Opleidingen Natuurkunde en Sterrenkunde
Universiteit Leiden

Uitwerking Tentamen Quantummechanica 2

29 juni 2006

Opgave 1

a. $\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}Y_l^m(\theta,\phi)$, zodat $\psi_{100} = e^{-r/a}/\sqrt{\pi a^3}$. Deze golffunctie hangt alleen af van r, en is dus even in z. Omdat H' oneven is in z verdwijnt de verwachtingswaarde van H' in deze toestand.

b. Er zijn vier golffuncties ψ_{2lm}, met $(l,m) = (0,0)$, $(1,\pm 1)$, en $(1,0)$. Het matrixelement $\langle\psi_{200}|H'|\psi_{100}\rangle$ verdwijnt om dezelfde reden als in a, en de matrixelementen $\langle\psi_{21m}|H'|\psi_{100}\rangle$ met $m = \pm 1$ zijn evenredig met $\exp(\mp i\phi)$, en verdwijnen als gevolg van de integratie over ϕ. Het enige overblijvende matrixelement is

$$\langle\psi_{210}|H'|\psi_{100}\rangle = eE\int_0^\infty drr^2\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^\pi d\theta\sin\theta r\cos\theta(R_{20})^*R_{10}(Y_1^0)^*Y_0^0$$

Gebruik van $\int_0^\infty d\rho\rho^4e^{-\rho} = 4!$, en $\int_0^\pi d\theta\sin\theta\cos^2\theta = \int_{-1}^1 d\xi\ \xi^2 = 2/3$ geeft dan $\langle\psi_{210}|H'|\psi_{100}\rangle = a\frac{2^8}{3^5\sqrt{2}}$.

c.
$$E^2_{100} = \frac{|\langle\psi_{210}|H'|\psi_{100}\rangle|^2}{E_1^0 - E_2^0}\ ,$$

waarin $E_1^0 = E_1 = -|E_1|$, $E_2^0 = E_2 = E_1/4 = -|E_1|/4$ (omdat $E_n = E_1/n^2$ voor waterstof).

d. In de uitdrukking is de teller evident positief, en de noemer is negatief, omdat $E_1 < E_2$. Dus is de correctie negatief. De weggelaten termen hebben eenzelfde structuur, met positieve teller, en negatieve noemer $E_1 - E_n$. Dus de weggelaten correcties zijn ook negatief.

Opgave 2.

a. De eigentoestanden van de gegeven Hamitoniaan H^0 zijn de eigentoestanden $|m_l, m_s\rangle$ van L_z en S_z. Deze negen eigentoestanden hebben eigenwaarden $eB\hbar(m_l + 2m_s)/2m$, met $m_l = \pm 1$ of 0, en $m_s = \pm 1$ of 0. De mogelijke waarden van $m_l + 2m_s$ zijn dus 3, 2 en 1 bij $m_s = 1$, 1, 0 en -1 bij $m_s = 0$, en -1, -2 en -3 bij $m_s = -1$. Dat geeft 7 verschillende eigenwaarden.

b. De eigenwaarden $eB\hbar/2m$ hoort bij de toestand $|m_l, m_s\rangle$ met $m_l = -1$, $m_s = 1$, en tevens bij de toestand met $m_l = 1$, $m_s = 0$. Dus deze eigenwaarde is tweevoudig ontaard. Hetzelfde geldt bij de eigenwaarde $-eB\hbar/2m$, die zowel hoort bij de toestand met $m_l = -1$, $m_s = 0$, als bij de toestand met $m_l = 1$, $m_s = -1$.

c. Voor de niet-ontaarde eigentoestanden van H^0 is de eerste-orde correctie van de spin-baankoppeling gegeven door de verwachtingswaarden $\langle m_l, m_s|H'|m_l, m_s\rangle$. De operatoren L_x en L_y koppelen alleen toestanden $|m_l\rangle$ en $|m_l'\rangle$ waarin $m_l = m_l' \pm 1$, en voor S_x en S_y geldt hetzelfde, zodat de termen L_xS_x en L_yS_y niet bijdragen aan deze verwachtingswaarde. Dus geldt $\langle m_l, m_s|H'|m_l, m_s\rangle = \hbar\gamma m_l m_s$. Voor de beide ontaarde niveaus moeten we de twee-dimensionale matrices W vinden. Daarin verdwijnen de niet-diagonaaltermen, omdat de twee toestanden waarden hebben van m_l en m_l' die twee verschillen, zodat weer alleen L_zS_z bijdraagt. Dus de diagonaaltermen $\langle m_l, m_s|H'|m_l, m_s\rangle = \hbar\gamma m_l m_s$ geven de eerste-orde correctie op de energie-eigenwaarden voor alle negen toestanden. [De waarden van die correcties zijn dus $\pm\hbar\gamma$ en 0.]

d. De twee ontaarde toestanden $|m_l, m_s\rangle$ met $m_l = -1$, $m_s = 1$, en die met $m_l = 1$, $m_s = 0$ krijgen een spin-baancorrectie $-\hbar\gamma$ en 0, zodat de energiesplitsing $\hbar\gamma$ bedraagt. De twee ontaarde toestanden $|m_l, m_s\rangle$ met $m_l = -1$, $m_s = 0$, en die met $m_l = 1$, $m_s = -1$ krijgen een spin-baancorrectie 0 en $-\hbar\gamma$, zodat ook voor dit niveau de energiesplitsing $\hbar\gamma$ bedraagt.

e. Als $H^0 = 0$, dan zijn de eigenwaarden van H' de energiewaarden. Omdat $\vec{L} \cdot \vec{S} = \left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\right)/2$, en omdat het quantumgetal j de drie waarden 0, 1 en 2 kan aannemen, zijn er drie energie-eigenwaarden. [Die energie-eigenwaarden zijn dus $\hbar\gamma\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)/2$, ofwel $\hbar\gamma$ voor $j = 2$, $-\hbar\gamma$ voor $j = 1$ en $-2\hbar\gamma$ voor $j = 0$.]

Opgave 3.

a. Als de potentiaalkromme horizontaal verplaatst wordt, en zijn minimum bij x_0 heeft, dan zijn de eigenfuncties evenzo verplaatst, zodat $\phi_n(x,t) = \psi_n(x - x_0(t))$ (uiteraard op een fasefactor na, die we nul mogen kiezen). De energie-eigenwaarden veranderen niet, zodat $F_n = E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

b. Omdat de golffuncties $\phi_n(x,t)$ genormeerd zijn geldt dat $d\langle\phi_n|\phi_n\rangle/dt = 0$, zodat $\langle\phi_n|\frac{d}{dt}\phi_n\rangle + \langle\frac{d}{dt}\phi_n|\phi_n\rangle = 0$. Omdat de golffuncties ϕ_n ook reëel zijn volgt hieruit dat $\langle\phi_n|\frac{d}{dt}\phi_n\rangle = 0$. Er is dus geen geometrische fase.

c. Uit de adiabaticiteit volgt dat $|\Psi(t_f)\rangle = \exp(i\theta_0)|\Psi(0)\rangle = \exp(i\theta_0)|\psi_0\rangle$, waarbij $\theta_0 = -\int_0^{t_f} dt\, F_0(t) = -\omega t_f/2$.

d. Bij een verticale verplaatsing van de potentiaalkromme blijven de eigenfuncties onveranderd, terwijl de eigenwaarden evenzo verplaatst worden. Dus $\phi_n(x,t) = \psi_n(x)$, en $F_n(t) = E_n + V_0(t)$. Omdat de eigenfuncties ook nu reëel zijn geldt nog steeds dat $\langle\phi_n|\frac{d}{dt}\phi_n\rangle = 0$. Daaruit volgt dat $|\Psi(t_f)\rangle = \exp(i\theta_0)|\Psi(0)\rangle = \exp(i\theta_0)|\psi_0\rangle$, met $\theta_0 = -\omega t_f/2 - \int_0^{t_f} dt\, V_0(t)/\hbar$.