{m_1,m_2} + |0,1\rangle_{m_1,m_2}; \\
|2,-2\rangle_{S,M} &= |-1,-1\rangle_{m_1,m_2}; \\
|1,1\rangle_{S,M} &= |1,0\rangle_{m_1,m_2} - |0,1\rangle_{m_1,m_2}; \\
|1,0\rangle_{S,M} &= |1,-1\rangle_{m_1,m_2} - |-1,1\rangle_{m_1,m_2}; \\
|1,-1\rangle_{S,M} &= |-1,0\rangle_{m_1,m_2} - |0,-1\rangle_{m_1,m_2}.
\end{aligned}
$$

Twee totaal-impulsmoment toestanden zijn nog niet uitgedrukt in direct-produkt toestanden, namelijk $|2,0\rangle_{S,M}$ en $|0,0\rangle_{S,M}$. Dit zal op de gebruikelijke manier moeten, maar daar gaan we nu niet op in.

Opgave 7. Een systeem van twee onderscheidbare spin-$\frac{1}{2}$ deeltjes

Gegevens: Wanneer de eigenwaarden ε_j en eigentoestanden $|\phi_j\rangle$ van een ongestoorde Hamiltoniaan H_0 bekend zijn, gelden voor een niet-ontaarde eigenwaarde ε_k van H_0 de volgende verschuivingen ten gevolge van een storingsterm V:

$$
\begin{aligned}
E_k^{(1)} &= \langle\phi_k|V|\phi_k\rangle \\
E_k^{(2)} &= \sum_{j\neq k} \frac{|\langle\phi_j|V|\phi_k\rangle|^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_j}
\end{aligned}
$$

Tenslotte geldt voor elk impulsmoment $\vec{J}$ (d.w.z., onderstaande geldt voor een baanimpulsmoment, spinimpulsmoment, totaal impulsmoment, etc.):

$$
\begin{aligned}
\vec{J}^2|j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle; \\
J_z|j,m\rangle &= m\hbar|j,m\rangle.
\end{aligned}
$$

In deze opgave beschouwen we twee onderscheidbare spin-$\frac{1}{2}$ deeltjes, waarvan we de baanbeweging buiten beschouwing laten. De deeltjes bevinden zich in een constant en homogeen magneetveld dat langs de z-as gericht is: $\vec{B} = B\hat{e}_z$.
De bijbehorende Hamiltoniaan is de som van twee Zeeman-interacties en een spin-spin interactie:

$$
H = g_1 B S_{1,z} + g_2 B S_{2,z} + A\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \text{waarbij } g_1, g_2, A, B > 0.
$$

We bekijken het geval dat $g_1 \neq g_2$, en gaan de eigenwaarden van H bepalen m.b.v. storingsrekening. Daartoe schrijven we:

$$
\begin{aligned}
H &= H_0 + V, \text{ met} \\
H_0 &= g_1 B S_{\text{tot},z} + A\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2; \\
V &= (g_2 - g_1) B S_{2,z}.
\end{aligned}
$$

en vatten we V op als een storing op H_0.

a) Ga na dat de totaal-impulsmoment toestanden $|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle$ en $|0,0\rangle$ eigentoestanden zijn van H_0, en geef de bijbehorende energie-eigenwaarden.
Hint: $\vec{S}_{\text{tot}}^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$.

b) Bepaal met storingsrekening de energie-eigenwaarden van H tot en met de tweede orde in $(g_2 - g_1)$. (Neem daarbij aan dat de constanten A en B zodanig zijn dat de ongestoorde niveaus allemaal niet-ontaard zijn.)
<u>Gegeven</u>: Er geldt t.o.v. de basis $\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle, |0,0\rangle\}$:

$$S_{2,z} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Opgave 8. Drie harmonische oscillatoren

We beschouwen allereerst drie onderscheidbare, spinloze, onderling niet-wisselwerkende 1-dimensionale harmonische oscillatoren. De Hamiltoniaan wordt dus gegeven door:

$$H_0 = H_1 + H_2 + H_3 = \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{1}{2m}\hat{p}_i^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}_i^2 \right).$$

De Hilbertruimte wordt opgespannen door de direct-prudukt toestanden

$$|n', n'', n'''\rangle = |n\rangle_1 |n''\rangle_2 |n'''\rangle_3,$$

waarbij de $|n\rangle_i$ eigentoestanden zijn van H_i bij eigenwaarde $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.
Het grondniveau ε_0 van H_0 wordt dus gegeven door

$$\varepsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega.$$

Het is niet ontaard, en de bijbehorende eigenruimte wordt opgespannen door $|0,0,0\rangle$.
Vervolgens beschouwen we het geval dat de drie deeltjes interageren volgens

$$\lambda V(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3) = \lambda \frac{m^2\omega^3}{\hbar} (\hat{x}_1^2 + \hat{x}_2^2 + \hat{x}_3^2)^2, \text{met } \lambda \ll 1.$$

De totale Hamiltoniaan wordt dan dus:

$$H = H_0 + \lambda V.$$

U gaat met storingsrekening het effect van de storingsterm op het grondniveau bepalen. Daarbij kunt u gebruik maken van de theorie van storingsrekening zonder deze eerst af te leiden.

a) Beschouw λV als een storing op H_0 en bepaal de eerste orde verschuiving van het grondniveau.

<u>Gegevens</u>: U mag zonder bewijs gebruiken:

$$\begin{aligned} \hat{x}_i^2|0\rangle_i &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(|0\rangle_i + \sqrt{2}|2\rangle_i \right); \\ \hat{x}_i^2|2\rangle_i &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\sqrt{2}|0\rangle_i + 5|2\rangle_i + 2\sqrt{3}|4\rangle_i \right). \end{aligned}$$

Mathematisch gezien is het bovenstaande probleem met drie onderscheidbare deeltjes in een 1-dimensionale harmonische potentiaal plus de gegeven storing, identiek aan het probleem met één spinloos deeltje in een 3-dimensionale isotrope harmonische potentiaal plus een bolsymmetrische storingsterm. H kan dus ook (in de plaatsrepresentatie) geschreven worden als:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \lambda V, \text{met} \\ H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + \frac{m\omega^2}{2} r^2; \\ V &= \frac{m^2\omega^3}{\hbar} r^4. \end{aligned}$$

De grondtoestandsfunctie $\psi_0(\vec{r})$ van H_0 wordt gegeven door:

$$\psi_0(\vec{r}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2}.$$

b) Bepaal opnieuw de eerste orde verschuiving van het grondniveau.
Gegevens:

$$\int_0^\infty dx\ x^n e^{-bx^2} = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}(n+1)\right)}{2b^{\frac{(n+1)}{2}}};\ \Gamma(z+1) = z\Gamma(z);\ \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}.$$

Opgave 9. Het principe van variatierekening

Bij de methode van variatierekening gaat het erom de energiefunctionaal

$$E[|\Psi\rangle] \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

te minimaliseren over een geschikt gekozen deelverzameling van de toestandsruimte.
Toon aan dat met de methode van variatierekening altijd een bovengrens gevonden wordt van het exacte grondniveau.