Kvantfysik

Tentamen Januari 2024

Kurs: TIF395
Tid: 2024/01/05, 0830 – 1230
Ansvarig: Tom Blackburn
Tillåtna hjälpmedel: Physics Handbook, miniräknare, bifogade formelblad
Totalt antal frågor: 7
Total poäng: 50
Betygsgränser: Minst 20 $\Rightarrow$ 3 / minst 30 $\Rightarrow$ 4 / minst 40 $\Rightarrow$ 5

Instruktioner:
Varje fråga består av 10 poäng. Svara på så många som du vill. De bästa fem kommer att räknas.

1. (a) (2 poäng) Hermitska operatorer används hela tiden inom kvantfysik. Vad har deras egenvärden och egentillstånd för fysikalisk betydelse?

   (b) (2 poäng) En partikel befinner sig i en superposition av energiegentillstånd, $|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |E_n\rangle$. Vad är konstanterna α_n? Vilket villkor måste uppfyllas så att detta är möjligt?

   (c) (3 poäng) Visa att operatorerna som motsvarar position, $\hat{x}$, och rörelsemängd, $\hat{p}_x$, inte kommuterar. Vad innebär detta resultat, både matematiskt och i termer av kunskap man kan ha om ett kvantsystem?

   (d) (1 poäng) Vad är vågfunktionen i positionsbasen, $\psi(x)$, av en partikel med bestämd rörelsemängd $p = p_0$?

   (e) (2 poäng) Din kollega Dr Knowitall påstår att ett *väntevärde* är vad man får om man mäter ett kvantsystem väldigt många gånger och beräknar genomsnittet av alla utfall. Har han rätt eller inte? Förklara ditt svar.

2. En partikel med massa m är bunden i en brunn med kvadratisk potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$. Tillståndet vid $t = 0$ är

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

   där $|n\rangle$ är egentillståndet som motsvarar energinivån E_n.

   (a) (1 poäng) Vad är energiväntevärdet $\langle E\rangle$?

   (b) (4 poäng) Bestäm positionens väntevärde $\langle x\rangle$ som funktion av tid.

   (c) (2 poäng) Vad hade *klassisk* fysik förutsagt om svängningens amplitud och frekvens? Anta att partikelns energi ges av $\langle E\rangle$, resultatet av ditt svar i (a). Överenstämmer de med ditt svar i (b)?

   (d) (3 poäng) Bestäm rörelsemängdens väntevärde $\langle p\rangle$ som funktion av tid och visa att det uppfyller *Ehrenfests teorem*:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m}. \tag{2}$$

FORTSÄTTER PÅ NÄSTA SIDA

3. En spinn-$\frac{1}{2}$ partikel förbereds så att dess tillstånd är

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|\downarrow\rangle\,, \tag{3}$$

där (t ex) $|\uparrow\rangle$ betyder att partikeln är spinn-upp med avseende på z-axeln.

Vad är de möjliga utfallen och de motsvarande sannolikheterna om:

(a) (4 poäng) ... vi direkt mäter x-komponenten av spinnet, S_x?

(b) (4 poäng) ... vi först mäter z-komponenten S_z och *sedan* S_x?

(c) (2 poäng) Förklara varför dina svar i (a) och (b) inte överenstämmer med varandra.

4. Ett svagt elektriskt fält E_0 tillämpas på en laddad partikel som befinner sig i en låda med bredd a. Hamiltonianen i positionsbasen är då:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + qE_0 x + \begin{cases} 0 & |x| < a/2 \\ \infty & |x| > a/2 \end{cases}. \tag{4}$$

(a) (2 poäng) Visa att första ordningens korrigering till energin, $E_n^{(1)}$, är noll för alla energinivåer. Förklara ditt svar fysikaliskt.

(b) (6 poäng) Det störda grundtillståndet kan uppskattas med första ordningens störningsteori. Det går att visa att:

$$|\psi_g\rangle = |1\rangle + \alpha_2\,|2\rangle + \alpha_3\,|3\rangle + \cdots \tag{5}$$

där $|n\rangle$ är energiegentillståndet som motsvarar $E_n = \hbar^2\pi^2 n^2/(2ma^2)$. Bestäm konstanterna α_2 och α_3.

(c) (2 poäng) Skissa vågfunktionen som motsvarar det störda grundtillståndet och förklara det du finner.

FORTSÄTTER PÅ NÄSTA SIDA

5. Tillståndet som beskriver två sammanflätade partiklar, en med $s = 1$ och en annan med $s = \frac{1}{2}$, är

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{3}\,|1,0\rangle \otimes |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \frac{2\sqrt{2}}{3}\,|1,1\rangle \otimes |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\,, \tag{6}$$

där $|s, m_s\rangle$ är ett spinntillstånd med kvanttal s, m_s.

(a) (1 poäng) Förklara vad det betyder att partiklarna är "sammanflätade".

(b) (2 poäng) Vad är sannolikheten att en mätning ska ge att partikeln med $s = \frac{1}{2}$ är spinn-upp? Och i så fall, vad är sannolikheten att den andra partikeln har $S_z = \hbar$?

(c) (5 poäng) Vi bestämmer oss för att mäta spinnbeloppet av det hela systemet. Vad är sannolikheten att vi får som utfall $\left|\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}\right| = \sqrt{3}\,\hbar/2$?

(d) (2 poäng) Mätningen ger faktiskt att $\left|\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}\right| = \sqrt{3}\,\hbar/2$. Bestäm sannolikheten att en följande mätning ska ge att partikeln med $s = \frac{1}{2}$ är spinn-upp.

6. Elektronen i en väteatom är beskriven av följande vågfunktion:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}L^{3/2}}\exp\left(-\frac{r}{L}\right), \tag{7}$$

där L är en godtycklig längd.

Tips: $\int_0^\infty x^n e^{-x}dx = n!$

(a) (2 poäng) Visa att vågfunktionen är normerad.

(b) (5 poäng) Bestäm sannolikheten att en energimätning ger som utfall $E = -\mathcal{R}$, där $\mathcal{R}$ är Rydbergs konstant.

(c) (3 poäng) Skissa sannolikheten som funktion av L. Markera på grafen där sannolikheten är störst, den motsvarande längden L, och förklara det du finner.

FORTSÄTTER PÅ NÄSTA SIDA

7. En endimensionell modell för heliumatomen är:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0}\delta(x_1) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0}\delta(x_2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\delta(x_1 - x_2) \tag{8}$$

där x_1 och x_2 är de två elektronernas positioner.

Har ska du använda variationsmetoden med ansatsvågfunktion

$$\psi(x_1, x_2) = N \exp\left(-\frac{|x_1|}{L}\right) \exp\left(-\frac{|x_2|}{L}\right) \tag{9}$$

där L är en fri parameter.

(a) (6 poäng) Försumma termen i Hamiltonianen som beskriver repulsionen mellan elektronerna. Använd variationsmetoden för att visa att den uppskattade grundenergin är $-8\mathcal{R}$, där $\mathcal{R}$ är Rydbergs konstant. Ange vilken L som motsvarar den här energin.

Tips: Du får använda utan bevis att

$$f(x) = \alpha e^{-\beta|x|} \implies \int_{-\infty}^{\infty} f^\star(x)\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}\,dx = -|\alpha|^2\beta \tag{10}$$

om $\beta > 0$.

(b) (4 poäng) Ta nu hänsyn till repulsionen och uppskatta grundenergin igen. Jämför L med det du fick i (a) och förklara skillnadens ursprung.

END

Formelblad

- **Diracs deltafunktion**:

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

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

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

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle \qquad \hat{a}\, |n\rangle = \sqrt{n}\, |n-1\rangle \tag{3}$$

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

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

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

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

$$\sigma_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

- Hamiltonianen i **sfäriska koordinater**:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(\mathbf{r}), \tag{6}$$

  där

$$\hat{p}_r^2 = \left[-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\right]^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{7}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{8}$$

- **Clebsch-Gordan tabeller**
  Kvadrot antagen för varje koefficient. Minustecken ska stå framför roten.

$s_1 = \frac{1}{2}$		1			
$s_2 = \frac{1}{2}$		1	1	0	
1/2	1/2	1	0	0	
	1/2	−1/2	1/2	1/2	1
	−1/2	1/2	1/2	−1/2	−1
			−1/2	−1/2	1

tabell-förklaring:

		S
		M_S
m_1	m_2	$C^{s_{1,2},S}_{m_{1,2},M}$

$s_1 = 1$		3/2					
$s_2 = \frac{1}{2}$		3/2	3/2	1/2			
1	1/2	1	1/2	1/2			
	1	−1/2	1/3	2/3	3/2	1/2	
	0	1/2	2/3	−1/3	−1/2	−1/2	
			0	−1/2	2/3	1/3	3/2
			−1	1/2	1/3	−2/3	−3/2
					−1	−1/2	1

Kvantfysik

Tentamen Januari 2024

Kurs: TIF395
Tid: 2024/01/05, 0830 – 1230
Ansvarig: Tom Blackburn
Tillåtna hjälpmedel: Physics Handbook, miniräknare, bifogade formelblad
Totalt antal frågor: 7
Total poäng: 50
Betygsgränser: Minst 20 ⇒ 3 / minst 30 ⇒ 4 / minst 40 ⇒ 5

Instruktioner:
Varje fråga består av 10 poäng. Svara på så många som du vill. De bästa fem kommer att räknas.

1. (a) (2 poäng) Hermitska operatorer används hela tiden inom kvantfysik. Vad har deras egenvärden och egentillstånd för fysikalisk betydelse?

Solution: Egenvärdena är de möjliga utfallen av en mätning, t ex 3 J, 2 m osv. Ett egentillstånd är ett tillstånd där systemet har ett bestämt värde av en viss fysiskalisk mängd, eller tillståndet som systemet hamnar i direkt efter mätning.

(b) (2 poäng) En partikel befinner sig i en superposition av energiegentillstånd, $|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |E_n\rangle$. Vad är konstanterna α_n? Vilket villkor måste uppfyllas så att detta är möjligt?

Solution: α_n är sannolikhetsamplitudena att en energimätning ger som utfall E_n. Tillståndet måste vara normerat.

(c) (3 poäng) Visa att operatorerna som motsvarar position, $\hat{x}$, och rörelsemängd, $\hat{p}_x$, inte kommuterar. Vad innebär detta resultat, både matematiskt och i termer av kunskap man kan ha om ett kvantsystem?

Solution:

$$
\begin{aligned}
\langle x| [\hat{x}, \hat{p}_x] |\psi\rangle &= \left[x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right] \psi(x) && (1)\\
&= -i\hbar \left[x\psi' - (x\psi)'\right] && (2)\\
&= -i\hbar \left(x\psi' - (\psi + x\psi')\right] && (3)\\
&= i\hbar\psi(x) \neq 0. && (4)
\end{aligned}
$$

Det betyder att position och rörelsemängd inte delar egentillstånd och att det är omöjligt att veta både två exakt och samtidigt.

(d) (1 poäng) Vad är vågfunktionen i positionsbasen, $\psi(x)$, av en partikel med bestämd rörelsemängd $p = p_0$?

Solution: $\psi(x) = \exp(ip_0x/\hbar)/\sqrt{2\pi\hbar}$

(e) (2 poäng) Din kollega Dr Knowitall påstår att ett *väntevärde* är vad man får om man mäter ett kvantsystem väldigt många gånger och beräknar genomsnittet av alla utfall. Har han rätt eller inte? Förklara ditt svar.

Solution: Han har fel. Systemet kollapsar vid mätning så upprepade mätningar ska ge precis samma utfall. (Man måste mäta många olika system som inledningsvis ockuperar identiska tillstånd för att få fram väntevärdet.)

2. En partikel med massa m är bunden i en brunn med kvadratisk potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$. Tillståndet vid $t = 0$ är

$$|\psi; t = 0\rangle = \frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}, \tag{5}$$

där $|n\rangle$ är egentillståndet som motsvarar energinivån E_n.

(a) (1 poäng) Vad är energiväntevärdet $\langle E\rangle$?

Solution: $\langle E\rangle = \frac{1}{2}(\frac{3}{2}\hbar\omega_0) + \frac{1}{2}(\frac{5}{2}\hbar\omega_0) = 2\hbar\omega_0$.

(b) (4 poäng) Bestäm positionens väntevärde $\langle x\rangle$ som funktion av tid.

Solution: Skriv ner det tidsberoende tillståndet med hjälp av wiggle-faktorerna:

$$|\psi; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\exp\left(-\frac{3i\omega_0 t}{2}\right)|1\rangle + \exp\left(-\frac{5i\omega_0 t}{2}\right)|2\rangle\right], \tag{6}$$

tillämpa $\hat{x} = L(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$:

$$\hat{x}\,|\psi; t\rangle = \frac{L}{\sqrt{2}}\left[\exp\left(-\frac{3i\omega_0 t}{2}\right)\left(|0\rangle + \sqrt{2}\,|2\rangle\right) + \exp\left(-\frac{5i\omega_0 t}{2}\right)\left(\sqrt{2}\,|1\rangle + \sqrt{3}\,|3\rangle\right)\right] \tag{7}$$

och bra-a igenom med $\langle\psi; t|$:

$$\langle x\rangle = \frac{L}{2}\left[\sqrt{2}\exp(-i\omega_0 t) + \sqrt{2}\exp(i\omega_0 t)\right] \tag{8}$$

$$= \sqrt{2}L\cos\omega_0 t \tag{9}$$

(c) (2 poäng) Vad hade *klassisk* fysik förutsagt om svängningens amplitud och frekvens? Anta att partikelns energi ges av $\langle E\rangle$, resultatet av ditt svar i (a). Överenstämmer de med ditt svar i (b)?

Solution: Klassisk fysik förutsäger att frekvensen är ω_0, som överenstämmer med kvantfysik. Amplituden är däremot $\frac{1}{2}m\omega_0^2 A^2 = \langle E\rangle = 2\hbar\omega_0 \implies A = 2\sqrt{2}L$ som inte överenstämmer med kvantfysik.

(d) (3 poäng) Bestäm rörelsemängdens väntevärde $\langle p \rangle$ som funktion av tid och visa att det uppfyller *Ehrenfests teorem*:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m}. \tag{10}$$

Solution: Tillämpa $\hat{p} = \hbar/(2iL)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$ till det tidsberonde tillståndet:

$$\hat{p}\,|\psi; t\rangle = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}iL}\left[\exp\left(-\frac{3i\omega_0 t}{2}\right)\left(|0\rangle - \sqrt{2}\,|2\rangle\right) + \exp\left(-\frac{5i\omega_0 t}{2}\right)\left(\sqrt{2}\,|1\rangle - \sqrt{3}\,|3\rangle\right)\right] \tag{11}$$

och bra-a igenom med $\langle \psi; t|$:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{\hbar}{4iL}\left[\sqrt{2}\exp(-i\omega_0 t) - \sqrt{2}\exp(i\omega_0 t)\right] && (12) \\ &= -\frac{\hbar}{\sqrt{2}L}\sin\omega_0 t && (13) \end{aligned}$$

Sedan derivera resultatet i (b):

$$m\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\sqrt{2}L\,\underbrace{m\omega_0}_{\hbar/2L^2}\,\sin\omega_0 t = \langle p \rangle \tag{14}$$

3. En spinn-$\frac{1}{2}$ partikel förbereds så att dess tillstånd är

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|\downarrow\rangle\,, \tag{15}$$

där (t ex) $|\uparrow\rangle$ betyder att partikeln är spinn-upp med avseende på z-axeln.

Vad är de möjliga utfallen och de motsvarande sannolikheterna om:

(a) (4 poäng) ... vi direkt mäter x-komponenten av spinnet, S_x?

Solution: Tillståndet i spinorform är $(\sqrt{2/3}, \sqrt{1/3})^T$. Börja med att diagonalisera spinnoperatorn:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \implies |S_x = \pm\hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Sannolikheterna att vi får $S_x = \pm\hbar/2$ är då:

$$P(S_x = \pm\hbar/2) = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{2/3} \\ \sqrt{1/3} \end{pmatrix}\right|^2 \tag{17}$$

$$= \left|\frac{\sqrt{2} \pm 1}{\sqrt{6}}\right|^2 \tag{18}$$

$$= \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{2}}{3}. \tag{19}$$

(b) (4 poäng) ... vi först mäter z-komponenten S_z och *sedan* S_x?

Solution: Om vi mäter S_z kollapsar tillståndet till $(1, 0)^T$ ($S_z = \hbar/2$) eller $(0, 1)^T$ ($S_z = -\hbar/2$) med sannolikhet $2/3$ respektive $1/3$. I båda fall blir sannolikheterna att sedan få $S_x = \pm\hbar/2$ en halv respektive en halv:

$$P(S_x = \pm\hbar/2 | S_z = \hbar/2) = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right|^2 = \frac{1}{2} \tag{20}$$

$$P(S_x = \pm\hbar/2 | S_z = -\hbar/2) = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right|^2 = \frac{1}{2} \tag{21}$$

(c) (2 poäng) Förklara varför dina svar i (a) och (b) inte överenstämmer med varandra.

Solution: $\hat{S}_x$ och $\hat{S}_z$ kommuterar inte med varandra och darför delar de inte egentillstånd. I så fall stör mellanliggande mätningnar det slutliga resultatet eftersom tillståndet kollapsar två gånger istället för en.

4. Ett svagt elektriskt fält E_0 tillämpas på en laddad partikel som befinner sig i en låda med bredd a. Hamiltonianen i positionsbasen är då:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + qE_0 x + \begin{cases} 0 & |x| < a/2 \\ \infty & |x| > a/2 \end{cases}. \tag{22}$$

(a) (2 poäng) Visa att första ordningens korrigering till energin, $E_n^{(1)}$, är noll för alla energinivåer. Förklara ditt svar fysikaliskt.

Solution:

$$E_n^{(1)} = qE_0 \langle E_n| \hat{x} |E_n\rangle \tag{23}$$

$$= \frac{2}{a} \underbrace{\int_{-a/2}^{a/2}}_{\text{jämnt intervall}} \underbrace{x}_{\text{udda funktion}} \underbrace{\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}_{\text{jämn funktion}} dx, \quad n = 2, 4, 6, \ldots \tag{24}$$

$$= 0 \tag{25}$$

och samma gäller $\cos(n\pi x/a)$ ($n = 1, 3, 5, \ldots$). Vågfunktionen är symmetrisk omkring $x = 0$ så det är lika sannolikt att partikeln ska hittas där energin är högre som där den är lägre.

(b) (6 poäng) Det störda grundtillståndet kan uppskattas med första ordningens störningsteori. Det går att visa att:

$$|\psi_g\rangle = |1\rangle + \alpha_2 |2\rangle + \alpha_3 |3\rangle + \cdots \tag{26}$$

där $|n\rangle$ är energiegentillståndet som motsvarar $E_n = \hbar^2\pi^2 n^2/(2ma^2)$. Bestäm konstanterna α_2 och α_3.

Solution:

$$\alpha_n = qE_0 \frac{\langle E_k| \hat{x} |E_n\rangle}{E_n - E_k} \tag{27}$$

Börja med energiskillnaderna:

$$E_1 - E_3 = \frac{\hbar^2\pi^2(1^2 - 3^2)}{2ma^2} = -\frac{4\hbar^2\pi^2}{ma^2}, \tag{28}$$

$$E_1 - E_2 = \frac{\hbar^2\pi^2(1^2 - 2^2)}{2ma^2} = -\frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2}. \tag{29}$$

Matriselementerna är (med hjälp av trigonometriska identiter i handboken):

$$\langle E_3|\,\hat{x}\,|E_1\rangle = \frac{2}{a} \underbrace{\int_{-a/2}^{a/2}}_{\text{jämnt intervall}} \underbrace{x}_{\text{udda funktion}} \underbrace{\cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right)}_{\text{jämn funktion}} \underbrace{\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)}_{\text{jämn funktion}} dx \tag{30}$$

$$= 0, \tag{31}$$

$$\langle E_2|\,\hat{x}\,|E_1\rangle = \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2} x \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \tag{32}$$

$$= \frac{4}{a}\int_{-a/2}^{a/2} x \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \tag{33}$$

$$= \frac{4}{a}\left[\cancel{-\frac{a}{3\pi}x\cos^3\left(\frac{\pi x}{a}\right)\Big|_{-a/2}^{a/2}} + \frac{a}{3\pi}\int_{-a/2}^{a/2}\cos^3\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx\right] \tag{34}$$

$$= \frac{1}{3\pi}\int_{-a/2}^{a/2}\cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + 3\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \tag{35}$$

$$= \frac{1}{3\pi}\left[\frac{a}{3\pi}\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \frac{3a}{\pi}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]\Bigg|_{-a/2}^{a/2} \tag{36}$$

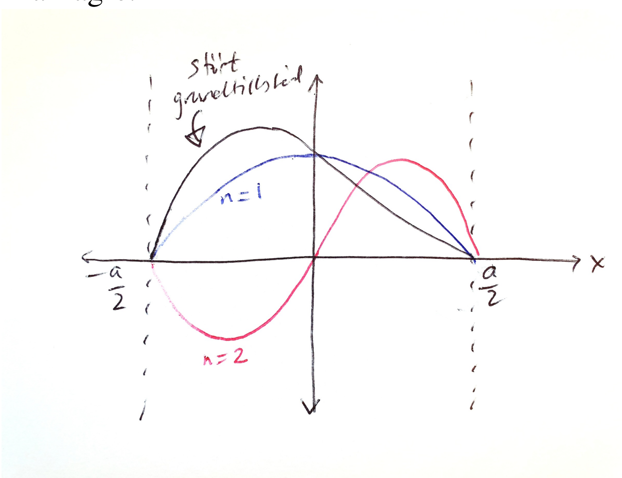
$$= \frac{16a}{(3\pi)^2}. \tag{37}$$

Konstanterna är darför:

$$\alpha_2 = -\frac{4}{9\pi^4}\frac{qE_0ma^3}{\hbar^2}, \qquad \alpha_3 = 0. \tag{38}$$

(c) (2 poäng) Skissa vågfunktionen som motsvarar det störda grundtillståndet och förklara det du finner.

Solution: Störningen gör det är mer sannolikt att partikeln ska hittas i området $x < 0$, där energin är lägre.



5. Tillståndet som beskriver två sammanflätade partiklar, en med $s = 1$ och en annan med $s = \frac{1}{2}$, är

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{3}\,|1,0\rangle \otimes |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \frac{2\sqrt{2}}{3}\,|1,1\rangle \otimes |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\,, \tag{39}$$

där $|s, m_s\rangle$ är ett spinntillstånd med kvanttal s, m_s.

(a) (1 poäng) Förklara vad det betyder att partiklarna är "sammanflätade".

Solution: Det betyder att en mätning av den ena partikeln påverkar sannolikheterna som gäller en mätning av den andra.

(b) (2 poäng) Vad är sannolikheten att en mätning ska ge att partikeln med $s = \frac{1}{2}$ är spinn-upp? Och i så fall, vad är sannolikheten att den andra partikeln har $S_z = \hbar$?

Solution: Bara den första termen bidrar, så sannolikheten är $P = 1/9$. Mätningen kollapsar tillståndet till $|\Psi\rangle = |1,0\rangle \otimes |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$ då är det garanterat att den andra partikeln har $S_z = 0$. Sannolikheten att $S_z = \hbar$ är då noll.

(c) (5 poäng) Vi bestämmer oss för att mäta spinnbeloppet av det hela systemet. Vad är sannolikheten att vi får som utfall $\left|\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}\right| = \sqrt{3}\,\hbar/2$?

Solution: För att spinnbeloppet är $\sqrt{3}\hbar/2$ behövs $S = \frac{1}{2}$ då $S(S+1)\hbar^2 = 3\hbar^2/4$. Använd Clebsch-Gordan tabeller för att skriva om tillståndet termvis:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{3}\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\,|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\,|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\right) + \frac{2\sqrt{2}}{3}\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\,|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\right) \tag{40}$$

$$= \left(-\frac{1}{3\sqrt{3}} + \frac{4}{3\sqrt{3}}\right)|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle + \cdots \tag{41}$$

Sannolikheten är därför $1/3$.

(d) (2 poäng) Mätningen ger faktiskt att $\left|\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}\right| = \sqrt{3}\,\hbar/2$. Bestäm sannolikheten att en följande mätning ska ge att partikeln med $s = \frac{1}{2}$ är spinn-upp.

Solution: Mätningen kollapsar tillståndet till $|\Psi'\rangle = |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$. Använd Clebsch-Gordan tabellerna en till gång för att skriva om tillståndet i termer av enpartikel-spinntillstånd:

$$|\Psi'\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|1,1\rangle \otimes |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\,|1,0\rangle \otimes |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\,. \tag{42}$$

Att partikeln med $s = \frac{1}{2}$ är spinn-upp är givet av den andra termen, så sannolikheten är $1/3$.

6. Elektronen i en väteatom är beskriven av följande vågfunktion:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}L^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{L}\right), \tag{43}$$

där L är en godtycklig längd.

Tips: $\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$

(a) (2 poäng) Visa att vågfunktionen är normerad.

Solution: Normeringsvillkoret är $\iiint |\psi(r,\theta,\varphi)|^2\, d^3\mathbf{r} = 1$. Eftersom vågfunktionen är sfäriskt symmetrisk går det att ersätta $d^3\mathbf{r}$ med $4\pi r^2 dr$:

$$\begin{aligned} 4\pi \int_0^\infty r^2 |\psi(r)|^2\, dr &= \frac{4}{L^3} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/L}\, dr && (44)\\ &= \frac{4}{L^3}\left(\frac{L}{2}\right)^3 \int_0^\infty x^2 e^{-x}\, dx && (45)\\ &= 1. && (46) \end{aligned}$$

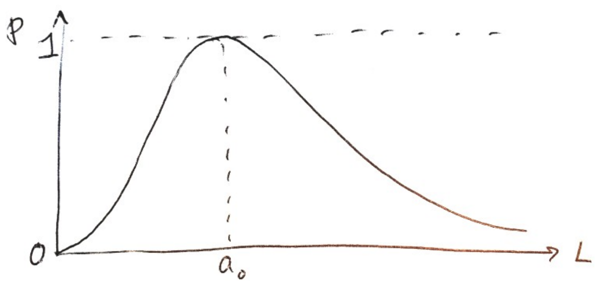
(b) (5 poäng) Bestäm sannolikheten att en energimätning ger som utfall $E = -\mathcal{R}$, där $\mathcal{R}$ är Rydbergs konstant.

Solution: Sannolikhetsamplituden är givet av överlappningen mellan vågfunktionen $\psi(r,\theta,\varphi)$ och egenfunktionen som motsvarar kvanttalen $n = 1, \ell = 1, m_\ell = 0$:

$$\begin{aligned} \alpha &= \iiint [\underbrace{\psi_{1,0,0}(r,\theta,\varphi)}_{R_{1,0}(r)Y_0^0(\theta,\varphi)}]^\star \psi(r,\theta,\varphi)\, d^3\mathbf{r} && (47)\\ &= 2\int_0^\infty r^2 \frac{2e^{-r/a_0}}{a_0^{3/2}} \frac{e^{-r/L}}{L^{3/2}}\, dr && (48)\\ &= \frac{4}{(a_0 L)^{3/2}} \int_0^\infty r^2 \exp\left(-\frac{a_0+L}{a_0 L} r\right) dr && (49)\\ &= \frac{8(a_0 L)^{3/2}}{(a_0+L)^3}, && (50)\\ \implies P &= \frac{(4a_0 L)^3}{(a_0+L)^6}. && (51) \end{aligned}$$

(c) (3 poäng) Skissa sannolikheten som funktion av L. Markera på grafen där sannolikheten är störst, den motsvarande längden L, och förklara det du finner.

Solution: $P \propto L^3$ om $L \to 0$ och $P \propto L^{-3} \to 0$ om $L \to \infty$. Sannolikheten är störst om $L = a_0$, där $P = 1$, eftersom vågfunktionen matchar egenfunktionen med $n = 1$.



7. En endimensionell modell för heliumatomen är:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0}\delta(x_1) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0}\delta(x_2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\delta(x_1 - x_2) \tag{52}$$

där x_1 och x_2 är de två elektronernas positioner.

Har ska du använda variationsmetoden med ansatsvågfunktion

$$\psi(x_1, x_2) = N \exp\left(-\frac{|x_1|}{L}\right) \exp\left(-\frac{|x_2|}{L}\right) \tag{53}$$

där L är en fri parameter.

(a) (6 poäng) Försumma termen i Hamiltonianen som beskriver repulsionen mellan elektronerna. Använd variationsmetoden för att visa att den uppskattade grundenergin är $-8\mathcal{R}$, där $\mathcal{R}$ är Rydbergs konstant. Ange vilken L som motsvarar den här energin.

Tips: Du får använda utan bevis att

$$f(x) = \alpha e^{-\beta|x|} \implies \int_{-\infty}^{\infty} f^\star(x) \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}\, dx = -|\alpha|^2\beta \tag{54}$$

om $\beta > 0$.

Solution: Låt termerna i eq. (52) vara T_1, V_1, T_2, V_2 och V_{ee}. Sista termen är repulsionen som vi försummar (till att börja med).

$$\begin{aligned}
\langle T_1 \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \iint \psi(x_1, x_2) \frac{\partial^2 \psi(x_1, x_2)}{\partial x_1^2}\, dx_1 dx_2 && (55)\\
&= -\frac{\hbar^2 N^2}{2m} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{2|x_2|}{L}\right) dx_2}_{L} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-|x_1|/L} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} e^{-|x_1|/L}\, dx_1}_{-1/L \text{ från tipsen}} && (56)\\
&= \frac{\hbar^2 N^2}{2m} && (57)\\
\langle V_1 \rangle &= -\frac{e^2}{2\pi\epsilon_0} \iint |\psi(x_1, x_2)|^2 \delta(x_1) dx_1 dx_2 && (58)\\
&= -\frac{e^2 N^2}{2\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2|x_2|/L}\, dx_2 && (59)\\
&= -\frac{e^2 N^2 L}{2\pi\epsilon_0} && (60)
\end{aligned}$$

Normeringskonstanten följer från att $\iint |\psi(x_1, x_2)|^2 dx_1 dx_2 = 1 \implies N = 1/L$. Vi har till och med att $\langle V_2 \rangle = \langle V_1 \rangle$ och $\langle T_2 \rangle = \langle T_1 \rangle$ så

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{mL^2} - \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 L}. \tag{61}$$

Minimumet näs vid

$$\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial L} = -\frac{2\hbar^2}{mL^3} + \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 L^2} = 0 \tag{62}$$

$$\implies L = \frac{2\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = \frac{a_0}{2}. \tag{63}$$

$$\langle H\rangle|_{L=a_0/2} = \frac{4\hbar^2}{ma_0^2} - \frac{4\hbar^2}{ma_0}\frac{2}{a_0} = -8\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = -8\mathcal{R}. \tag{64}$$

(b) (4 poäng) Ta nu hänsyn till repulsionen och uppskatta grundenergin igen. Jämför L med det du fick i (a) och förklara skillnadens ursprung.

Solution: Det kvarstår att bestämma

$$\langle V_{ee}\rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\iint |\psi(x_1,x_2)|^2\delta(x_1-x_2)\,dx_1dx_2 \tag{65}$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x_1,x_1)|^2\,dx_1 \tag{66}$$

$$= \frac{e^2N^2}{4\pi\epsilon_0}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-4|x_1|/L}\,dx_1}_{L/2} \tag{67}$$

$$= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 L}, \tag{68}$$

$$\implies \langle H\rangle = \frac{\hbar^2}{mL^2} - \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 L} + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 L}. \tag{69}$$

Minimumet näs nu vid

$$\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial L} = -\frac{2\hbar^2}{mL^3} + \frac{7e^2}{8\pi\epsilon_0 L^2} = 0 \tag{70}$$

$$\implies L = \frac{8}{7}\times\frac{a_0}{2}. \tag{71}$$

Att L är större när vi tar hänsyn till repulsionen är rimligt då elektronerna borde "undvika" varandra mer och detta uppnås om vågfunktionen blir mer utspridd. Den motsvarande grundenergin är

$$\langle H\rangle|_{L=4a_0/7} = -\frac{49}{8}\mathcal{R} = -\left(\frac{7}{8}\right)^2 8\mathcal{R}. \tag{72}$$

vilket betyder att atomen är mindre starkt bunden.

Formelblad

- **Diracs deltafunktion**:

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

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

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

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \qquad \hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{3}$$

där $L = \sqrt{\hbar/(2m\omega_0)}$.

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

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

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

$$\sigma_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

- Hamiltonianen i **sfäriska koordinater**:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(\mathbf{r}), \tag{6}$$

där

$$\hat{p}_r^2 = \left[-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\right]^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{7}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{8}$$

- **Clebsch-Gordan tabeller**
  Kvadrot antagen för varje koefficient. Minustecken ska stå framför roten.

$s_1 = \frac{1}{2}$		1			
$s_2 = \frac{1}{2}$		1	1	0	
1/2	1/2	1	0	0	
	1/2	−1/2	1/2	1/2	1
	−1/2	1/2	1/2	−1/2	−1
			−1/2	−1/2	1

tabell-förklaring:

		S
		M_S
m_1	m_2	$C^{s_{1,2},S}_{m_{1,2},M}$

$s_1 = 1$		3/2					
$s_2 = \frac{1}{2}$		3/2	3/2	1/2			
1	1/2	1	1/2	1/2			
	1	−1/2	1/3	2/3	3/2	1/2	
	0	1/2	2/3	−1/3	−1/2	−1/2	
			0	−1/2	2/3	1/3	3/2
			−1	1/2	1/3	−2/3	−3/2
					−1	−1/2	1