TEORETISK FYSIK
KTH

TENTAMEN I KVANTFYSIK

Kvantfysik SI1151 för F3
Tisdag 130108 kl. 8.00-13.00

Skriv på varje sida	Namn och problemnummer
Motivera noga	Otillräckliga motiveringar leder till poängavdrag
Hjälpmedel	Teoretisk fysiks formelsamling, BETA, miniräknare
Poängsättning	6 poäng per problem
Examinator	Mats Wallin tel 5537 8475

1. En partikel med massa m befinner sig i grundtillståndet till en endimensionell oändlig potentialbrunn som ges av potentialen

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{för } 0 < x < L \\ \infty & \text{för övrigt} \end{cases}$$

(a) Bestäm sannolikheten att en positionsmätning ger resultatet $L/4 < x < 3L/4$.

(b) Bestäm sannolikheten att en mätning av rörelsemängden ger $p > 0$.

2. En spinn 1/2 partikel är i tillståndet

$$|\psi\rangle = C \begin{pmatrix} 1+i \\ 1 \end{pmatrix}$$

(a) Bestäm värdet på konstanten C så att tillståndet blir normerat.

(b) Bestäm väntevärdena $\langle S_x\rangle, \langle S_y\rangle, \langle S_z\rangle$ av spinnkomponenterna.

3. En partikel i en endimensionell harmonisk oscillatorpotential störs av en potential av formen $H'(x) = Ax^4$ där A är en konstant. Bestäm mha stegoperatorer $a, a^\dagger$ första ordningens korrektion till grundtillståndsenergin.

VÄND!

4. Hamiltonianen för vibrationer hos en NH_3 molekyl (ammoniak) ges av

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_3}$$

där $I_x = I_y = I_1, I_z = I_3$ är tröghetsmoment. Bestäm de möjliga energinivånerna.

5. Två identiska spinn 1/2 fermioner är i en gemensam endimensionell oändlig potentialbrunn med längd L. Fermionerna antas växelverka endast genom sina spinn så att Hamiltonianen blir

$$H = H_1 + H_2 - A\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

där H_1, H_2 är Hamiltonianerna för partikel 1 och 2, och A är en konstant. Bestäm grundtillståndsenergin som funktion av A.

Ledning: Bestäm grundtillståndsenergierna för fallen då spinnen är i singlett och triplett tillstånd.

LYCKA TILL!

Formler

Energinivåer och egenfunktioner för en partikel i en oändlig potentialbrunn:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \ , \ \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x \ , \ k_n = \frac{n\pi}{L} \ , \ n = 1, 2, 3, ...$$

Lösning till tentamen i Kvantfysik 130108

1. (a) Sannolikheten att en positionsmätning ger resultatet $L/4 < x < 3L/4$ blir

$$P(L/4 < x < 3L/4) = \int_{L/4}^{3L/4} |\psi(x)|^2 \, dx$$

$$= \frac{2}{L} \int_{L/4}^{3L/4} \sin^2(\pi x/L) \, dx = \frac{2}{L} \frac{L}{\pi} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \sin^2 x \, dx$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \frac{1 - \cos 2x}{2} \, dx = \frac{1}{\pi} \left[x - \frac{\sin 2x}{2} \right]_{\pi/4}^{3\pi/4}$$

$$= \frac{1}{\pi} \left(\frac{3\pi}{4} - \frac{\pi}{4} - \frac{-1 - 1}{2} \right) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \approx 0.82$$

(b) Skriv vågfunktionen som

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \pi x/L = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{e^{i\pi x/L} - e^{-i\pi x/L}}{2i}$$

Detta är summan av två plana vågor med rörelsemängd $p = \hbar k = \pm \hbar \pi/L$. De båda plana vågorna har samma expansionskoefficient (upp till ett minustecken). Sannolikheten att mäta positiv och negativ rörelsemängd måste därför vara lika. Svaret är alltså att sannolikheten blir 0.5 att mäta $p > 0$.

Formellt:

$$P(p = \hbar\pi/L) = |\langle p = \hbar\pi/L|\psi\rangle|^2 = \left| \int \langle p = \hbar\pi/L|x\rangle\langle x|\psi\rangle \, dx \right|^2$$

$$= \left| \int_0^L \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-i\pi x/L} \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{e^{i\pi x/L} - e^{-i\pi x/L}}{2i} \, dx \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{2}}{2i} + 0 \right|^2 = 1/2$$

2. (a) Normering:

$$\langle\psi|\psi\rangle = |C|^2(1-i,1)\left(\begin{array}{c} 1+i \\ 1 \end{array}\right) = |C|^2(1-i)(1+i)+1 = 3|C|^2 = 1$$

Tag därför $C = 1/\sqrt{3}$

(b) Väntevärden:

$$\langle S_x\rangle = \frac{1}{3}(1-i,1)\frac{\hbar}{2}\left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c} 1+i \\ 1 \end{array}\right) = \frac{\hbar}{6}(1-i,1)\left(\begin{array}{c} 1 \\ 1+i \end{array}\right) = \frac{\hbar}{6}(1-i+1+i) = \frac{\hbar}{3}$$

$$\langle S_y\rangle = \frac{1}{3}(1-i,1)\frac{\hbar}{2}\left(\begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c} 1+i \\ 1 \end{array}\right) = \frac{\hbar}{6}(1-i,1)\left(\begin{array}{c} -i \\ -1+i \end{array}\right) = \frac{\hbar}{6}(-1-i-1+i) = -\frac{\hbar}{3}$$

$$\langle S_z\rangle = \frac{1}{3}(1-i,1)\frac{\hbar}{2}\left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c} 1+i \\ 1 \end{array}\right) = \frac{\hbar}{6}(1-i,1)\left(\begin{array}{c} 1+i \\ -1 \end{array}\right) = \frac{\hbar}{6}((1-i)(1+i)-1) = \frac{\hbar}{6}$$

3. Stegoperatorer:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + ip/m\omega) \ \ , \ \ a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - ip/m\omega) \ \ \Rightarrow \ \ x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)$$

Första ordningens korrektion till grundtillståndsenergin ges av

$$E_0^1 = \langle 0|H'|0\rangle = \langle 0|Ax^4|0\rangle = A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle 0|(a^\dagger + a)^4|0\rangle$$

De enda termerna i expansionen av $(a^\dagger + a)^4$ som ger nollskilt resultat är

$$\langle 0|aa^\dagger aa^\dagger|0\rangle + \langle 0|aaa^\dagger a^\dagger|0\rangle = \langle 0|aa^\dagger a|1\rangle + \langle 0|aaa^\dagger|1\rangle$$

$$= \langle 0|aa^\dagger|0\rangle + \sqrt{2}\langle 0|aa|2\rangle = \langle 0|a|1\rangle + 2\langle 0|a|1\rangle$$

$$= \langle 0|0\rangle + 2\langle 0|0\rangle = 3$$

Första ordningens korrektion blir därför

$$E_0^1 = 3A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2$$

Alternativt: Mha $[a, a^\dagger] = 1, N = a^\dagger a$ fås

$$aa^\dagger aa^\dagger + aaa^\dagger a^\dagger = aa^\dagger aa^\dagger + a(a^\dagger a + 1)a^\dagger = aa^\dagger(2aa^\dagger + 1)$$

$$= (a^\dagger a + 1)(2(a^\dagger a + 1) + 1) = (N + 1)(2(N + 1) + 1) = 3 + 3N + 2N^2$$

Mha $\langle n|n\rangle = 1, \langle n|N|n\rangle = n, \langle n|N^2|n\rangle = n^2$ blir

$$E_0^1 = A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle 0|3 + 3N + 2N^2|0\rangle = 3A\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2$$

4. Skriv om Hamiltonianen i termer av $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ och L_z^2:

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_3}$$

$$= \frac{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2}{2I_1} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_3} - \frac{1}{I_1}\right) L_z^2$$

$$= \frac{L^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2\tilde{I}}$$

där $1/\tilde{I} = 1/I_3 - 1/I_1$. Eftersom rörelsemängdsmomentegenfunktionerna uppfyller $L^2|lm\rangle = l(l+1)\hbar^2|lm\rangle$ och $L_z^2|lm\rangle = m^2\hbar^2|lm\rangle$ så är $|lm\rangle$ egenfunktioner till H med energiegenvärden

$$E_{lm} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I_1} + \frac{m^2\hbar^2}{2\tilde{I}}$$

där möjliga kvanttal är heltalen $l = 0, 1, 2, ..., m = 0, \pm 1, .., \pm l$.

5. Energiegenvärdena till H_1, H_2 är

$$E_{n_j} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n_j^2}{2mL^2} \quad , \quad n_j = 1, 2, 3, \ldots \quad , \quad j = 1, 2$$

Kopplad bas:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \quad \Rightarrow \quad S^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2}(S^2 - S_1^2 - S_2^2)$$

Hamiltonianen blir

$$H = H_1 + H_2 - \frac{A}{2}(S^2 - S_1^2 - S_2^2)$$

och energiegenvärdena är

$$E_{n_1 n_2 s} = E_{n_1} + E_{n_2} - \frac{A\hbar^2}{2}\left[s(s+1) - 2\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\right] = E_{n_1} + E_{n_2} - \frac{A\hbar^2}{2}\left[s(s+1) - \frac{3}{2}\right]$$

där $S^2|sm_s\rangle = s(s+1)\hbar^2|sm_s\rangle \;\; , \;\; s = 0, 1$

Spinnsinglett: $s = 0, m_s = 0$, som är antisymmetrisk under utbyte, vilket betyder att rumsdelen av tillståndet måste vara symmetrisk under utbyte. Därför måste båda partiklarna vara i potentialbrunnens grundtillstånd $n = 1$ för att minimera totala energin, som blir

$$E_{110} = 2E_1 + \frac{3A\hbar^2}{4} = \frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2} + \frac{3A\hbar^2}{4}$$

Spinntriplett: $s = 1, m_s = 0, \pm 1$, som är symmetrisk under utbyte, och rumsdelen måste därför vara antisymmetrisk. Partiklarna måste därför vara i olika tillstånd till potentialbrunnen, och lägst energi fås med $n = 1, 2$:

$$E_{121} = E_1 + E_2 - \frac{A\hbar^2}{2}\left[1(1+1) - \frac{3}{2}\right] = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} + \frac{\pi^2\hbar^2 2^2}{2mL^2} - \frac{A\hbar^2}{4} = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2mL^2} - \frac{A\hbar^2}{4}$$

De två energierna är lika för $A = A_c$ som ges av

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2} + \frac{3A_c\hbar^2}{4} = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2mL^2} - \frac{A_c\hbar^2}{4} \quad \Rightarrow \quad A_c = \frac{3\pi^2}{2mL^2}$$

Slutsats: För $A < A_c$ är grundtillståndet en spinnsinglett med grundtillståndsenergi $\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2} + \frac{3A\hbar^2}{4}$, och för $A > A_c$ är grundtillståndet en trefalt degenererad spinntriplett med energi $\frac{5\pi^2\hbar^2}{2mL^2} - \frac{A\hbar^2}{4}$.