ANTWOORDEN EN UITWERKINGEN
TENTAMEN QUANTUMMECHANICA 2
VAN 31 MEI 2011

1) (Andere antwoorden zijn niet noodzakelijk (geheel) incorrect)

(a) Enkelvoudig ontaard ofwel niet-ontaard. Niveau met energie $13C/a^2$ heeft één deeltje met $n = 2$ en één deeltje met $n = 3$. Aangezien de deeltjes niet onderscheidbaar zijn hoort hier maar 1 toestand bij! Eventueel kun je opschrijven dat die ene toestand de volgende golffunctie heeft: $\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_2(x_1)\psi_3(x_2) + \psi_3(x_1)\psi_2(x_2)\right)$.

(b) Het matrixelement is $\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle$, met ψ_n^0, ψ_m^0 twee <u>verschillende</u> eigentoestanden van de ongestoorde Hamiltoniaan (H^0). In E_n^2 komt dit matrixelement tot de **tweede macht**, ofwel: kwadratisch , voor.

(c) De bedoelde ongelijkheid is: $\langle\psi|H|\psi\rangle \geq E_{\text{gs}}$, voor een willekeurige, <u>genormeerde</u>(!) probeerfunctie ψ, met H de echte (d.w.z. niet-benaderde) Hamiltoniaan en E_{gs} de grondtoestandsenergie. De ongelijkheid zegt dus dat de verwachtingswaarde van de Hamiltoniaan voor een genormeerde, maar verder willekeurige, functie als toestandsfunctie altijd groter of gelijk is aan de grondtoestandsenergie behorende bij die Hamiltoniaan.

(d) Merk op dat $V(x) = 0$ tussen 0 en a zeker *zwak variërend* is. Je mag dus de WKB-quantisatieconditie gebruiken en de integraal is eenvoudig in dat geval, zodat: $\sqrt{2mE}\,a = n\pi\hbar \quad \rightarrow \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$. Vergelijking met onderdeel (a) leert dat de constante C dan is: $C = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}$.

(e) Om symmetrie-redenen kan het relevante matrixelement voor de overgang, bv. het elektrisch dipoolmoment, nul zijn. De levensduur is dan heel groot (in de praktijk niet echt oneindig) t.o.v. niveaus die overgangsmatrixelementen ongelijk aan nul hebben. Het antwoord: *vanwege selectieregels*, is ook grotendeels goed te rekenen.

2) (a) Er wordt hier gevraagd naar toestanden $|n\,\ell\,j\,m_j\rangle$ voor het waterstofatoom (dus niet voor deuterium!) voor $n = 3$. Dit betekent dat ℓ de waarden 0, 1 of 2 kan aannemen. Aangezien $s = \frac{1}{2}$ kan voor $\ell = 0$ j alleen de waarde $j = \frac{1}{2}$ aannemen, voor $\ell = 1$, $j = \frac{1}{2}$ of $j = \frac{3}{2}$, en voor $\ell = 2$, $j = \frac{3}{2}$ of $j = \frac{5}{2}$. Immers: $j = \ell + s, \ell + s - 1, \ldots, |\ell - s|$. Voor elke j kan m_j de $2j + 1$ waarden $j, j-1, \ldots, -j$ aannemen. Voor $\ell = 0$ zijn er dus 2 toestanden, voor $\ell = 1$ 2+4=6 toestanden, en voor $\ell = 2$ zijn er 4+6=10 toestanden. In totaal: 18 toestanden (=$2n^2$) voor $n = 3$.

In onderstaande tabel zijn de 18 toestanden voor $n = 3$ weergegeven. Met het oog op onderdeel (b) zijn ook alvast de bijbehorende waarden voor g_J en $m_j g_J$ berekend. Merk op, dat g_J alleen afhangt van ℓ en j en dat g_J dus slechts voor 5 verschillende (ℓ, j)-combinaties behoeft te worden uitgerekend.

ℓ	j	m_j	g_J	$m_j g_J$
0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	2	1
0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	2	-1
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	**1/3**
1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	**-1/3**
1	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{4}{3}$	2
1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{4}{3}$	2/3
1	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{4}{3}$	-2/3
1	$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$\frac{4}{3}$	-2
2	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	4/5	6/5
2	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	4/5	**2/5**
2	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	4/5	**-2/5**
2	$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$	4/5	-6/5
2	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	6/5	3
2	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	6/5	9/5
2	$\frac{5}{2}$	$\frac{1}{2}$	6/5	3/5
2	$\frac{5}{2}$	$-\frac{1}{2}$	6/5	-3/5
2	$\frac{5}{2}$	$-\frac{3}{2}$	6/5	-9/5
2	$\frac{5}{2}$	$-\frac{5}{2}$	6/5	-3

(b) De helling in de beschreven grafiek wordt gegeven door $m_j g_J$. De toestanden waarvoor $m_j g_J$ in absolute waarde kleiner is dan $\frac{1}{2}$ zijn in bovenstaande tabel makkelijk te vinden (dikgedrukte $m_j g_J$). Het betreft dus de volgende **4** toestanden $|n\,\ell\,j\,m_j\rangle$:

$$|3\,1\,\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle \qquad |3\,1\,\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle \qquad |3\,2\,\tfrac{3}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle \qquad |3\,2\,\tfrac{3}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle$$

(c)

$$S^2 = \left(\vec{S}_1 + \vec{S}_2\right) \cdot \left(\vec{S}_1 + \vec{S}_2\right) = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \quad \longrightarrow$$

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \tfrac{1}{2}\left(S^2 - S_1^2 - S_2^2\right)$$

Dit is nog een gelijkheid van **operatoren**; de waarden die het linkerlid aanneemt zijn:

$$\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle = [s(s+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)] \frac{\hbar^2}{2}$$

(aangezien bv. S^2 (lengte van de totale spin in het kwadraat) de waarden $s(s+1)\hbar^2$ aanneemt)

(d) Het deuteron heeft spin 1 en het elektron heeft spin $\frac{1}{2}$; deuterium heeft dan ofwel spin $\frac{3}{2}$ $(= s_1 + s_2)$, een quadruplet, ofwel spin $\frac{1}{2}$ $(= |s_1 - s_2|)$, een doublet. Pas nu het resultaat van onderdeel (c) toe voor $s_1 = 1$, $s_2 = \frac{1}{2}$ en $s = \frac{3}{2}$ of $s = \frac{1}{2}$:

$$s = \tfrac{3}{2}: \quad \langle \vec{S}_d \cdot \vec{S}_e \rangle = \left(\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right) \frac{\hbar^2}{2} = +\frac{\hbar^2}{2}$$

$$s = \tfrac{1}{2}: \quad \langle \vec{S}_d \cdot \vec{S}_e \rangle = \left(\frac{3}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right) \frac{\hbar^2}{2} = -\hbar^2$$

Het verschil (!) tussen de twee gevallen is: $\frac{3}{2}\hbar^2$, zodat de hyperfijnsplitsingsenergie is:

$$\Delta E_D = \frac{3}{2} \left(\frac{\mu_0 g_d e^2 \hbar^2}{3\pi m_d m_e a^3} \right)$$

(e) Via eenzelfde berekening als in (d) geldt dat voor het waterstofatoom $\langle \vec{S}_p \cdot \vec{S}_e \rangle$ de waarden $-\frac{3}{4}\hbar^2$ en $+\frac{1}{4}\hbar^2$ aanneemt (zie ook Griffiths, p.284), met een verschil van $\hbar^2$. In deuterium is de factor ten gevolge van het spin-inproduct dus 3/2 keer zo groot. Verder verschillen de g-factor en de kernmassa tussen deuterium en waterstofatoom, zodat we krijgen:

$$\Delta E_D = \frac{3}{2} \times \frac{g_d}{g_p} \times \left(\frac{m_d}{m_p} \right)^{-1} \Delta E_H = \frac{3}{2} \times \frac{1.71}{5.59} \times \frac{1}{2} \Delta E_H$$

Aangezien $E \sim \hbar\omega \sim \hbar c/\lambda$ geldt dan:

$$\lambda_D = \frac{2}{3} \times \frac{5.59}{1.71} \times 2\,\lambda_H = 4.4 \times 21 \text{ cm} = 92 \text{ cm}$$

Opmerking: De inzichten en berekeningen m.b.t. deuterium zaten ook in de inleveropgave van werkcollege 4 van dit jaar. Zie ook Problem 6.38 in Griffiths.

3) (a) In het H-atoom geldt, via het gegeven viriaaltheorema:

$$\langle T \rangle_{\rm gs} = -E_1 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

Aangezien in geval van de Yukawa-potentiaal de kinetische-energie operator dezelfde is ($\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2$) en in de toestandsfunctie alleen a is vervangen door b t.o.v. de waterstof grondtoestandsgolffunctie geldt er:

$$\langle T \rangle_{\psi_{\rm T}} = \frac{\hbar^2}{2mb^2}$$

Opmerkingen: 1. De verwachtingswaarde van de kinetische energie moet positief zijn. 2. Met heel wat meer werk zou je ook de verwachtingswaarde van de kinetische-energie operator kunnen uitrekenen voor de gegeven probeerfunctie. Je moet dan wel de operator $\vec{\nabla}^2$ kennen in bolcoördinaten! Deze is niet eenvoudigweg: $\frac{\partial^2}{\partial r^2}$ (zie Griffiths, [4.13]). Aangezien deze (ingewikkelde) uitdrukking niet gegeven was, was dit duidelijk niet de aangewezen weg om dit onderdeel op te lossen.

(b)

$$\langle V \rangle_{\psi_{\rm T}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{4\pi}{\pi b^3}\int_0^\infty dr\, r^2\, e^{-2r/b}\,\frac{e^{-\mu r}}{r} \quad ,$$

waarin de factor 4π komt van de integratie over de hoeken θ en ϕ en de factor r^2 in de integraal van de Jacobiaan in bolcoördinaten. Verder uitwerken van de integraal en gebruik maken van de gegeven integraal bij opgave 4 geeft:

$$\langle V \rangle_{\psi_{\rm T}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{4}{b^3}\int_0^\infty dr\, r\, e^{-2r/b-\mu r} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{b\,(1+\mu b/2)^2}$$

(c)

$$\langle H \rangle_{\psi_{\rm T}} = \langle T \rangle_{\psi_{\rm T}} + \langle V \rangle_{\psi_{\rm T}} = \frac{\hbar^2}{2mb^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{b\,(1+\mu b/2)^2}$$

De optimale b (d.w.z. die de laagste energie en dus de beste benadering voor de grondtoestandsenergie geeft) wordt gevonden uit de conditie: $\frac{d\langle H\rangle}{db} = 0$, ofwel:

$$0 = -\frac{\hbar^2}{mb^3} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left[\frac{1}{b^2\,(1+\mu b/2)^2} + \frac{\mu}{b\,(1+\mu b/2)^3}\right] \quad ,$$

Vermenigvuldigen met b en uitwerken van de uitdrukking tussen rechte haken geeft:

$$\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{mb^2} = \left[\frac{1}{b\,(1+\mu b/2)^2} + \frac{\mu}{(1+\mu b/2)^3}\right] = \frac{1}{b}\frac{1+3\mu b/2}{(1+\mu b/2)^3}$$

Nu moet je gebruik maken van het gegeven dat b in feite gelijk is aan a met een kleine correctie daarop (zie opgave en ook omdat μ klein is). Dus moet je

op de een of ander manier a in bovenstaande gelijkheid invoeren. Dit kan via het tweede gelijkteken in de uitdrukkingen voor E_1 in de opgave (ook gegeven in onderdeel (c) van opgave 4!): $a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$.
Dan geldt dus voor de optimale b:

$$\frac{a}{b^2} = \frac{1}{b}\frac{1+3\mu b/2}{(1+\mu b/2)^3}$$

Aangezien $\mu a \ll 1$ geldt ook: $\mu b/2 \ll 1$. We kunnen dan de moeilijke breuk in het rechterlid (bv. via een Taylor-ontwikkeling van $\frac{1}{(1+\varepsilon)^3}$ voor kleine ε) als volgt benaderen:

$$\frac{1+3\mu b/2}{(1+\mu b/2)^3} = 1 - 3\left(\frac{\mu b}{2}\right)^2 + \ldots$$

Let op dat je steeds alle termen die kwadratisch zijn in de kleine parameter $\mu b/2$ meeneemt; dat zijn er meestal meerdere!
Bedenk tenslotte dat voor de gevraagde **leidende** correctie op a, we in bovenstaande ontwikkeling μb door μa mogen vervangen (correcties hierop worden van hogere orde). Dan hebben we:

$$\frac{a}{b} = 1 - 3\left(\frac{\mu b}{2}\right)^2 + \ldots = 1 - 3\left(\frac{\mu a}{2}\right)^2 + \ldots \quad \Longrightarrow \quad \boxed{b = a\left(1 + \tfrac{3}{4}(\mu a)^2 + \ldots\right)}$$

(d) Invullen van de uitdrukking voor de optimale b uit (c) geeft:

$$\langle H\rangle_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{a^2\left(1+\frac{3}{4}(\mu a)^2\right)^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{a\left(1+\frac{3}{4}(\mu a)^2\right)(1+\mu a/2)^2},$$

waarbij in de uitdrukking voor de potentiële energie in de laatste factor in de noemer b is vervangen door a, aangezien de correctie tweede orde in μa is, de uitdrukking kwadratisch in de noemer staat en er slechts gevraagd wordt naar een uitdrukking tot op tweede orde in μa. Gebruiken we nu de twee uitdrukkingen voor E_1 gegeven in de opgave en ontwikkelen we alles in μa (gebruik dat: $\frac{1}{(1+\varepsilon)^2} = 1 - 2\varepsilon + 3\varepsilon^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3)$), dan vinden we:

$$\langle H\rangle_{\min} = \frac{-E_1}{\left(1+\frac{3}{4}(\mu a)^2\right)^2} - \frac{-2E_1}{\left(1+\frac{3}{4}(\mu a)^2\right)(1+\mu a/2)^2} =$$

$$= -E_1\left[1 - \frac{3}{2}(\mu a)^2 + \ldots\right] + 2E_1\left(1 - \frac{3}{4}(\mu a)^2 + \ldots\right)\left(1 - \mu a + \frac{3}{4}(\mu a)^2 + \ldots\right)$$

$$= -E_1\left[1 - \frac{3}{2}(\mu a)^2 - 2 + 2\mu a + 2\left(\frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right)(\mu a)^2 + \ldots\right]$$

De gevraagde beste afschatting voor de grondtoestandsenergie van het Yukawa waterstofatoom is dan: $\boxed{\langle H\rangle_{\min} = E_1\left[1 - 2\mu a + \frac{3}{2}(\mu a)^2 + \mathcal{O}\left((\mu a)^3\right)\right]}$
(Aangezien de Coulomb-potentiaal wat is afgezwakt door de factor $\exp(-\mu r)$ is de bindingsenergie wat kleiner, d.w.z. minder negatief, dan voor het waterstofatoom)

4) *(Veel van de redeneringen en berekeningen in deze opgave zijn precies hetzelfde als in Problems 9.1, 9.11 en 9.14 van Griffiths)*

(a) Gevraagd wordt naar componenten van matrixelement $\langle n00|\,\vec{r}\,|210\rangle$ voor $n = 1, 2, 3, \ldots$. Aangezien de positievector $\vec{r}$ drie componenten, x, y, z, heeft, heeft dit matrixelement ook drie componenten. Er wordt dus gevraagd welke van de matrixelementen $\langle n00|\,x\,|210\rangle, \langle n00|\,y\,|210\rangle$ en $\langle n00|\,z\,|210\rangle$ nul zijn. Aangezien de golffuncties gegeven zijn in bolcoördinaten, moet je x, y en z in bolcoördinaten schrijven:

$$z = r\cos\theta \ , \ x = r\sin\theta\cos\phi \ , \ y = r\sin\theta\sin\phi$$

Verder merken we op dat de golffuncties ψ_{n00} altijd sferisch-symmetrisch zijn, d.w.z. niet afhangen van de hoeken θ en ϕ. De golffunctie ψ_{210} hangt niet af van ϕ. Dus de enige ϕ-afhankelijkheid in de x- en y-componenten van de matrixelementen (voor alle n) is een enkele $\cos\phi$ of $\sin\phi$. De integraal over ϕ (van 0 tot 2π) levert dus altijd nul voor de x- en y-componenten. Je zou ook naar de θ-afhankelijkheid kunnen kijken, maar vergeet dan niet de factor $\sin\theta$ van de Jacobiaan: $\int_0^\pi \sin^2\theta\cos\theta d\theta = 0$, waarbij er nog een factor $\sin\theta$ van de x of y komt en een factor $\cos\theta$ van ψ_{210}.
De z-component is ongelijk aan nul, want de ϕ-integraal levert 2π op en de θ-integraal is (factoren $\cos\theta$ van ψ_{210} en z, factor $\sin\theta$ van de Jacobiaan):

$$\int_0^\pi \cos^2\theta\sin\theta d\theta = \tfrac{2}{3}$$

Voor $n = 1$ is de integrand in de r-integraal duidelijk altijd positief, dus die integraal is ongelijk nul; voor hogere waarden van n is de r-integraal ook altijd ongelijk nul, zoals aannemelijk is wanneer je naar die integralen kijkt (een algemeen bewijs is wat lastiger, maar dat wordt hier niet verlangd).
Opmerking: Het heeft wel degelijk zin naar matrixelementen van dit type voor $n = 2$ te kijken, ook al kunnen er geen stralingsovergangen tussen $|200\rangle$ en $|210\rangle$ plaatsvinden: de matrixelementen kunnen nog steeds al dan niet nul zijn.

(b) Volgens onderdeel (a) zijn de x- en y-componenten nul:

$$\boxed{\langle 100|\,x\,|210\rangle = 0} \qquad \boxed{\langle 100|\,y\,|210\rangle = 0}$$

We hoeven alleen nog de z-component te berekenen:

$$\langle 100|\,z\,|210\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} e^{-r/a}\,r\cos\theta\,\frac{r}{a}e^{-r/2a}\cos\theta\,r^2\sin\theta\,drd\theta d\phi =$$

$$= \frac{2\pi}{4\sqrt{2}\pi a^4}\frac{2}{3}\int_0^\infty dr\,r^4\,e^{-3r/2a} = \frac{1}{a^4}\frac{1}{2\sqrt{2}}\frac{2}{3}\left(\frac{2a}{3}\right)^5 4!\ ,$$

waarin er een factor 2π van de ϕ-integraal is, een factor $\frac{2}{3}$ van de θ-integraal (zie onderdeel (a)) en voor de r-integraal een van de gegeven integralen aan het eind is gebruikt. Een goede controle op dit punt is om te zien of je antwoord de goede dimensie heeft, d.w.z. het resultaat moet iets met dimensie lengte zijn, bv. een dimensieloos getal maal de Bohr-straal zoals hier. Het eindresultaat voor het z-matrixelement is dan:

$$\boxed{\langle 100|\, z\, |210\rangle = a\frac{2^7\sqrt{2}}{3^5} \simeq 0.745a}$$

(Je geeft blijk van enig inzicht, indien je een resultaat dat van de verkeerde dimensie is of van een onwaarschijnlijke orde van grootte, bv. honderden of duizenden Bohr-stralen, van gepast commentaar voorziet)

(c) Er geldt m.b.v. het resultaat van onderdeel (b), dat $|\vec{P}|^2 = e^2a^2\,\frac{2^{15}}{3^{10}}$ voor de overgang $|210\rangle \to |100\rangle$. De energie van de overgang is:
$E_2 - E_1 = E_1/4 - E_1 = -\frac{3}{4}E_1$, zodat $\boxed{\omega_0 = -\frac{3E_1}{4\hbar}}$.

Gebruik nu de gegeven formule voor $A^{\text{spont.em.}}$:

$$A = \omega_0^3\,|\vec{P}|^2\,\frac{1}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3} = -\frac{3^3}{2^6}\frac{E_1^3}{\hbar^3}\,\frac{2^{15}}{3^{10}}e^2a^2\,\frac{1}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3} = -\frac{2^9}{3^8}\frac{E_1^3e^2a^2}{\pi\varepsilon_0\hbar^4c^3}$$

Dit kan in de gevraagde vorm geschreven worden door gebruik te maken van de twee gegeven formules voor E_1 en a:

$$\frac{E_1^3e^2a^2}{\pi\varepsilon_0\hbar^4c^3} = E_1^2\left(-\frac{\hbar^2}{2m_ea^2}\right)\frac{e^2a^2}{m_ee^2a/4}\,\frac{1}{\hbar^2c^3} = -2\left(\frac{E_1}{m_ec^2}\right)^2\frac{c}{a}\quad ,$$

zodat: $\boxed{A = \frac{2^{10}}{3^8}\left(\frac{E_1}{m_ec^2}\right)^2\frac{c}{a}}$

(d) De levensduur τ is:

$$\tau = \frac{1}{A} = \frac{3^8}{2^{10}}\left(\frac{0.511\times 10^6}{-13.6}\right)^2\left(\frac{0.529\times 10^{-10}}{3\times 10^8}\right)\,\text{s} \quad\Longrightarrow\quad \boxed{\tau = 1.6\times 10^{-9}\ \text{s}}$$

(Ook hier geldt, dat je na afloop van dit college (met werkcollege) geacht wordt een idee te hebben van redelijke waarden voor de levensduur: vind je een resultaat dat de nu bekende leeftijd van het heelal benadert, dan kun je daar best een verstandige opmerking over maken)