

Tentamen Quantum Mechanica 2

30 mei 2016

Het tentamen bestaat uit 4 opgaven, waarmee in totaal 60 punten zijn te verdienen.

Schrijf op elk vel dat je inlevert je naam, voorletters en studentnummer.

- (a) (4 punten) In een oneindig-diepe, rechthoekige potentiaalput hebben de eigentoe-standen één deeltje-energieën $E_n = Cn^2$, $n = 1, 2, 3 \dots$ met C een constante energie. Beschouw drie identieke, niet-wisselwerkende fermionen met spin $\frac{1}{2}$ in bovenbeschreven potentiaalput. Wat is de grondtoestandsenergie van het systeem van deze drie fermionen?

Oplossing: Volgens het Pauli-principe kunnen fermionen zich niet in dezelfde quantumtoestand bevinden. Deze fermionen hebben spin $\frac{1}{2}$ dus ze kunnen zich in twee verschillende spintoestanden bevinden ($m_s = \pm\frac{1}{2}$, spin up of spin down). In de laagste energietoestand van de potentiaalput $E_1 = C$ kunnen (maximaal) twee van deze fermionen zitten! De laagstmogelijke energie (=grondtoestands-energie) voor drie fermionen is dan: $2E_1 + E_2 = 2C + 4C = 6C$.

- (b) (4 punten) Een deeltje met spin 1 (quantumgetal $s = 1$) bevindt zich in een toe-stand met quantumgetal $\ell = 2$ voor wat betreft het baanimpulsmoment. Wat zijn de mogelijke waarden voor het quantumgetal j dat hoort bij het totale impulsmo-ment $\vec{J} (= \vec{L} + \vec{S})$?

Oplossing: Deze optelling van \vec{J} en \vec{S} is eenvoudig, maar moeten we uitre-kenen. Het totale impulsmoment j ligt tussen $|\ell - s| \leq j \leq \ell + s$ en neemt stappen van ± 1 tussen deze waarde. Voor het geval $\ell = 2$ en $s = 1$ geeft dit de waarden $j = 1, 2, 3$.

- (c) (4 punten) In de theorie van de fijnstructuur van het waterstofatoom is de sto-ringsterm in de Hamiltoniaan die de *spin-baan koppeling* in rekening brengt van de vorm:

$$H_{so} = B\vec{X} \cdot \vec{Y}$$

waarin \vec{X} en \vec{Y} twee fysische vectorgrootheden zijn en B een constante voorfactor. Welke grootheden stellen \vec{X} en \vec{Y} hierin voor en wat is de fysische dimensie van de voorfactor B ?

Oplossing: \vec{X} en \vec{Y} stellen voor het baanimpulsmoment \vec{L} en het spinimpulsmoment (spin) \vec{S} van het elektron. De fysische dimensie van een term in de Hamiltoniaan is de dimensie van energie en dus moet de dimensie van de constant B gelijk aan de dimensie

$$\frac{\text{energie}}{(\text{impuls moment})^2}$$

Verder uitwerken (werd niet gevraagd):

$$\frac{\text{kracht} \times \text{lengte}}{(\text{impuls} \times \text{lengte})^2} = \frac{\text{massa} \times \text{versnelling} \times \text{lengte}}{(\text{massa} \times \text{snelheid} \times \text{lengte})^2} = \frac{1}{\text{massa} \times (\text{lengte})^2}$$

N.B. impuls is iets anders dan impulsmoment!

- (d) (4 punten) Geef en benoem de quantumgetallen die de eigentoestanden van het waterstofatoom karakteriseren in het geval het atoom in een sterk extern magneetveld wordt geplaatst (sterk-veld Zeeman effect).

Oplossing: Quantumgetallen n, l, m_l, m_s (evt. kun je ook s noemen, maar die heeft een vaste waarde $\frac{1}{2}$. n hoofdquantumgetal, l quantumgetal bij grootte baanimpulsmoment, m_l magnetisch quantumgetal, behorend bij z -component van het baanimpulsmoment, m_s magnetisch quantumgetal, behorend bij z -component van het spinimpulsmoment.

- (e) (4 punten) Waarom mag je het elektrisch veld in de interactie tussen zichtbaar licht en atomen effectief als plaatsonafhankelijk veronderstellen (de “elektrische dipoolbenadering”)?

Oplossing: De golfengte van zichtbaar licht is van orde-grootte $500 \text{ nm} = 5000 \text{ \AA}$. De grootte van een atoom is van orde-grootte 1 \AA . Dit betekent dat op de schaal van een atoom de amplitude van de elektromagnetische golf, die (zichtbaar) licht en het elektrisch veld zijn, nauwelijks zal veranderen. Het elektrisch veld is dus nagenoeg onafhankelijk van de plaats.

2. 2-D ideaal Bose gas

Beschouw een ideaal gas van identieke bosonen in **twee** (ruimtelijke) dimensies. We nemen aan dat de bosonen geen spin hebben ($s = 0$) en allemaal dezelfde massa m hebben. De dispersierelatie is dan: $\varepsilon(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$, met $k = |\vec{k}|$ de lengte van de golfvector \vec{k} en m de massa van de bosonen. Neem aan dat de bosonen zich in een (groot) vierkant met zijde L bevinden (oppervlak $O = L^2$) en de componenten van de golfvector \vec{k} slechts gehele veelvoudigen van $2\pi/L$ kunnen zijn. Er gelden de volgende uitdrukkingen voor het totale deeltjesaantal N en de energie E :

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon D(\varepsilon) n_{\text{BE}}(\varepsilon) \quad \text{en} \quad E = \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon D(\varepsilon) n_{\text{BE}}(\varepsilon)$$

- (a) (4 punten) Omschrijf zo exact mogelijk de betekenis van $D(\varepsilon)$ en $n_{\text{BE}}(\varepsilon)$.

Oplossing: (Hier wordt expliciet naar de betekenis gevraagd: een naam is dus niet voldoende)

$D(\varepsilon)$: de toestandsdichtheid, d.w.z. $D(\varepsilon)d\varepsilon$ is het aantal toestanden met energie tussen ε en $\varepsilon + d\varepsilon$ ($D(\varepsilon)$ is dus zelf geen aantal, maar een dichtheid (van toestanden))

$n_{\text{BE}}(\varepsilon)$: de Bose-Einstein verdeling, d.w.z. de gemiddelde bezettingsgraad van het één-deeltjes-niveau met energie ε voor identieke bosonen. (n_{BE} is geen kans(verdeling) en ook geen (meest-waarschijnlijk) aantal)

- (b) (4 punten) Laat zien dat $D(\varepsilon)$ onafhankelijk is van ε in deze situatie.

Oplossing: De energie hangt alleen af van de lengte van golfvector \vec{k} . Toestanden kunnen gerepresenteerd worden als roosterpunten in de \vec{k} -ruimte. Combineer je dit met het feit dat een ring met dikte dk bij lengte k een oppervalkte heeft gelijk aan $2\pi k dk = d(\pi k^2)$, dan geldt voor het aantal toestanden $g(k)$ met $|\vec{k}|$ tussen k en $k + dk$:

$$g(k)dk = D(\varepsilon)d\varepsilon \quad \text{met} \quad g(k) \sim k$$

Dan volgt:

$$D(\varepsilon) = g(k) \left(\frac{d\varepsilon}{dk} \right)^{-1} \sim k(k)^{-1} = \text{const.}$$

- (c) (6 punten) Het verschijnsel **Bose-Einstein condensatie** treedt op wanneer de chemische potentiaal $\mu(T)$ gelijk wordt aan nul bij een eindige temperatuur ($T > 0$). Het gevolg hiervan is dat, beneden een kritische temperatuur T_c , alle deeltjes in de quantum mechanische grondtoestand komen. Beargumenteer aan de hand van de resultaten en formules hierboven of er in een twee-dimensionaal ideaal Bose gas al dan niet Bose-Einstein condensatie kan optreden.

Oplossing: Zie ook Griffiths Problem 5.29(c).

Beschouw de integraal voor N (je kunt ook kijken naar N/V):

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} - 1}$$

Deze integraal stelt voor het aantal bosonen dat niet in de laagste energietoestand ($\vec{k} = 0$) zit. In dit geval (vanwege $D(\varepsilon) = \text{constant}$) kan de integraal onbeperkt groot worden (indien μ naar nul nadert) en zal de $\vec{k} = 0$ toestand niet macroscopisch bezet hoeven worden bij het verlagen van de temperatuur bij vast aantal deeltjes. Er treedt dus géén Bose-Einstein condensatie op in een twee-dimensionaal ideaal Bose gas!

3. Lineaire potentiaalput

Beschouw een één-dimensionale lineaire potentiaalput:

$$V(x) = A|x|$$

De Hamiltoniaan voor een deeltje met massa m in deze potentiaalput is dan:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

- (a) (6 punten) Bereken op basis van het variatieprincipe de laagstmogelijke energie E_{min}^D , in de potentiaalput voor een driehoekige probeerfunctie:

$$\Psi_D(x) = \begin{cases} C(x+d) & \text{voor } -d \leq x \leq 0 \\ C(-x+d) & \text{voor } 0 \leq x \leq d \\ 0 & \text{voor } |x| > d \end{cases}$$

Hint: Bedenk dat de afgeleide van een stapfunctie een Dirac delta-functie is met sterkte gelijk aan de grootte van de stap.

Oplossing: We normeren eerst de toestand $\Psi_D(x)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi_D(x)|^2 = 1$$

$$\begin{aligned} 1 &= |C|^2 \int_{-d}^0 (x+d)^2 dx + \int_0^d (-x+d)^2 dx \\ &= |C|^2 \int_{-d}^0 (x+d)^2 dx = 2|C|^2 \int_0^d y^2 dy = \frac{2}{3}|C|^2 d^3 \Leftrightarrow \\ C &= \sqrt{\frac{3}{2d^3}} \end{aligned}$$

De laagst mogelijke energie treedt op indien $\langle H \rangle_D \equiv \langle \Psi_D | H | \Psi_D \rangle$ minimaal is.

$$\langle H \rangle_D = \langle T \rangle_D + \langle V \rangle_D$$

$$\langle T \rangle_D = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_D^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \Psi_D(x)$$

Aangezien $\Psi_D(x)$ een knik heeft op $x = 0$ en de afgeleide op $x = 0$ een sprong maakt van $+C$ naar $-C$ is de tweede afgeleide

$$\frac{d^2 \Psi_D}{dx^2} = -2C\delta(x)$$

(Voor $x \neq 0$ is de tweede afgeleide nul!)

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_D &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_D^*(x) (-2C\delta(x)) \\ &= \frac{\hbar^2 C}{m} \Psi_D^*(0) = \frac{\hbar^2 |C|^2 d}{m} = \frac{3\hbar^2}{2md^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_D &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_D^*(x) V(x) \Psi_D(x) \\ &= |C|^2 \int_{-d}^0 (x+d)^2 (-Ax) dx + \int_0^d (-x+d)^2 (+Ax) dx \\ &= -A|C|^2 \int_0^d (y)^2 (y-d) dy + A|C|^2 \int_0^d (y)^2 (d-y) dy \\ &= 2A|C|^2 \int_0^d (y)^2 (d-y) dy = 2A \frac{3}{2d^3} \left(\frac{1}{3} d^4 - \frac{1}{4} d^4 \right) = \frac{Ad}{4} \end{aligned}$$

$$\langle H \rangle_D = \frac{3\hbar^2}{2md^2} + \frac{Ad}{4}$$

De parameter d is nog optimaal te kiezen!

$$\frac{d}{dd} \langle H \rangle_D = 0 \Leftrightarrow$$

$$-2 \frac{3\hbar^2}{2md^3} + \frac{A}{4} = 0 \Leftrightarrow$$

$$d^3 = \frac{12\hbar^2}{mA}, \quad d_{min} = \left(\frac{12\hbar^2}{mA} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Invullen van de optimale waarde van d geeft:

$$\begin{aligned}
 E_{min}^D &= \frac{3\hbar^2}{2m} \left(\frac{12\hbar^2}{mA} \right)^{-\frac{2}{3}} + \frac{A}{4} \left(\frac{12\hbar^2}{mA} \right)^{\frac{1}{3}} \\
 &= \left(\frac{A^2\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}} \left[3 \times 24^{-2/3} + \frac{24^{1/3}}{4} \right] \\
 &= \left(\frac{A^2\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}} 3^{1/3} \left[\frac{1}{4} + \frac{1}{2} \right] = \left(\frac{A^2\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{3^{4/3}}{4} \\
 &\approx 1.082 \left(\frac{A^2\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}}
 \end{aligned}$$

(b) (4 punten) Een Gaussische probeerfunctie,

$$\Psi_G(x) = Be^{-bx^2}$$

levert in deze potentiaal een laagstmogelijke energie op gelijk aan (Er wordt **niet** gevraagd dit na te rekenen!)

$$E_{min}^G = \frac{3}{2} \left(\frac{A^2\hbar^2}{2\pi m} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Vergelijk deze energie met het antwoord bij vraag a). Wat kun je op basis van het quantummechanische variatieprincipe zeggen over de exacte grondtoestandsenergie E_{GS} , in de lineaire potentiaalput?

Oplossing:

$$E_{min}^G = \frac{3}{2} \left(\frac{A^2\hbar^2}{2\pi m} \right)^{\frac{1}{3}} \approx 1.024 \left(\frac{A^2\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}}$$

E_{min}^G is dus kleiner dan E_{min}^D . Volgens het variatieprincipe zal de exacte energie altijd lager zijn dan de E_{min} gevonden met een probeerfunctie. Er geldt dus dat

$$E_{GS} < E_{min}^G$$

Opmerking: Het variatieprincipe geeft een gelijk teken ($E_{GS} \leq \langle \Psi_T | H | \Psi_T \rangle$), maar dat geldt alleen als de probeerfunctie gelijk is aan de exacte oplossing. Het is op zijn minst onwaarschijnlijk dat een Gaussische probeerfunctie de exacte oplossing is; dit is namelijk de exacte oplossing voor een potentiaal $V(x) \sim x^2$.

4. Stark effect

Van een atoom dat in een uniform elektrisch veld wordt geplaatst verschuiven de energieniveaus; dit heet het Stark effect. Om deze verschuivingen te berekenen voegen we een storingsterm toe aan de Hamiltoniaan:

$$H_S = eE_{ext}x = eE_{ext}r \sin \theta \cos \phi$$

(we hebben het externe elektrisch veld E_{ext} in de x -richting gekozen). Beschouw het waterstofatoom en neem H_S als storing op de Bohr-Hamiltoniaan. We laten de elektronspin en fijnstructuur buiten beschouwing; dan kunnen toestanden van het elektron in het waterstofatoom weergegeven worden als $|nlm\rangle$, met bijbehorende golfuncties Ψ_{nlm} . In de tabel bij deze opgave worden enkele golfuncties gegeven, uitgedrukt in bolcoördinaten (r, θ, ϕ) , en verder enkele integralen die behulpzaam kunnen zijn bij het beantwoorden van de vragen.

- (a) (4 punten) De eigentoestanden met hoofdquantumgetal $n = 2$; Ψ_{200} , Ψ_{211} , Ψ_{210} , Ψ_{21-1} hebben zonder elektrisch veld allemaal dezelfde energie (zijn ontaard). Noem de matrixelementen van H_S in de basis van bovengenoemde toestanden W_{ij} . Nummer de toestanden 1 t/m 4: $1 \equiv \Psi_{200}$, $2 \equiv \Psi_{211}$, $3 \equiv \Psi_{210}$, $4 \equiv \Psi_{21-1}$. W is dus een 4×4 matrix. Van de 16 matrixelementen zijn er 4 niet nul. Geef de volledige argumentatie waarom de andere 12 matrixelementen gelijk aan nul zijn.

Oplossing: Er zijn verschillende argumentaties mogelijk: matrixelementen kunnen nul zijn vanwege het oneven zijn in x , y of z van de integrand (Cartesische coördinaten) of de ϕ - of θ -integraal kan nul zijn (bolcoördinaten). De opgave vraagt naar een expliciet argument voor elk matrixelement (of groep van matrixelementen) dat nul is. Bijvoorbeeld als volgt:

- de 4 diagonaalelementen ($W_{ii} = 0, i = 1 \dots 4$) zijn nul omdat de integrand oneven is in x .
- toestand 3 (Ψ_{210}) bevat een factor z , terwijl de andere 3 toestanden even zijn in z ; daarom is de integrand oneven in z indien je toestand 3 combineert met een van de anderen. Dit levert 6 matrixelementen die nul zijn: W_{13}, W_{23}, W_{43} en hun getransponeerden W_{31}, W_{32}, W_{34} . [Alternatief voor deze matrixelementen is te kijken naar de integrand voor de θ -integraal: die is ofwel $\sin^2 \theta \cos \theta$ ofwel $\sin^3 \theta \cos \theta$, zodat de integraal (van 0 tot π) nul is]
- De overblijvende matrixelementen (van de 12 die nul zijn), W_{24} en W_{42} , zijn nul vanwege de ϕ -integraal: de integrand is $e^{\pm 2i\phi} \cos \phi$

- (b) (4 punten) Bereken W_{12} .

Oplossing:

$$W_{12} = \langle 200 | H_S | 211 \rangle = eE_{ext} \langle 200 | x | 211 \rangle$$

Berekening van het matrix-element $\langle 200|x|211\rangle$:

$$\frac{-1}{8\sqrt{8}\pi a^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta \cos\phi \frac{r}{a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/a} e^{i\phi} \sin\theta r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

waarin de laatste factor $r^2 \sin\theta$ de Jacobiaan is. De factor $r \sin\theta \cos\phi$ gelijk aan x , en andere factoren uit de golffuncties $|200\rangle$ en $|211\rangle$ komen. Uitschrijven geeft de volgende bijdragen:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \cos\phi e^{i\phi} = \int_0^{2\pi} d\phi \cos^2\phi = \pi$$

$$\int_0^\pi d\theta \sin^3\theta = \frac{4}{3}$$

$$\int_0^\infty dr \left(r^4 - \frac{r^5}{2a}\right) e^{-r/a} = 4!a^5 - 5! \frac{a^6}{2a} = -36a^5$$

Alles tezamen levert dit:

$$W_{12} = -\frac{1}{16\sqrt{2}} \frac{1}{\pi a^3} \frac{1}{a} \frac{4}{3} (-36a^5) e E_{ext} = \frac{3}{2} \sqrt{2} e E_{ext} a$$

Van belang voor het optreden van een *elektrische-dipoolovergang* tussen quantummechanische toestanden van een atoom, en dus voor de levensduur van een toestand, is de grootte van het (niet-diagonale) matrixelement van de elektrische dipool:

$$\vec{P} = -e \langle n'l'm' | \vec{r} | nlm \rangle$$

waarbij e : eenheidslading, en $\vec{r} = (x, y, z)$: positie-vector voorstellen.

- (c) (4 punten) Beschrijf kort een overeenkomst en een verschil tussen de berekeningen die je voor het Stark effect en die je voor het bepalen van de levensduur van een atomaire toestand moet doen. Neem desgewenst de $n = 2$ toestanden van het waterstofatoom als voorbeeld.

Oplossing: Overeenkomst: er dienen matrixelementen van een positie-coördinaat berekend te worden. Ofwel: de storingshamiltoniaan H_S bevat dezelfde fysische grootheid (observabele) als de elektrische dipool $e\vec{r}$.

Verschillen:

- voor de levensduur dienen matrixelementen van x , y en z berekend te worden, voor Stark slechts één van de drie.
- voor de levensduur zijn alleen niet-diagonale matrixelementen nodig (want

het gaat om overgangen), voor Stark moeten ook diagonale matrixelementen beschouwd worden (al zijn die vaak gelijk aan nul).

- (d) (4 punten) Voor de levensduur van toestand $|211\rangle$ is het nodig $\langle 100|\vec{r}|211\rangle$ te berekenen. Beschrijf een efficiënt plan van aanpak voor deze berekening, d.w.z. een plan waarin zo weinig mogelijk integralen berekend hoeven te worden. Het uitvoeren van de berekening wordt niet gevraagd.

Oplossing: In principe moeten er 3 matrixelementen uitgerekend worden (die elk een 3-dimensionale integraal zijn): $\langle 100|x|211\rangle$, $\langle 100|y|211\rangle$ en $\langle 100|z|211\rangle$. Je ziet eenvoudig dat het matrixelement van z gelijk aan nul is, aangezien de integrand in de integraal over z oneven is in z (of: in een integraal over bolcoördinaten de ϕ -integraal nul is). Verder is er een verband tussen het matrixelement van x en dat van y : alleen de ϕ -integraal is verschillend ($e^{i\phi} \cos \phi$ tegen $e^{i\phi} \sin \phi$), deze levert π op voor x en $i\pi$ voor y , zodat: $\langle 100|y|211\rangle = i \langle 100|x|211\rangle$.

Conclusie: Om $\langle 100|\vec{r}|211\rangle$ uit te rekenen hoeft alleen $\langle 100|x|211\rangle$ expliciet berekend te worden.

x , y en z in bolcoördinaten: $z = r \cos \theta$, $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$

$$\begin{aligned}\Psi_{100} &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} && a : \text{Bohrstraal} \\ \Psi_{200} &= \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} \\ \Psi_{210} &= \frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}} \frac{r}{a} e^{-r/2a} \cos(\theta) \\ \Psi_{21\pm 1} &= \frac{\mp}{8\sqrt{\pi a^3}} \frac{r}{a} e^{-r/2a} e^{\pm i\phi} \sin(\theta)\end{aligned}$$

$$\int_0^\pi \sin^n(\theta) \cos(\theta) d\theta = 0 \quad n \text{ geheel, niet negatief } (n \in \mathbb{N})$$

$$\int_0^\pi \sin^3(\theta) d\theta = \frac{4}{3}$$

$$\int_0^\pi \cos^n(\theta) \sin(\theta) d\theta = \frac{1}{n+1} (1 - (-1)^{n+1})$$

$$\int_0^{2\pi} e^{in\phi} d\phi = 0 \quad (n \neq 0)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos^2(\phi) d\phi = \pi$$

$$\int_0^\infty x^n e^{-x/b} dx = n! b^{n+1}$$