ANTWOORDEN EN UITWERKINGEN
TENTAMEN QUANTUMMECHANICA 2
VAN 8 JUNI 2012

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

(a) Volgens het Pauli-principe kunnen fermionen zich niet in dezelfde quantumtoestand bevinden. De spintoestand is hetzelfde, dus de toestand die de energie bepaalt moet verschillend zijn. De laagstmogelijke energie (= grondtoestandsenergie) is dan: $E_0 + E_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega = 2\hbar\omega$

(b)
$$n_{\mathrm{BE}}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon} - 1} = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/(k_{\mathrm{B}}T)} - 1}$$

(c) Het matrixelement absoluut in het kwadraat, $|\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle|^2$, is altijd positief of nul. Verder geldt voor de grondtoestandsenergie, dat alle andere energieën hoger liggen: $E_0^0 < E_n^0 \quad, n \neq 0$. Passen we de formule voor E_n^2 toe voor $n = 0$, dan is de noemer altijd negatief: $E_0^0 - E_m^0 < 0$. De correctie E_0^2 is dus altijd negatief (of hoogstens gelijk aan nul).

(d) $\vec{X}$ en $\vec{Y}$ stellen voor het baanimpulsmoment $\vec{L}$ en het spinimpulsmoment $\vec{S}$ (ofwel: de spin) van het elektron. Aangezien de fysische dimensie van een (term in de) Hamiltoniaan die van *energie* is, is de fysische dimensie van de constante B: $\frac{\text{energie}}{(\text{impulsmoment})^2}$.
Verder uitwerken wordt niet gevraagd, maar zou bv. als volgt gaan:
$\frac{\text{kracht}\times\text{lengte}}{(\text{impuls}\times\text{lengte})^2} = \frac{\text{massa}\times\text{versnelling}\times\text{lengte}}{(\text{massa}\times\text{snelheid}\times\text{lengte})^2} = \frac{1}{\text{massa}\times(\text{lengte})^2}$.

N.B. impuls *is iets anders dan* impulsmoment*!*

(e) De golflengte van zichtbaar licht is van orde-grootte 500 nm = 5000Å. De grootte van een atoom is van orde-grootte 1Å. 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.

(f) Het proces van absorptie

2) *(Deze opgave is ongeveer hetzelfde als Opgave 10 van het werkcollege; de verschillen zijn dat het nu om (spinloze) bosonen (i.p.v. fermionen) gaat en dat de dimensie niet willekeurig is, maar gelijk aan 3; dat zijn allebei vereenvoudigingen. Bestudeer ook de uitwerking van Opgave 10)*

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

(b) 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 schil met dikte dk bij lengte k een volume heeft gelijk aan $4\pi k^2 dk = d\left(\frac{4}{3}\pi k^3\right)$, dan geldt voor het aantal toestanden met $|\vec{k}|$ tussen k en $k + dk$:

$$g(k)dk = D(\varepsilon)d\varepsilon \qquad \text{met} \;\; g(k) \sim k^2$$

Dan volgt:

$$D(\varepsilon) = g(k)\,\left(\frac{d\varepsilon}{dk}\right)^{-1} \sim k^2\,(k)^{-1} \sim k \sim \sqrt{\varepsilon}$$

(c) Als som over $\vec{k}$:

$$\psi(\alpha, \beta, V) = -\sum_{\vec{k}} \ln\left[1 - e^{-(\alpha+\beta\varepsilon(\vec{k}))}\right] \;.$$

Als integraal over ε (hier verschijnt de toestandsdichtheid, zie (a)!):

$$\psi(\alpha, \beta, V) = -\int d\varepsilon\, D(\varepsilon)\, \ln\left[1 - e^{-(\alpha+\beta\varepsilon)}\right] \;.$$

Uit $\psi = \beta PV$ volgt dan:

$$PV = -\frac{1}{\beta}\int d\varepsilon\, D(\varepsilon)\, \ln\left[1 - e^{-(\alpha+\beta\varepsilon)}\right] \;.$$

Om het gevraagde verband af te leiden tussen PV en E, vergelijk je dit met de uitdrukking voor E:

$$E = \int d\varepsilon\, \varepsilon\, D(\varepsilon)\, n_{\mathrm{BE}}(\varepsilon) = \int d\varepsilon\, \varepsilon\, D(\varepsilon)\, \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon} - 1}$$

Aangezien we uit (b) weten dat $D(\varepsilon) = C\sqrt{\varepsilon}$ lijkt het een goed idee om de uitdrukking voor PV partiëel te integreren (differentiëren van de ln-functie zou dan o.a. $n_{\rm BE}$ moeten opleveren):

$$\begin{aligned} PV &= -\frac{C}{\beta}\int_0^\infty d\varepsilon\,\sqrt{\varepsilon}\,\ln\left[1-e^{-(\alpha+\beta\varepsilon)}\right] \\ &= -\frac{C}{\beta}\,\frac{2}{3}\varepsilon^{\frac{3}{2}}\,\ln\left[1-e^{-(\alpha+\beta\varepsilon)}\right]\Big|_0^\infty + \frac{C}{\beta}\,\frac{2}{3}\int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon^{\frac{3}{2}}\,\frac{1}{-e^{-(\alpha+\beta\varepsilon)}+1}\,e^{-(\alpha+\beta\varepsilon)}(-\beta) \end{aligned}$$

De stokterm is nul voor $\varepsilon \to \infty$ vanwege (gebruik hier(!) hint nummer 2):

$$\lim_{\varepsilon\to\infty}\varepsilon^{\frac{3}{2}}\,\ln\left[1-e^{-(\alpha+\beta\varepsilon)}\right] = \lim_{\varepsilon\to\infty}\varepsilon^{\frac{3}{2}}(-e^{-\alpha})\,e^{-\beta\varepsilon} = 0 \quad ,$$

(want de e-macht wint het van een enkele exponent). We hebben dan:

$$PV = \frac{2}{3}C\int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon^{\frac{3}{2}}\,\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon}-1} = \frac{2}{3}\int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon\,D(\varepsilon)\,n_{\rm BE}(\varepsilon) = \frac{2}{3}E \quad \boxtimes$$

(d) Partiële integratie van de uitdrukking voor N (zoals we ook in Opgave 10 van het werkcollege deden):

$$\begin{aligned} N &= \int_0^\infty d\varepsilon\,C\varepsilon^{\frac{1}{2}}\,\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon}-1} \\ &= \frac{2C}{3}\varepsilon^{\frac{3}{2}}\,\frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon}-1}\Big|_0^\infty - \frac{2C}{3}\int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon^{\frac{3}{2}}\,\frac{(-1)e^{\alpha+\beta\varepsilon}(\beta)}{(e^{\alpha+\beta\varepsilon}-1)^2} \\ &= \frac{2\beta C}{3}\int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon^{\frac{3}{2}}\,\frac{e^{\alpha+\beta\varepsilon}}{(e^{\alpha+\beta\varepsilon}-1)^2} \end{aligned}$$

Schrijf de breuk met exponenten in de integraal als volgt:

$$\frac{e^{\alpha+\beta\varepsilon}}{(e^{\alpha+\beta\varepsilon}-1)^2} = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon}-1} + \frac{1}{(e^{\alpha+\beta\varepsilon}-1)^2} \quad .$$

Dan hebben we (zie de uitdrukking voor PV op de laatste regel van (c)):

$$N = \beta PV + x$$

met

$$x = \frac{2\beta C}{3}\int_0^\infty d\varepsilon\,\frac{\varepsilon^{\frac{3}{2}}}{(e^{\alpha+\beta\varepsilon}-1)^2}$$

Omdat overduidelijk $x > 0$, geldt er: $\beta PV < N$, ofwel: $PV < Nk_{\rm B}T \quad \boxtimes$

(e) De Bose-Einstein statistiek zorgt effectief voor een aantrekking tussen de bosonen. Bij dezelfde dichtheid ($\rho = \frac{N}{V}$) en temperatuur zal de druk op de wanden van een container dus kleiner zijn dan in een klassiek ideaal gas (ofwel: bij gelijke P, N, T zal een kleiner volume worden ingenomen). Dit verklaart waarom PV kleiner is dan $Nk_{\rm B}T$ voor het ideale Bose gas.

3) (a) Kern (proton) en elektron hebben beiden spin-$\frac{1}{2}$. $\vec{F}$ is de som van twee spins-$\frac{1}{2}$ $\rightarrow$ $f = 0$ of $f = 1$. Voor $f = 0$ heb je alleen $m_f = 0$, voor $f = 1$, heb je $m_f = 1, 0, -1$. De 4 toestanden $|f\ m_f\rangle$ zijn dus: $|0\ 0\rangle, |1\ 1\rangle, |1\ 0\rangle, |1\ -1\rangle$.

(b) Aangezien in de grondtoestand $\ell = 0$, is ook $m_\ell = 0$, dus de verwachtingswaarde van L_z is nul.
Strict genomen zou de Zeeman-term in de Hamiltoniaan een factor $L_z + 2S_z$ bevatten (zie Griffiths *[6.71]), maar indien alleen de grondtoestand wordt beschouwd, zoals hier, mag de term L_z weggelaten worden.*

(c) We hebben nodig de verwachtingswaarde van $\vec{S} \cdot \vec{I}$ in de $|f\ m_f\rangle$ toestanden. Gebruik hiervoor hetzelfde trucje als bij de spin-baankoppeling (daar: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ en $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$) of bij de hyperfijnsplitsing (dit is zelfs precies hetzelfde als hier, alleen heten $\vec{S}$ en $\vec{I}$ daar $\vec{S}_e$ en $\vec{S}_p$, respectievelijk, maar het zijn dezelfde fysische grootheden):

$$F^2 = \vec{F} \cdot \vec{F} = \left(\vec{S} + \vec{I}\right) \cdot \left(\vec{S} + \vec{I}\right) = S^2 + I^2 + 2\vec{S} \cdot \vec{I} \ ,$$

dus: $\vec{S} \cdot \vec{I} = \frac{1}{2}\left(F^2 - S^2 - I^2\right)$.
Voor de 3 toestanden met $f = 1$: $\langle \vec{S} \cdot \vec{I} \rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left(1 \cdot 2 - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}\right) = \frac{\hbar^2}{4}$.
Voor de toestand met $f = 0$: $\langle \vec{S} \cdot \vec{I} \rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left(0 \cdot 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}\right) = -\frac{3\hbar^2}{4}$.
De matrix van H'_{hf} is dan:

$$(H'_{\mathrm{hf}}) = \frac{A}{4}\begin{pmatrix} -3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

We gebruiken de basis van toestanden zoals geordend in (a), d.w.z. het (11)-matrixelement linksboven is de verwachtingswaarde van H'_{hf} in de toestand $|0\ 0\rangle$, etc.

(d) De toestanden $|0\ 0\rangle$ en $|1\ 0\rangle$ zijn geen eigentoestanden van S_z, want het zijn lineaire combinaties van 2 toestanden $|m_s, m_i\rangle$ met $m_s = \frac{1}{2}$ en $m_s = -\frac{1}{2}$:

$$|0\ 0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \qquad |1\ 0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

N.B.: We gebruiken hier de gebruikelijke notatie dat $m_s = +\frac{1}{2}$ wordt aangegeven met $\uparrow$ en $m_s = -\frac{1}{2}$ met $\downarrow$; verder slaat de eerste pijl op de elektronspin (m_s) en de tweede op de protonspin (m_i)
Het te berekenen matrix-element is dan:

$$\begin{aligned} \langle 1\ 0|S_z|0\ 0\rangle &= \langle 1\ 0|S_z \left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right) \\ &= \langle 1\ 0|\frac{\hbar}{2}\left(\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}\right) \qquad (!) \\ &= \frac{\hbar}{2}\langle 1\ 0|1\ 0\rangle = \frac{\hbar}{2} \quad \Longrightarrow \langle 0\ 0|H'_{\mathrm{Z}}|1\ 0\rangle = \frac{2\mu_{\mathrm{B}}B}{\hbar} \cdot \frac{\hbar}{2} = \mu_{\mathrm{B}}B \qquad \boxtimes \end{aligned}$$

De toestanden $|1\ 1\rangle$ ($\equiv |\uparrow\uparrow\rangle$) en $|1\ -1\rangle$ ($\equiv |\downarrow\downarrow\rangle$) zijn wel eigentoestanden van S_z, met eigenwaarden $+\frac{1}{2}\hbar$ en $-\frac{1}{2}\hbar$, respectievelijk. Dat levert de volgende twee diagonaal-elementen voor de matrix van H'_Z:
$\langle 1\ 1|H'_\mathrm{Z}|1\ 1\rangle = \frac{2\mu_\mathrm{B}B}{\hbar}\cdot\frac{\hbar}{2} = \mu_\mathrm{B}B$, $\langle 1\ -1|H'_\mathrm{Z}|1\ -1\rangle = \frac{2\mu_\mathrm{B}B}{\hbar}\cdot\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = -\mu_\mathrm{B}B$.
De volledige matrix van H'_Z is dan:

$$(H'_\mathrm{Z}) = \mu_\mathrm{B}B\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

We gebruiken weer de basis van toestanden zoals geordend in (a), en uiteraard geldt: $\langle 0\ 0|S_z|1\ 0\rangle = \langle 1\ 0|S_z|0\ 0\rangle^*$ (fysische grootheden, zoals S_z, zijn hermitische operatoren).

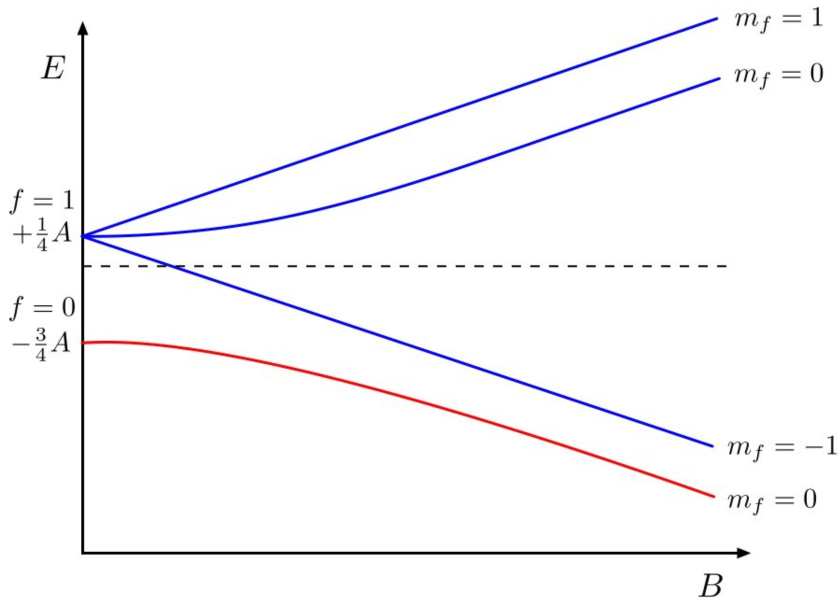
(e) De eenvoudigste berekening die je kunt doen is het diagonaliseren van de 2×2 submatrix van H'_Z in de basis: $\{|0\ 0\rangle, |1\ 0\rangle\}$. Dit is (op een factor $\mu_\mathrm{B}B$ na) de matrix:

$$\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

De eigenwaarden hiervan zijn (zoals inmiddels bekend mag worden verondersteld): $+1$ en -1, zodat de eigenwaarden voor H'_Z zijn: $+\mu_\mathrm{B}B$ en $-\mu_\mathrm{B}B$. Voor de twee andere toestanden van de basis is de matrix al diagonaal en treden dezelfde twee eigenwaarden op. De conclusie is dat voor een sterk magneetveld (verwaarloos H'_hf) er twee curves zijn in het (energie,magneetveld)-diagram die lineair omhoog lopen (eigenwaarde $+\mu_\mathrm{B}B$) en twee curves die lineair omlaag lopen (eigenwaarde $-\mu_\mathrm{B}B$).
Om het Rabi-diagram te construeren is verder van belang:

* Voor $B = 0$ zijn er twee niveaus t.g.v. de hyperfijnsplitsing: $+\frac{1}{4}A$ (3-voudig ontaard) en $-\frac{3}{4}A$ (niet ontaard); dit volgt uit onderdeel (c).
* Voor heel zwak magneetveld zal het singlet niveau (met $f = 0, m_f = 0$) in eerste aanleg onafhankelijk zijn van B en net zo voor de $|1\ 0\rangle$ toestand. Immers, $\langle S_z\rangle = 0$ in die twee toestanden (zie onderdeel (d) en herinner je eerste-orde storingsrekening!). Voor deze toestanden loopt de curve dus in eerste instantie (bij groter wordende B) horizontaal.
* Voor de toestanden $|1\ 1\rangle$ en $|1\ -1\rangle$ loopt de curve voor alle B (!) lineair omhoog en omlaag, respectievelijk. Dit zijn immers eigentoestanden van zowel H'_hf als H'_Z. De twee energie-curves worden dus gegeven door:
  $E_{|11\rangle} = \frac{1}{4}A + \mu_\mathrm{B}B$, $E_{|1\ -1\rangle} = \frac{1}{4}A - \mu_\mathrm{B}B$.

Dit alles samengevoegd geeft het *Rabi-diagram* (volgende pagina).
(*De liefhebbers zouden nog na kunnen rekenen, door $H'_\mathrm{hf} + H'_\mathrm{Z}$ te diagonaliseren in de sub-basis $\{|0\ 0\rangle, |1\ 0\rangle\}$, dat de twee andere energie-curves exact worden gegeven door:* $E_\pm = -\frac{1}{4}A \pm \frac{1}{2}\sqrt{A^2 + 4\left(\mu_\mathrm{B}B\right)^2}$
Dit is echter niet nodig om deze vraag volledig correct te beantwoorden.)



Rabi-diagram, energie E als functie van extern magneetveld B. De labels f en m_f worden in de tekst uitgelegd; $+\frac{1}{4}A$ en $-\frac{3}{4}A$ zijn de energieën t.g.v. de hyperfijnsplitsing, bij $B = 0$. De onderbroken horizontale lijn geeft de energie aan zonder hyperfijnsplitsing en zonder magneetveld, d.w.z. de grondtoestand Bohr-energie E_1.

(f) De toestanden $|1\ -1\rangle$ en $|0\ 0\rangle$ verlagen hun energie in een groot magneetveld (zie diagram); deze zullen de *high-field seekers* worden genoemd.
(*Strikt genomen, is voor magneetveld ongelijk nul de toestand $|0\ 0\rangle$ niet de eigentoestand die bij dit energieniveau hoort, maar de (genormeerde) som van $|0\ 0\rangle$ en $|1\ 0\rangle$. De vraagstelling is echter dusdanig, dat dit toch (de helft van) het goede antwoord is.*)