Deeltentamen Quantummechanica

30 januari 2009

Bij het tentamen mag gebruik gemaakt worden van een A4-blad, dubbelzijdig beschreven, met eigen aantekeningen.
Beantwoord de vragen kort en bondig. Geef geen overbodige of extra antwoorden, want dat kan punten kosten, zeker als er naast het goede ook foutieve antwoorden staan! De waardering voor de opgaven (gespecificeerd per onderdeel, in totaal 90 punten) is aangegeven.

Opgave 1 (5 + 5 + 5)

(a) Geef de belangrijkste eigenschappen van de eigenwaarden en eigentoestanden van een hermitische operator?
(oplossing)
(1) De eigenwaarden van een hermitische operator zijn reëel.
(2) De eigentoestanden zijn orthogonaal.
(orthonormaal of opmerkingen over normering mag maar hoeft niet!)

(b) Geef de impulsoperator (voor één dimensie). Geef de eigenwaarde-vergelijking. Wat zijn de mogelijke eigenwaarden en de bijbehorende eigenfuncties?
(oplossing)
De impulsoperator wordt gegeven door

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}.$$

De eigenwaarde vergelijking is

$$\hat{p}_x\, \phi_k(x) = \hbar k\, \phi_k(x).$$

Vanzelfsprekend is gebruik van p als index en/of eigenwaarde ($p = \hbar k$) ook goed. De eigenwaarden $p = \hbar k$ kunnen alle reele getallen zijn en de eigenfuncties zijn

$$\phi_k(x) \sim e^{i\,kx}.$$

(c) De impulsmoment operator $\hat{\ell}_z$ wordt in poolcoördinaten gegeven door

$$\hat{\ell}_z = -i\hbar \frac{d}{d\varphi},$$

waar φ de azimuthale hoek is. Geef voor deze operator de eigenfuncties en eigenwaarden (met korte uitleg).
(oplossing)
Als we schrijven

$$\hat{\ell}_z\, \phi_m(\varphi) = m\hbar\, \phi_m(\varphi).$$

zijn de eigenfuncties

$$\phi_m(\varphi) \sim e^{i\,m\varphi}$$

en de mogelijke eigenwaarden voor m de gehele getallen. Dit laatste volgt uit $\phi_m(0) = \phi_m(2\pi)$.
Opmerking: De spherisch harmonische functies $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ zijn ook eigenfuncties, maar de eigenwaarde $\ell = 0, 1, \ldots$ heeft niets met de vraag te maken (minpunt). Als er gesteld wordt dat bij een gegeven m alle spherisch harmonische functies met $\ell \geq m$ mogelijke eigenfuncties zijn is dat correct, maar het is een niet-gevraagde toevoeging.

Opgave 2 (5 + 5 + 5 + 5)

(a) Laat zien dat voor operatoren A, B en C geldt $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$.
(oplossing)
Uitschrijven van de commutator geeft $[AB, C] = ABC - CAB = ABC - ACB + ACB - CAB = A[B, C] + [A, C]B$.

(b) Bepaal uit de bekende commutatierelaties voor positieoperatoren r_i en impulsoperatoren p_j (i en j zijn componenten van $\boldsymbol{r}$ en $\boldsymbol{p}$) de volgende commutatoren

$$[\ell_x, p_x], \quad [\ell_x, p_y], \quad [\ell_x, p_z].$$

(oplossing)
We vinden gebruikmakend van $[r_i, p_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$ en $[r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0$ dat

$$\begin{aligned}
&[\ell_x, p_x] = [yp_z - zp_y, p_x] = 0, \\
&[\ell_x, p_y] = [yp_z - zp_y, p_y] = y[p_z, p_y] + [y, p_y]p_z - z[p_y, p_y] - [z, p_y]p_y = i\hbar\, p_z, \\
&[\ell_x, p_z] = [yp_z - zp_y, p_z] = -i\hbar\, p_y.
\end{aligned}$$

(c) Laat zien dat

$$[x^n, p_x] = n\, i\hbar\, x^{n-1}.$$

(oplossing)
Dit kan rechtstreeks door werking op een golffunctie $\phi(x)$,

$$[x^n, p_x]\phi(x) = i\hbar \left(x^n \frac{d}{dx}\phi - \frac{d}{dx}\, x^n \phi \right) = i\hbar \left(x^n \frac{d\phi}{dx} - n\, x^{n-1}\phi - x^n \frac{d\phi}{dx} \right) = n\, i\hbar\, x^{n-1}\phi(x).$$

of door een inductiebewijs waarbij de inductiestap is

$$[x^n, p_x] = [x\, x^{n-1}, p_x] = x[x^{n-1}, p_x] + [x, p_x]x^{n-1} = x\,(n-1)\, i\hbar\, x^{n-2} + i\hbar\, x^{n-1} = n\, i\hbar\, x^{n-1}.$$

(d) Gebruik het voorgaande resultaat om $[f(x), p_x]$ te berekenen waar $f(x)$ een functie van de x-operatoren is waarvoor we een machtreeks kunnen opschrijven.
(oplossing)
We vinden dat

$$[f(x), p_x] = [\sum_{n=0}^{\infty} a_n\, x^n, p_x] = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\, [x^n, p_x] = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, (n-1)\, i\hbar\, x^{n-1} = i\hbar\, \frac{df}{dx}.$$

Opgave 3 (5 + 5 + 5 + 5)

Beschouw de Hamiltoniaan (bijvoorbeeld een deeltje met impulsmoment in een magneetveld)

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \omega_0\, \ell_z.$$

en veronderstel dat we een bundel hebben van deeltjes die in een van de $\ell = 1$ toestanden zitten. De voor dit probleem relevante eigenfuncties van ℓ_z zijn dan $\phi_1^z \sim (x + iy)/\sqrt{2}$ (met eigenwaarde $+\hbar$), $\phi_0^z \sim z$ (met eigenwaarde 0) en $\phi_{-1}^z \sim (x - iy)/\sqrt{2}$ (met eigenwaarde $-\hbar$).

(a) Op tijdstip $t = 0$ beginnen we met een ℓ_x-meting en selecteren de toestand met m_x eigenwaarde $+\hbar$ met bijbehorende eigenfunctie $\phi_1^x \sim (y + iz)/\sqrt{2}$. Vervolgens doen we direct hierna (nog steeds $t = 0$) een meting van ℓ_z. Wat zijn de mogelijke uitkomsten van deze meting en wat zijn de waarschijnlijkheden van elke uitkomst.
(oplossing)
Gebruikmakend van de expansie van ϕ_1^x in eigenfuncties van ℓ_z,

$$\frac{y + i\,z}{\sqrt{2}} = \frac{-i}{2}\left(\frac{x + iy}{\sqrt{2}}\right) + \frac{i}{2}\left(\frac{x - iy}{\sqrt{2}}\right) + i\sqrt{\frac{1}{2}}\,z,$$

vinden we uitkomsten $+\hbar$ en $-\hbar$ met waarschijnlijkheden van 25% en uitkomst 0 met waarschijnlijkheid 50%.

(b) Wat zijn de eigenfuncties van de Hamiltoniaan en maak daarvan gebruik om, beginnende op tijdstip $t = 0$ met de geselecteerde ℓ_x eigenfunctie ϕ_1^x, de tijdsafhankelijkheid van de golffunctie op te schrijven.
(oplossing)
De eigentoestanden van de Hamiltoniaan zijn ϕ_m^z met energieën $E = E_0 + m\,\hbar\omega$. Dus de tijdsafhankelijkheid van de oplossing is

$$\psi(t) \sim \sum_m c_m\,\phi_m^z\,e^{-im\,\omega_0 t},$$

waarbij de c_m's berekend worden uit de toestand op $t = 0$, dus

$$\psi(t) \sim \frac{-i}{2}\left(\frac{x + iy}{\sqrt{2}}\right)e^{-i\,\omega_0 t} + \frac{i}{2}\left(\frac{x - iy}{\sqrt{2}}\right)e^{i\,\omega_0 t} + i\sqrt{\frac{1}{2}}\,z,$$

(c) Geef de golffunctie op tijd $t = \pi/2\omega_0$, waar ω_0 de constante is in de bovenstaande hamiltoniaan.
(oplossing)
De gevraagde golffunctie op tijdstip $t = \pi/2\omega_0$ is (gebruikmakend van $e^{\pm i\,\omega_0 t} = \pm i$)

$$\psi(\pi/\omega_0) \sim -i\,\frac{-i}{2}\left(\frac{x + iy}{\sqrt{2}}\right) + i\,\frac{i}{2}\left(\frac{x - iy}{\sqrt{2}}\right)e^{i\,\omega_0 t} + i\sqrt{\frac{1}{2}}\,z = -\frac{x - i\,z}{\sqrt{2}}$$

(d) Geef de uitkomsten van metingen van ℓ_x en ℓ_y op tijdstip $t = \pi/2\omega_0$.
(oplossing)
De toestand op $t = \pi/2\omega_0$ is een eigentoestand van ℓ_y met eigenwaarde $-\hbar$. De uitkomst van een ℓ_y meting geeft dus $-\hbar$. Die van een ℓ_x-meting geeft weer alle drie de mogelijkheden met percentages 25% ($+\hbar$), 50% (0) en 25% ($-\hbar$). Idem een ℓ_z meting. We zien het 'impulsmoment' als het ware roteren in het magneetveld.

Opgave 4 (10)

Geef de minimale diepte V_0 die een drie-dimensionale centrale potentiaal van de vorm

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_0 \quad \text{voor} \quad r \le a, \\ &= 0 \quad \text{voor} \quad r > a, \end{aligned}$$

moet hebben opdat er minstens een gebonden toestand is.
Hint: Probeer dit op te lossen zonder al te veel algebra. Bedenk even wat de energie is voor het grensgeval

dat er net één oplossing (met $E = 0$) is. Maak eventueel een schets van de golffunctie voor dat geval.
(oplossing)
De oplossing voor de golffunctie in het gebied $r < a$ wordt gegeven door

$$u(r) \sim \sin(Kr) \quad \text{met} \quad \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = E + V_0.$$

Pas als de afgeleide bij $r = a$ kleiner of gelijk aan nul wordt, kan deze golffunctie gematched worden door een exponentieel afvallende functie $u(r) \sim e^{-\kappa r}$ met $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$. Het grensgeval treedt op als $E = 0$, dus $\kappa = 0$. In dat geval is de afgeleide op de rand 0 en voor de oplossing binnen de put moet gelden dat de sinus maximaal is op de rand, dus

$$Ka = \frac{\pi}{2},$$

wat gecombineerd met $E = 0$ oplevert

$$V_0 = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m\, a^2}.$$

Opgave 5 (10)

Wat zijn de pariteit selectieregels voor een overgang in het Waterstofatoom (hoe worden de toestanden voor elektronen in Waterstof 'gelabeld') van een begintoestand $|i\rangle$ naar $|f\rangle$ die geinduceerd wordt door de quadrupool operator

$$Q_{xy} = xy$$

en waarvan de waarschijnlijkheid van de overgang wordt gegeven door $P \sim |\langle f|Q_{xy}|i\rangle|^2$.
(oplossing)
De toestanden in Waterstof worden gelabeld met $|n\ell m\rangle$. De pariteit van zo'n toestand is $\pi = (-)^\ell$. Pariteit vereist dat $\pi_i = \pi_f$. Overgangen kunnen dus alleen plaatsvinden tussen toestanden met beiden even ℓ of met beiden oneven ℓ.
Opmerking: vanwege het $\ell = 2$ karakter van de operator moet bovendien $\Delta\ell = |\ell_i - \ell_f| \le 2$ (waarbij $\ell_i = 0$ naar $\ell_f = 0$ verboden is).

Opgave 6 (5 + 5 + 5)

Beschouw de twee-dimensionale harmonische oscillator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2}\right) + \frac{1}{2}\, m\omega^2 \left(x^2 + y^2\right).$$

(a) Gebruik je kennis van de een-dimensionale harmonische oscillator (geef voor de een-dimensionale harmonische oscillator de energieën en toestanden gekarakteriseerd door bezettingsgetal) om het spectrum van de twee-dimensionale harmonische oscillator te geven, inclusief de ontaardingsgraad van de laagste drie energieniveaux.
(oplossing)
De eendimensionale hamiltoniaan heeft oplossingen $|n\rangle$ met energieën $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$. Voor de twee-dimensionale oscillator (separabel) vinden we toestanden die een (direct) product zijn van harmonische oscillatoren in x- en y-richting, dus toestanden $|n_x\ n_y\rangle$ met energieën $E_{n_x\ n_y} = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega$.

niveau	(n_x, n_y)	ontaarding
0	(0,0)	1
1	(1,0), (0,1)	2
2	(2,0), (1,1), (0,2)	3

(b) Is deze hamiltoniaan invariant onder inversie en rotaties, en zo ja, kun je op grond hiervan zeggen welke inversie/rotatie-operator(en) met de hamiltoniaan commuteren?
(oplossing)
Inversiesymmetrie: ja $\Rightarrow \ [H, P] = 0$.
Rotatiesymmetrie: ja, in x-y vlak (om z-as) $\Rightarrow \ [H, \ell_z] = 0$.

(c) Ga nu terug naar het spectrum onder (a) en gebruik een geschikte set van operatoren onder (b) aan wat de quantumgetallen van de laagste niveaux zijn. Geef hier enige uitleg bij.
(oplossing)
Gebruikmakend van de quantumgetallen m ($m\hbar$ eigenwaarde van ℓ_z) en π (eigenwaarde van pariteits-operator P) krijgen we

niveau	ontaarding	(n_x, n_y)	π	m
0	1	(0,0)	+	0
1	2	(1,0), (0,1)	-	-1, 1
2	3	(2,0), (1,1), (0,2)	+	-2, 0, 2

Deeltentamen Quantum mechanics

Friday, 29 January 2010

Students are allowed to use book and notes.

Give short answers. Do not give additional answers. If you give correct *and* wrong answers, you will certainly not get the full credit. The weight of the various exercises (specified per sub-question, in total 90 points) is given.

Exercise 1 (5+5+5+5)

Given the (1-dimensional) wave function

$$\phi(x) = N\, e^{-|x|/a}.$$

(a) Determine N if the wave function is normalized.

(b) Calculate $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ and the standard deviation Δx.
Note: $\int_0^\infty dx\, x^n\, e^{-x/a} = n!\, a^{n+1}$.

(c) Calculate $\langle p\rangle$, $\langle p^2\rangle$ and the standard deviation Δp.

(d) Give the uncertainty relation for x and p and check this.

Exercise 2 (5+7+8)

(a) Show that for the components of the position and momentum operators one has $[x_i, p_j] = \delta_{ij}$. Show this for arbitrary components or make a choice of two characteristic cases, for instance $[x, p_y]$ and $[x, p_x]$.

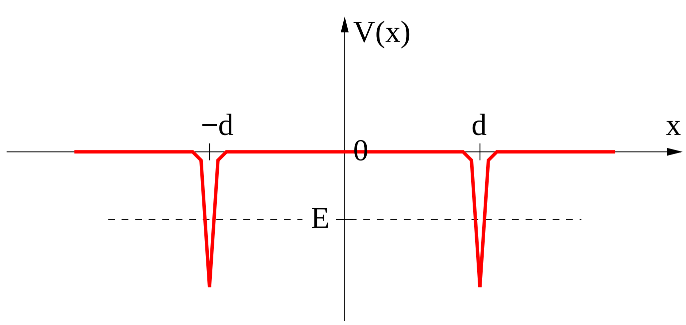
(b) Calculate the commutators $[p_x, x^2]$, $[p_x, y^2]$, $[p_x, r^2]$ and $[p_x, r]$, with $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

(c) Calculate the commutators $[\ell_y, z]$, $[\ell_y, p_z]$ and $[\ell_y, \ell_z]$ with $\boldsymbol{\ell} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ being the angular momentum operator.

Exercise 3 (5+5+5+5)

Given is a one-dimensional potential of the form in the figure, consisting of two delta functions at $x = -d$ and $x = +d$.

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2\,m\,a}\left[\delta(x+d) + \delta(x-d)\right].$$



The matching conditions for the wave function at the points $x = \pm d$ are

$$\lim_{x\downarrow\pm d} \phi'(x) - \lim_{x\uparrow\pm d} \phi'(x) = -\frac{\phi(\pm d)}{a}.$$

(a) Sketch the lowest possible bound state solutions. Explain some characteristics.
(solution)
This is the even solution (reflection/inversion symmetry) with kinks at $x = \pm d$; exponential fall-off at both ends; no node at $x = 0$.

(b) Give the expressions for the wave functions of the state under (a) in the various regions.
(solution)
For an energy $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$ we get as solution in the various regions for the lowest (*even*) solution,

$$\begin{aligned}
&\phi(x) = A\, e^{\kappa x} \quad \text{for } x \le -d,\\
&\phi(x) = B\, \cosh(\kappa x) \quad \text{for } -d \le x \le +d,\\
&\phi(x) = A\, e^{-\kappa x} \quad \text{for } x \ge +d,
\end{aligned}$$

(c) Implement the matching and boundary conditions for these solutions and give an expression for the energy of these solutions (you can restrict yourself to an implicit expression). Compare the energy with the bound state energy of a single δ-potential.
(solution)
Having distinguished even and odd solutions, the condition in $x = d$ is sufficient. We can write the condition as

$$\lim_{x\downarrow d} \frac{\phi'(x)}{\phi(d)} - \lim_{x\uparrow d} \frac{\phi'(x)}{\phi(d)} = -\frac{1}{a}.$$

Thus for even solutions $-\kappa - \kappa\, \tanh(\kappa d) = -1/a$ or

$$\tanh(\kappa d) = \frac{1-\kappa a}{\kappa a},$$

There is always an even solution. For the solution we find that $\kappa a < 1$, thus $\kappa > 1/a$. For the energy we find $E < \hbar^2/2ma^2$ (The latter is the energy of the bound state for a single delta potential).

(d) Can you say something about the next higher solution? (Sketch; condition; is there always a next solution?)
(solution)
The next higher solution has one node. Because of the inversion symmetry this is at $x = 0$ and the solution is odd. The wave function in the various regions is

$$\begin{aligned}
&\phi(x) = A\, e^{\kappa x} \quad \text{for } x \le -d,\\
&\phi(x) = B\, \sinh(\kappa x) \quad \text{for } -d \le x \le +d,\\
&\phi(x) = -A\, e^{-\kappa x} \quad \text{for } x \ge +d.
\end{aligned}$$

The condition for the odd solution is

$$\tanh(\kappa d) = \frac{\kappa a}{1-\kappa a}.$$

The presence of an odd solution depends on the ratio d/a. For small κ we have

$$\frac{\kappa a}{1-\kappa a} = \tanh(\kappa d) \approx \kappa d,$$

thus $\kappa a = 1 - \frac{a}{d}$, which allows a (positive) solution for κ if $a < d$ (in that case the potential is strong enough!).

Exercise 4 (5+5+5+5)

(a) Sketch the spectrum of the 1-dimensional harmonic oscillator.

(b) Sketch the spectrum of the 2-dimensional harmonic oscillator,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}. + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}\,m\omega^2\left(x^2 + y^2\right).$$

If there is degeneracy, give the degeneracy of the lowest three levels.

(c) Give the wave function for the lowest two levels of the 2-dimensional harmonic oscillator (don't worry about normalization).

(d) In a plane we can consider rotational behavior, in particular consider the angular momentum around an axis perpendicular to the x-y plane (ℓ_z). What is the commutator $[H, \ell_z]$. What are the possible eigenvalues of ℓ_z for the first excited state(s) of the 2-dimensional harmonic oscillator.

Exercise 5 (5+5)

The wave function of an electron in Hydrogen, considering only the central part of the potential, can be written in terms of a radial part and an angular part.

(a) Give the radial dependence and the angular dependence for the 3p-level. What is the degeneracy of this level.

(b) Consider the (angular averaged) radial density $\rho(r)\,dr$. Sketch $\rho(r)$ for the 3p-level and give the behavior near $r = 0$ and for large r.