FUF040: Kvantfysik

Kurs: FUF040
Tid: 2022/10/20, 0830 – 1230
Ansvarig: Tom Blackburn
Tillåtna hjälpmedel: Physics Handbook, bifogad formelblad
Frågor: 5
Total poäng: 6 + 12 + 11 + 8 + 13 = 50

1. En partikel med massa m befinner sig bunden i en endimensionell, kvadratisk potential med naturlig frekvens ω_0. Dess tillstånd vid $t = 0$ är

$$|\psi; t = 0\rangle = \frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}} \tag{1}$$

där $|n\rangle$ är ett energiegentillstånd med energi E_n.

(a) (2 poäng) Vad är sannolikheten att en energimätning ger $E = 5\hbar\omega_0/2$? Beror ditt svar på tid?

Solution: Det är $n = 2$ som har energi $E = 5\hbar\omega_0/2$, $P_2 = 0.5$. Det beror inte på tid.

(b) (3 poäng) Bestäm positionens väntevärde, $\langle x\rangle$, som funktion av tid.

Solution: Det tidsberoende tillståndet

$$|\psi; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-3i\omega_0 t/2}|1\rangle - e^{-5i\hbar\omega_0 t/2}|2\rangle) = \frac{e^{-2i\omega_0 t}}{\sqrt{2}}(e^{i\omega_0 t/2}|1\rangle - e^{-i\omega_0 t/2}|2\rangle). \tag{2}$$

Med hjälp av stegoperatorer, blir positionsoperatorn $\hat{x} = L(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$ och

$$\hat{x}|\psi; t\rangle = \frac{e^{-2i\omega_0 t}L}{\sqrt{2}}\left[e^{i\omega_0 t/2}(|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle) - e^{-i\omega_0 t/2}(\sqrt{2}|1\rangle + \sqrt{3}|3\rangle)\right]. \tag{3}$$

Därför

$$\langle\psi; t| x |\psi; t\rangle = \frac{L}{2}\left(-\sqrt{2}e^{i\omega_0 t}\langle 1|1\rangle - \sqrt{2}e^{i\omega_0 t}\langle 2|2\rangle\right) = -\sqrt{2}L\cos(\omega_0 t) \tag{4}$$

(c) (1 poäng) Stämmer ditt resultat i (b) med vad klassisk fysik förutsäger om harmoniska oscillatorer?

Solution: t ex: ja, partikeln oscillerar fram och tillbaka vid oscillatorns naturliga frekvensen ω_0.

2. En partikel i en harmonisk oscillator är störd av en svag potential $\hat{H}' = -V_\delta \delta(x)$ där $V_\delta > 0$. Vågfunktionerna som motsvarar de första tre energinivåer är:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{(2\pi L^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4L^2}\right) \times \begin{cases} 1, & n = 0 \\ x/L, & n = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[(x/L)^2 - 1], & n = 2 \end{cases} \tag{5}$$

där $L = \sqrt{\hbar/(2m\omega_0)}$.

(a) (2 poäng) Bestäm första ordningens korrigering till grundtillståndets energi, $E_0^{(1)}$.

Solution:

$$E_0^{(1)} = \langle 0| \hat{H}' |0\rangle = -V_\delta \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^\star(x)\delta(x)\psi_0(x)\, dx = -\frac{V_\delta}{\sqrt{2\pi L^2}} \tag{6}$$

(b) (2 poäng) Vad är första ordningens korrigering till det första exciterade tillståndets energi, $E_1^{(1)}$? Förklara det du hittar.

Solution: Det är noll, $E_1^{(1)} = 0$, eftersom vågfunktionen försvinner vid $x = 0$ och därför har partikeln ingen aning att det finns en störning.

(c) (4 poäng) Visa att det störda grundtillståndet kan uttryckas som $|0'\rangle \simeq |0\rangle + A\,|2\rangle + \cdots$ och bestäm konstanten A.

Solution: Det störda grundtillståndet är

$$|0'\rangle = |0\rangle + \sum_{k\neq 0} \alpha_k\, |k\rangle\,, \qquad \alpha_k = \frac{\langle k| \hat{H}' |0\rangle}{E_0 - E_k}. \tag{7}$$

Matriselementen är noll för $k = 1$ eftersom vågfunktionen försvinner vid $x = 0$.

$$\langle 2| \hat{H}' |0\rangle = -V_\delta \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^\star(x)\delta(x)\psi_0(x)\, dx = \frac{V_\delta}{2\sqrt{\pi}L} \tag{8}$$

och $E_0 - E_2 = -2\hbar\omega_0$. Då har vi att

$$A = -\frac{V_\delta}{4\sqrt{\pi}\hbar\omega_0 L} \tag{9}$$

(d) (4 poäng) Din kollega Dr Knowitall säger att partikeln borde bli mer lokaliserad eftersom störningen är en attraktiv potential. Bestäm $\langle x^2 \rangle$ med hjälp av resultatet i (c) och visa ifall den goda doktorn har rätt.

Solution: Lättast att bestämma $|\phi\rangle = \hat{x}\,|0'\rangle$ och använda att $\hat{x}$ är Hermitsk för att skriva om $\left\langle x^2 \right\rangle = \langle 0'|\,\hat{x}^2\,|0'\rangle = \langle 0'|\,\hat{x}^\dagger \hat{x}\,|0'\rangle = \langle \phi|\phi\rangle$.

$$|\phi\rangle = \hat{x}\,|0'\rangle = L\left(|1\rangle + \sqrt{2}A\,|1\rangle + \sqrt{3}A\,|3\rangle\right) \tag{10}$$

$$\implies \left\langle x^2 \right\rangle = \langle \phi|\phi\rangle = L^2(1 + 2\sqrt{2}A + \cancel{5A^2}) \tag{11}$$

Termen $5A^2$ måste tas bort eftersom vi har bestämt bara första ordningens korrigeringar. $A < 0$ betyder att störningen minskar $\left\langle x^2 \right\rangle$ och att den goda doktorn har rätt.

3. En spinn-1/2 partikel förbereds så att dess tillstånd är givet av

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\rangle + e^{i\phi}\,|\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle\right) \tag{12}$$

där ϕ är en reell fas.

(a) (1 poäng) Om vi mäter spinnbeloppet $|\mathbf{S}|$ vad får vi som svar?

Solution: $|\mathbf{S}| = \sqrt{s(s+1)\hbar^2} = \sqrt{3}\hbar/2$.

(b) (2 poäng) Om vi mäter spinnet längs z-axeln, S_z, vad är de möjliga resultaten och hur sannolika är de?

Solution: $+\hbar/2$ med sannolikhet 50% och $-\hbar/2$ med sannolikhet 50%.

(c) (1 poäng) Vad är väntevärdet $\langle S_z \rangle$?

Solution: $\langle S_z \rangle = \sum_n P_n S_z = 0$.

(d) (2 poäng) Din kollega Dr Knowitall säger, "Om vi mäter partikelns spinn längs z väldigt många gånger, ska alla resultats genomsnitt hålla med ditt svar i (c)." Har han rätt? Förklara varför.

Solution: Han har fel eftersom tillståndet kollapsar vid mätning. Om vi gör som han föreslår ska vi få det första resultatet om och om igen. Väntevärdet är genomsnittet man får genom att mäta spinnet (en gång!) av många partiklar beskrivna av samma tillstånd $|\psi\rangle$.

(e) (4 poäng) Istället mäter vi partikelns spinn längs x-axeln. Vad är de möjliga resultaten och hur sannolika är de?

Solution: Använd $\hat{S}_x$:s matrisrepresentation för hitta egentillstånd i termer av $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \to \binom{1}{0}$ och $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \to \binom{0}{1}$:

$$\underbrace{\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{S_x} \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}}_{\chi} = \pm\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \qquad \Longrightarrow \chi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{13}$$

De möjliga resultaten är $\hbar/2$ med sannolikhet $P_+ = |\langle\chi_+|\psi\rangle|^2 = |\frac{1}{2}(1 + e^{i\phi})|^2 = (1 + \cos\phi)/2$, och $-\hbar/2$ med sannolikhet $P_- = 1 - P_+ = (1 - \cos\phi)/2$.

(f) (1 poäng) Ge en fysikalisk tolkning av fasen ϕ.

Solution: Det kan tolkas som vinkeln mellan x-axeln och partikelns "spinnvektor": vi vet att $\langle S_z\rangle = 0$ och nu att $S_x = +\hbar/2$ om $\phi = 0$ samt $S_x = -\hbar/2$ om $\phi = \pi$.

4. Operatorn som motsvarar banrörelsemängdsmomentet längs z-axeln är:

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \qquad \hat{L}_z\,\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\psi(\mathbf{r}) \tag{14}$$

(a) (2 poäng) Visa att $\hat{L}_z$ och $\hat{p}_x$ inte kommuterar.
Tips: $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]$.

Solution:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_z, p_x] &= [\hat{x}\hat{p}_y, \hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_x] && (15)\\
&= [\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{p}_y + \hat{x}\cancel{[\hat{p}_y, \hat{p}_x]} - \cancel{[\hat{y}, \hat{p}_x]}\hat{p}_x - \hat{y}\cancel{[\hat{p}_x, \hat{p}_x]} && (16)\\
&= i\hbar\hat{p}_y && (17)\\
&\neq 0 && (18)
\end{aligned}$$

(b) (2 poäng) Vad innebär resultatet i (a), både matematiskt och i termer av kunskapen man kan ha om ett kvantmekaniskt system?

Solution: Att $\hat{L}_z$ och $\hat{p}_x$ inte delar egentillstånd samt att det är omöjligt att veta båda två exakt och samtidigt.

(c) (3 poäng) Ange $\hat{L}_z$:s egenvärden och bestäm dess egenfunktioner. (Du behöver inte normera dem.) Vilka värden får egenvärdena ha och varför?

Solution: Ekvationen $-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\psi = \lambda\psi$ har lösning $\psi = A\exp(-i\lambda\phi/\hbar)$. Fast så att vågfunktionen är envärd, $\exp(-i\lambda\phi/\hbar) = \exp[-i\lambda(\phi + 2\pi)/\hbar]$ och $\lambda/\hbar$ måste vara ett heltal. Egenvärden är därför $\lambda = m\hbar$ där $m \in \mathbb{Z}$.

(d) (1 poäng) Föreslå ett experiment som kan visa att L_z är kvantiserad.

Solution: Om L_z bidrar till ett magnetiskt moment, ett Stern-Gerlach-experiment.

5. En elektron, bunden i en väteatom med bestämd energi och bestämt orbitalt rörelsemängdsmoment, har Hamiltonianen:

$$\hat{H}_\ell = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m\hat{r}^2} - \frac{\hbar^2}{ma_0\hat{r}} \tag{19}$$

där $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(me^2)$ är Bohr-radien. $\underline{\text{Anta att } \ell = 1}$.

(a) (2 poäng) Vad är tillståndet med den lägsta energin om $\ell = 1$? Ge tillståndets energi i termer av Rydbergs konstant $R = \hbar^2/(2ma_0^2)$.

Solution: $2p$, eller $n = 2, \ell = 1$. Energin är $-\hbar^2/(8ma_0^2) = -R/4$.

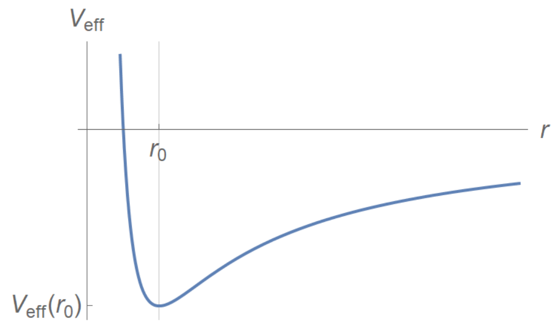
(b) (3 poäng) Ange den radiella vågfunktionen $R_{n,\ell}(r)$ som motsvarar tillståndet i (a) och bestäm radiens väntevärde $\langle r \rangle$.
Tips: $\int_0^\infty x^n \exp(-x)\,dx = n!$

Solution: Enligt boken $R_{2,1}(r) = (r/a_0)\exp[-r/(2a_0)]/(2\sqrt{6}a_0^{3/2})$. Väntevärdet

$$\langle r \rangle = \frac{\int_0^\infty r^5 e^{-r/a_0}\,dr}{\int_0^\infty r^4 e^{-r/a_0}\,dr} = a_0\frac{5!}{4!} = 5a_0 \tag{20}$$

(c) (3 poäng) Tolka de sista två termerna i ekvation 19 som en effektiv potentialenergi $V_{\text{eff}}(r)$. Skissa $V_{\text{eff}}(r)$ och bestäm jämviktsradien, r_0, och potentialen vid denna punkt, $V_{\text{eff}}(r_0)$.

Solution: Potentialens första derivata är $-2\hbar^2/(mr^3) + \hbar^2/(ma_0r^2)$. Jämviktsradien är $r_0 = 2a_0$ och potentialen vid denna punkt är $V(r_0) = -\hbar^2/(4ma_0^2) = -R/2$.



(d) (2 poäng) Din kollega Dr Knowitall är besatt av harmoniska oscillatorer och därför expanderar han $V_{\text{eff}}(r)$ omkring jämviktsradien upp till och med termer $O[(r-r_0)^2]$. Om vi betraktar problemet som en elektron bunden i en kvadratisk potential, vad är den motsvarande naturliga frekvensen ω_0?

Solution: Potentialens andra derivata är $6\hbar^2/(mr^4) - 2\hbar^2/(ma_0r^3)$,

$$V(r) \simeq -\frac{\hbar^2}{4ma_0^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{16ma_0^4}}_{\frac{1}{2}m\omega_0^2}(r-r_0)^2, \tag{21}$$

då identifierar vi $\omega_0 = \hbar/(\sqrt{8}ma_0^2)$.

(e) (2 poäng) Enligt (d), vad är den lägsta energin en elektron med $\ell = 1$ kan ha? Ge ditt svar i termer av Rydbergs konstant. Håller resultatet med (a)?
Tips: $2-\sqrt{2} \simeq 0.6$.

Solution: En harmonisk oscillators lägsta energinivå är $\hbar\omega_0/2$, men här är botten $V(r_0) = -\hbar^2/(4ma_0^2)$ istället för 0. Då är den lägsta energin

$$V(r_0) + \hbar\omega_0/2 = -\frac{\hbar^2}{4ma_0^2} + \frac{\hbar^2}{2\sqrt{8}ma_0^2} = -\frac{(2-\sqrt{2})\hbar^2}{8ma_0^2} = -0.6\frac{R}{4} \tag{22}$$

Svaret är 40% större än som givet i (a).

(f) (1 poäng) Blir (c):s förutsägelser bättre eller sämre vid högre energinivåer? Förklara varför.

Solution: Sämre. (De blir positiva!) Dr Knowitalls kvadratiska uppskattning till potentialen blir oändligt stor om $r \to \infty$. I verklighet $V_{\text{eff}}(r) \to 0$ och bindningen är svagare.

Formelblad

- Diracs deltafunktion:

$$f(a) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) f(x)\, dx, \qquad \delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx \tag{23}$$

- Stegoperatorer för en harmonisk oscillator, $V(\hat{x}) = \frac{1}{2} m\omega_0^2 \hat{x}^2$:

$$\hat{a}^\dagger = \frac{\hat{x}}{2L} - \frac{iL\hat{p}}{\hbar}, \qquad \hat{a} = \frac{\hat{x}}{2L} + \frac{iL\hat{p}}{\hbar} \tag{24}$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle \qquad \hat{a}\, |n\rangle = \sqrt{n}\, |n-1\rangle \tag{25}$$

  där $L = \sqrt{\hbar/(2m\omega_0)}$.

- Paulimatriser för j eller $s = 1/2$ ($\hat{J}_i|\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$):

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{26}$$

- Paulimatriser för j, ℓ eller $s = 1$ ($\hat{J}_i|\hat{L}_i|\hat{S}_i = \hbar\sigma_i$):

$$\sigma_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{27}$$

- Hamiltonianen i sfäriska koordinater:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r), \tag{28}$$

  där

$$\hat{p}_r^2 = \left[-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\right]^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{29}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{30}$$