

TIF101 Tillämpad kvantfysik

Datum: 11e januari 2023
Tid: 8.30 – 12.30
Examinator: Anders Hellman, telefon: 031-7725611
Hjälpmedel: Physics Handbook, Beta Mathematics Handbook, Chalmersgodkänd miniräknare.
Betygsgränser : Betyg 3: 17 p, betyg 4: 25 p, betyg 5: 37 p (inkluderat poäng från inlämningsuppgifter).
Tentamen maximalt 24 p.

1. Sannolikheter och väntevärden (4 poäng)

Antag att elektronen i en väteatom beskrivs av superpositionen

$$|\psi\rangle = A \left[\sqrt{2} |\psi_{100}\rangle - i\sqrt{3} |\psi_{211}\rangle + \sqrt{2} |\psi_{210}\rangle + 3i |\psi_{21(-1)}\rangle \right],$$

där egentillstånden betecknas $|\psi_{n\ell m}\rangle$ och A är en normaliseringskonstant. Bestäm A och beräkna sedan

- Sannolikheten att mäta ett tillstånd med $\ell = 1$.
- Väntevärdet för \hat{L}_z . Behåll \hbar i svaret.
- Väntevärdet för \hat{L}^2 . Behåll \hbar i svaret.

Joniseringsenergin för väte är $E_n = -\frac{E_H}{2} \frac{1}{n^2}$ där E_H är Hartree-energin.

- Bestäm väntevärdet för den uppmätta energin i eV.

2. Två svagt kopplade kvantbitar (spinn-1/2) (4 poäng)

Utgå från Hamiltonianerna för två okopplade kvantbitar,

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar\omega_1}{2} \sigma_z \otimes \mathbf{1} \text{ och } \hat{H}_2 = -\frac{\hbar\omega_2}{2} \mathbf{1} \otimes \sigma_z,$$

där $\hbar\omega_1$ och $\hbar\omega_2$ är energiskillnaden mellan de två tillstånden i kvantbit 1 respektive 2, σ_z är Pauli sigma-z-matris samt $\mathbf{1}$ är den tvådimensionella enhetsmatrisen.

- Vilka är de fyra egentillstånden till Hamiltonian $\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ och vilka är egenenergierna? (1 p)
- Vi kopplar dem nu svagt genom störningshamiltonianen

$$\hat{H}' = g(\sigma_+ \otimes \sigma_- + \sigma_- \otimes \sigma_+),$$

där operatorerna

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ och } \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

exciterar respektive relaxerar kvantbiten och g är kopplingsstyrkan. Denna koppling flyttar alltså en excitation mellan kvantbit 1 och 2.

Räkna ut första ordningens korrektion till egenenergierna. (1 p)

- Räkna ut andra ordningens korrektion till egenenergierna. (2 p)

3. Elektronstruktur för atomer (4 poäng)

- a) Motivera och redovisa alla Russell-Saunders termer ($^{2S+1}L_J$) för elektronsystemet $npn'd$. Notera att huvudkvanttalet n och n' inte är samma. (3 poäng)
- b) Vilken av ovanstående termer identifierar grundtillståndet? (1 poäng)

4. Rotationsspektra (4 poäng)

Under ett experiment uppmäts avståndet mellan de lägsta rotationsnivåerna för ^{12}CO till 3.84235 cm^{-1} och för ^{13}CO till 3.67337 cm^{-1} . Givet att massorna för ^{12}C och O är 12.0000 u respektive 15.9994 u , beräkna massan för ^{13}C . (4 p)

5. Hückelmetoden (4 poäng)

Lös Hückelekvationen för linjär och ringformig H_3 (antag $\alpha = 0, \beta = -1$). Rita energinivådiagrammet och bestäm bindningsenergierna (i Hückel enheter) för båda molekylerna. (4 p)

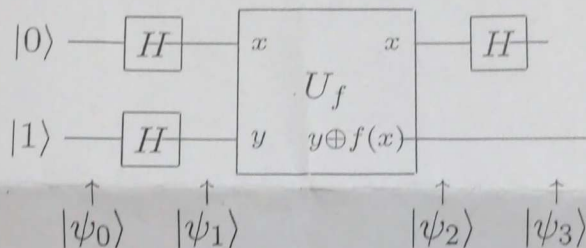
6. Deutsch algoritm (4 poäng)

Kretsen nedan beskriver Deutsch algoritm.

Vad är det för problem som löses med denna algoritm? (1 p)

Analysera algoritmen genom att skriva ner de fyra registertillstånden $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ och $|\psi_3\rangle$ (2 p).

Vad är det för mätning som skall utföras på $|\psi_3\rangle$ för att få ut svaret? (1 p)



Figur 1: Deutsch algoritm.

①

Lösungsversuch uppgift 1.

$$|\psi\rangle = A \left[\sqrt{2} |\psi_{100}\rangle - i\sqrt{3} |\psi_{211}\rangle + \sqrt{2} |\psi_{210}\rangle + 3i |\psi_{21(-1)}\rangle \right]$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = |A|^2 [2 + 3 + 2 + 9] = 16|A|^2 \Rightarrow A = \frac{1}{4}$$

$$A = \frac{1}{4}$$

$$a) P_{100} = \frac{2}{16} = \frac{1}{8}$$

$$P_{211} = \frac{3}{16}$$

$$P_{210} = \frac{2}{16} = \frac{1}{8}$$

$$P_{21(-1)} = \frac{9}{16}$$

$$P_{l=1} = P_{211} + P_{210} + P_{21(-1)} = \frac{14}{16} = \frac{7}{8}$$

$$\begin{aligned} b) \langle\psi|\hat{L}_z|\psi\rangle &= \hbar (0 \cdot P_{100} + 1 \cdot P_{211} + 0 \cdot P_{210} - 1 \cdot P_{21(-1)}) = \\ &= \hbar \left(0 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot \frac{3}{16} + 0 \cdot \frac{1}{8} - 1 \cdot \frac{9}{16} \right) = \\ &= -\hbar \cdot \frac{6}{16} = -\hbar \frac{3}{8} = \underline{\underline{-\frac{3}{8}\hbar}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 c) \quad \langle \psi | \hat{L}^2 | \psi \rangle &= \hbar^2 \left[0 \cdot P_{100} + 1 \cdot (1+1) \cdot (P_{211} + P_{210} + P_{21(-1)}) \right] = \\
 &= 2\hbar^2 \left(\frac{3+2+9}{16} \right) = \frac{28}{16} \hbar^2 = \underline{\underline{\frac{7}{4} \hbar^2}}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 d) \quad \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= P_{100} \cdot E_1 + (P_{211} + P_{210} + P_{21(-1)}) \cdot E_2 = \\
 &= -\frac{E_H}{2} \left(\frac{1}{1} \cdot \frac{1}{8} + \frac{1}{4} \cdot \frac{7}{8} \right) = \\
 &= -\frac{E_H}{2} \cdot \frac{1}{8} \left(1 + \frac{7}{4} \right) = -\frac{E_H}{2} \cdot \frac{11}{32} = -E_H \frac{11}{64} = \\
 &\approx -27,2114 \cdot \frac{11}{64} \text{ eV} \approx \underline{\underline{-4,68 \text{ eV}}}
 \end{aligned}$$

2. Två svagt kopplade kvantbitar

Givet Hamiltonianerna $H_1 = -\frac{\hbar\omega_1}{2}\sigma_z \otimes I$ och $H_2 = -\frac{\hbar\omega_2}{2}I \otimes \sigma_z$

där $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ är Pauli-z matrisen.

a) För att beräkna $H_0 = H_1 + H_2$ behöver vi tensorprodukterna:

$$\sigma_z \otimes I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$I \otimes \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Därmed är H_0 diagonal (förenklad notation utan 0-element)

$$H_0 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -(\omega_1 + \omega_2) & & & \\ & \omega_2 - \omega_1 & & \\ & & \omega_1 - \omega_2 & \\ & & & \omega_1 + \omega_2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Eftersom H_0 är diagonal ges egen tillstånden och egenenergierna direkt av

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$E_{00}^{(0)} = -\frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2) \quad E_{01}^{(0)} = \frac{\hbar}{2}(\omega_2 - \omega_1) \quad E_{10}^{(0)} = \frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2) \quad E_{11}^{(0)} = \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2)$$

b) Introducera störningshamiltonian $H' = g(\sigma_+ \otimes \sigma_- + \sigma_- \otimes \sigma_+)$,
där

$$\sigma_+ \otimes \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ och } \sigma_- \otimes \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\Rightarrow H' = g \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Störningsräkning ges första ordningens korrektion

$$E_n^{(1)} = \langle n | H' | n \rangle, \text{ där } n = 00, 01, 10 \text{ och } 11.$$

Notera, eftersom H' ej har diagonala element i (2) gäller

$$H' | n' \rangle = \lambda | n' \rangle, \quad n' \neq n \text{ för något } \lambda \in \mathbb{R}.$$

$$\Rightarrow E_n^{(1)} = 0 \text{ ity ortogonalitet } \langle n | n' \rangle = 0 \text{ för } n' \neq n.$$

c) Andra ordningens korrektion ges av

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | H' | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (3)$$

Vi noterar från (2) att H' enbart har nollskild verkan på

$$H' | 01 \rangle = g | 10 \rangle \text{ och } H' | 10 \rangle = g | 01 \rangle.$$

Ekv. (3) medför därför

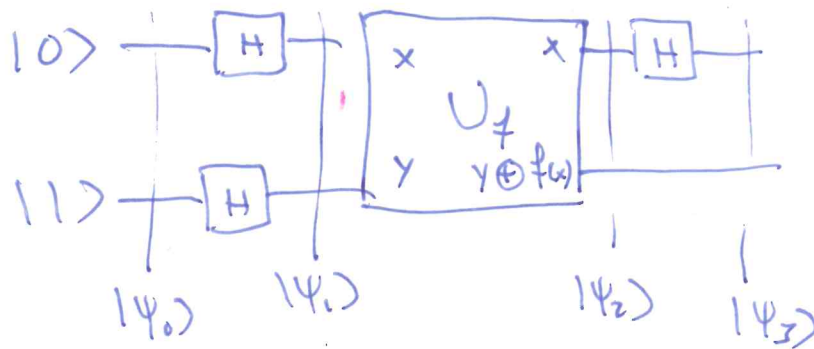
$$E_{00}^{(2)} = 0, \quad E_{01}^{(2)} = \frac{|\langle 10 | g | 01 \rangle|^2}{\hbar(\omega_2 - \omega_1)} = \frac{g^2}{\hbar(\omega_2 - \omega_1)}, \quad E_{10}^{(2)} = \frac{|\langle 01 | g | 10 \rangle|^2}{\hbar(\omega_1 - \omega_2)} = \frac{g^2}{\hbar(\omega_1 - \omega_2)},$$

$$E_{11}^{(2)} = 0$$

Lösningsskiss uppgif ⑤

①

→ Kretsen avgör om funktionen $f(x)$ är konstant [$f(0)=f(1)$] eller balanserad [$f(0) \neq f(1)$]. $f(x)$ är en klassisk funktion från 1-bit till 1-bit.



→ $|\psi_0\rangle = |0\rangle|1\rangle$

→ $|\psi_1\rangle = \left(\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \left(\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}\right) = \frac{1}{2} [|0\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle - |1\rangle|1\rangle]$

Vi använder att $0 \oplus f(x) = f(x)$
 $1 \oplus f(x) = \bar{f}(x)$ där $\bar{1} = 0$
 $\bar{0} = 1$

→ $|\psi_2\rangle = \frac{1}{2} [|0\rangle|f(0)\rangle - |0\rangle|\bar{f}(0)\rangle + |1\rangle|f(1)\rangle - |1\rangle|\bar{f}(1)\rangle]$

Om $f(0)=f(1)=0$ har vi

(2)

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2} [|0\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle - |1\rangle|1\rangle] = \\ &= \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \Rightarrow |\Psi_3\rangle = |0\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \end{aligned}$$

För $f(0)=f(1)=1$ har vi

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2} [|0\rangle|1\rangle - |0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle] = \\ &= - \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \Rightarrow |\Psi_3\rangle = -|0\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \end{aligned}$$

För $f(0)=0$ och $f(1)=1$ har vi

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2} [|0\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle + |1\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle] = \\ &= \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \Rightarrow |\Psi_3\rangle = |1\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \end{aligned}$$

För $f(0)=1$ och $f(1)=0$ har vi

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \frac{1}{2} [|0\rangle|1\rangle - |0\rangle|0\rangle + |1\rangle|0\rangle - |1\rangle|1\rangle] = \\ &= - \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \Rightarrow |\Psi_3\rangle = -|1\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \end{aligned}$$

⑤

I de första två fallen är funktionen konstant och den första kvantbiten är i tillståndet $|0\rangle$

I de två sista fallen är f.ex) balanserad och den första kvantbiten i tillståndet $|1\rangle$.

→ Vi får alltså svaret genom att läsa ut den första kvantbiten.

Russel-Saunders termerna för $np\ n'd$

$$\left. \begin{array}{l} L_1 = 1 \\ L_2 = 2 \end{array} \right\} L = |L_1 - L_2| \dots |L_1 + L_2| = 1, 2, 3$$

$$\left. \begin{array}{l} S_1 = 1/2 \\ S_2 = 1/2 \end{array} \right\} S = |S_1 - S_2| \dots |S_1 + S_2| = 0, 1$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} {}^1P_1, {}^1D_2, {}^1F_3 \\ {}^3P_{0,1,2}, {}^3D_{1,2,3}, {}^3F_{2,3,4} \end{array} \right.$$

b) Grundtillståndet ges av Hundts regler

1) Maximalt S

2) Maximalt L

3) minimalt J eftersom skalet är mindre än halvfyllt.

$$\Rightarrow {}^3F_2$$

Från uppgiften vet vi

$$\tilde{\nu}_{J=0 \rightarrow J=1} = 3.84235 \text{ cm}^{-1} \text{ för } {}^{12}\text{CO}$$

$$\tilde{\nu}_{J=0 \rightarrow J=1} = 3.67337 \text{ cm}^{-1} \text{ för } {}^{13}\text{CO}$$

$$\tilde{\nu} = 2B$$

$$\Rightarrow B_{{}^{12}\text{CO}} \approx 1.921175 \text{ cm}^{-1}$$

$$B_{{}^{13}\text{CO}} \approx 1.836685 \text{ cm}^{-1}$$

$$B = \frac{h}{8\pi c \mu r^2}$$

$$\mu = \frac{m_c \cdot m_o}{m_c + m_o}$$

$$\Rightarrow \frac{B_{{}^{12}\text{CO}}}{B_{{}^{13}\text{CO}}} = \frac{1.921175}{1.836685} = \frac{m_{{}^{13}\text{C}} \cdot m_o}{(m_{{}^{13}\text{C}} + m_o)} \cdot \frac{(m_{{}^{12}\text{C}} + m_o)}{m_{{}^{12}\text{C}} \cdot m_o}$$

$$\Rightarrow m_{{}^{13}\text{C}} = \frac{B_{{}^{12}\text{CO}} \cdot m_{{}^{12}\text{C}} \cdot m_o}{B_{{}^{13}\text{CO}} m_{{}^{12}\text{C}} + B_{{}^{12}\text{CO}} \cdot m_o - B_{{}^{12}\text{CO}} \cdot m_{{}^{12}\text{C}}} = 13.0006 \text{ u}$$

Hückelmetoden för H_3 ($\alpha=0$ $\beta=-1$)

Anta linjär konfiguration $H-H-H$

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} -\epsilon & -1 & 0 \\ -1 & -\epsilon & -1 \\ 0 & -1 & -\epsilon \end{vmatrix} = -\epsilon \begin{vmatrix} -\epsilon & -1 \\ -1 & -\epsilon \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} -1 & -1 \\ 0 & -\epsilon \end{vmatrix} =$$

$$= -\epsilon(\epsilon^2 - 1) + \epsilon = -\epsilon^3 + 2\epsilon =$$

$$= -\epsilon(\epsilon^2 + 2) = -\epsilon(\epsilon - \sqrt{2})(\epsilon + \sqrt{2})$$

$$\Rightarrow \epsilon = \begin{cases} \sqrt{2} \\ 0 \\ -\sqrt{2} \end{cases} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \uparrow \\ \uparrow \downarrow \end{array} \begin{array}{c} - \\ 0 \\ -\sqrt{2} \end{array}$$

$$E_{TOT} = -2 \cdot \sqrt{2} \text{ hü}$$

Anta cyklisk konfiguration $\begin{array}{c} H-H \\ \backslash / \\ H \end{array}$

$$\Rightarrow \begin{vmatrix} -\epsilon & -1 & -1 \\ -1 & -\epsilon & -1 \\ -1 & -1 & -\epsilon \end{vmatrix} = -\epsilon \begin{vmatrix} -\epsilon & -1 \\ -1 & -\epsilon \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} -1 & -1 \\ -1 & -\epsilon \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} -1 & -\epsilon \\ -1 & -1 \end{vmatrix} =$$

$$= -\epsilon(\epsilon^2 - 1) + \epsilon - 1 - 1 + \epsilon = -\epsilon^3 + 3\epsilon - 2 =$$

$$= (\epsilon - 1)(\epsilon - 1)(\epsilon + 2)$$

$$\Rightarrow \epsilon = \begin{cases} 1, 1 \\ -2 \end{cases} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \uparrow \\ \uparrow \downarrow \end{array} \begin{array}{c} - \\ - \\ -2 \end{array}$$

$$E_{TOT} = -3 \text{ hü}$$