IMFUFA tekst

- I, OM OG MED MATEMATIK OG FYSIK

Opgavesamling til *Kvantemekanik*

Eksamensopgaver stillet i perioden

januar 1978 til august 2016

Redigeret af Bo Jakobsen

marts 2017

nr. 495c - 2017 (2. udgave)

Roskilde University
Department of Science and Environment, IMFUFA
P.O. Box 260, DK - 4000 Roskilde
Tel: 4674 2263

Opgavesamling til Kvantemekanik

1. udgave, august 2013, Redigeret af Lyt Baden & Bo Jakobsen
2. udgave, marts 2017, Redigeret af Bo Jakobsen

IMFUFA tekst nr. 495c/ 2017 (2. udgave) – 122 sider – ISSN: 0106-6242

Denne tekst indeholder eksamensopgaver i kvantemekanik stillet i perioden januar 1978 til august 2016.

Tekst nr. 495 består af tre dele:

Nr. 495a: Opgavesamling til Termodynamik og Statistisk mekanik

Nr. 495b: Opgavesamling til Elektrodynamik og Relativitetsteori

Nr. 495c: Opgavesamling til Kvantemekanik

Tilsammen indeholder de opgaverne fra tekst nr. 429/2004, 406/2001 og 25/1980 og erstatter dermed disse.

I en længere periode bestod eksamenssættene til de såkaldte *dybdekurser* af opgaver i flere teoribygninger. I denne tekstserie (495 a–c) er disse opgaver fordelt i de relevante tekster. Ønsker man at studere de originale, samlede eksamenssæt, henvises til tekst nr. 429/2004.

En del af eksamenssættene findes på engelsk, dels fra eksamener, som blev givet på engelsk, og dels fra senere oversættelser.

Indhold

Skriftlig eksamen i fysikuddannelsens modul 2, dybdemodul, torsdag den 12.01.1978.

HJÆLPEMIDLER TILLADT

Opgave 1.

Vi vil betragte finstrukturopspaltningen af det ikke-relativistiske brintatoms 2p niveau.

For at kunne formuliere resten nogenlunde kort, starter vi med et indskud om notation. Vi skal betragte operatorer for totalt impulsmoment, baneimpulsmoment og spin, som benævnes $\vec{J}$, $\vec{L}$ og $\vec{S}$ henholdsvis, og med $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Desuden indfører vi egentilstande, således at

$$J^2 \, |j, m_j\rangle = j(j+1)\,|j, m_j\rangle \,, \qquad J_z \, |j, m_j\rangle = m_j\,|j, m_j\rangle$$

$$L^2 \, |\ell, m\rangle = \ell(\ell+1)\,|\ell, m_\ell\rangle \,, \qquad L_z \, |\ell, m\rangle = m_\ell\,|\ell, m_\ell\rangle$$

$$S^2 \, |s, m_s\rangle = s(s+1)\,|s, m_s\rangle \,, \qquad S_z \, |s, m_s\rangle = m_s\,|s, m_s\rangle$$

Impulsmomenter måles altså i enheder af $\hbar$, og unødvendige indices er undertrykt i egentilstandene.

Den omtalte opspaltning kan beregnes, når man til den sædvanlige (Schrödinger) energioperator for brintatomet (her i mks enheder)

$$H_o = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o r}$$

adderer et såkaldt spin-bane koblingsled

$$H_{SB} = -A\left(\frac{a_o}{r}\right)^3 \vec{L}\cdot\vec{S}$$

således at den totale energioperator bliver

$$H = H_o + H_{SB}$$

Her har $\vec{p}$, m, e og r deres sædvanlige betydning som elektronens impuls (operator), masse, ladning og polær koordinat. Konstanten a_o er Bohr-radius, og den anden konstant A er givet ved Bohr magnetonen og a_o, så at

$$A = 0{,}72 \cdot 10^{-3}\ \text{eV}$$

1) Vis at operatoren $\vec{L} \cdot \vec{S}$ opfylder $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$.

2) Vis ved brug af algebraen for impulsmoment og spin at J_z kommulerer med H_{SB}, men at L_z og S_z ikke gør det.

De stationære tilstande til H (inclusive H_{SB}) kan da vælges som egentilstande til J^2, J_z, L^2 og S^2.
Vi betragter nu 2p tilstanden i brintatomet, dvs. hovedkvantetal $n = 2$ og $\ell = 1$, og den har naturligvis $s = \frac{1}{2}$. Opspaltningen beregnes ved at finde middelværdien af H_{SB} i det oprindelige brintatoms stationære tilstande, altså 2p egentilstanden til H_o.

3) Udtryk de to tilstande med $j = \frac{3}{2}$ og $j = \frac{1}{2}$, henholdsvis, men hvor begge har $m_j = \frac{1}{2}$, $\ell = 1$ og $s = \frac{1}{2}$ som en linearkombination af egentilstande til L^2, L_z, S^2 og S_z.

4) Beregn middelværdien af H_{SB} i de under 3) nævnte to tilstande (dvs. $\langle j = \frac{3}{2}|H_{SB}|j = \frac{3}{2}\rangle$ og $\langle j = \frac{1}{2}|H_{SB}|j = \frac{1}{2}\rangle$ i lidt løs notation) og udtryk forskellen mellem de to middelværdier (opspaltningen) som et matrixelement af $\left(\frac{a_o}{r}\right)^3$ (vejl. brug resultatet fra 1)).

5) Beregn det relevante matrixelement af $\left(\frac{a_o}{r}\right)^3$ og find opspaltningens størrelse. Hjælp: Den normerede radialfunktion til 2p tilstanden kan skrives $R_{2p}(r) = (24a_o^3)^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{r}{a_o} e^{-\frac{1}{2}\frac{r}{a_o}}$, når den er normeret til $\int_0^\infty r^2 |R_{2p}(r)|^2 dr = 1$

ogave 2.

i betragter en planbølgeløsning til den frie Dirac ligning

$$\psi(\vec{x},t) = u(p)\ e^{-\frac{i}{\hbar}p_\mu x^\mu}$$

Dvs. at Dirac spinoren

$$u(p) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

med 4 komponenter opfylder

$$(p_\mu \gamma^\mu - mc)\ u(p) = 0$$

Her er p en firevektor der opfylder $p^2 = p_\mu p^\mu = (mc)^2$, og summation over dobbelt forekommende indices er underforstået.

Vi skal interessere os for tilfældet $\underline{m = 0}$, og altså bruge

$$p_\mu \gamma^\mu\ u(p) = 0 \qquad \text{(I)}$$

1) Vis at $\frac{1}{2}(1 + i\gamma_5)$ og $\frac{1}{2}(1 - i\gamma_5)$ er projektionsoperatorer.

2) Vis at når m = 0 opfylder

$$u_+(p) = \frac{1}{2}(1 + i\gamma_5)u(p) \text{ og } u_-(p) = \frac{1}{2}(1 - i\gamma_5)u(p)$$

den samme ligning som u(p), nemlig (I).

3) Vis at $u_+(p)$ og $u_-(p)$ (defineret i 2)) hver kun indeholder to uafhængige komponenter, dvs. een to-komponent Pauli-spinor.

Notationen i ovenstående følger Messiah, men her er et par af de vigtige regler:

Antikommutatorer: $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2 g_{\mu\nu}$

$$g_{oo} = 1 \ , \ g_{ij} = -\delta_{ij} \text{ for } i,j = 1,2,3$$

$$\gamma_5 = \gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3 = -i\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\{\gamma_5, \gamma_\mu\} = 0 \quad , \quad \gamma_5^2 = -1$$

Opgave 2.

Vi betragter en 2-dimensional, isotrop harmonisk oscillator, dvs. en partikel med

$$E_p(r) = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2).$$

1. Opskriv Schrödingerligningen (energi-egenværdiligningen) i cartesiske koordinater (dvs. (x,y)). Find desuden den almindelige løsning hertil, dvs. egenfunktionerne $\psi = \psi(x,y)$ samt energi-egenværdierne, på grundlag af viden om den en-dimensionale oscillator.

2. Diskuter egenfunktionernes paritetsforhold.

3. Angiv udartningsgraden for de første 5 tilstande og find et udtryk for udartningsgraden for den m'te tilstand.

4. Find $\langle r \rangle_o$, dvs. middelværdien af r i grundtilstanden.

Lad nu partiklen befinde sig i en tilstand, der ikke er en egentilstand til energien, nemlig i

$$\psi(x,y) = \frac{a}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{1}{2}a^2(x-\xi)^2} e^{-\frac{1}{2}a^2(y-\eta)^2}$$

hvor (ξ,η) er et fast punkt i (x,y) planen.

5. Find sandsynligheden for, at man ved måling af energien i denne tilstand får resultatet $E = \hbar\omega$.

6. Vil sandsynligheden for at få $E = \hbar\omega$ ved måling af energien (jf. spm. 5) afhænge af tiden? (Dvs.: Hvis man havde målt E til et senere tidspunkt, t>o, ville man så have fået en anden sandsynlighed?)

   Begrund svaret.

Skriftlig eksamen i dybdemodulet (relativitetsteori og kvantemekanik)
torsdag, den 10. januar 1985 kl. $10^{\underline{00}}$ - $14^{\underline{00}}$.

Brug af alle sædvanlige hjælpemidler er tilladt.

Opgave 1.

En partikel med masse m bevæger sig i et én-dimensionalt harmonisk oscillatorpotential

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

a) Partiklen antages at befinde sig i grundtilstanden. Anfør energien og bølgefunktionen for grundtilstanden.

Pludselig til tiden t=o ændres potentialet til

$$V'(x) = m\omega^2 x^2$$

b) Sandsynligheden for, at partiklen befinder sig i grundtilstanden for det nye harmoniske potential V'(x), kaldes P_o. Beregn værdien af P_o umiddelbart efter t=o.

c) Ændrer sandsynligheden P_o sig, når tiden går? Begrund svaret.

d) Find tilsvarende sandsynligheden P_1 for at finde partiklen i den første anslåede tilstand af V'(x) umiddelbart efter t=o.

e) Vis, at middelværdien af energien, <E>, umiddelbart efter t=o er $\frac{3}{4}\hbar\omega$.

f) Angiv værdien af <E> før t=o og giv en forklaring på, at middelenergien ændrer sig ved t=o.

— o —

(opgavesættet fortsætter)

Opgave 2.

Den normerede bølgefunktion ψ for en partikel i et centralfelt er til en vis tid (t=o) givet i polære koordinater ved

$$\psi(r,\theta,\varphi,o) = f(r) \cdot N \cdot (1 + 3\cos\theta)$$

Den radiale bølgefunktion f opfylder

$$\int_0^\infty |f|^2 r^2 dr = 1$$

Partiklens baneimpulsmoment kaldes $\vec{L}$.

a) Bestem normeringskonstanten N for bølgefunktionens vinkeldel.

b) Angiv de mulige resultater ved en måling af henholdsvis $\vec{L}^2$, L_x, L_y og L_z.

c) Find middelværdien $\langle\vec{L}^2\rangle$ samt sandsynligheden for at observere hver af de mulige resultater af en måling af $\vec{L}^2$.

Der foretages nu en måling af $\vec{L}^2$. Resultatet blev den højeste af de mulige værdier.

d) Opskriv bølgefunktionen, der beskriver partiklen efter denne måling.

(opgavesættet slut)

Opgave 2

(spørgsmål 5 kan besvares uafhængigt af de foregående)

Opgaven betragter en punktpartikel med massen m, der bevæger sig i det én-dimensionale potential V(x) givet ved

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(4\beta - x^2 + \frac{1}{16\beta} x^4\right), \quad \text{hvor } \beta = \frac{\hbar}{m\omega}$$

2.1. Vis at med indførelsen af den ny variable $z = x/\sqrt{\beta}$ kan potentialet skrives som $V(x) = \frac{1}{2} \hbar\omega\, P(z)$ med

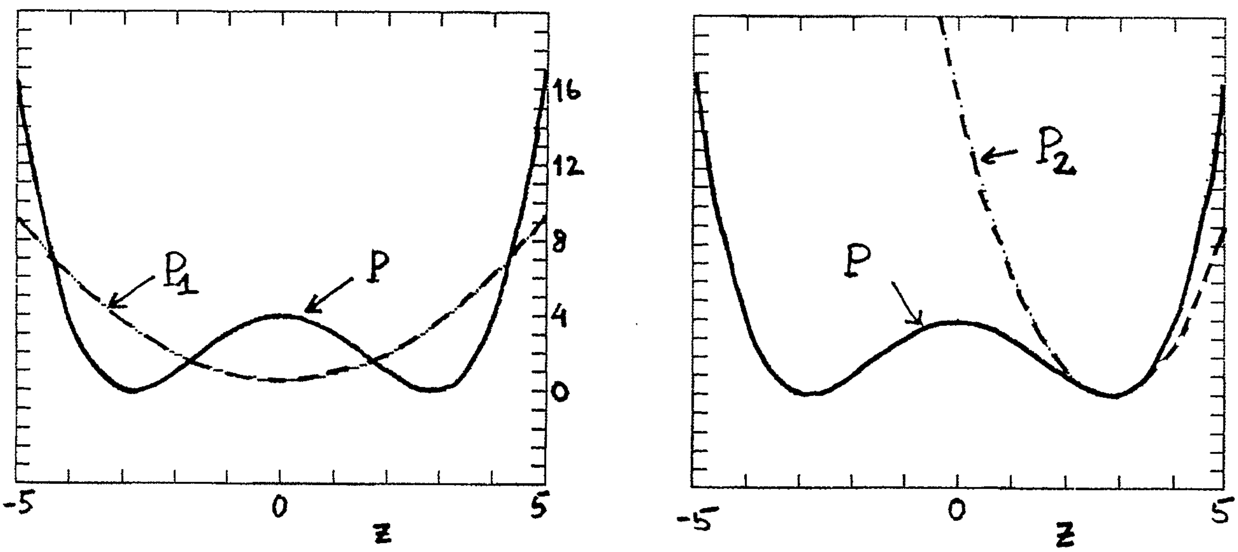
$$P(z) = 4 - z^2 + z^4/16.$$

De stationære tilstande kan nu findes ved perturbationsregning udfra løsningerne for et harmonisk oscillator potential $V_i(x) = \frac{1}{2} \hbar\omega\, P_i(z)$. Følgende to valg af $P_i(z)$ betragtes:

$$P_1(z) = 0.59 + 0.35\, z^2$$

$$P_2(z) = 2\,(z - z_0)^2 \quad \text{hvor } z_0 = \sqrt{8}$$

P og de to tilnærmede potentialer er vist på hosstående figurer. P_1 er den bedste 2. ordens tilnærmelse (fundet ved mindste kvadraters metode) til P i intervallet [-5,5], mens P_2 er en 2. ordens Taylor rækkeudvikling omkring P's positive minimums punkt $z_0 = \sqrt{8}$.



(opgaven fortsætter næste side)

2.2. Opskriv energispektret for de ~~tre~~ to basis hamiltonoperatorer $T+V_i$ og angiv i hvert tilfælde basisfrekvænsen ω_i udtrykt ved ω.

2.3. Idet $T+V_1$ tages som basis-hamiltonoperator og $V-V_1$ som perturbations hamiltonoperator, ønskes energispektret for $H=T+V$ bestemt ved første ordens perturbationsregning (altså uændrede bølgefunktioner. Nyttige integrationsformler er angivet sidst i opgaven).

2.4. Samme spørgsmål ønskes besvaret med V_1 erstattet af V_2. Basis bølgefunktionerne er harmonisk oscillator bølgefunktioner $u_n(x-x_0)$ taget relativt til V_2's minimum for x-værdien $x_0=z_0\sqrt{\beta}=\sqrt{8\beta}$.

2.5. Som kandidater til en forbedret bølgefunktion for grundtilstanden vil det pga. potentialet V's symmetri være naturligt at se på

$$u_\pm(x) = N(u_0(x-x_0) \pm u_0(x+x_0)),$$

hvor $u_0(x\pm x_0) = \sqrt{\alpha/\sqrt{\pi}}\,\exp(-\alpha^2(x\pm\sqrt{8\beta})^2/2)$

med $\alpha=\sqrt{m\omega_2/\hbar} = \sqrt{m\omega\sqrt{2}/\hbar}$

er grundtilstands oscillator bølgefunktioner for henholdsvis V_2 med potential minimum for positiv x_0 og det tilsvarende potentiale med minimum for $-x_0$.

Vis at overlappet $\int u_0^*(x+x_0)u_0(x-x_0)dx$ er forsvindende.

Det kan tilsvarende vises at forventningsværdien af energien i de to tilstande $u_\pm$ praktisk taget er ens.

Følgende integrationsformler gælder for harmonisk oscillator bølgefunktioner $u_n(x)$ svarende til basis frekvensen ω_i:

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\, x^2\, u_n(x)\, dx = \frac{\hbar}{m\omega_i}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\, x^4\, u_n(x)\, dx = \frac{3}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega_i}\right)^2 (2n^2+2n+1)$$

Opgave 4

En partikel med massen m er indespærret i en kugle med radius R (dvs. sandsynligheden for at finde partiklen udenfor denne kugle er nul).

4.1. Opskriv den radiære Schrödinger ligning for partiklen.

4.2. Angiv partiklens (bane-)impulsmoment i grundtilstanden.

4.3. Find energien og den normerede bølgefunktion for partiklen i dens grundtilstand.

Nu udvides kuglen så dens radius fordobles. Udvidelsen antages at ske så hurtigt at partiklens bølgefunktion lige efter udvidelsen forbliver den i spørgsmål 4.3 fundne.

4.4. Find sandsynligheden for at partiklen befinder sig i[1] grundtilstanden for det ny kuglepotential.

4.5. Find bølgefunktionerne for den laveste impulsmoment L =1 og L=2 tilstand i det ny kuglepotential. samt for den næstlaveste L=0 tilstand.

4.6 Find sandsynlighederne for at finde partiklen i hver af de tre i spørgsmål 4.5 nævnte tilstande.

---

[1] $2 \sin \alpha \sin \beta = \cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)$

Juni 87 Kvantemekanik (4)

Opgave 4.

Opgaven handler om heliumatomet (med 2 elektroner). Sigtet er at udregne dets energi i grundtilstanden approksimativt.

1) Nedskriv den fulde hamiltonoperator for de to elektroner omkring heliumkernen.

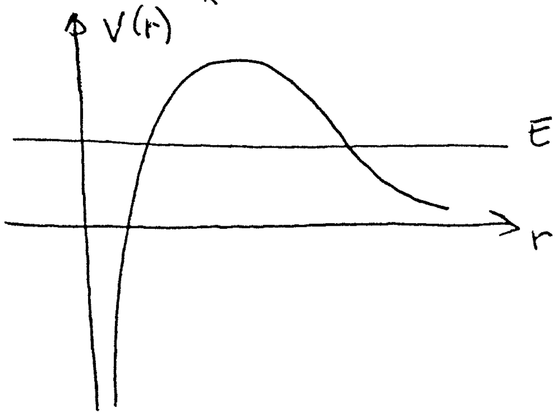
2) Hvad er egenfunktionen og energien i grundtilstanden, idet der ses bort fra elektron-elektron vekselvirkningen. Begrund svaret.

3) Hvilken spin-tilstand har systemet i grundtilstanden. Begrund svaret.

4) Udregn en førsteordens korrelation til grundtilstands-energien ved at tage hensyn til elektron-elektron vekselvirkningen.

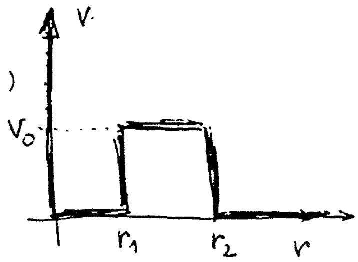
Opgave i kvantemekanik:

Den potentielle energi V(r) af en α-partikel i en atomkerne er resultatet af to bidrag: Et bidrag fra coulomb-kræfterne ($V_c(r)$) og et bidrag fra kernekræfterne ($V_k(r)$), således at $V(r) = V_c(r) + V_k(r)$



Udsendelse af en α-partikel er en typisk kvante-effekt, som fremkommer ved kvantemekanisk tunellering.

Til beskrivelse af α-partikel udsendelsen kan man som approksimation anvende følgende potential:



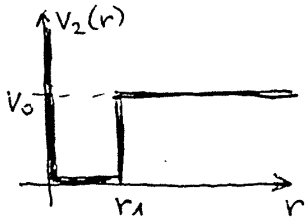
$V_1(r) = 0$ for $r < r_1$ $(V_1(r) \to \infty$ for $r = 0)$

$V_1(r) = V_0$ for $r_1 < r < r_2$

$V_1(r) = 0$ for $r > r_2$

1) Find de stationære tilstande for en partikel i et sådant potential, når partiklens masse er μ og dens energi E har værdier $E < V_0$ i området $r > 0$.

2) Vis at den stationære sandsynlighed for at finde partiklen i området $r < r_1$ kun er forskellig fra nul for visse diskrete energi-værdier, som er energi-egenværdierne for en partikel i et potential $V_2(r)$ af formen:



$V_2(r) = 0$ for $r < r_1$ $(V_2(R) \to \infty$ for $r = 0)$

$V_2(r) = V_0$ for $r > r_1$.

3) Diskuter (kvalitativt) energi spektret og mulighederne for at normalisere bølgefunktionerne for partiklen i de to tilfælde.

4) Skitser (kvalitativt) hvordan man i tilfælde af en partikel i et potential af formen $V_1(r)$ kan udregne sandsynligheder for udsendelse af en partikel fra området $r < r_1$.

(Hjælp: Betragt tids-udviklingen af en bølgepakke, som til tiden $t=o$ er lokaliseret i området $r < r_1$).

Opgave i kvantemekanik.

En elektron (masse m) bevæger sig i potentialet

$$V(x,y,z) = \tfrac{1}{2}\cdot m\cdot\omega^2\cdot(x^2 + y^2 + z^2)$$

I spørgsmålene 1 - 4 nedenfor ses bort fra elektronens spin.

1) Forklar hvorfor de stationære tilstande kan opregnes på formen $|n_x,n_y,n_z\rangle$ ved kvantetallene for den éndimensionale oscillator. Hvilke værdier kan de tre kvantetal antage? Udtryk energien og pariteten af en sådan tilstand ved tallet $n = n_x + n_y + n_z$.

2) Angiv udartningen af de fire laveste energiniveauer, eller evt. en generel formel for udartningen af niveau n.

3) Giv en begrundelse for, at det er muligt at vælge en basis $|n,\ell,m\rangle$, af stationære egentilstande til L^2 og L_z, hvor $\vec{L}$ er impulsmomentet. Hvad er pariteten af en tilstand med L^2-egenværdien $\hbar^2\ell(\ell+1)$?

4) Hvilke ℓ-værdier kan optræde for en given værdi af n? Opregn de mulige ℓ-værdier for de fire laveste niveauer, samt antallet af m-værdier for hver af disse. Kontroller, at det stemmer med de i spørgsmål 2 udregnede udartninger.

I det følgende tager vi hensyn til elektronens spin $\vec{S}$ og introducerer et nyt bidrag til Hamiltonoperatoren, spin-bane koblingen

$$H_{so} = A\cdot\vec{L}\cdot\vec{S}$$

(opgavesættet fortsætter)

(opgavesættet fortsat)

5) Vis, at H_{so} kan diagonaliseres i en ny basis efter kvantetallene j og m_j for den totale impulsmomentoperator $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Angiv de mulige værdier af j og m_j for hver af l-værdierne i niveauet $n = 2$.

6) Angiv, under forudsætning af, at H_{so} kan betragtes som en svag perturbation, hvordan det udartede niveau $n = 2$ splitter op under indflydelse af spin-bane koblingen. Vis endvidere (kvalitativt, med en tegning af niveauer), hvordan den resterende udartning ophæves af et svagt magnetfelt.

Opgave i kvantemekanik.

Spintilstanden af et system, bestående af tre elektroner, kan udvikles på basistilstandene $|a_1, a_2, a_3>$, hvor a_i er egenværdien for Pauli matricen $\sigma_z^{(i)}$. Spin z operatoren for elektron nr. i (i = 1,2 eller 3) er altså $S_z^{(i)} = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z^{(i)}$.

Vi indfører kvantetallene s og m, defineret ved, at egenværdien for kvadratet på totalspinnet $\vec{S}$ er $\hbar^2 s(s+1)$ og egenværdien af S_z er $\hbar$ m.

1) Angiv de mulige værdier af s og for hver af disse de mulige værdier af m. Vis, at s og m <u>ikke</u> kan være et fuldstændigt sæt kvantetal til beskrivelse af spintilstanden.

2) Undersøg, om spintilstanden

$$|A> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1, 1> - |-1, -1, -1>)$$

har veldefinerede værdier af s og m. Vis dernæst, at $|A>$ er egentilstand for operatorerne $\sigma_x^{(i)}\sigma_y^{(j)}\sigma_y^{(k)}$ samt $\sigma_x^{(i)}\sigma_x^{(j)}\sigma_x^{(k)}$, hvor ijk er en vilkårlig permutation af tallene 1, 2 og 3. Angiv de tilhørende egenværdier.

3) Tilstanden af systemet er givet ved et produkt af spintilstanden $|A>$ og en rumlig bølgefunktion, som kan skrives på formen

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = f(\vec{r}_2-\vec{r}_3)f(\vec{r}_3-\vec{r}_1)f(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$$

Angiv en nødvendig symmetri-egenskab for funktionen f. Vis endvidere, at tilstanden har en veldefineret paritet og angiv dens værdi.

(opgavesættet fortsætter)

4) Vi betragter operatorerne

$$\sigma^{(i)}(\varphi_i) = \cos\varphi_i \cdot \sigma_x^{(i)} + \sin\varphi_i \cdot \sigma_y^{(i)}$$

svarende til en spinretning i xy planen for elektron i, der danner vinklen φ_i med x-aksen. Angiv en betingelse for de tre vinkler φ_1, φ_2 og φ_3, således at $|A\rangle$ er egentilstand for operatoren

$$\Sigma = \sigma^{(1)}(\varphi_1)\ \sigma^{(2)}(\varphi_2)\ \sigma^{(3)}(\varphi_3)$$

Angiv også de tilhørende egenværdier og sammenlign med resultater fra spørgsmål 2.

(opgavesættet SLUT)

Skriftlig eksamen i dybdemodulet, juni 1991.

Kvantemekanik

Opgave 1.

En partikel med masse m bevæger sig i to dimensioner. Dens potentielle energi er givet ved

$$V(x,y) = \frac{1}{2}K(x^2+y^2) \text{ for alle } x \text{ og alle } y \qquad (1)$$

hvor K er en positiv konstant.

a) Begrund kort, at de mulige energier for partiklen er:

$$E_{n_1,n_2} = (n_1 + n_2 + 1)\hbar\omega \; ; \; \left.\begin{matrix} n_1 \\ n_2 \end{matrix}\right\} = 0,1,2,\ldots; \; \omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$$

Hvordan ser de tilsvarende bølgefunktioner ud ?

b) Angiv grundtilstandsenergien og den tilhørende bølgefunktion, hvis den potentielle energi i stedet for (1) er givet ved

$$V(x,y) = \frac{1}{2}K\ (x^2+y^2) \text{ for } x > 0 \text{ og } y > 0 \; ; \; V(x,y) = \infty \text{ ellers.} \quad (2)$$

c) Til et givet tidspunkt ændres den potentielle energi fra at være givet ved (2) til at være givet ved (1). Bølgefunktionen antages til dette tidspunkt at være den under b) fundne. Hvad er sandsynligheden for til et senere tidspunkt at måle energien til at være $3\hbar\omega$?

(Hjælp: $\int_0^\infty e^{-x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$; $\int_0^\infty xe^{-x^2}dx = \frac{1}{2}$; $\int_0^\infty x^2e^{-x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4}$; $\int_0^\infty x^3e^{-x^2}dx = \frac{1}{2}$)

fortsættes..

Opgave 2.

En partikel med masse m bevæger sig i to dimensioner. Dens potentielle energi er givet ved

$$V(x,y) = \frac{1}{2}K(x^2+y^2) \quad \text{for alle } x \text{ og alle } y,$$

hvor K er en positiv konstant.

De mulige energier for partiklen er

$$E_{n_1,n_2} = (n_1 + n_2 + 1)\hbar\omega \; ; \quad \left.\begin{matrix} n_1 \\ n_2 \end{matrix}\right\} = 0,1,2,\ldots; \quad \omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$$

med tilsvarende egentilstande $|n_1,n_2\rangle$.

a) Hvad ved vi om partiklens tilstand sammenholdt med tilstandene $|n_1,n_2\rangle$, hvis dens energi er målt til at være $3\hbar\omega$?

b) Vis, at en måling af partiklens impulsmoment nødvendigvis vil resultere i én af de tre værdier $0, 2\hbar$ og $-2\hbar$, hvis dens energi er målt til at være $3\hbar\omega$.

(Hjælp: $L = i\hbar(a_2^+a_1 - a_1^+a_2)$, hvor a_i^+ og a_i er sædvanlige skabelses- og annihilationsoperatorer)

——— o ———

Skriftlig eksamen i dybdemodulet, juni 1992.

Kvantemekanik.

Opgave 1.

En spinløs partikel med masse m bevæger sig i tre dimensioner. Dens potentielle energi er givet ved:

$$V(x,y,z) = \tfrac{1}{2}K(x^2+y^2+z^2) \text{ for alle værdier af } x,y \text{ og } z,$$

hvor K er en positiv konstant.

a) Begrund kort, at de mulige resultater af en måling af partiklens energi er:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = (n_x+n_y+n_z+\tfrac{3}{2})\hbar\omega; \quad \left.\begin{matrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{matrix}\right\} = 0,1,2,\ldots; \quad \omega=\sqrt{\frac{K}{m}}$$

Hvordan ser de til egentilstandene $|n_x,n_y,n_z\rangle$ svarende bølgefunktioner ud?

b) Hvad ved vi om partiklens tilstand sammenholdt med egentilstandene $|n_x,n_y,n_z\rangle$, hvis dens energi er målt til at være $\frac{7}{2}\hbar\omega$?

c) Find middelværdierne $\langle L_z\rangle$ og $\langle L_z^2\rangle$ for de forskellige egentilstande $|n_x,n_y,n_z\rangle$ med $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$.

Vis, at målinger af L_z for partiklen, når det alene i forvejen vides, at dens energi er $\frac{7}{2}\hbar\omega$, vil give middelværdierne $\langle L_z\rangle=0$ og $\langle L_z^2\rangle=\frac{5}{3}\hbar^2$.

Begrund herudfra, at $\langle \bar{L}^2\rangle= 5\,\hbar^2$.

(Hjælp: $L_z = i\hbar(a_y^+a_x - a_x^+a_y)$, hvor a_i^+ og a_i er sædvanlige skabelses- og annihilationsoperatorer for den harmoniske oscillator).

(fortsættes..)

Opgave 2.

En spinløs partikel med masse m bevæger sig i tre dimensioner. Dens potentielle energi er i polære koordinater givet ved:

$$V(r) = \tfrac{1}{2}Kr^2 \quad \text{for alle } r \geqq 0 \;,$$

hvor K er en positiv konstant.

a) Begrund, at egentilstandene for Hamiltonoperatoren kan vælges således, at de også er egentilstande for $\bar{L}^2$ og L_z.

b) Vis, at funktionerne:

$$\psi_m(r,\theta,\varphi) = r^2\, e^{-\frac{r^2}{2a^2}} \cdot Y_{2m}(\theta,\varphi) \;;\; a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \;; \quad \omega = \sqrt{\frac{K}{m}} \;,$$

tilfredsstiller den tidsuafhængige Schrödingerligning med $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$.

($Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ er fælles egenfunktioner for $\bar{L}^2$ med egenværdien $\ell(\ell+1)\hbar^2$ og for L_z med egenværdien $m\hbar$. r, θ og φ er sædvanlige polære koordinater).

c) Begrund, at der udover de fem funktioner Ψ_m i spørgsmål b) må findes netop én sjette lineært uafhængig fælles egenfunktion for $\bar{L}^2$, L_z og Hamiltonoperatoren med energiegenværdien $\frac{7}{2}\hbar\omega$.

Begrund - bl.a. ud fra resultatet $\langle\bar{L}^2\rangle = 5\hbar^2$ i opgave 1, spørgsmål c) - at dens vinkelafhængighed må være givet ved $Y_{00}(\theta,\varphi)$.

o

Skriftlig eksamen i kvantemekanik, juni 1993.

Opgave 1.

En spinløs partikel med masse m bevæger sig i tre dimensioner i et brintlignende atom. Dens potentielle energi er i polære koordinater givet ved:

$$V(r) = -\frac{Z\,e_o^2}{r}$$

hvor Z og e_o er sædvanlige konstanter.

a) Begrund, at egentilstandene for Hamiltonoperatoren kan vælges således, at de også er egentilstande for $\bar{L}^2$ og L_z.

b) De fælles egentilstande betegnes $|n,\ell,m\rangle$ svarende til sædvanlige kvantetal for energien, $\bar{L}^2$ og L_z.

Hvad ved vi om partiklens tilstand sammenholdt med egentilstandene $|n,\ell,m\rangle$, hvis vi alene ved, at dens energi er målt til at være den næstlavest mulige ?

c) Der tilføjes et magnetfelt, B, i z-aksens retning.

Med god tilnærmelse er partiklens Hamiltonoperator herefter:

$$H = \frac{\bar{p}^2}{2m} - \frac{Z\,e_o^2}{r} + \frac{eB}{2m} L_z$$

, hvor -e er partiklens ladning.

Hvordan påvirkes det næstlaveste energiniveau uden magnetfeltet af magnetfeltet ? Angiv egenværdier og tilhørende egentilstande for H.

(fortsættes)

Opgave 2.

En spinløs partikel med masse m bevæger sig som i opgave 1 i tre dimensioner i et brintlignende atom. De fælles egentilstande for Hamiltonoperatoren, $\bar{L}^2$ og L_z betegnes $|n,\ell,m\rangle$ svarende til sædvanlige kvantetal for energien, $\bar{L}^2$ og L_z.

a) Hvordan ser de til tilstandene $|2,\ell,m\rangle$ svarende fire bølgefunktioner ud i polære koordinater ?

b) Der tilføjes både et elektrisk felt, E, og et magnetfelt, B, begge i z-aksens retning. Med god tilnærmelse er partiklens Hamiltonoperator herefter:

$$H = \frac{\bar{p}^2}{2m} - \frac{Z\,e_o^2}{r} + \frac{eB}{2m} L_z + eEz$$

, idet -e er partiklens ladning.

Er tilstandene $|n,\ell,m\rangle$ stadig fælles egentilstande for H, $\bar{L}^2$ og L_z ?

c) Vis ved symmetribetragtninger, at alle elementerne i matricen

$$\langle 2,\ell,m|eEz|2,\ell',m'\rangle$$

er 0, undtagen

$\langle 2,1,0|eEz|2,0,0\rangle$ og $\langle 2,0,0|eEz|2,1,0\rangle$.

d) Felterne er tilstrækkeligt svage til, at deres virkning kan betragtes som en perturbation set i forhold til situationen uden felter.

Hvordan påvirkes det næstlaveste energiniveau uden felter af felterne ?

[Hjælp: $\int_0^\infty x^n e^{-x}\,dx = n!$, hvor n er et helt tal større end eller lig med 0.]

(fortsættes)

Opgave 3.

Der regnes som i opgave 1 og opgave 2 på det næstlaveste energiniveau for en spinløs partikel i et brintlignende atom.

a) Hvordan påvirkes energiniveauet, når der samtidigt tilføjes et magnetfelt og et derpå vinkelret elektrisk felt ?

Sammenhold resultatet i grænserne for henholdsvis forsvindende elektrisk felt og forsvindende magnetfelt med det i opgave 2 spørgsmål d) fundne.

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

hvor n er et helt tal større end eller lig med 0.]

(opgavesæt slut)

Skriftlig eksamen, fredag den 3. juni 1994, kl. 10.00 - 13.00.

Fysik, modul 2, KVANTEMEKANIK.

Opgavesættet består af 3 opgaver. Vægtning er angivet på opgaverne.

Alle sædvanlige hjælpemidler er tilladt.

Opgave 1. [40%]

Bølgefunktionen for en partikel med Hamilton-operatoren $H = A\,(L^2)^2$ (hvor L er impulsmomentoperatoren) er kl $t=0$ i sfæriske koordinater givet ved

$$|\psi\rangle = N \sin^2\theta \, f(r) \quad ,$$

hvor N er en konstant og $f(r)$ opfylder

$$\int_0^\infty dr\, r^2\, |f(r)|^2 = 1$$

1) Er $|\psi\rangle$ en egentilstand til L_z?

2) Er $|\psi\rangle$ en egentilstand til H?

3) Find normeringskonstanten N.

4) Angiv de mulige resultater af en måling af $\boldsymbol{L}^2$ og bestem de tilhørende sandsynligheder.

5) Find bølgefunktionen til senere tider $t>0$.

Opgave 2. [30%]

En partikel med massen m bevæger sig i én dimension i potentialet

$$U(x) = U_o \exp\left[\frac{x^2}{2x_o^2}\right] .$$

Det antages gennem hele opgaven at:

(*) Grundtilstandsbølgefunktionen er kun væsentligt forskellig fra nul i de x*, der opfylder* $|x| \ll x_o$.

1) Estimer grundtilstandsenergien og energien af den første exciterede tilstand. [Vink: Argumenter for og udnyt dernæst, at (*) medfører, at man som en god approximation kan rækkeudvikle exponentialfunktionen.]

2) Angiv betingelsen for at (*) er opfyldt udtrykt ved Plancks konstant, x_o, U_o og m.

3) Det antages nu, at potentialet kl t=0 pludseligt ændres til $U'(x)$, hvor

$$U'(x) = \frac{1}{2} U_o \exp\left[\frac{x^2}{2x_o^2}\right] .$$

Hvad er sandsynligheden for at finde partiklen i den ny grundtilstand umiddelbart efter kl t=0, givet at partiklen var i grundtilstanden før kl t=0? Hvad er sandsynligheden for at finde partiklen i den ny grundtilstand for $t \to \infty$?

Opgave 3. [30%]

En partikel med massen m bevæger sig i én dimension. Partiklen befinder sig i potentialet

$$U(x) = U_o \sin(\frac{x}{a}) \quad .$$

Partiklens Hamilton-operator betegnes H.

1) Vis at enhver måling af energien vil give en energi ϵ, der opfylder $\epsilon + U_o > 0$.

2) Forskydningsafbildningen T defineres ved

$$(T\psi)(x) = \psi(x+2\pi a) \quad .$$

Vis at T er en lineær operator og at T kommuterer med H.

3) Vi betragter nu en fælles egentilstand for T og H givet ved bølgefunktionen $\psi(x)$. Vis at der findes et tal k, så

$$\psi(x) = N_k \, e^{ikx} \, \phi_k(x) \quad ,$$

hvor N_k er en normeringskonstant og ϕ_k opfylder $T\phi_k = \phi_k$.

[Vink: Vælg k så egenværdien hørende til $\psi(x)$ for operatoren T udtrykkes som tallet $e^{i2\pi ka}$.]

4) Redegør for at k må være reel, for at ψ_k er en fysisk acceptabel egenfunktion.

Skriftlig eksamen, torsdag den 12. januar 1995, kl. 10.00 - 13.00
Fysik, dybdemodulet, KVANTEMEKANIK.
Opgavesættet består af 2 opgaver. Vægtning er angivet på opgaverne.
Alle sædvanlige hjælpemidler er tilladt.

I. OPGAVE (60 %)

Man betragter en partikel med massen m i det én-dimensionale harmoniske oscillator potential $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. For hvert kompleks tal z defines tilstanden $|z>$ som den normerede egentilstand for A operatoren ($A = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}x + i\frac{p}{\sqrt{2m\omega}}$, jvnf. p. 128 i Gasiorowicz) med egenværdien $z\sqrt{\hbar}$, altså

$$A|z> = z\sqrt{\hbar}|z> . \tag{1}$$

1) Vis at hvis $|z>= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n|\psi_n>$, hvor $|\psi_n>$ er den n'te normerede energiegentilstand, gælder

$$\lambda_n = \frac{z^n}{\sqrt{n!}}\lambda_0. \tag{2}$$

(Vink: Vis først at $\lambda_n = \frac{z}{\sqrt{n}}\lambda_{n-1}$ ved at udnytte resultatet fra opgave 1 p. 136 i Gasiorowicz.)

2) Vis at (pånær en fasefaktor) er tilstanden $|z>$ givet ved

$$|z> = \exp[-\frac{|z|^2}{2}]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|\psi_n> . \tag{3}$$

3) Find et udtryk for det indre produkt $< z_1|z_2 >$ og vis at denne størrelse går mod nul for $|z_1 - z_2| \to \infty$.

4) Som bølgefunktionsrepræsentationen af tilstanden $|z>$ antages nu

$$|z> = C\ exp[i\alpha x - \beta(x - x_o)^2], \tag{4}$$

hvor C er en normaliseringskonstant. Vis at denne repræsentation "virker", find et udtryk for β og bestem sammenhængen mellem z og α . Giv en fysisk fortolkning af disse to konstanter.

5) Det kan vises at tilstanden $|z>$ udvikler sig i tiden efter ligningen

$$|z>(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}}\ |ze^{-i\omega t}> . \tag{5}$$

Giv en fysik fortolkning af dette i lyset af fortolkningen af konstanterne i 4).

6) Hvad er fortolkningen af tilstanden $|z>$ i den klassiske grænse ($m \to \infty$) ?

II. OPGAVE (40 %)

En partikel bevæger sig i 3 dimensioner i potentialet

$$U(r) = Ar^n, \tag{6}$$

hvor A er en konstant, r er afstanden til origo og $n \geq -1$.

1) Find dimensionen af A. Hvorfor er det nødvendigt at antage at $nA \geq 0$?

2) Variationsmetoden benyttes til at estimere grundtilstandsenergien. Som ansatz tages bølgefunktionen

$$\psi(\mathrm{r}) = C\ e^{-br}. \tag{7}$$

Vis at det er nødvendigt at antage at $b > 0$ og angiv den fysiske fortolkning af b. Find normaliseringskonstanten C.

3) Angiv for hvert n den værdi af variationsparameteren b som giver den mindste energi.

4) Sammenlign resultatet fra 3) med de eksakte grundtilstandsenergier for tilfældene $n = -1$, $n = 0$ og $n = 2$.

Skriftlig 3-timers prøve i dybdekursus i

KVANTEMEKANIK

Fredag den 9. juni 1995, kl. 10.00 - 13.00.

Opgavesættet består af 3 opgaver. Vægtning er angivet på opgaverne.
Alle sædvanlige hjælpemidler er tilladt.

I. OPGAVE (40 %)

Vi betragter en partikel med massen m i det én-dimensionale "box"potential $V(x)$ givet ved $V(x) = 0$ for $|x| < a$ og $V(x) = \infty$ for $|x| > a$. Til et givet tidspunkt kl $t = 0$ er partiklen beskrevet ved bølgefunktionen $\psi(x) = C(x^2 - a^2)$ for $|x| < a$ og $\psi(x) = 0$ ellers.

1) Bestem dimensionen af konstanten C og udregn værdien af C.

2) Find middelværdien af energien til kl $t = 0$.

3) Find sandsynligheden for at en måling af energien kl $t = 0$ som resultat giver grundtilstandsenergien.

II. OPGAVE (30 %)

En spin-1/2 partikel er beskrevet ved Hamiltonoperatoren $H = A(3\sigma_x + 4\sigma_y)$, hvor A er en konstant og σ_x og σ_y er de sædvanlige Paulimatricer. Partiklens rumbølgekoordinater ignoreres i opgaven.

1) Til tiden kl $t = 0$ vides det, at partiklen med sikkerhed har spinnet rettet i den positive y-akse. Beregn tilstanden til alle senere tider, idet tilstanden beskrives ved en sædvanlig 2-spinor.

2) Beregn for enhver tid $t > 0$ sandsynligheden for at en måling af spinnet i y-aksens retning resulterer i værdien $-\hbar/2$.

III. OPGAVE (30 %)

Opgaven vedrører energi-tids usikkerhedsrelationen. For et system beskrevet ved tilstanden $|\psi>$ defineres som sædvanlig for enhver Hermitisk operator A middelværdien $< A >$ ved $< A >=< \psi|A|\psi >$ og ubestemtheden, ΔA, ved $\Delta A = \sqrt{< A^2 > - < A >^2}$.

1) Vis at $\Delta A = 0$, hvis $|\psi >$ er en egentilstand til A.

1a) [extraspørgsmål] Redegør for at hvis $|\psi >$ ikke er en egentilstand til A gælder altid $\Delta A > 0$.

I almindelighed afhænger $< A >$ af tiden. Vi definerer nu tidsubestemtheden Δt som groft taget den tid, det tager for størrelsen $< A >$ at ændre sig ΔA. Mere præcist defineres Δt ved

$$\Delta t \left| \frac{d < A >}{dt} \right| = \Delta A . \tag{1}$$

2) Vis at $\Delta t \Delta E \geq \hbar/2$, hvor ΔE er energiubestemtheden som sædvanligt defineret ved $\Delta E = \Delta H$, hvor H er Hamiltonoperatoren. Vink: Benyt bla den generaliserede usikkerhedsrelation (jævnfør ligning (B-34) på side 499 i Gasiorowicz), der gælder for to Hermitiske operatorer A og B,

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} (< i[A, B] >)^2 . \tag{2}$$

3) Vi betragter nu specialtilfældet hvor $|\psi >$ er en egentilstand for H. Vis ud fra definitionen af Δt [lign. (1)] at $\Delta t = \infty$. Hvordan harmonerer dette resultat med energi-tids usikkerhedsrelationen?

Skriftlig 4-timers prøve i dybdekursus i

KVANTEMEKANIK

mandag den 10. juni 1996, kl. 10.00 - 14.00.

Opgavesættet består af 3 opgaver. Vægtning er angivet på opgaverne.
Alle sædvanlige hjælpemidler er tilladt.

OPGAVE 1 [30%]

Vi betragter en partikel uden spin, der bevæger sig i et centralsymmetrisk potential. Partiklen er kl $t = 0$ beskrevet ved bølgefunktionen

$$\psi(x, y, z) = K(x + y + z)e^{-r/a} , \tag{1}$$

hvor K er en normeringskonstant, a en karakteristisk længde og $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$.

1. Bestem de mulige udfald af en måling af L_z kl $t = 0$ og deres tilhørende sandsynligheder.

2. Man tænker sig nu, at målingen af L_z først foretages senere end kl $t = 0$. Vil denne situation resultere i de samme mulige udfald og tilhørende sandsynligheder, som hvis målingen foretages kl $t = 0$?

3. Bestem de mulige udfald af en måling af L_x kl $t = 0$ og deres tilhørende sandsynligheder.

OPGAVE 2 [30%]

To identiske partikler med massen m og spin $\frac{1}{2}$ befinder sig i en 3-dimensional kubisk box med sidelængden L (potentialet er altså 0 inden i boxen og ∞ udenfor).

1. Bestem energien og den normerede bølgefunktion for den laveste energiegentilstand med totalt spin 0, idet det antages, at partiklerne ikke vekselvirker med hinanden. Bølgefunktionen ønskes angivet som funktion af både de rumlige koordinater og spinkoordinaterne for de to partikler.

Det tænkes nu, at partiklerne i boxen vekselvirker via potentialet $V = V_0\delta(x_1 - x_2)\delta(y_1 - y_2)\delta(z_1 - z_2)$, hvor x_i er den i'te partikels x-koordinat, osv.

2. Giv en fysisk fortolkning af potentialet, herunder af fortegnet på konstanten V_0.

3. Bestem for tilstanden angivet i spørgsmål 1 ved hjælp af laveste ordens perturbationsregning ændringen af energien, der skyldes vekselvirkningen mellem partiklerne.

OPGAVE 3 [40%]

Vi betragter et kvantemekanisk system med et 2-dimensionalt tilstandsrum, hvori en ortonormal basis er givet ved tilstandene $|\psi_1\rangle$ og $|\psi_2\rangle$. Det oplyses, at disse to tilstande er egentilstande med forskellige egenværdier for en Hermitisk operator, A (hørende til en vis ikke nærmere specificeret fysisk egenskab), dvs at $A\,|\psi_i\rangle = a_i\,|\psi_i\rangle$, hvor $a_1 \neq a_2$. Hamiltonoperatoren, H, er givet ved at $H\,|\psi_1\rangle = \lambda\,|\psi_2\rangle$ og $H\,|\psi_2\rangle = \lambda\,|\psi_1\rangle$, hvor λ er en positiv konstant.

1. Opstil matricen for H. Find egenenergierne og de tilhørende normede energiegentilstande.

2. Det antages, at systemet kl $t = 0$ er i tilstanden $|\psi_1\rangle$. Beregn systemets tilstand til alle senere tider.

3. Beregn sandsynligheden, $P_1(t)$, for at en måling af egenskaben A kl t giver resultatet a_1.

4. Vis at for $t \to 0$ gælder, at $P_1(t)$ ikke indeholder noget førsteordensled i t, altså at man for små tider kan skrive $P_1(t) = 1 - Ct^2$. Bestem konstanten C.

5. Med symbolet $P_n(t)$ betegnes sandsynligheden for, at en måling af egenskaben A kl t giver resultatet a_1, hvis der forudgående er foretaget $n-1$ målinger af egenskaben A til tiderne $t/n, 2t/n, ..., (n-1)t/n$. Vis at $P_n(t) > [P_1(t/n)]^n$. [Vink: Vis først og udnyt dernæst, at højresiden er sandsynligheden for, at alle n målinger af A giver resultatet a_1.]

6. Vis at $P_n(t) \to 1$ for $n \to \infty$. [Vink: Kombiner resultaterne fra spørgsmål 4. og 5. med den matematiske identitet $\lim_{n\to\infty}(1 + x/n^2)^n = 1$, der gælder for alle x.]

7. Hvad er den fysiske fortolkning af resultatet fra 6.?

Skriftlig 4-timers prøve i dybdekurset i

KVANTEMEKANIK

tirsdag den 3. juni 1997, kl. 10.00 - 14.00

Opgavesættet består af 3 opgaver. Vægtning er angivet på opgaverne.
Alle sædvanlige hjælpemidler er tilladt.

OPGAVE 1 [40%]

En partikel med massen m befinder sig i én dimension under påvirkning af potentialet $V(x) = A + Bx^2$, hvor $B > 0$.

1. Hvilke mulige resultater kan en måling af energien give?

— Det oplyses, at kl $t = 0$ befinder partiklen sig i tilstanden $|\psi\rangle = C\left(|u_0\rangle - |u_1\rangle\right)$, hvor $|u_n\rangle$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ er de normerede egentilstande for Hamiltonoperatoren (som sædvanlig nummereret efter stigende energi).

2. Bestem C så $|\psi\rangle$ er normeret.

3. Bestem middelenergien, middelimpulsen og middelpositionen af partiklen kl $t = 0$.

4. Hvilke af de i 3. nævnte størrelser afhænger af tiden for $t > 0$?

5. Bestem sandsynlighedstætheden for at finde partiklen i punktet $x = 0$ kl $t = 0$. Hvordan afhænger denne sandsynlighedstæthed af tiden for $t > 0$?

OPGAVE 2 [30%]

En spin-$\frac{1}{2}$-partikel befinder sig i et rumligt og tidsligt konstant ydre magnetfelt, der peger i den positive z-akses retning. Hvis magnetfeltstyrken betegnes B_0 og γ er partiklens gyromagnetiske ratio gælder at spindelen af Hamiltonoperatoren er givet ved $H = -\gamma B_0 S_z$, hvor S_z er z-komposanten af partiklens spinoperator S. Det oplyses, at partiklen kl $t = 0$ har spinnet pegende i den negative x-akses retning.

1. Bestem partiklens spinor kl $t = 0$.
2. Bestem partiklens spinor til alle senere tider.
3. Bestem $\langle \mathrm{S} \rangle$ for partiklen til alle tider $t > 0$.
4. Eftervis at der til alle tider $t > 0$ gælder $\frac{d}{dt} \langle \mathrm{S} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \mathrm{S}] \rangle$. Dette skal gøres ved eksplicit at udregne højre- og venstre-siden af lighedstegnet til alle tider $t > 0$ for partiklen.

OPGAVE 3 [30%]

Vi betragter et én-elektron atom med kerneladningen Ze. P_{nlm} betegner sandsynligheden for at en måling af elektronens afstand fra kernen resulterer i en værdi større end den af Bohrs teori forudsagte (ligning (1-34) i bogen), givet at elektronen befinder sig i egentilstanden for Hamiltonoperatoren karakteriseret på sædvanlig vis ved kvantetallene n, l og m.

1. Udtryk P_{nlm} ved hjælp af bølgefunktionen for n, l, m-tilstanden.
2. Vis at P_{nlm} er uafhængig af m.
3. Udregn P_{nlm} for tilfældet $n = 1$.

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
Dybdemoduleksamen i Kvantemekanik
Torsdag d. 18. juni 1998 kl. 10.00 - 14.00
HJÆLPEMIDLER TILLADT.
Opgavesættet består af TRE opgaver på TO ark papir

Opgavesættet består af 8 delspørgsmål, der vægtes ligeligt i vurderingen

Opgave 1. En spin 1/2 partikel er begrænset til at bevæge sig langs x-aksen i et tre-dimensionalt rum under påvirkning af et harmonisk oscillator potentiale.
Til tiden t=0 er partiklen beskrevet ved bølgefunktionen:

$$\psi(x,t=0) = 6u_0(x)\chi_+ + (2+i)u_1(x)\chi_- - 2u_1(x)\chi_+$$

$u_n(x)$ er den n'te normaliserede stationære egentilstand for den én-dimensionale harmoniske oscillator og $\chi_{+/-}$ er de normaliserede egenspinorer for z-komposanten af det spin-angulære moment, S_z.

1.1)

- Normalisér bølgefunktionen.
- Energien af et stort antal systemer i tilstanden ψ måles - hvad er middelværdien af de målte energier?
- I et eksperiment måles energien E og S_z samtidigt. Hvad er sandsynligheden for, at målingen giver resultatet E $= \frac{1}{2}\hbar\omega$ og $S_z = -\frac{\hbar}{2}$?

1.2) I et eksperiment måles y-komposanten af det spin-angulære moment, S_y, til tiden t=0. Angiv de mulige resultater af målingen med tilhørende sandsynligheder.

Opgave 2.) Systemet beskrevet i opgave 1 udsættes for en lille perturbation, der er lineær i x: $\hat{H}' = -\lambda x$

2.1) Vis at der til første orden ikke sker nogen ændring i de relevante energiniveauer.

2.2) Find 2.ordens korrektionen, E_n^2, til energien af de uperturberede stationære tilstande $u_n(x)$.
(*Hint:* Udnyt stepoperatorerne ("ladder operators") a_+ og a_-)

2.3) Find den eksakte energi for de perturberede tilstande og kommentér udfra denne størrelsen af højere ordens korrektioner til energien.
(*Hint:* Skift variabel til $X \equiv x - (\lambda/m\omega^2)$)

Opgave 3.) Et system kan eksistere i to tilstande, $|a_0\rangle$ og $|a_1\rangle$, som er normaliserede egentilstande for den observable A, svarende til egenværdierne 0 og 1. Systemet er under påvirkning af et tidsuafhængigt potentiale og Hamilton operatoren $\hat{\mathrm{H}}$ er defineret ved:

$$\hat{H}\,|a_0\rangle = \alpha\,|a_0\rangle + \beta\,|a_1\rangle$$
$$\hat{H}\,|a_1\rangle = \beta\,|a_0\rangle + \alpha\,|a_1\rangle$$

α og β er reelle.

3.1) Kommuterer $\hat{\mathrm{H}}$ og $\hat{\mathrm{A}}$?

3.2) Systemet er i tilstanden $|a_0\rangle$ til tiden t=0. Find et udtryk for systemets tilstand til tiden t.

3.3) Værdien af den observable A måles til tiden t=T, men resultatet mistes. Værdien af A måles igen til tiden t=2T. Hvad er sandsynligheden for at resultatet af den anden måling er 0?

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
Dybdemoduleksamen i Kvantemekanik
Mandag d. 28. juni 1999 kl. 10.00 - 14.00
HJÆLPEMIDLER TILLADT.
Opgavesættet består af TRE opgaver på TO ark papir

Opgavesættet består af 9 delspørgsmål, der vægtes ligeligt i vurderingen

Opgave 1. For en generel løsning Y_l^m til den vinkelafhængige del af Schrödinger ligningen gælder følgende:

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \pm\hbar e^{\pm i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

samt

$$\hat{L}_\pm Y_l^m = A_l^m Y_l^{m\pm1}$$

$$A_l^m = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm1)}$$

$\hat{L}$ angiver operatoren for angulært moment (baneimpulsmoment).
Givet funktionen $Y_1^0(\theta,\phi)$:

$$Y_1^0(\theta,\phi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta$$

1.1) Elektronen i et brintatom er i en tilstand, hvor rumdelen af bølgefunktionen er $R_{21}(r)$.
Find ved anvendelse af ovenstående oplysninger eksplicitte udtryk for de relevante funktioner Y_l^m for elektronen.

1.2) Der er udført eksperimenter på mange brintatomer i tilstanden beskrevet ovenfor. Resultatet af disse målinger er at middelværdien af z-komposanten af det angulære moment, $\langle L_z\rangle = \frac{2}{3}\hbar$ samt at sandsynligheden for at måle værdien 0 af z-komposanten af det angulære moment er $\frac{1}{4}$. Angiv elektronens bølgefunktion $\psi(r,\theta,\phi)$ (fraregnet spin).

1.3)

- Hvad er middelværdien af kvadratet på det angulære moment, $\langle L^2\rangle$?
- Hvad er middelværdien af x-komposanten af det angulære moment, $\langle L_x\rangle$?
- Hvad er elektronens energi hvis der tages hensyn til finstruktur?

Opgave 2.) Hamiltonoperatoren Ĥ for en spin 1/2 partikel er givet ved $\hat{H} = \beta \hat{S}_y$ hvor β er en (positiv) konstant og $\hat{S}_y$ er y-komposanten af spinoperatoren $\hat{\mathbf{S}}$. Til tiden t=0 peger partiklens spin i den negative y-akses retning.

2.1) Bestem partiklens spinor til alle tider t > 0. Afhænger $\langle S_y \rangle$ af tiden?

2.2) En tilsvarende partikel har til tiden t=0 spinnet pegende i den positive z-akses retning. Bestem $\langle \mathbf{S} \rangle$ til alle tider t > 0.

2.3) Systemet hvor spinnet til tiden t=0 peger i den negative y-akses retning betragtes. Systemet udsættes for en perturbation givet ved $\hat{H}' = \gamma \cos(\omega t) \hat{S}_x$, hvor γ er 'lille' og $\hat{S}_x$ er x-komposanten af spinoperatoren $\hat{\mathbf{S}}$. Beregn sandsynligheden for at spinnet 'flipper', dvs til tiden t peger i den positive y-akses retning.

Opgave 3.)
3.1) Vis at egentilstandene for impulsoperatoren $\hat{p}$ er givet ved

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

En partikel er beskrevet ved bølgefunktionen $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}$ for $|x| \leq L$ og $\psi(x) = 0$ for $|x| > L$.

3.2) Normér bølgefunktionen $\psi(x)$ og find sandsynligheden $P(p)$ for at en måling af partiklens impuls giver værdien p.

3.3) Diskutér det fundne resultat i relation til usikkerhedsrelationen.

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
Dybdemoduleksamen i Kvantemekanik
Torsdag 22. juni 2000 kl. 10.00 - 14.00
HJÆLPEMIDLER TILLADT.
Opgavesættet består af TRE opgaver på TO ark papir
Opgavesættet består af 9 delspørgsmål, der vægtes ligeligt i vurderingen

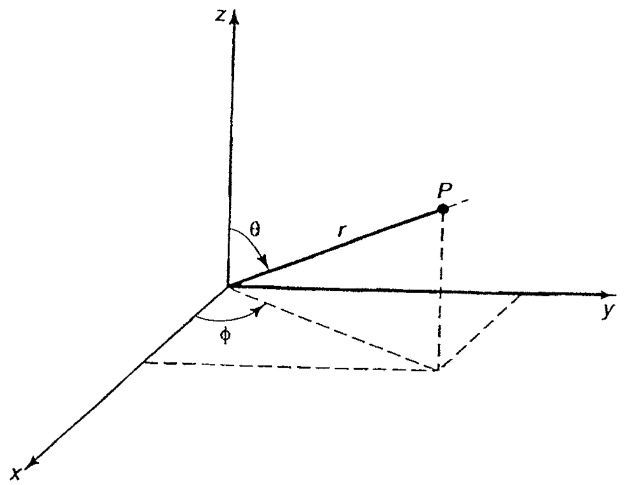
Matematisk nødhjælpskasse: Beregning af determinant for en $n \times n$ matrix: Vælg en række (eller en søjle) og gang hvert element T_{ij} i den valgte række med elementets cofaktor og addér resultaterne. Cofaktor til elementet T_{ij} er $(-1)^{i+j}$ gange determinanten for den undermatrix, der fås ved at slette i'te række og j'te søjle.

Opgave 1. En spin 1/2 partikel befinder sig i et magnetfelt givet ved $\vec{B} = (B, 0, 0)$. Til tiden t=0 er z-komposanten af spinnet $+\frac{\hbar}{2}$.

1.1) Til hvilket tidspunkt τ vil en måling af y-komposanten af spinnet med sikkerhed give $+\frac{\hbar}{2}$?

Partiklen placeres nu i et magnetfelt med samme størrelse som i 1.1), men retning givet ved en enhedsvektor med polarvinkel θ og azimuthalvinkel ϕ (se figur).

1.2) Angiv matricen for operatoren $\hat{S}_{\theta,\phi}$, der angiver spinkomposanten langs den nye feltretning.
1.3) Find den egenfunktion, der repræsenterer den orientering af spinkomposanten langs den nye feltretning, der svarer til lavest energi.



Polarvinkel θ, azimuthalvinkel ϕ, afstand r

Opgave 2. En fri partikel i én dimension betragtes. Partiklen har massen m og er til tiden t=0 beskrevet ved bølgepakken $\psi(x) = A\exp(\frac{-\alpha x^2}{2})$, hvor α er en positiv konstant.

2.1) Hvad er sandsynligheden for at finde partiklen i intervallet mellem x og $x + dx$, udtrykt ved parameteren α?
2.2) Hvad er sandsynligheden for at impulsen p har en værdi i intervallet mellem p og $p + dp$?
2.3) Beregn middelværdien af partiklens energi. Argumentér for det fundne resultat udfra bølgepakkens bredde.

Opgave 3. Elektronen i et brintatom er i en tilstand givet ved:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{100}(\vec{r}) + \sqrt{5}\psi_{210}(\vec{r}) + 2i\psi_{211}(\vec{r})$$

I opgaven ses bort fra finstruktur.

3.1)

- Normér ψ.
- Find middelværdien af z-komposanten af det angulære moment, $\langle L_z \rangle$.
- Find middelværdien af elektronens energi.
- Hvad er sandsynligheden for at en måling af kvadratet på det angulære moment giver $6\hbar^2$?

Brintatomet placeres i et felt, således at den potentielle energi givet ved $V(r, \theta) = \gamma r \cos(\theta)$ adderes til Coulomb vekselvirkningen mellem elektron og kerne. z-aksen er polarakse (def. af r og θ, se figuren til opg. 1) og γ er 'lille'.

3.2) Find energien af brintatomets grundtilstand til første orden.
3.3) Hvor mange energiniveauer splitter den første exciterede tilstand op i? Hvad er energien af disse niveauer til første orden?

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
Dybdemoduleksamen i Kvantemekanik
Tirsdag 19. juni 2001 kl. 10.00 - 14.00
HJÆLPEMIDLER TILLADT.
Opgavesættet består af TRE opgaver på TO ark papir
Opgavesættet består af 9 delspørgsmål, der vægtes ligeligt i vurderingen

Opgave 1. En spin 1/2 partikel befinder sig i et magnetfelt $\vec{B}$ rettet langs z-aksen. Til tider $t \leq 0$ er z-komposanten af spinnet positiv. Til tiden $t = 0$ sker en momentan 90^0 rotation af magnetfeltet, så det derefter peger i den negative x-akses retning.

1.1) Find partiklens spinor for tider $t > 0$.

1.2) På systemet beskrevet i 1.1 måles den observable svarende til $(\hat{S}_x + \hat{S}_y)$. Hvad er den største værdi målingen kan resultere i og hvad er sandsynligheden for at måle denne værdi?

1.3) I spørgsmål 1.1 blev det forudsat at rotation af magnetfeltet sker momentant. Antag istedet at rotationen af magnetfeltet tager tiden T.
Argumentér for hvad $\langle S_x \rangle$ er, når rotationen er tilendebragt, hvis T er meget stor. Estimér en grænse for T, der skiller 'langsom rotation' fra 'hurtig rotation'.

Opgave 2. Ionisering af et atom kan ske via såkaldt 'intern konversion', hvorved der sker en overførsel af energi fra en exciteret kerne til en af de atomare elektroner. Dette fører til ionisering, hvis den overførte excitationsenergi er større end den relevante ioniseringsenergi. Det antages, at sandsynligheden for udsendelse af en elektron via intern konversion er proportional med sandsynligheden for at elektronen befinder sig på kernens position.

2.1) Et helium atom er ioniseret ved intern konversion og det vides, at den frigjorte elektron er kommet fra en n=2 tilstand.
Angiv de øvrige kvantetal for den tilstand, den frigjorte elektron kommer fra.
Den frigjorte elektron kunne også have været en n=1 elektron. Hvad er forholdet mellem sandsynligheden for intern konversion via en n=1 elektron og via den relevante n=2 elektron?

OPGAVEN FORTSÆTTES NÆSTE SIDE

2.2) Helium ionen betragtes. Elektronens bølgefunktion er givet ved:

$\psi(\vec{r}) = A(3\psi_{100}(\vec{r}) + i\psi_{211}(\vec{r}) - 2\psi_{210}(\vec{r}) + 4\psi_{300}(\vec{r}))$
Der ses bort fra spindelen af bølgefunktionen.

- Normér bølgefunktionen
- Energien af et stort antal systemer i tilstanden ψ måles - hvad er middelværdien af de målte energier (der ses bort fra finstruktur)?
- Hvad er middelværdien af kvadratet på det angulære moment, $\langle L^2 \rangle$?
- Hvad er sandsynligheden for at en måling af L_z giver 0?

2.3) Ved måling er det fundet, at elektronen befinder sig i tilstanden ψ_{300}. Angiv hvordan levetiden af denne tilstand kan beregnes. De størrelser, der skal beregnes for at finde levetiden, skal angives ved hjælp af bølgefunktionens parametre, men det er ikke nødvendigt at foretage selve beregningerne. Antallet af sådanne ikkegennemførte beregninger skal være mindst muligt.

Opgave 3. En én-dimensional krystal af N spin 1/2 partikler betragtes. Krystallen er orienteret langs x-aksen i et koordinatsystem og afstanden mellem hver partikel er a.
Vekselvirkningen <u>mellem</u> partiklerne er givet ved Hamiltonoperatoren:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}J\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 \sum_{i=1}^{N} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$$

J er en positiv koblingskonstant, $\vec{S}_i$ angiver spinoperatoren for den i'te partikel. Cykliske randbetingelser kan anvendes, dvs randeffekter kan negligeres.

3.1) Systemet befinder sig i et magnetfelt rettet langs den positive z-akse: $\vec{B} = (0, 0, B)$. Spindelen af den samlede bølgefunktion er et produkt af en-partikel bølgefunktioner. Bølgefunktionen i grundtilstanden er givet ved $\mathrm{X}_0 = \chi_+^1 \chi_+^2 \chi_+^3 \cdots \chi_+^N$. Argumentér for værdien af z-komposanten af de enkelte partiklers spin i grundtilstanden og find energien E_0 af grundtilstanden.

3.2) $\mathrm{X_j}$ angiver spinbølgefunktionen svarende til at spinnet på plads j er antiparallel til orienteringen i grundtilstanden (spinnet er 'flippet'). Orienteringen af de øvrige spin er uændret, dvs $\mathrm{X_j} = \chi_+^1 \chi_+^2 \chi_+^3 \cdots \chi_-^j \cdots \chi_+^N$.
Vis at:
i) $(\frac{2}{\hbar})^2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \mathrm{X_j} = \mathrm{X_j} \quad (j \neq i \text{ og } j \neq i+1)$
ii) $(\frac{2}{\hbar})^2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \mathrm{X_i} = 2\mathrm{X_{i+1}} - \mathrm{X_i} \quad (j = i)$
iii) $(\frac{2}{\hbar})^2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \mathrm{X_{i+1}} = 2\mathrm{X_i} - \mathrm{X_{i+1}} \quad (j = i+1)$

3.3) Spinbølgefunktionen $\mathrm{X} = \sum_j c_j \mathrm{X_j}$ betragtes.
$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp(iqja)$, hvor $-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$.
Antag at X er en egenfunktion for systemets Hamiltonoperator svarende til energien E og find excitationsenergien $E - E_0$.

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
Dybdemoduleksamen i kvantemekanik
Mandag 24. Juni 2002 kl. 10:00-14:00
KUN PERSONLIGE HJÆLPEMIDLER TILLADT:
INGEN KOMMUNIKATION I ELLER UD FRA EKSAMENSLOKALET
Opgavesættet består af 3 opgaver på i alt 3 ark papir

Opgave 1. En partikel befinder sig i et én-dimensionalt potentiale givet ved $V(x) = 0$ for $0 \le x \le a$ og $V(x) = \infty$ uden for dette interval. Til tiden t=0 er partiklens bølgefunktion inden for intervallet fra $x = 0$ til $x = a$ givet ved $|\psi\rangle = \psi(x) = A\,x\,(x - a/2)\,(x - a)$, mens den er nul uden for dette interval.

1.1. Find normeringskonstanten A. Det kan benyttes at

$$\int_0^a x^2 (x - \frac{a}{2})^2 (x-a)^2\,dx = \frac{a^7}{2\cdot 3\cdot 4\cdot 5\cdot 7}$$

1.2. Opskriv de to første egentilstande $|i\rangle = \psi_i(x)$, i=1,2, for potentialet V og de tilhørende to laveste egenværdier E_i.

1.3. Find overlappet $\langle i|\psi\rangle$ mellem ψ og egentilstandene ψ_i for i=1 og 2. Er den opgivne bølgefunktion ψ en god approksimation til nogen af disse egentilstande? Ved udregning af overlappene kan benyttes at

$$\int_0^a \sin\frac{\pi x}{a}\left(x^3 - \frac{3}{2}ax^2 + \frac{1}{2}a^2x\right)dx = 0 \quad \text{og at} \quad \int_0^a \sin\frac{2\pi x}{a}\left(x^3 - \frac{3}{2}ax^2 + \frac{1}{2}a^2x\right)dx = \frac{6a^4}{(2\pi)^3}$$

1.4. Opskriv udviklingen af $\psi_0(x,t=0)$ til senere tider t, idet ψ_0 betegner den tilnærmede form af ψ, hvor kun de første to led i en rækkeudvikling på egentilstandene medtages.

Opgave 2. Personen P spiller med sin kvantecomputer Q et spil defineret som følger: P placerer en mønt i en æske med låg, med "krone" opad (på møntens ene side er et billede af en dronning med krone. Denne side betegnes "krone". Den anden side har et ligegyldigt indhold og betegnes "plat"). Nu stikker Q sin gribe-arm ned i æsken og kan vende mønten eller lade være, men uden på noget tidspunkt at se ned i æsken. Derefter er det P's tur til på samme vilkår at stikke hånden ned i æsken og evt. vende mønten. Så får Q endnu en tur og herefter åbnes æsken og møntens position checkes. Hvis "krone" vender op vinder Q og hvis "plat" vender op vinder P.

De to tilstande repræsenteres ved vektorerne

$$\text{"}krone\text{"} = |1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}. \qquad \text{"}plat\text{"} = |2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

og de to strategier "vende mønten" eller "ikke vende den", som den menneskelige spiller P kan følge, repræsenteres ved operatorerne

$$V = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix} \qquad og \qquad I = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}.$$

2.1. Check disse operatorers virkning på en vilkårlig tilstand $|\psi\rangle = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$.

Ifølge klassisk fysik har de to spillere lige stor sandsynlighed for at vinde spillet. Imidlertid er kvantecomputeren Q udstyret med evnen til at kunne danne vilkårlige tilstands-superpositioner, og

Q vælger som sin strategi for det første træk (dvs. aktion med gribe-arm i æsken) hverken V eller I, men

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

2.2. Vis at S er hermitisk og at $S^{-1} = S$.

2.3. Hvad kommer der ud af Q's anvendelse af S på begyndelsestilstanden $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$?

2.4. Når P derefter anvender V eller I på den i spørgsmål 2.3 fundne tilstand, hvilke tilstande resulterer så?

2.5. Beregn udkommet efter at Q nu som sit 2. træk anvender $S^{-1} = S$ på de i spørgsmål 2.4 fundne tilstande.

2.6. Hvor stor er P's chance for at vinde spillet?

Opgave 3. [det er muligt at begynde ved spørgsmål 3.2, 3.3, 3.5, 3.6 og 3.7 uden at have besvaret de foregående spørgsmål].

Betragt et lige antal fermioner, som parvis er i samme rumlige tilstand, men med modsat rettede spin. Behandles parrene som bevægende sig uafhængigt i et fælles middelpotentiale, kan Hamilton-operatoren skrives

$$H_0 = \sum_{i=1}^{m} 2e_i \, b_i^+ b_i \tag{1}$$

Energispektret kan antages at være ikke-udartet, dvs. at e_i'erne ikke er ens for forskellige i. For skabelsesoperatoren b_i^+ for et par i tilstanden $|i\rangle$, og den hermitisk konjugerede destruktionsoperator b_i, gælder ombytningsrelationerne

$$[\, b_i^+, b_j^+ \,] = 0 \qquad\qquad [\, b_i, b_j^+ \,] = \delta_{ij} \;\; \textit{plus led med } \delta_{ij}\; b_j^+ \, b_j$$

hvor $\delta_{ij} = 1$ når i=j, og ellers 0, og hvor kun leddene med $b_j^+ \, b_j$ afslører at b_i^+-partiklerne er opbygget af fermion-par. I det følgende ses bort fra disse led, og ombytningsrelationerne antages derfor at være

$$[\, b_i^+, b_j^+ \,] = 0 \qquad\qquad [\, b_i, b_j^+ \,] = \delta_{ij} \tag{2}$$

Par-operatorerne b_i^+ kan således opfattes som rene boson-operatorer, der hvis Hamiltonoperatoren H_0 er givet ved (1) hver tilføjer en energi $2e_i$ (svarende til 2 gange fermionernes energi).

3.1. Kontrollér dette ved at udregne forventningsværdien af H_0 for tilstandene $b_i^+|0\rangle$, hvor $|0\rangle$ er den tomme tilstand som er defineret ved $b_i|0\rangle = 0$.

Nu tilføjes en vekselvirkning H_1 mellem parrene, svarende til observerede forhold i superflydende elektron- og nukleon-systemer:

$$H_1 = -G \sum_{i,j=1}^{m} b_i^+ b_j \tag{3}$$

3.2. Opskriv den samlede Hamiltonoperator $H = H_0 + H_1$ som en *(m × m)* matrix i det af $|i\rangle$-tilstandene udspændte vektorrum.

I resten af opgaven betragtes specielt ét partikel-par med kun to mulige tilstande $|i=1\rangle$ og $|i=2\rangle$, og dermed Hamiltonoperatoren

$$H = \begin{pmatrix} 2e_1 - G & -G \\ -G & 2e_2 - G \end{pmatrix}, \quad \text{hvor } e_1 = -\frac{e}{2} \text{ og } e_2 = \frac{e}{2}. \tag{4}$$

Egenvektorerne for ét-par tilstande er af formen $\alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$.

3.3. Opskriv determinant-ligningen til bestemmelse af de for sådanne tilstande mulige energi-egenværdier E.

3.4. Vis at løsningerne til denne ligning er

$$E \;=\; -G \pm \sqrt{G^2 + e^2} \tag{5}$$

3.5. Skitsér løsningerne E/e som funktion af G/e.

3.6. Bestem egenvektorerne $\alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$ svarende til de to værdier af E.

[svaret er for den som svarer til den laveste energi givet ved: $\alpha_1^2 = \dfrac{e + \sqrt{G^2 + e^2}}{2\sqrt{G^2 + e^2}}$, $\quad \beta_1^2 = 1 - \alpha_1^2$]

3.7. Udregn sandsynligheden for i grundtilstanden (den med lavest E) at finde et par i basis-tilstanden $|2\rangle$.

BSØ 16.5.02

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
Dybdemoduleksamen i kvantemekanik
Torsdag 19. Juni 2003 kl. 10:00-14:00
KUN PERSONLIGE HJÆLPEMIDLER TILLADT:
INGEN KOMMUNIKATION I ELLER UD FRA EKSAMENSLOKALET
Opgavesættet består af 5 opgaver på i alt 4 ark papir

Opgave 1. Opgaven betragter en simpel én-dimensional model for et di-atomigt molekyle, givet ved potentialet

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \textit{for } x < -b \\ 0 & \textit{for } -b \le x \le -a \quad (\textit{område I}) \\ V_0 & \textit{for } -a < x < a, \textit{ hvor } V_0 \textit{ er en positiv konstant.} \quad (\textit{område II}) \\ 0 & \textit{for } a \le x \le b \quad (\textit{område III}) \\ +\infty & \textit{for } x > b \end{cases}$$

Opskriv bølgefunktionerne ψ for en enkelt elektron i en stationær tilstand og de tilhørende udtryk til bestemmelse af tilladte energier E, dvs. løsninger til den tidsuafhængige Schrödinger ligning for en elektron i ovenstående potentiale. Der betragtes kun energier i intervallet $0 < E < V_0$. Det tillades at bølgefunktionerne indeholder en enkelt skala-konstant, der senere vil kunne bestemmes ved normering. Vis at løsningerne kan skrives som enten lige eller ulige funktioner,

$$\psi(x) = \begin{cases} A\sin(k(x+b)) & i \textit{ område I} \\ B\exp(qx) + C\exp(-qx) & i \textit{ område II} \\ D\sin(k(x-b)) & i \textit{ område III} \\ 0 \textit{ ellers} \end{cases}$$

hvor der for lige løsninger gælder

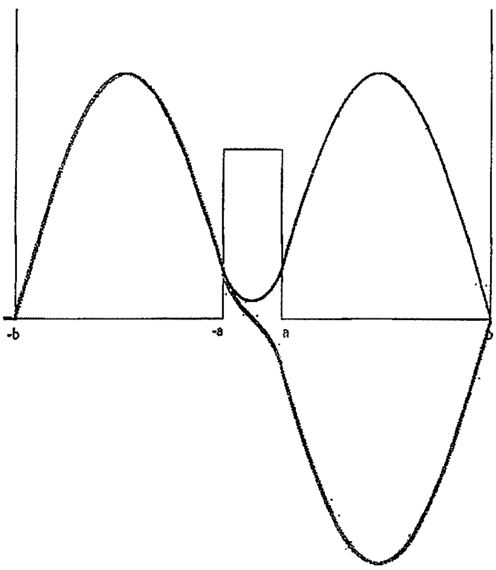
$$A = D = 2B\cosh(qa)/\sin(k(b-a)); \quad C = B; \quad kq^{-1}\cot(k(b-a)) = -\mathrm{tgh}(qa), \tag{i}$$

mens der for ulige løsninger gælder

$$A = -D = -2B\sinh(qa)/\sin(k(b-a)); \quad C = -B; \quad kq^{-1}\cot(k(b-a)) = -\coth(qa), \tag{ii}$$

med følgende sammenhæng mellem bølgetal og energi (m er elektronens masse):

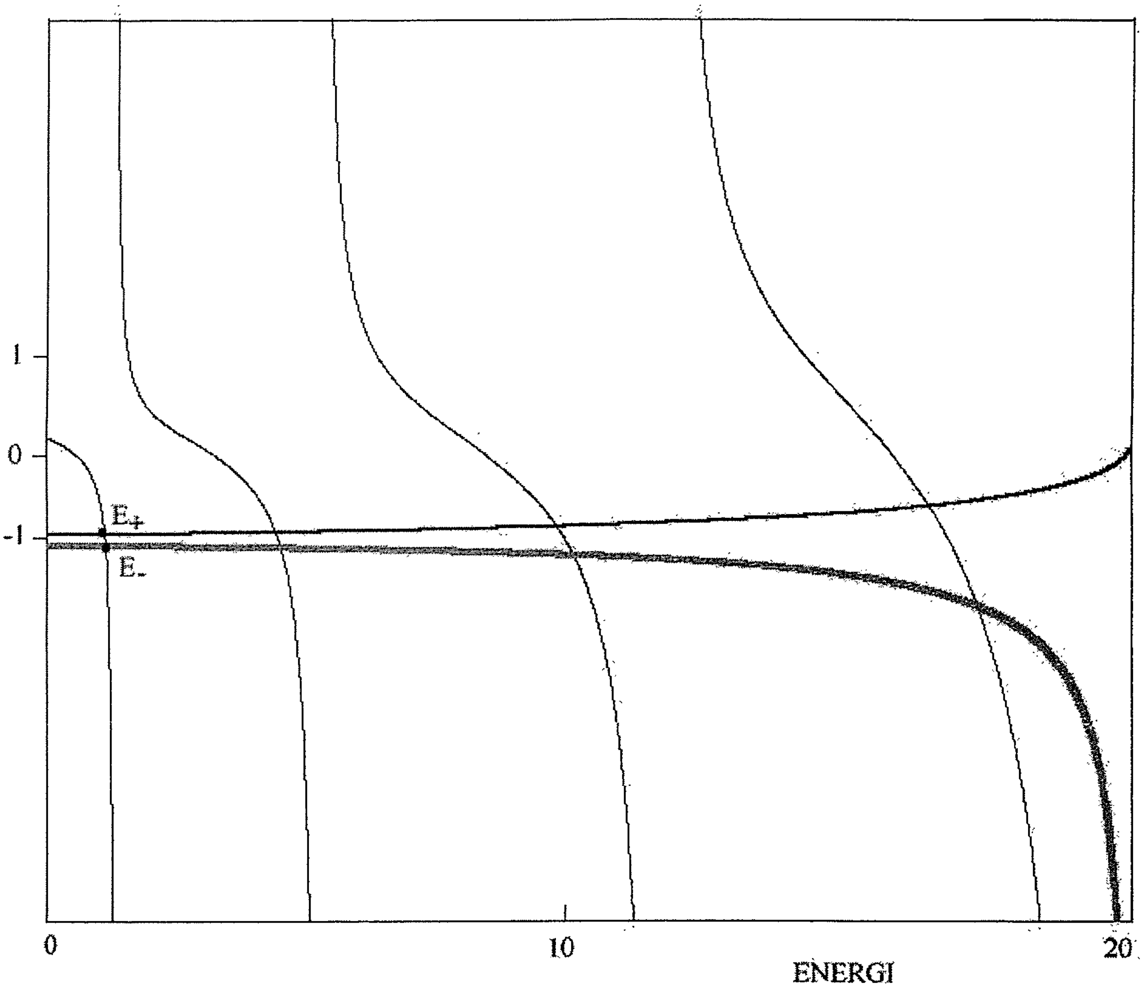
$$\hbar^2k^2 = 2mE; \quad \hbar^2q^2 = 2m(V_0 - E).$$



Figuren til venstre viser den laveste lige og ulige bølgefunktion for en version af det omhandlede potentiale.

Den numeriske løsning af energibetingelserne (udtrykkene der relaterer k og q) er illustreret i figuren øverst på følgende side, som giver den fælles venstre side af de to betingelser givet sidst i (i) og (ii) ovenfor (buede linjer oppefra og ned) samt de to højre sider (de i starten næsten vandrette linjer).

De tilladte energier falder i par (svarende til lige og ulige bølgefunktioner), der i starten ligger meget tæt men efterhånden afviger mere og mere, efterhånden som E nærmer sig V_0. De to laveste energier med tilhørende normerede bølgefunktioner betegnes E_+, ψ_+ (lige) og E_-, ψ_- (ulige).



De hyperbolske funktioner er defineret ved

sinh(z) = ½(exp(z) – exp(-z)); cosh(z) = ½(exp(z) + exp(-z))

tgh(z) = sinh(z) / cosh(z); coth(z) = cosh(z) / sinh(z).

Opgave 2. En endnu simplere model for det di-atomige molekyle ville være at lade V_0 i modellen beskrevet i opgave 1 være $+\infty$, dvs. potentialet består af to separate brønde med uendeligt høje vægge. Løsninger for et enkelt brøndpotential af denne form findes i alle lærebøger. Opskriv løsningerne for systemet med to separate brønde, altså tilladte energier og tilhørende bølgefunktioner.

2.1. Vis at løsningerne kan skrives som lige og ulige funktioner i analogi til de i opgave 1 fundne, og skitsér den laveste lige og ulige løsning i et potentiale svarende til den første figur i opgave 1. Hvad er energien af disse to tilstande?

2.2. De laveste par af energiløsninger i opgave 1 (figuren ovenfor) ses at ligge meget tæt og også tæt på løsningen for de separate brøndpotentialer. Man kunne derfor tænke på at løse opgave 1 ved perturbations-regning ud fra løsningerne til potentialet her i opgave 2. Hvorfor kan det ikke lade sig gøre?

Opgave 3. Nu betragtes tidsafhængige løsninger for potentialet givet i opgave 1. Elektronen startes i tilstanden

$$\psi(x,t=0)=\psi_0(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{b-a}}\sin k_0(x+b) & i\ område\ I\\ 0 & i\ alle\ øvrige\ områder\end{cases}$$

3.1. Vis at den tilnærmede form af denne tilstands rækkeudvikling på egentilstandene fundet i opgave 1, som kun medtager den laveste lige og den laveste ulige funktion, er

$$\psi_0(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+(x)+\psi_-(x))$$

3.2. Hvorledes udvikler denne tilstand sig i tiden?

3.3. Vis at tilstanden efter en vis tid Δt er blevet til

$$\psi(x,t=\Delta t)=\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+(x)-\psi_-(x))$$

3.4. Elektronen oscillerer mellem venstre og højre side af molekylet. Opskriv hvordan perioden $T = 2\Delta t$ i denne oscillation afhænger af E_+ og E_-.

Opgave 4. Antag nu, at der befinder sig to elektroner med spin i det di-atomige molekyle med potentialet givet i opgave 1.

4.1. Opskriv bølgefunktionerne for de mulige værdier af det totale spin, udtrykt ved spinbølgefunktionerne $\chi(s=½;\ m_s=\pm ½)$, og rumlige bølgefunktioner for den laveste lige eller ulige funktion ψ_+ og ψ_-.

Lad P være paritetsoperatoren $\qquad P: x \rightarrow -x$

og lad X være ombytningsoperatoren $\qquad X$: *partikel 1* $\longleftrightarrow$ *partikel 2.*

4.2. Opskriv virkningen af P og X på de i 4.1 fundne tilstande, og udled en sammenhæng mellem P og X, gyldig for virkningen på de betragtede tilstande.

Opgave 5. Personen P spiller med sin kvantecomputer Q et spil defineret som følger: P placerer en mønt i en æske med låg, med "krone" opad (på møntens ene side er et billede af en dronning med krone. Denne side betegnes "krone". Den anden side har et ligegyldigt indhold og betegnes "plat"). Nu stikker Q sin gribe-arm ned i æsken og kan vende mønten eller lade være, men uden på noget tidspunkt at se ned i æsken. Derefter er det P's tur til på samme vilkår at stikke hånden ned i æsken og evt. vende mønten. Så får Q endnu en tur og herefter åbnes æsken og møntens position checkes (kvantemekanisk: observeres). Hvis "krone" vender op vinder Q og hvis "plat" vender op vinder P.

De to tilstande repræsenteres ved vektorerne

$$"krone" = |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \qquad "plat" = |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

og de to strategier "vende mønten" eller "ikke vende den", som den menneskelige spiller P kan følge, repræsenteres ved operatorerne

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad og \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Imidlertid er kvantecomputeren Q udstyret med evnen til ikke blot at kunne foretage trækkene V og I, men også at kunne danne vilkårlige tilstands-superpositioner, og Q vælger som sin strategi for både sit første træk (dvs. aktion med gribe-arm i æsken) og sit andet træk hverken V eller I, men

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

5.1. Vis ved at lade operatorerne for successive træk virke på begyndelsestilstanden "krone", altså først S, så enten V eller I, og endelig S igen, at computeren vinder hver gang.

Irriteret over denne situation beslutter P sig til at snyde. Under sin anden tur sniger P sig til at se ned i æsken hvordan mønten er orienteret, før han foretager sit træk. Denne handling udgør en observation.

5.2. Hvad er nu P's chance for at vinde spillet?

5.3. Gør det nogen forskel hvilket træk P gør i anden runde?

Det ses at kun ved at snyde kan P opnå et "fair" spil som det klassiske. Har du nogen sinde mødt eller hørt om en kvantecomputer, der var i stand til at lave vilkårlige superpositioner?

BSØ 8.5.03

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
Dybdemoduleksamen i Kvantemekanik
Fredag 25. juni 2004 kl. 10.00–14.00
HJÆLPEMIDLER TILLADT
Opgavesættet består af FIRE opgaver på TRE ark papir.
Vægtning er angivet på opgaverne.

Opgave 1 [20%]

I de senere år er det ved hjælp af nanoteknologi lykkedes at lave nøjagtige diffraktionsgitre, der tillader bygningen af atom- og molekyl-interferometre. I det følgende betragter vi et atom-interferometer med en gitter-spaltebredde på 400 nm og en afstand fra gitter til detektor på 0.5 m.

1a. Vi betragter en stråle af Na-atomer med hastigheden 10^3 m s^{-1}. Beregn de Broglie bølgelængden for et Na-atom i strålen.
(Na har atommassen 22.99 amu; 1 amu = 1.66054×10^{-27} kg.)

1b. Stråleretningen betegnes z. Bevægelsen i en retning (x) vinkelret på stråleretningen repræsenteres ved en Gauss-bølgepakke, $\Psi(x,t)$, af samme form som den i Problem 2.22 studerede. Det gælder således, at

$$\Psi(x,0) = Ae^{-ax^2}, \qquad \sigma_x(t) = \sqrt{\frac{1+(t/\tau)^2}{4a}}, \qquad \tau = \frac{m}{2a\hbar},$$

og det antages, at $\sigma_x(0) = 200$ nm (den halve spaltebredde). Beregn $\sigma_x(t_1)$, hvor t_1 er den tid, det tager et atom at bevæge sig fra gitteret til detektoren.

Opgave 2 [15%]

Antag, at funktionen ψ er egenfunktion for operatoren $\widehat{F}$ med egenværdien λ,

$$\widehat{F}\psi = \lambda\psi.$$

Antag endvidere, at der findes en operator $\widehat{\Omega}$, således at

$$[\widehat{F}, \widehat{\Omega}] = k\widehat{\Omega},$$

hvor k er en konstant ($k \neq 0$).

2a. Vis, at også $\widehat{\Omega}\psi$ er en egenfunktion for $\widehat{F}$ og find den tilhørende egenværdi.

2b. Giv eksempler på operatorparret $(\widehat{F}, \widehat{\Omega})$ fra teorien for den harmoniske oscillator og fra teorien for impulsmomenter.

Opgave 3 [25%]

I denne opgave betragter vi et system af to skelnelige spin-1/2 partikler.

3a. Antag, at den totale spintilstand er singlet-tilstanden

$$|\Psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\chi_+^{(z)}(1)\chi_-^{(z)}(2) - \chi_-^{(z)}(1)\chi_+^{(z)}(2)\right\},$$

hvor $\chi_+^{(z)}$ og $\chi_-^{(z)}$ er de konventionelle egenspinorer for énpartikeloperatoren $\widehat{S}_z$.
Der foretages en måling af partikel 1's spinkomposant langs z-aksen, og resultatet findes at være $-\hbar/2$. Nedskriv formen af topartikeltilstanden umiddelbart efter målingen.
Successivt måles partikel 2's spinkomposant langs z-aksen. Hvilket resultat vil man forvente?

Sammen med $|\Psi_a\rangle$ betragter vi nu også tilstandene

$$|\Psi_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\chi_+^{(x)}(1)\chi_-^{(x)}(2) - \chi_-^{(x)}(1)\chi_+^{(x)}(2)\right\}$$

og

$$|\Psi_c\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\chi_+^{(y)}(1)\chi_-^{(y)}(2) - \chi_-^{(y)}(1)\chi_+^{(y)}(2)\right\},$$

hvor $(\chi_+^{(x)}, \chi_-^{(x)})$ og $(\chi_+^{(y)}, \chi_-^{(y)})$ tilsvarende er de konventionelle egenspinorer for de respektive énpartikeloperatorer $\widehat{S}_x$ og $\widehat{S}_y$.

3b. Udtryk $\chi_+^{(x)}$, $\chi_-^{(x)}$, $\chi_+^{(y)}$ og $\chi_-^{(y)}$ ved $\chi_+^{(z)}$ og $\chi_-^{(z)}$. En egentlig udledning af udtrykkene kræves ikke.

3c. Udtryk $|\Psi_b\rangle$ og $|\Psi_c\rangle$ ved $\chi_+^{(z)}(1)$, $\chi_-^{(z)}(1)$, $\chi_+^{(z)}(2)$ og $\chi_-^{(z)}(2)$. Kommenter resultatet.

Opgave 4 [40%]

Her betragtes grundtilstanden af det éndimensionale "hydrogenatom", defineret ved Hamiltonoperatoren

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|x|}, \qquad -\infty < x < \infty.$$

Som udgangspunkt anvender vi variationsprincippet med den normerede prøvefunktion

$$\psi(x) = Axe^{-\kappa|x|}, \qquad \kappa > 0.$$

4a. Bestem normeringskonstanten A.

4b. Bestem forventningsværdien $\langle\hat{T}\rangle$ af den kinetiske energi og forventningsværdien $\langle\hat{V}\rangle$ af den potentielle energi.

4c. Bestem den optimale værdi af κ og den tilhørende værdi for grundtilstandsenergien. Relater værdien af κ til den velkendte værdi af Bohr-radius.

4d. Beregn forventningsværdierne $\langle\hat{x}\rangle$, $\langle\hat{p}\rangle$, $\langle\hat{x}^2\rangle$ og $\langle\hat{p}^2\rangle$ samt værdien af ubestemthedsproduktet $\sigma_x\sigma_p$.

4e. Vis, at bølgefunktionen $\psi(x)$ defineret ved den optimale κ-værdi er en eksakt løsning til Schrödinger-ligningen for det éndimensionale hydrogenatom.

Hjælpeintegral:

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x}dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}, \qquad \alpha > 0.$$

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
Dybdemoduleksamen i Kvantemekanik
Fredag 20. august 2004 kl. 10.00–14.00
HJÆLPEMIDLER TILLADT
Opgavesættet består af FIRE opgaver på TRE ark papir.
Vægtning er angivet på opgaverne.

Opgave 1 [10%]

Cæsium-atomet har en kraftig elektronisk overgang ved bølgelængden $\lambda = 850$ nm. Ved absorption af en foton svarende til denne bølgelængde overføres fotonens impuls p til atomet. Dette tildeles herved en kinetisk energi E_R,

$$E_R = \frac{p^2}{2m},$$

hvor m er cæsium-atomets masse.

Beregn E_R/k_B, hvor k_B er Boltzmanns konstant.
(Cæsium har atommassen 132.905 amu; 1 amu = 1.66054×10^{-27} kg.)

Opgave 2 [40%]

I denne opgave betragter vi den harmoniske oscillator i én dimension.

2a. Nedskriv de normerede bølgefunktioner $\psi_0(x), \psi_1(x), \psi_2(x)$ og $\psi_3(x)$ ud fra det generelle udtryk [2.69] hos Griffiths. Det af disse fire funktioner udspændte funktionsrum betegnes i det følgende Ω_4.

2b. For matrixelementerne $\langle\psi_n|\hat{x}|\psi_{n'}\rangle$ gælder følgende generelle udtryk:

$$\langle\psi_n|\hat{x}|\psi_{n'}\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n'}\delta_{n,n'-1} + \sqrt{n}\delta_{n,n'+1}\right).$$

Opstil den ved funktionsrummet Ω_4 definerede 4×4 matrix $\langle\psi_n|\hat{x}|\psi_{n'}\rangle$.

2c. Nedskriv herefter de tilsvarende 4×4 matricer $\langle\psi_n|\hat{x}^2|\psi_{n'}\rangle$ og $\langle\psi_n|\hat{x}^4|\psi_{n'}\rangle$ ud fra den antagelse, at funktionsrummet Ω_4 er fuldstændigt.

2d. Bestem matrixelementerne $\langle\psi_0|\hat{x}^4|\psi_0\rangle$ og $\langle\psi_0|\hat{x}^4|\psi_2\rangle$ ved direkte udregning (integration over x). Sammenlign resultaterne med resultaterne indeholdt i den ovenfor bestemte 4×4 matrix for $\langle\psi_n|\hat{x}^4|\psi_{n'}\rangle$.

2e. I Problem 3.50 anfører Griffiths også et generelt udtryk for matrixelementerne $\langle\psi_n|\hat{x}|\psi_{n'}\rangle$. Dette udtryk er lidt forskelligt fra det i spørgsmål 2b anførte. Giv en begrundelse herfor.

Hjælpeudtryk:

$$\int_0^\infty x^n e^{-\beta x^2} dx = \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{2\beta^{\frac{n+1}{2}}}, \quad \beta > 0; \quad \Gamma(n+1) = n\Gamma(n); \quad \Gamma(\tfrac{1}{2}) = \sqrt{\pi}.$$

Opgave 3 [30%]

Her betragtes et atom med massen m, der bevæger sig i en enkelt bølgedal i et éndimensionalt optisk gitter frembragt af to modsatrettede laserstråler. Hamilton-operatoren er

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}V_0 \sin^2 \kappa x = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0\left(\frac{1}{2}\kappa^2 x^2 - \frac{1}{6}\kappa^4 x^4 + \ldots\right).$$

Her er $\kappa = 2\pi/\lambda$, hvor λ er laserlysets bølgelængde. Indføres ω ved relationen $\omega = \sqrt{\frac{V_0}{m}}\kappa$, kan $\widehat{H}$ skrives

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{1}{6}\frac{m^2\omega^4}{V_0}x^4 + \ldots$$

Det kvantemekaniske problem defineret ved denne Hamiltonoperator kan behandles ved hjælp af perturbationsteori med

$$\widehat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

og

$$\widehat{H}' = -\frac{1}{6}\frac{m^2\omega^4}{V_0}x^4,$$

idet højere potenser af x negligeres. Nulte ordens energierne er

$$E_n^0 = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Vi betragter i det følgende kun grundtilstanden, med nulte ordens energien E_0^0.

3a. Bestem første ordens korrektionen E_0^1 til grundtilstandsenergien (se kommentaren nedenfor).

3b. Bestem anden ordens korrektionen E_0^2.

3c. Beregn værdien af $\hbar\omega/k_B$ for et cæsium-atom under antagelse af, at $\lambda = 850$ nm og $V_0 = 10^4 E_R$ (jvf. Opgave 1).

Kommentar: Ved besvarelsen af spørgsmål 3a og 3b forventes man at anvende resultaterne fra opgave 2, og desuden relationen

$$\langle\psi_0|\hat{x}^4|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\langle\psi_0|\hat{x}^4|\psi_2\rangle.$$

Har man ikke løst opgave 2 fuldstændigt, kan man som en nødløsning sætte alle *ikke forsvindende* integraler af typen $\langle\psi_0|\hat{x}^4|\psi_n\rangle$ lig $\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2$.

Opgave 4 [20%]

Den normerede kuglefladefunktion $Y_4^0(\theta,\phi)$ har formen

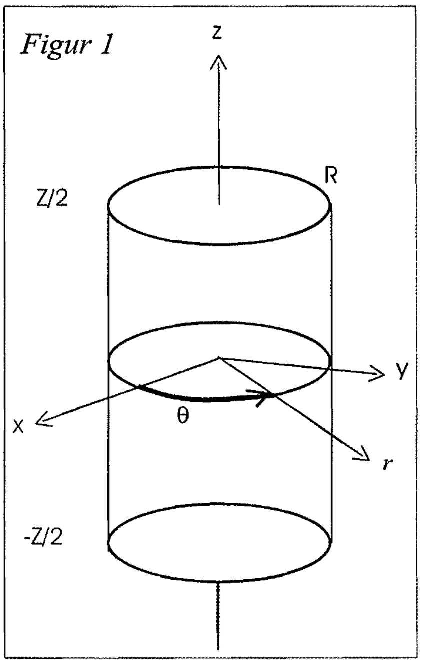
$$Y_4^0(\theta,\phi) = \frac{3}{16}\sqrt{\frac{1}{\pi}}\left(35\cos^4\theta - 30\cos^2\theta + 3\right).$$

Bestem, under anvendelse af operatorerne $\widehat{L}_+$ og $\widehat{L}_-$, de normerede kuglefladefunktioner $Y_4^1(\theta,\phi)$ og $Y_4^{-1}(\theta,\phi)$.

ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER
Dybdemoduleksamen i kvantemekanik
Tirsdag 21. Juni 2005 kl. 10:00-14:00
KUN PERSONLIGE HJÆLPEMIDLER TILLADT:
INGEN KOMMUNIKATION I ELLER UD FRA EKSAMENSLOKALET
Opgavesættet består af 4 opgaver på i alt 4 ark papir.
Stort set alle delspørgsmål kan besvares uden at de foregående er besvaret.

Opgave 1. Opgaven betragter et rotationssymmetrisk nanorør med radius R og længde Z. En partikel med massen m befinder sig inde i røret, der beskrives med et potentiale $V(r,z)$ som afhænger af afstanden r fra rørets centerlinje, af koordinaten z langs røret, men ikke af den tredje koordinat, vinklen θ for drejninger omkring z-aksen. Systemet antages fuldstændigt beskrevet ved de rumlige koordinater (dvs. spin og lignende betragtes ikke).

Figur 1



1.1. Vis at Schrödingerligningen for systemets stationære tilstande i cylindriske koordinater (r,z,θ) (cf. Figur 1) antager formen

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi + V(r,z)\Psi = E\Psi \quad [1.1]$$

Herefter bruges den fra sfæriske potentialer kendte faktoriseringsmetode:

$$\Psi(r,\theta,z) = \Psi_1(r,z)\Psi_2(\theta)$$

1.2. Vis at løsningerne for vinkeldelen af bølgefunktionen kan skrives

$$\Psi_2(\theta) = c_2 \exp(in_1\theta) \qquad \text{med } n_1 = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

og at den resterende del af Schrödingerligningen bliver

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi_1(r,z) + \left(V(r,z) - E + n_1^2\frac{\hbar^2}{2mr^2}\right)\Psi_1(r,z) = 0 \qquad [1.2]$$

Opgave 2. For et nanorør af den i opgave 1 beskrevne type antages potentialet nu at have formen

$$V(r,z) = \begin{cases} 0 & \text{for } r \le R \text{ og } |z| \le Z/2 \\ \infty & \text{ellers} \end{cases} \qquad [2.1]$$

2.1. Foretag en yderligere separation af bølgefunktionen,

$$\Psi_1(r,z) = \varphi(r)\Psi_3(z),$$

og vis herved at Schrödingerligningen [1.2] med potentialet [2.1] har løsninger for z-delen, $\Psi_3(z)$, af formen

$$\Psi_3(z) = a_1 \sin(\beta z) + a_2 \cos(\beta z) \qquad \text{med} \quad \beta = \frac{\pi n_2}{Z},$$

og hvor grænsebetingelsen for $z = \pm Z/2$ opfyldes når $a_1 = 0$ for ulige n_2 og at $a_2 = 0$ for lige n_2 (med n_2 lig et heltal større end 0 i alle tilfælde). Vis at den resterende Schrödingerligning for r-delen bliver

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \left(q^2 - \frac{p^2}{r^2}\right)\right)\varphi(r) = 0 \quad \text{hvor } p = n_1 \text{ og } \quad q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{n_2^2 \pi^2}{Z^2} \qquad [2.2]$$

Løsninger til denne differentialligning er som i det sfæriske tilfælde Bessel og Neumann funktioner:

$$\varphi(r) = c_1 J_p(qr) + c_2 N_p(qr) \qquad [2.3]$$

2.2. Nu indskrænkes opgaven til at betragte løsninger med $n_1 = 0$ og $n_2 = 1$. Brug forholdene ved $r = 0$ til at argumentere for at kun Bessel-delen af [2.3] med $p = 0$ er mulig, altså at løsningen kan udtrykkes alene ved J_0 og derfor kan omformes til*

$$\varphi(r) = \varphi_0(r) = c_1 \frac{\sin(qr)}{qr} \qquad \text{med} \quad q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\pi^2}{Z^2} \qquad [2.4]$$

2.3. Brug endvidere grænsebetingelsen ved $r = R$ til at bestemme systemets energi E_0 i den betragtede grundtilstand,

$$E = E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{1}{R^2} + \frac{1}{Z^2}\right)$$

Opgave 3. Kulstof nanorør har været foreslået anvendt til lagring af brint. Modellen i opgave 2 omformes nu til at beskrive nanorøret som en tynd skal, med et potentiale der er nul såvel indenfor som udenfor kulstofskallens barriere og som tillige indeholder en ikke nærmere specificeret tidsafhængighed. Til gengæld interesserer opgaven sig nu ikke for vinkelafhængigheden eller z-afhængigheden (røret betragtes f.eks. som meget langt). Der betragtes således kun en éndimensional Schrödingerligning med r og tiden t som variable og med det i Figur 2 skitserede rumlige potentiale. For at vurdere sandsynligheden for at en partikel (såsom et brintmolekyle) placeret inde i røret undslipper til ydersiden skal den tidsafhængige Schrödingerligning i spil,

$$H(t)\varphi(r,t) = i\hbar \frac{\partial \varphi(r,t)}{\partial t}. \qquad [3.1]$$

Der betragtes en situation, hvor systemet for $t = 0$ er i den i opgave 2.2 fundne tilstand for $r < R$ og bølgefunktionen er nul udenfor røret (denne tilstand benævnes $\varphi_0^{(\text{inde})}$), og der undersøges en sluttilstand, hvor partiklen er sluppet ud af røret, men befinder sig i en tilstand der stadig er givet ved Besselfunktionen [2.4], men nu med værdien nul for $r < R$ (denne tilstand kaldes $\varphi_0^{(\text{ude})}$). Såvel begyndelses- som sluttilstanden opfylder grænsebetingelsen at være nul ved rørets potentialbarriere, som antages forsvindende tynd og med en højde V_0, der bestemmes af detaljerne i $H(t)$. De to bølgefunktioner er skitserede i Figur 2.

* Tilføjelse efter afholdt eksamen: Den opgivne løsning [2.4] er ikke korrekt for det cylindriske tilfælde.

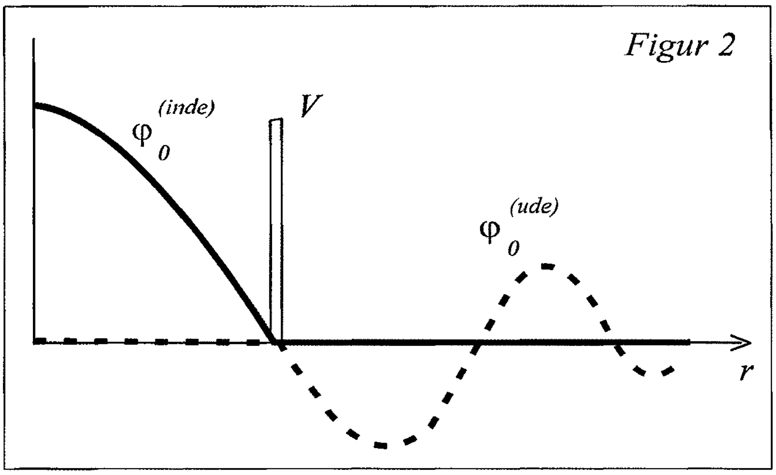
3.1. Betragt nu tidsudviklingen af den overfor beskrevne situation givet ved en bølgefunktion

$$\varphi(r,t) \;=\; \left(c_1(t)\varphi_0^{(inde)}(r) + c_2(t)\varphi_0^{(ude)}(r)\right)\exp\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar}\right) \quad \text{med } c_1(0) = 1 \text{ og } c_2(0) = 0 \qquad [3.2]$$

i en særlig version af tidafhængig perturbationsregning. Den sædvanlige kan ikke direkte anvendes fordi begyndelses- og sluttilstandene antages at have samme energi E_0, men fremgangsmåden kan kopieres ved at indsætte bølgefunktionen [3.2] i [3.1]. Vis at ligningerne til bestemmelse af de tidsafhængige koefficienter herved bliver

$$i\hbar\frac{dc_1}{dt} \;=\; c_2 < \varphi_0^{(inde)} \mid H \mid \varphi_0^{(ude)} >$$

$$i\hbar\frac{dc_2}{dt} \;=\; c_1 < \varphi_0^{(ude)} \mid H \mid \varphi_0^{(inde)} >$$



3.2. Vis at løsningen til disse ligninger med de givne antagelser til første orden kan skrives

$$c_1(t) \;=\; 1$$

$$c_2(t) \;=\; -\frac{i}{\hbar}\int_0^t < \varphi_0^{(ude)} \mid H \mid \varphi_0^{(inde)} >_{\text{udregnet til tiden } t'} dt'$$

Giv en kort forklaring af hvad matrix-elementet af H skal indeholde for at c_2 bliver forskellig fra 0.

Opgave 4. En "qubit" er et kvantesystem med kun to egentilstande (eksempelvis et spin-½ system eller et atom med en grundtilstand og en enkelt, dominerende exciteret tilstand). Et muligt koncept for kvantecomputere består af qubits der prepareres i en overlejret ("entangled") tilstand, og hvor "data input" realiseres gennem målinger på en eller flere qubits (således at de tvinges ind i en bestemt egentilstand). Med passende opbygning af systemet ændrer herved yderligere en qubit blandt de oprindeligt overlejrede sin tilstand til én, der svarer til resultatet af den ønskede regneoperation, og denne information kan hentes ud af kvantecomputeren ved en måling på denne qubit. Opgaven betragter regneoperationen "negation", som ændrer en af systemet to egentilstande til den anden. De nævnte målinger sker ved, over en tidsperiode $0 \leq t \leq T$, at påtrykke det relevante qubit-system et tidsafhængigt magnetfelt, $\boldsymbol{B} = B_0 \sin(\omega t)\boldsymbol{e}_z$, i z-aksens retning.

4.1. Vis at den tidsafhængige Schrödingerligning $H\chi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi$ i den ovenfor beskrevne situation (med $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ antaget at svare til kvantisering efter z-aksen) kan skrives

$$\frac{da}{a} = i\frac{H_1}{\hbar}\sin(\omega t)\,dt; \qquad \frac{db}{b} = -i\frac{H_1}{\hbar}\sin(\omega t)\,dt,$$

hvor H_1 er givet ved B_0 og den gyromagnetiske konstant γ,

$$H_1 = \frac{\hbar}{2}\gamma B_0.$$

4.2. Vis at løsningen for det tilfælde hvor begyndelsestilstanden ved $t = 0$ er $\chi_0^+(t=0) = \frac{1}{2^{1/2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$, (svarende til spin-projektionen $+\frac{\hbar}{2}$ langs y-aksen) kan skrives

$$\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \frac{1}{2^{1/2}}\begin{pmatrix}\exp\{-\frac{iH_1}{\hbar\omega}(\cos(\omega t)-1)\}\\ i\exp\{\frac{iH_1}{\hbar\omega}(\cos(\omega t)-1)\}\end{pmatrix}.$$

4.3. Vis at virkningen af spinoperatoren S_y for y-projektionen af spinnet på den i opgave 4.2 fundne tilstand kan skrives $S_y\chi = S_y\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \frac{i\hbar}{2}\begin{pmatrix}-b\\ a\end{pmatrix}$.

4.4. Vis at skalarproduktet $<\chi_0^- | S_y | \chi>$ af den i opgave 4.3 fundne vektor med tilstanden der svarer til spinprojektion $-\frac{\hbar}{2}$ langs y-aksen, $\chi_0^- = \frac{1}{2^{1/2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}$, er

$$\frac{i\hbar}{2}\sin\left(\frac{H_1}{\hbar\omega}(\cos(\omega t)-1)\right).$$

4.5. I hvilket tidsrum T skal magnetfeltet virke for at ændre spinnets y-projektion fra $\frac{\hbar}{2}$ til $-\frac{\hbar}{2}$, og hvilken værdi skal magnetfeltet B_0 mindst have (for at argumentet i skalærproduktets sinusfunktion i opgave 4.4 numerisk kan opnå værdien $\frac{\pi}{2}$)?

BSØ 8.5.05

Roskilde Universitetscenter

Dybedemoduleksamen i kvantemekanik

Monday 26. June 10.00-14.00

ONLY PERSONAL HELP-MATERIALS ALLOWED: NO COMMUNICATION WITHIN OR OUT FROM THE EXAM ROOM.

The exam consists of three problems. These are independent of each other (they can be answered in any order). The parts within a given problem have equal weight. Answers may be written either in Danish or in English.

1 Question 1 (40 percent)

Two identical spin-1/2 particles (therefore fermions), with position variables x_1 and x_2 and mass m, are subject to a one-dimensional harmonic oscillator potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Assume first that the particles do not interact with each other.

(a) Write down the Hamiltonian for this system. What is the ground state wavefunction $\Psi_0(x_1, x_2)$, including spin? What is the ground state energy?

(b) What is the first excited state energy? What is the degeneracy of this energy (how many states are there actually with this energy)? Write down the wavefunctions in terms of the usual one-particle harmonic oscillator wavefunctions (which you can call $\psi_0(x), \psi_1(x)$, etc).

Now suppose the particles are connected by a spring with spring constant α, so there is an extra term in the Hamiltonian $H' = \frac{1}{2}\alpha(x_2 - x_1)^2$.

(c) Use first-order perturbation theory to estimate the correction to the ground state energy, E_0^1.

(d) Next, use the variational principle with a gaussian trial wavefunction $\Psi(x_1, x_2) = Ae^{-b(x_1^2+x_2^2)}$, where A is a normalizing constant, to estimate the real (with interactions included) ground-state energy by varying the parameter b. Without knowing the exact ground state energy, can you say whether this estimate is any better than the perturbation theory estimate?

2 Question 2 (30 percent)

In this problem we will consider a particle with spin-1. We ignore the motion of the particle (that is, the space part of the wavefunction) and concentrate only on the spin.

(a) How many states does this system have? List them, using the usual quantum numbers representing total spin and z-component of spin.

(b) Write the states as column vectors and write the operator for the z-component component of the spin as a matrix.

(c) We want to obtain the matrices which represent the x- and y-components of the spin. To do this you must first obtain the matrix forms of the raising and lowering operators. Do this by (1) considering the action of S_+ and S_- on each state, which gives the columns of the matrix apart from an overall constant, and (2) using $S_\pm|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)}|s(m\pm 1)\rangle$ to fix the constant.

(d) Write out the matrix forms of S_x and S_y.

(e) Suppose that the particle is charged, and therefore has a magnetic moment $\vec{\mu} = \gamma\vec{S}$. Write down the Hamiltonian which corresponds to the particle being in the presence of a fixed magnetic field $\vec{B}$ (with arbitrary direction). Write it both in terms of operators and as a matrix.

(f) Now assume that $\vec{B}$ points in the z-direction. Suppose at time $t = 0$ the particle is in a state $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_A + \psi_B)$ where ψ_A and ψ_B are the basis states with highest and second highest z-component of spin, respectively. Calculate the expectation value of the y-component of spin as a function of time.

3 Question 3 (30 percent)

(a) Consider the three-dimensional harmonic oscillator with potential $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$. Show that the Hamiltonian can be written as a sum of three separate one-dimensional Hamiltonians. Then write the form of the energy eigenstates and eigenvalues in terms of one-dimensional eigenfunctions.

(b) What are the first four *distinct* energy eigenvalues and what are their degeneracies?

(c) Now, consider a one-dimensional potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ for $x > 0$ and $V(x) = \infty$ for $x < 0$. Use your knowledge of the ordinary harmonic oscillator in one dimension to determine the energy eigenvalues and sketch the ground state wavefunction.

(d) Returning to the three-dimensional oscillator, but now thinking in terms of the radial variable r, write down the radial equation for $u(r) = rR(r)$ for general l. Then consider the case $l = 0$. Argue that this is equivalent to the one-dimensional half-harmonic oscillator and show that you get the same ground state energy as in part (b).

(e) The energy eigenstates that you have from treating the three-dimensional oscillator do not correspond one-to-one with the ones you get by separating into radial and angular functions (except for the ground state). Because there is degeneracy, all you can say is that an eigenstate which is a product of one-particle functions can be written as a sum of terms with different nlm and vice versa. Show that the state $\Psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{100} + i\psi_{010})$ (where the subscripts indicate the quantum numbers of the one-dimensional wavefunctions, and NOT nlm) is (1) an energy eigenstate, and find the eigenvalue, and (2) an eigenstate of the L_z operator, and find the eigenvalue.

Roskilde Universitetscenter
Dybedemoduleksamen i kvantemekanik
Friday 15. June, 2007. 10.00-14.00
ONLY PERSONAL HELP-MATERIALS ALLOWED: NO COMMUNICATION WITHIN OR OUT FROM THE EXAM ROOM

Questions 1, 2 and 3 are independent of each other and can be answered in any order.

Question 1 (40 %) One-dimensional analog of the Hydrogen molecular ion

We have seen in the course that for a potential $V(x) = -\alpha\delta(x)$ the ground state wavefunction has the (non-normalized) form $\exp(-K_0|x|)$ with energy $-\frac{\hbar^2 K_0^2}{2m}$ where $K_0 = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$. Here we will consider a double delta-function potential, $V(x) = V_a(x) + V_{-a}(x) \equiv -\alpha\delta(x-a) - \alpha\delta(x+a)$.

1. (5%) Write down the (normalized) wavefunction $\psi_{-a}(x)$ that would be the ground state wavefunction if there were just one delta-function well at $x = -a$, and the (normalized) wavefunction $\psi_a(x)$ that would be the ground state if there was just one well at $x = a$. What is the energy in these cases?
2. (10%) We will consider a pair of trial wavefunctions $\psi_+(x)$ and $\psi_-(x)$ for the variational method, of form $\psi_\pm(x) = A(\psi_{-a}(x) \pm \psi_a(x))$. Are these functions even, odd or neither? Find the normalization constant A. Check that it makes sense in the limit $a \to \infty$. What happens in the case of ψ_- in the limit $a \to 0$, and why?
3. (15%) Calculate the expection value of $H = T + V_{-a}(x) + V_a(x)$ in the states ψ_+ and ψ_-, where $T = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ is the kinetic energy operator. Note: calculating the kinetic energy part by itself is a little tricky because the first derivative is not continuous. But you can avoid having to deal with this by using the fact that $\psi_a(x)$ is an eigenstate of $H_a \equiv T + V_a(x)$ (and similarly with $\psi_{-a}(x)$).
4. (5%) Of the two states ψ_+ and ψ_-, which would you expect to be a reasonable estimate of the ground state energy? Suggest a way to improve the calculation (but do not do it)
5. (5%) Investigate the behaviour of $\langle H\rangle_{\psi_\pm}$ in the limits $a \to \infty$ and $a \to 0$. Is it what you expect?

Question 2 (30 %) Discrete analog of a free particle in one dimension

We consider a system consisting of N sites arranged on the x-axis at positions $0, a, 2a, 3a, \ldots, (N-1)a$. We define a set of basis states for this system $\{|n\rangle\}$ where $|n\rangle$ represents the particle being located at site n. A general state may then be written as $|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$. To model a particle that can move from site to site, we consider a Hamilonian operator which in matrix form looks like

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -t & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & -t \\ -t & 0 & -t & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & 0 & -t & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & -t & 0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

where $t > 0$. So every state $|n\rangle$ is connected to the neighboring states $|n-1\rangle$ and $|n+1\rangle$ by a matrix element $H_{n,n-1} = H_{n,n+1} = -t$. For convenience we imagine that the line is "wrapped around" as if in a circle, so that state $|N-1\rangle$ is not only beside state $|N-2\rangle$ but also $|0\rangle$ (this is called periodic boundary conditions). That is why there is a $-t$ in the bottom left and top right corners of the matrix; it means we don't have to worry about treating sites 0 and $N-1$ in a special way.

1. (6%) If the coefficients c_n are gathered to make a column vector $\underline{c}$, then the time independent Schrödinger equation is $H\underline{c} = E\underline{c}$ where E is an eigenvalue. Write out the nth row of this matrix equation explicitly.

2. (6%) Now we guess a solution $\vec{c}^k$ of the plane-wave form: $c_n^k = A\exp(ikna)$. By substituting into the result from the last part, show that this is indeed an eigenstate and write down the eigenvalue. Also determine the constant A by normalization.

3. (6%) Show that adding $2\pi/a$ to k gives the same state (that is, $c_n^{k+2\pi/a} = c_n^k$). This means we need only consider a range of k from $-\pi/a$ to π/a. Sketch E as a function of k in this range.

4. (6%) To make the connection with our normal concept of a particle moving in one dimension, we consider states with a wavelength much longer than the spacing between sites a, that is $ka(= 2\pi a/\lambda) \ll 1$. Expand the energy near the ground state in this limit; then by comparing to the usual expression for the energy of a free particle, $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, write down what t must be in terms of m, $\hbar$ and a.

5. (6%) Because there are a finite number (N) of basis states that we started with, there must be the same finite number of energy eigenstates. That means that not all values of k within the range $-\pi/a$ to π/a are possible. ecause of the periodic boundary conditions it must be that if you put $n = N$ in c_n^k, it must be the same as c_0^k. Use this to get an expression for allowed values of k. Then write down the energy difference between the ground state and the first excited state. What is the degeneracy of the first excited state and what is its physical interpretation?

Question 3 (30 %) Two localized electrons in a magnetic field

We consider two localized electrons, for example they are part of trapped ions and not free to move in space. So we can ignore the space part of their wavefunction, and also ignore the requirement of antisymmetry. The magnetic field $\vec{B}$ is pointing in the positive z-direction and the ratio between the magnetic moment of each electron and its spin-angular momentum is a constant γ.

1. (5%) Write an expression forthe Hamiltonian H_B in terms of the spin operators $\vec{S}^{(1)}$ and $\vec{S}^{(2)}$. Then write it as a 4×4 matrix in the basis of eigenstates of $S_z^{(1)}$ and $S_z^{(2)}$, the spin operators for the first and second electrons respectively.

2. (5%) Write down the energy eigenvalues and the corresponding eigenstates (use arrow notation $\uparrow\downarrow$ etc.).

3. (5%) We now add an additional term to the Hamiltonian of the form $H' = -\beta\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)}$ (β is a real, positive constant). Show that H' is not diagonal in the basis we started with by computing the matrix element $H'_{\uparrow\downarrow,\downarrow\uparrow} = (H'_{\downarrow\uparrow,\uparrow\downarrow})^*$ between states $\uparrow\downarrow$ and $\downarrow\uparrow$.

4. (10%) Show that both H_B and H' (and therefore $H = H_B + H'$) are diagonal in the basis consisting of eigenstates of $(S^{(1)})^2$, $(S^{(2)})^2$, $(S^{(\mathrm{tot})})^2$ and $S_z^{(\mathrm{tot})}$, where $\vec{S}^{(\mathrm{tot})} \equiv \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ is the total spin. Write down the new energy eigenvalues and the corresponding eigenstates (in terms of the old basis).

5. (5%) Until now, H' was taken to be time-independent. Now instead suppose that H' was "turned on" at time $t = 0$ and "turned off" again at time $t = T$, and also assume that β is small. In this case the original basis states are good states, but the perturbation will cause transitions between them. What transitions are possible? You do not need to calculate the transition probabilities. In fact, if you think carefully, you do not need to calculate anything new at all.

Roskilde Universitetscenter

Dybedemoduleksamen i kvantemekanik

Monday 23. June, 2008. 10.00-14.00

CLOSED-BOOK EXAM: NO EXTRA MATERIALS ALLOWED BEYOND THE FORMULAS INCLUDED WITH THE EXAM SET (THIS INCLUDES NO CALCULATORS)

Questions 1, 2 and 3 are independent of each other and can be answered in any order.

Question 1 (40 %)

We will consider a harmonic oscillator potential for particles of mass m, constrained to move in one dimension: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. There are two particles in this system, which to start with are considered to be non-interacting.

1. (10%) Assuming first the particles are distinguishable and have no spin, what are the first three allowed energy levels of the system, and what are the corresponding degeneracies? For each level write the energy eigenstate (if there is degeneracy, write down a set of orthogonal eigenstates) in terms of the product states $\psi_{mn} = \psi_m(x_1)\psi_n(x_2)$ where the n or m is the index of the one-particle eigenstate and the x_1 and x_2 are the positions of the particles.
2. (10%) Now suppose the particles are identical and have spin-1/2. What are the lowest three energy levels and their degeneracies? Write out the states, including the spin part.
3. (10%) For the calculation coming up we need the explicit expression for the one-particle state $\psi_1(x)$. Calculate this by use of the raising operator a_+ and sketch it.
4. (10%) We add now a perturbation to the system consisting of a short-range attractive interaction between the particles:

$$H' = -\alpha\delta(x_1 - x_2) \tag{1}$$

where $\alpha > 0$. Calculate the first order correction to the ground state energy and first excited energy (note that not all of the states corresponding to the first excited energy are affected the same way!).

Question 2 (35 %) Hydrogen atom

1. (10%) Sketch the radial part of the Hydrogen orbital states ψ_{200} and ψ_{210}. In the case of ψ_{210} calculate $\langle r \rangle$.

   Including spin now, consider a state ψ which is a linear combination of eigenstates (χ_+ and χ_- are the spin states which are eigenstates of S_z with eigenvalues $\hbar/2$ and $-\hbar/2$, respectively):

$$\psi = A(\psi_{200}\,\chi_+ + (1+i)\,\psi_{210}\,\chi_+ + 3\,\psi_{211}\,\chi_-) \tag{2}$$

2. (5%) Calculate A so that ψ is normalized.
3. (10%) If a measurement of the square of total orbital angular momentum (L^2) is made, what are the possible results, and what is the probability of measuring each?
4. (10%) Suppose the L^2 is measured and the result is $2\hbar^2$. What is the probability to measure the Z-component of spin to be $\hbar/2$ immediately after this L^2 measurement?

Question 3 (25 %) Scattering in 1D

For a particle of mass m moving in one dimension, consider a step potential $V = 0$, for $x < 0$, and $V = V_0$, for $x > 0$. Here $V_0 > 0$. We are interested in what happens to an incident particle of energy $E > 0$ approaching from the left.

1. (5%) What would happen classically for $E < V_0$ and $E > V_0$? Are there any bound states (energy eigenstates with negative energy) in this system?
2. (10%) Consider the case with $E > V_0$ and calculate the probability R for the particle to be reflected back from the step. Write the answer in terms of the quantity $Z = E/V_0$
3. (10%) Without doing the full calculation, argue why the reflection probability is 100% in the case $E < V_0$. Check that your result for part (2) agrees with this in the limit $E \to V_0$. Can you say anything about the limit of high incident energy ($Z \to \infty$) ?

Roskilde Universitet

Dybdemoduleksamen i kvantemekanik

onsdag d. 24. juni, 2009. 10.00-14.00

INGEN HJÆLPEMIDLER TILLADTE UDOVER DEN UDLEVEREDE FORMELSAMLING OG JERES EGEN FORMELSAMLING. INGEN LOMMEREGNERE

Opgavesættet er på tre sider. Opgave 1, 2 og 3 er uafhængige af hinanden og kan besvares i hvilken som helst rækkefølge.

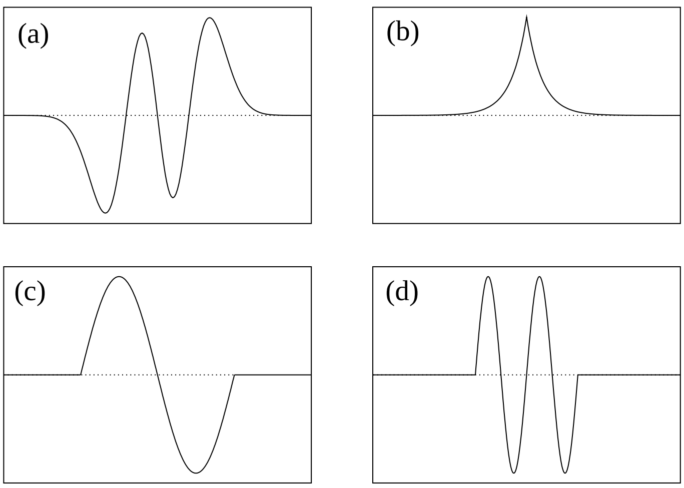
Opgave 1 (40 %)

I denne opgave betrager vi tre potentialer for en partikel der bevæger sig i én dimension: den uendelige firkantbrønd $V_{\mathrm{UFB}}(x) = 0$ for $0 < x < a$, og $V_{\mathrm{UFB}}(x) = \infty$ for alle andre værdier af x; den harmoniske oscillator $V_{\mathrm{HO}}(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$; og delta-funktionspotentialet $V_{\mathrm{DF}}(x) = -\alpha\delta(x)$, med $\alpha > 0$. Grundtilstandene til de tre potentialer betegnes henholdsvis

$$\psi^g_{\mathrm{UFB}}(x) = A\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \tag{1}$$

$$\psi^g_{\mathrm{HO}}(x) = B\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \tag{2}$$

$$\psi^g_{\mathrm{DF}}(x) = C\exp\left(-\frac{m\alpha|x|}{\hbar^2}\right). \tag{3}$$



1. (10%) Hver bølgefunktion i figuren ovenfor er en energi-egentilstand for et af tre de overnævnte potentialer. Angiv for hver bølgefunktion, hvilket potentiale der er tale om, og hvilken egentilstand (for eksempel "$n = \ldots$"—angiv også hvilken n der svarer til grundtilstanden)

2. (10%) Beregn grundtilstandsenergien i hvert tilfælde ved at operere på grundtilstand-bølgefunktionen med den relevante Hamilton-operator.

   [Bemærk, at $\frac{d^2}{dx^2}\exp(-b|x|) = b^2\exp(-b|x|) - 2b\delta(x)$]

3. (10%) Normér hver grundtilstand (beregn koefficienterne A, B og C i ligninger (1), (2) og (3)), og beregn variansen σ_x^2 af sandsynlighedsfordelingen for stedkoordinaten x.

4. (10%) Beregn for hvert system forventningsværdien af den kinetiske energi og omskriv den i termer af σ_x^2 (dvs, eliminér a i Lign. (1), ω i Lign. (2) , og α i Lign. (3))). Det kan oplyses at resultatet bliver det samme i alle tilfælde (bortset fra faktorer af størrelsesordenen 1).

Opgave 2 (30 %)

I denne opgave betragter vi hydrogenatomets tilstande inklusiv spin. H_0 er den sædvanlige Hamiltonoperator (med kun Coulomb-potentialet), Vi betragter også spin-bane koblingen

$$H'_{SO} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\frac{1}{m^2c^2r^3}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} \tag{4}$$

og Zeeman vekselvirkningen med et magnetisk felt B_{ext} i z-retningen,

$$H'_Z = \frac{eB_{ext}}{2m}(L_z + 2S_z). \tag{5}$$

Vi betragter også to mulige baser, som begge består af egentilstande af H_0: "P"-basen (produkt-basen) med kvantetal n, l, m, m_s svarende til egenværdier af henholdsvis H_0, L^2, L_z og S_z; og "T"-basen (total impulsmoment-basen) med kvantetal n, l, j, m_j hvor j og m_j er forbundet med egenværdier af henholdsvis J^2 og J_z. Her er $\mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S}$ det totale impulsmoment.

1. (10%) Betragt det underrum som består af $n = 2$ egentilstandene af H_0. Lav to tabeller som nedenunder, og udfyld de relevante værdier af kvantetal og deres tilhørende egenværdier.

"P" basis

l, m, m_s	L^2	L_z	S_z

"T" basis

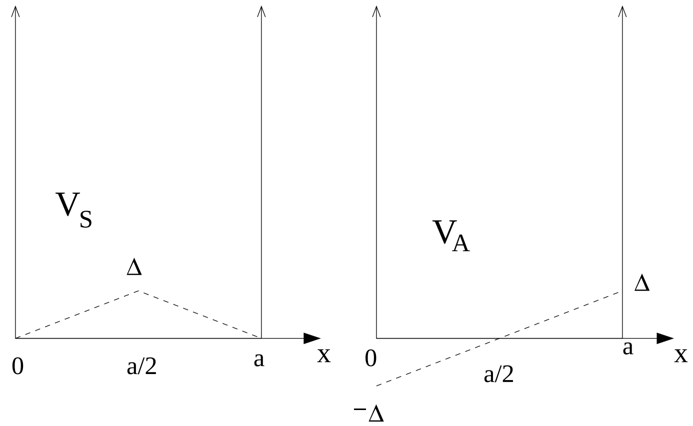
l, j, m_j	L^2	J^2	J_z

Zeeman Hamiltonoperatoren er diagonal i én ud af de to baser. Angiv hvilken og egenværdierne ved at lave en ekstra kolonne i den relevante tabel.

2. (10%) Angiv de kommuteringsrelationer som J_x og J_y og J_z tilfredsstiller. Bevis at J^2 kommuterer med de individuelle komponenter J_x, J_y og J_z. Bevis derefter at L^2 kommuterer med J_z og J^2. Bevis til sidst at $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ kommuterer med L^2, J^2 og J_z.

3. (10%) I P-basen er $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ ikke diagonal—der er ikke-diagonale matrixelementer som er forskellige fra nul. Opskriv kombinationen $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ i termer af $L_\pm$, L_z og de tilsvarende S operatorer. Beregn derefter matrixelementet $\langle\psi_{2,1,0,\frac{1}{2}}|\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}|\psi_{2,1,1,-\frac{1}{2}}\rangle$ (kvantetal n, l, m, m_s). Giv et eksempel på et ikke-diagonalt matrixelement af denne operator som er lig med nul.

Opgave 3 (30 %)



Her betragter vi den uendelige firkantbrønd i én dimension, med to forskellige perturberende potentialer V_S' og V_A', som illustreret ovenfor.

$$V_S' \equiv \begin{cases} \Delta \frac{2x}{a}, & x < a/2 \\ 2\Delta - \Delta \frac{2x}{a}, & x > a/2 \end{cases} \tag{6}$$

$$V_A' \equiv -\Delta + \Delta \frac{2x}{a} \tag{7}$$

1. (10%) Beregn korrektionen i første orden til det n'te energiniveau for tilfældet V_S.

2. (10%) Hvilke tilstande bliver "blandet" ind i grundtilstanden af perturbationen V_S til første-orden? Det vil sige, hvilke koefficienter er forskellige fra nul når førsteordenskorrektionen til grundtilstanden udtrykkes som en linearkombination af uperturberede egentilstande? [Det er ikke nødvendigt at beregne dem—et symmetriargument er fint] Hvad med V_A-tilældet—hvilke koefficienter er forskellige fra nul?

3. (10%) Bevis, enten ved en beregning eller et symmetriargument, at førsteordenskorrektionen til energierne er nul for V_A-perturbationen. Beregn andenordenskorrektionen til grundtilstandsenergien (svaret må stå som en sum).

Roskilde Universitet

Dybedemoduleksamen i kvantemekanik. Re-eksamen.

Fredag d. 28. august, 2009. 10.00-14.00

INGEN HJÆLPEMIDLER TILLADTE UDOVER DEN UDLEVEREDE FORMELSAMLING OG JERES EGEN FORMELSAMLING. INGEN LOMMEREGNERE

Opgavesættet er på tre sider. Opgave 1, 2 og 3 er uafhængige af hinanden og kan besvares i hvilken som helst rækkefølge.

Opgave 1 (40 %)

I denne opgave betrager vi spintilstandene i et system der består af to spin-1/2 partikler. De tilsvarende spin-operatorer betegnes $\mathbf{S}^{(1)}$ og $\mathbf{S}^{(2)}$, og det "totale spin-impulsmoment" er $\mathbf{S}^{(\mathrm{tot})} \equiv \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$. Komponenter skrives som $S_x^{(1)}$, osv, og $(S^{(1)})^2 \equiv (S_x^{(1)})^2 + (S_y^{(1)})^2 + (S_z^{(1)})^2$ betegner kvadratet på absolutværdien (tilsvarende for $\mathbf{S}^{(2)}$ og $\mathbf{S}^{(\mathrm{tot})}$)

En basis for disse tilstande, "P"-basen (produkt-basen), består af produkt-tilstandene $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ og $|\downarrow\downarrow\rangle$, hvor pilene refererer til egenværdier af $S_z^{(1)}$ og $S_z^{(2)}$ som sædvænligt. En anden, "T"-basen (total spin-basen), består af egentilstande af $(S^{(\mathrm{tot})})^2$ og $S_z^{(\mathrm{tot})}$, som skrives $|S, M\rangle$ hvor S er enten 0 eller 1 og $-S \leq M \leq S$.

1. (10%) I de nedenstående tabeller står tilstande i den første søjle og spin-operatorer i den første række (glem søjlen med H_{SS} indtil videre). Du må antage at de givne tilstande er egentilstande af de givne operatorer i hver tabel. Udfyld de tilsvarende egenværdier.

   "P" basis

tilstand	$(S^{(1)})^2$	$(S^{(2)})^2$	$S_z^{(1)}$	$S_z^{(2)}$
$\|\uparrow\uparrow\rangle$				
$\|\uparrow\downarrow\rangle$				
$\|\downarrow\uparrow\rangle$				
$\|\downarrow\downarrow\rangle$				

   "T" basis

tilstand	$(S^{(1)})^2$	$(S^{(2)})^2$	$(S^{(\mathrm{tot})})^2$	$S_z^{(\mathrm{tot})}$	H_{SS}
$\|0,0\rangle$					
$\|1,-1\rangle$					
$\|1,0\rangle$					
$\|1,1\rangle$					

   Nu betragter vi en Hamilton-operator H_{SS} baseret på prik-produktet af spin-operatorerne ("spin-spin kobling")

   $$H_{SS} = -\alpha \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} \tag{1}$$

   hvor α er en reel, positiv konstant.

2. (10%) Bevis at tilstanden $|\uparrow\downarrow\rangle$ *ikke* er en egentilstand af operatoren $\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}$ ved at beregne $\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} |\uparrow\downarrow\rangle$. Det betyder, at H_{SS} ikke er diagonal i P-basen.

3. (10%) Bevis, at H_{SS} er diagonal i T-basen ved at omskrive den i termer af operatorer i T-basis-tabellen. Udfyld dens egenværdier i den tilsvarende søjle.

4. (10%) Nu antager vi, at hver partikel har en positiv ladning og dermed et magnetisk moment, $\mu^{(1)} = \gamma \mathbf{S}^{(1)}$ og $\mu^{(2)} = \gamma \mathbf{S}^{(2)}$, hvor $\gamma > 0$ er en konstant. Hvis vi påtrykker et magnetisk felt $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$ på systemet, er det tilsvarende led i Hamilton-operatoren

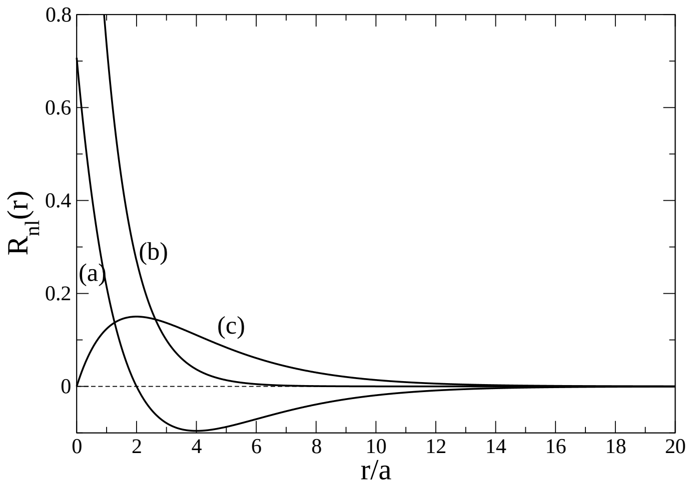
$$H_B = -\gamma B_0 S_z^{(1)} - \gamma B_0 S_z^{(2)}, \tag{2}$$

   Er H_B diagonal i T-basen? Hvis ja, give en liste over dens egenværdier. Hvis nej, antage at B_0 er lille nok, til at man kan bruge perturbationsteori, og beregn førsteordenskorrektionen til energier ved at betragte H_B som perturbation. Skitsér energierne som funktion af B_0.

Opgave 2 (30 %)

I denne opgave betragter vi de radielle bølgefunktioner $R_{nl}(r)$ i hydrogen-atomet, specielt R_{10}, R_{20} og R_{21}.

1. (10%) Figuren nedenunder viser de tre overnævnte radielle bølgefunktioner. Angiv, hvilken funktion svarer til hvilken kurve (a), (b) og (c).



2. (10%) Beregn forventningsværdien $\langle r \rangle$ i de to tilstande R_{20} og R_{21}.

3. (10%) Beregn den mest sandsynlig værdi af r i tilstanden R_{21}.

Opgave 3 (30 %)

I denne opgave betragter vi den endelige firkant-brønd, med potentialet $V(x) = -V_0$, for $-a/2 < x < a/2$, og $V(x) = 0$ for alle andre værdier af x (bemærk, at koordinatsystemet er forskelligt fra det sædvænlige—brønden er rykket til venstre ved $a/2$ for at gøre den symmetrisk). Vi bruger en gætte-bølgefunktion (som i variationsprincippet) som svarer til grundtilstanden af en *uendelig* firkant-brønd med bredde b (denne er også rykket for at passe med potentialets symmetri):

$$\psi_b(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{b}}\sin((\pi/b)(x+b/2)) = \sqrt{\frac{2}{b}}\cos(\pi x/b), & -b/2 \leq x \leq b/2 \\ 0, & x < -b/2 \text{ og } x > b/2 \end{cases} \tag{3}$$

1. (10%) Beregn forventningsværdien af den kinetiske energi $\langle \hat{T} \rangle$ for ψ_b, som funktion af b. Skitsér denne funktion.

2. (10%) Beregn forventningsværdien af den potentielle energi $\langle \hat{V} \rangle$ som funktion af b. Bemærk: tænk omhyggeligt over forskellen mellem de to tilfælde $b < a$ og $b > a$. Skitsér denne funktion.

3. (10%) For at estimere grundtilstandsenergien skulle vi minimere summen $\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{V} \rangle$. Det er ikke muligt at løse den fremkomne ligning analytisk. I stedet for, argmentér for at der egentlig er en minimumsværdi af $\langle \hat{H} \rangle$ ved en bestemt værdi b_{min} af b, for alle værdier af $V_0 > 0$. Gør dette grafisk ved brug af dine skitseringer, og ved at tænke på hvordan $\langle \hat{T} \rangle$ og $\langle \hat{V} \rangle$ opfører sig når $b \to \infty$. Hvordan opfører b_{min} sig i de to grænsetilfælde $V_0 \to 0$ og $V_0 \to \infty$? Kan vi konkludere, at der eksisterer en bunden tilstand for alle værdier af $V_0 > 0$?

Roskilde Universitet

Dybdemoduleksamen i kvantemekanik

Mandag d. 7. juni, 2010, 10.00-14.00

INGEN HJÆLPEMIDLER TILLADT UDOVER DEN UDLEVEREDE FORMELSAMLING OG JERES EGEN FORMELSAMLING. LOMMEREGNERE ER TILLADTE.

Opgavesættet er på tre sider. Opgavene er uafhængige af hinanden.

Opgave 1 (35 %)

Den potentielle energi for en partikel in én dimension er givet ved

$$V(x) = \alpha\delta(x) \tag{1}$$

hvor $\alpha > 0$ (bemærk at dette ikke er identisk med det tilfælde vi tidligere har studeret hvor $\alpha < 0$).

1. (5 point) Definer begreberne "bundne tilstande" og "spredningstilstande" (på engelsk: "scattering states"). Har potentialet bundne tilstande?

2. (20 point) Beregn for spredningstilstandene refleksions- og transmissionskoefficienterne $R(E)$ og $T(E)$, hvor E is energien af den indkommende partikel.

3. (10 point) Redegør for at funktionerne $R(E)$ og $T(E)$ opfører sig fornuftigt i grænserne $E \to 0$ og $E \to \infty$ og skitser begge funktioner. Beregn energien E hvor $R(E) = T(E) = 0.5$.

Opgave 2 (30 %)

Idet spin-koordinaten ignoreres, betragter vi et Hydrogen-atoms bølgefunktioner. Der er givet to tilstande, ψ_A og ψ_B. Udtrykt som linearkombinationer af standardegentilstandene ψ_{nlm}, hvor kvantetallene n, l og m har deres sædvanlige betydning, er de to tilstande givet ved

$$\psi_A = A\left(\psi_{310} + \psi_{210} + \psi_{211}\right) \tag{2}$$
$$\psi_B = B\left(\psi_{200} + \psi_{210}\right) . \tag{3}$$

1. (5 points) Bestem normaliseringskonstanterne A og B.

2. (5 points) Vi betragter tre observable (operatorer): Hamiltonian operatoren, $\hat{H}$, kvadratet på baneimpulsmomentet, $\hat{L}^2$, og z-komposanten af baneimpulsmomentet, $\hat{L}_z$. Angiv for hver af de to tilstande ψ_A og ψ_B om den er en egentilstand for hver af disse tre observable. I bekræftende fald skal den relevante egenværdi angives. Resultaterne af undersøgelsen ønskes angivet i form en tabel som følger:

Tilstand	Observabel	Egentilstand?	Egenværdi (hvis egentilstand)
ψ_A	$\hat{H}$	(J/N)	
ψ_A	...		
...			
ψ_B	$\hat{H}$		
ψ_B	...		

3. (10 points) Antag vi måler energien (startende fra, respektive, (a) tilstand ψ_A, (b) tilstand ψ_B). Umiddelbart derefter måles $\hat{L}^2$. Angiv de mulige resultater af målingerne, de tilsvarende sluttilstande (dvs tilstanden systemet kommer i hvis en given værdi måles) og deres sandsynligheder.

4. (10 points) Antag at et Hydrogen-atom før målingerne befandt sig enten i tilstand ψ_A eller i tilstand ψ_B, og at resultaterne af ovennævnte målinger var, respektive, $E_3 = -13.6/9$ eV og $2\hbar^2$. Kan man ud fra disse oplysninger afgøre om starttilstanden var ψ_A eller ψ_B? Gentag undersøgelsen for tilfældet hvor måleresultaterne var $E_2 = -13.6/4$ eV og $2\hbar^2$.

Opgave 3 (30 %)

Vi betragter en harmonisk oscillator i én dimension, dvs en partikel i potentialet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Der mindes om at grundtilstandsenergien er $\hbar\omega/2$ og at variansen af positionen in grundtilstanden er $\hbar/(2m\omega)$. Opgaven vedrører hvor god en prøvebølgefunktion af formen

$$\psi_\lambda(x) \equiv A \exp(-\lambda|x|), \tag{4}$$

hvor λ er en fri parameter, er til at approximere grundtilstanden.

1. (10 points) Normaliser funktionen $\psi_\lambda(x)$ og bestem $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle$ (der gælder $\langle x \rangle = 0$ af symmetrigrunde) for ψ_λ som funktion af λ.

2. (10 points) Beregn middelværdien af den kinetiske energi $\langle \hat{T} \rangle$ og af den potentielle energi $\langle \hat{V} \rangle$ [det kan eventuelt udnyttes at $\frac{d^2}{dx^2} \exp(-\lambda|x|) = \lambda^2 \exp(-\lambda|x|) - 2\lambda\delta(x)$].

3. (10 points) Find det bedste estimat af grundtilstandsenergien ved brug af ovennævnte prøvebølgefunktion. Find også den tilsvarende σ_x^2. Sammenlign disse to størrelser med de eksakte værdier.

Roskilde Universitet

Dybdemoduleksamen i kvantemekanik

Tirsdag d. 28. juni, 2011. 10.00-14.00

INGEN HJÆLPEMIDLER TILLADTE UDOVER DEN UDLEVEREDE FORMELSAMLING OG JERES EGEN FORMELSAMLING.

Opgavesættet er på tre sider. Opgave 1, 2 og 3 er uafhængige af hinanden og kan besvares i hvilken som helst rækkefølge.

1 Brintatomets bølgefunktioner (35 %)

Her betragter vi Hydrogentilstande med n=3. Vi ser fuldstændig bort fra spin i denne opgave. Vi har den almindelige (Coulomb samt kinetisk energi) Hamilton-operator H_0 samt et Zeeman-agtig led som giver vekselvirkning mellem atomet og et uniformt magnetfelt med styrke B_0 i z-retningen

$$H_Z = -\frac{eB_0}{2m_e}L_z$$

Her betegner e og m_e henholdsvis elektronens ladning og masse.

1. (5 %) Hvad er udartningen af $n = 3$ niveauet?
2. (15 %) Tag den (unormerede) tilstand (med standard notation ψ_{nlm})

   $$\psi_A = \psi_{301} + 2\psi_{321}$$

   For hver af de tre operatorer H_0, L^2, og L_z, angiv om ψ_A er en egentilstand. Hvis ja, angiv egenværdien, hvis ikke, angiv forventningsværdien af operatoren.
3. (5 %) Førsteordens-perturbationsteori giver det eksakte resultat for perturbationen H_Z. Hvorfor?
4. (10 %) Hvor mange niveauer bliver $n = 3$ niveauet splittet op i når man tænder for magnetfeltet? Skitsér niveauerne som funktion af B_0, og angiv hvert niveaus udartning.

2 Koblede spin-1/2 systemer (30 %)

Her betragter vi et system som består af to spin-1/2 partikler og ser bort fra deres rumlige frihedsgrader. Spin-operatorerne for de individuelle partikler benævnes med 1 og 2 (for eksempel er $S_z^{(1)}$ z-komposanten af partikel 1's spin).

1. (5 %) Hvis systemet er i tilstanden $|\uparrow\uparrow\rangle$ (altså hvis både elektron 1 og elektron 2 er i op-tilstanden) og kvadratet af det totale spin, $(S^{(\mathrm{tot})})^2$, bliver målt, hvad er så de mulige resultater og de tilsvarende sandsynligheder?
2. (5 %) Hvis systemet istedet er i tilstanden $|\downarrow\uparrow\rangle$ (altså hvis elektron 1 er i ned-tilstanden og elektron 2 er i op-tilstanden) og man laver den samme måling, hvad er så de mulige resultater og deres sandsynligheder?

3. (10 %) Hvis elektron 1 er i tilstanden $(1/\sqrt{2})(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ og elektron 2 er i tilstanden $|\uparrow\rangle$, hvad er de mulige resultater og sandsynligheder så, for den samme måling som før?

4. (10 %) Antag at, resultatet fra målingen i spørgsmål (2) var 0, og z-komposanten af elektron 1's spin bliver målt. Hvad er sandsynligheden for at måle $\hbar/2$? Hvis denne værdi faktisk bliver målt, og man bagefter måler z-komposanten af elektron 2's spin, hvad er så sandsynligheden for at måle $\hbar/2$?

3 En-dimensionelt model af Helium-atomet (35 %)

Vi betragter to identiske spin-1/2 partikler som er begrænsede til at bevæge sig i én dimension under indflydelse af et harmonisk-oscillator potentiale:

$$H_{\text{HO}} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_2^2$$

Her betegner x_1 og x_2 de to partiklers sted-koordinater. Vi betragter også en vekselvirkning mellem partikler af form

$$H' = \alpha\delta(x_1 - x_2)$$

hvor $\alpha > 0$ antages så tilpas lille, at først-ordens perturbationsteori kan anvendes. Vi skriver tilstandene i termer af de almindelige én-partikelstilstande $\psi_n(x)$ og passende spintilstande. De første to energi-egentilstande for en harmonisk oscillator med frekvens ω i én dimension er

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

og

$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

1. (5 %) Angiv grundtilstanden og dens energi, i det tilfælde hvor der ikke er nogen vekselvirkning mellem partiklerne. Spin-tilstanden skal også inkluderes.

2. (10 %) Regn korrektionen til grundtilstandens energi på grund af H' ved brug af førsteordens-perturbationsteori.

3. (5 %) Den første eksiterede tilstand er udartet når der ikke er vekselvirkinger. Hvor mange forskellige (altså ortogonale) tilstande er der? Angiv dem og deres fælles energi. Bemærk: der findes i princippet forksellige måder at gøre det på, men det hjælper senere at vælge basistilstande som er symmetriske eller antisymmetrisk (under partikelombytning) separat for spin- og rum-dele, som vi plejer at gøre.

4. (15 %) Udregn korrektionen til det første eksiterede niveaus tilstande. Det må antages at perturbationen er diagonale hvis du vælger basistilstande som forslået i del (3).

Roskilde University

Master's Module, Quantum Mechanics

Friday, June 8, 2012, 10.00-14.00

CLOSED-BOOK EXAM: NO EXTRA MATERIALS ALLOWED BEYOND THE FORMULA SHEET INCLUDED WITH THE EXAM SET AND YOUR OWN GOLDEN SHEET (THIS INCLUDES NO CALCULATORS)

There are THREE problems on THREE sheets of paper. Problems 1, 2 and 3 are independent of each other and can be answered in any order.

Problem 1 (35%)

A quantum mechanical rigid rotor (it could consist of two charged particles attached to the ends of a rigid rod) is constrained to rotate in the xy-plane around a fixed axis; hence, the wavefunctions only depend on the angle ϕ. The rotor has moment of inertia I about its axis of rotation and electric dipole moment $\boldsymbol{\mu}$ (in the plane). In the absence of an electric field, the Hamiltonian operator of the system is

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{1}$$

When the rotor is placed in a weak uniform electric field $\boldsymbol{\varepsilon}$, which is in the plane of rotation, this gives rise to a perturbation term

$$\hat{H}' = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{\varepsilon} = -\mu\varepsilon\cos\phi \tag{2}$$

1. (10%) First, we assume that the electric field is absent. Show, that the eigenfunctions are

$$\psi_n = A_n e^{in\phi}, n = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \tag{3}$$

   Determine the constants A_n and find the energy levels.

2. (10%) Now, we let an external field act on the system. For what values of n can we use non-degenerate perturbation theory? Show that for the ground state, the first order correction to the energy is zero.

3. (15%) Find the second order correction to the energy for the ground state.

Problem 2 (25%)

The so-called *coherent states* of the harmonic oscillator are the eigenstates of the lowering operator $\hat{a}_-$. Hence a coherent state ψ_α satisfies

$$\hat{a}_-\psi_\alpha = \alpha\psi_\alpha, \tag{4}$$

where α is the eigenvalue. The eigenvalue can be real or complex.

It turns out that when we write ψ_α in terms of the eigenstates ψ_n of the Hamiltonian operator of the harmonic oscillator, we get:

$$\psi_\alpha = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\psi_n, \tag{5}$$

where the ψ_ns are the normalized energy eigenstates of the harmonic oscillator.

1. (10%) Show that ψ_α in equation (5) is an eigenfunction of $\hat{a}_-$ and show that the normalization constant c_0 is equal to $\exp(-\frac{1}{2}|\alpha|^2)$.

2. (15%) We consider two coherent states ψ_α and ψ_β with different eigenvalues $\alpha \neq \beta$. Show that these two coherent states are not orthogonal.

   Hint: Find $|\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle|^2$.

   Why is this fact not inconsistent with the theorem that eigenfunctions of a hermitian operator belonging to distinct eigenvalues are orthogonal?

Problem 3 (40%)

Consider a spin-1 particle. Within the basis of eigenvectors of S^2 and S_z and with the eigenvectors ordered as in Griffiths (i.e, starting with the eigenvector for the lowest value of s_z and ending with the eigenvector for the highest value), its Hamiltonian is given by

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & -2i & 0 \\ 2i & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \tag{6}$$

where ω is a constant.

1. (10%) What values could we get if we measure the energy (NB! You should get integer values of $\hbar\omega$.) What are the corresponding normalized states?

2. (10%) Initially, the system is in the state

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

   Find the state of the system at time t.

3. (10%) If we measure the spin in the x-direction when the system is in an arbitrary state, what values can we measure? What is the probability of measuring the lowest value of these values when the system is in the state $\chi(0)$?

4. (10%) Is S_x a conserved quantity?

Roskilde University

Master's Module, Quantum Mechanics

2012, August 23, 10.00-14.00

CLOSED-BOOK EXAM: NO EXTRA MATERIALS ALLOWED BEYOND THE FORMULA SHEET INCLUDED WITH THE EXAM SET AND YOUR OWN GOLDEN SHEET (THIS INCLUDES NO CALCULATORS)

There are THREE problems on THREE sheets of paper. Problems 1, 2 and 3 are independent of each other and can be answered in any order.

Problem 1 (40%)

Consider a system whose Hamiltonian is given by

$$\mathsf{H}^\circ = E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 \end{pmatrix}$$

where $E_0 > 0$.

1. (10%) What are the eigenenergies and the eigenstates? If the system is in the state
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
what is the probability of measuring the energy E_0?

We now perturb the system by

$$\mathsf{H}' = E_0 \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 0 \end{pmatrix},$$

where λ is a positive, real constant that fullfills $\lambda \ll 1$. Hence, $\mathsf{H} = \mathsf{H}^\circ + \mathsf{H}'$.

2. (10%) Show that the exact eigenenergies of H are $(1+\lambda)E_0$, $(5 - 2\sqrt{1+\lambda^2})E_0$, $(5 + 2\sqrt{1+\lambda^2})E_0$ and $8E_0$.

3. (20%) Argue that we can use non-degenerate perturbation theory. Find the approximate eigenenergies of H and the eigenstates to first order. For the (unperturbed) eigenstate of energy $7E_0$, find the approximate eigenenergy of H to second order.

Problem 2 (30%)

A particle of mass m moves in one dimension. The potential energy is given by

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{for } x > a \end{cases}$$

We assume that the particle at a certain time $t = 0$ is in the ground state corresponding to the Hamiltonian operator with potential energy given by $V(x)$. At time $t = 0$ the potential energy is changed to

$$V^*(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x < 0 \\ 0 & \text{for } 0 \leq x \leq 2a \\ \infty & \text{for } x > 2a \end{cases}$$

We assume that the change happens so fast that the wavefuntion of the particle immediately after $t = 0$ is given by the ground state wavefunction corresponding to $V(x)$.

1. (10%) Calculate the probability of finding the particle in the first excited state of the new potential immediately after $t = 0$.

2. (10%) What is the probability of finding the particle between a and $2a$ immediately after $t = 0$? Where are we most likely to find the particle immediately after $t = 0$?

3. (10%) What is the expectation value of the energy immediately after $t = 0$?

Problem 3 (30%)

The wave function for a hydrogen atom is

$$\psi(\mathbf{r}) = A(3\psi_{100} + 2\psi_{210} + \sqrt{3}\psi_{211}),$$

where the subscripts are values of the quantum numbers n, l, m. We ignore electron spin.

1. (5%) Find A.
2. (5%) What values of the total angular momentum can we measure? What are the corresponding probabilities?
3. (20%) Estimate (based on an appropriate approximation) the probability of finding the electron within a distance of 10^{-10}cm from the proton. Hint: use that the Bohr radius a fulfills $a \gg 10^{-10}$cm.

Roskilde Universitet

Kandidatuddannelsen i FYSIK, KVANTEMEKANIK
26. juni, 2013, 10.00-14.00

Til eksamen må kun anvendes den udleverede formelsamling samt det personlige 'golden sheet', der også udleveres. Lommeregner etc. må ikke medbringes

Sættet består af 2 opgaver med i alt 11 spørgsmål. De fleste spørgsmål kan besvares uafhængigt af hinanden

Opgave. 1. En spin 1/2 partikel bevæger sig langs y-aksen under påvirkning af et harmonisk oscillator potentiale.

Til tiden t = 0 er partiklen beskrevet ved bølgefunktionen:

$$\psi(y,t=0) = (1+i)u_0(y)\chi_+ + 5u_1(y)\chi_- - 3u_1(y)\chi_+$$

$u_n(y)$ er den n'te normaliserede stationære egentilstand for den én-dimensionale harmoniske oscillator. χ_+ og χ_- er de normaliserede egenspinorer for z-komposanten af det spin-angulære moment, S_z.

1.1 (5%) Normér bølgefunktionen.

1.2 (5%) Energien af et stort antal systemer i tilstanden ψ måles – hvad er middelværdien af de målte energier?

1.3 (5%) I et eksperiment måles energien, E, samtidigt med S_z til tiden t = 0. Hvad er de mulige resultater af målingen og hvad er sandsynligheden for de enkelte måleresultater?

1.4 (10%) I et eksperiment måles y-komposanten af det spin-angulære moment, S_y , til tiden t = 0. Angiv de mulige resultater af målingen med tilhørende sandsynligheder.

1.5 (10%) Systemet udsættes for en lille tidsuafhængig perturbation, der er lineær i y: $H' = -\lambda y$
Vis at der til første orden ikke sker nogen ændring i de relevante energiniveauer for tilstanden ψ .

1.6 (10%) Find 2. ordens korrektionen, E_n^2 , til energien af de uperturberede stationære tilstande $u_n(y)$. (*Hint:* Udnyt stepoperatorerne ("ladder operators") a_+ og a_-).

1.7 (15%) Find den eksakte energi for de perturberede tilstande og kommentér udfra denne størrelsen af højere ordens korrektioner til energien. (*Hint:* Skift variabel til $y' \equiv y - (\lambda / m\omega^2)$)

Opgave 2. Brintatomet.

2.1 (10%) Brintatomets kerne har radius r_k. Hvad er den eksakte sandsynlighed for at en elektron i brints grundtilstand befinder sig indenfor kernen, hvis det antages at det funktionelle udtryk for bølgefunktionen også gælder for $r < r_k$?

2.2 (10%) Brug rækkeudviklingen $e^{-\varepsilon} \approx 1-\varepsilon+\frac{\varepsilon^2}{2}-\frac{\varepsilon^3}{3!}$, hvor ε er et lille tal, til at udtrykke den fundne sandsynlighed som en potens af (r_k/a), hvor a er Bohrradius. Vis, at dit resultat er i overensstemmelse med et simpelt argument baseret på en antagelse om, at bølgefunktionen er konstant i det område, hvor kernen befinder sig. Giv et numerisk overslag for sandsynligheden, når $r_k \sim 10^{-15}$ m.

2.3 (10%) Antag at brintatomets elektron befinder sig i tilstanden ψ_{nlm}. Hvad er værdien af $\langle L_x \rangle$ og $\langle L_x^2 \rangle$? Værdien af $\langle L_y \rangle$ og $\langle L_y^2 \rangle$? $\vec{L}$ er det bane-angulære moment.

2.4 (10%) I et Stern-Gerlach eksperiment sendes atomer gennem et inhomogent magnetfelt. Hvis magnetfeltet er rettet langs z-aksen, splitter atomerne op i flere 'bundter' med forskellig afbøjning langs z-aksen. Kraften, der forårsager afbøjningen, er proportional med z-komposanten af atomets magnetiske moment, μ. Vi ved nu, at der er to bidrag til det magnetiske moment: $\vec{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar}\vec{S}$ og $\vec{\mu}_l = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar}\vec{L}$, hvor $\vec{S}$ er spin og $\vec{L}$ er bane-angulært moment. De øvrige størrelser er i denne sammenhæng at betragte som proportionalitetskonstanter.
Det oprindelige Stern-Gerlach eksperiment blev udført i 1922 med sølvatomer. I 1927 gennemførte Phipps og Taylor eksperimentet med brintatomer i grundtilstanden. Hvad observerede Phipps og Taylor i deres eksperiment og hvorfor er Stern-Gerlach eksperimentet banebrydende i kvantemekanikken?

Roskilde Universitet

Kandidatuddannelsen i FYSIK, KVANTEMEKANIK

30. august, 2013, 10.00-14.00

Til eksamen må kun anvendes den udleverede formelsamling samt det personlige 'golden sheet', der også udleveres. Lommeregner etc. må ikke medbringes

Sættet består af 3 opgaver med i alt 10 spørgsmål. Spørgsmålene vægtes ligeligt i bedømmelsen.

Opgave 1. En spin 1/2 partikel bevæger sig langs x-aksen under påvirkning af et harmonisk oscillator potentiale. Til tiden t = 0 er partiklen beskrevet ved bølgefunktionen:

$$\psi_0(x,t=0) = 3u_0(x)\chi_+ + (2-i)u_1(x)\chi_+$$

$u_n(x)$ er den n'te normaliserede stationære egentilstand for den én-dimensionale harmoniske oscillator. χ_+ og χ_- er de normaliserede egenspinorer for z-komposanten af det spin-angulære moment, S_z.

1.1 Normér bølgefunktionen og angiv hvilke resultater en samtidig måling til tiden t=0 af energien, E, og S_z kan give og med hvilke sandsynligheder.

Operatoren $\hat{n}\cdot\vec{S}$ repræsenterer projektionen af partiklens spin-angulære moment $\vec{S}$ langs retningen givet ved enhedsvektoren $\hat{n}$, $\hat{n} = \sin(\theta)\cos(\varphi)\hat{x} + \sin(\theta)\sin(\varphi)\hat{y} + \cos(\theta)\hat{z}$, hvor θ er polarvinkel, φ er azimuthalvinkel og $\hat{x}, \hat{y}$ og $\hat{z}$ er enhedsvektorer langs hhv x, y og z-aksen.

Undervejs i opgaven kan følgende eventuelt bruges:

$e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$ og $e^{-i\varphi} = \cos\varphi - i\sin\varphi$

$\cos\theta = 1 - 2\sin^2(\frac{\theta}{2}) = 2\cos^2(\frac{\theta}{2}) - 1$ og $\sin\theta = 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$

1.2 Hvad er egenværdierne for $\hat{n}\cdot\vec{S}$? Hvor mange egentilstande er der for $\hat{n}\cdot\vec{S}$?

1.3 Vis at $\chi_1 = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}$ og $\chi_2 = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}$ er egentilstande for $\hat{n}\cdot\vec{S}$ og angiv sandsynligheden for lige efter en måling på partiklen i tilstanden ψ_0 at finde partiklen i hhv χ_1 og χ_2.

Et tilsvarende system, der er i tilstanden $\psi(x,t=0) = u_0(x)\chi_+$, placeres i et homogent magnet felt $\vec{B} = \hat{n}\cdot B_0$. Hamiltonoperatoren er $H = H_0 - \omega\hat{n}\cdot\vec{S}$, hvor H_0 er den oprindelige Hamiltonoperator for det harmoniske potentiale, der ikke afhænger af spinnet og ω er en skalar. Den oprindelige rumlige tilstand er fortsat en egentilstand for det modificerede system.

1.4 Angiv partiklens bølgefunktion, $\psi(x,t)$, til tider t>0.

1.5 Bestem de tider, hvor systemet med sikkerhed igen befinder sig i begyndelsestilstanden og giv en fortolkning af ω.

Opgave 2.
En partikel med masse m befinder sig i en uendelig dyb potentialbrønd (square well) med bredde 2L (-L<x<L). Partiklen er i grundtilstanden.

Til tiden t=0 flyttes væggene i brønden momentant udad, så brøndens bredde fordobles (-2L<x<2L). Partiklens tilstand er den samme umiddelbart før og umiddelbart efter ændringen i potentialet.

Undervejs kan følgende eventuelt være nyttigt:

$$\int \sin(px)\sin(qx)dx = \frac{\sin(p-q)x}{2(p-q)} - \frac{\sin(p+q)x}{2(p+q)} \qquad p \neq q$$

$$\int \cos(px)\cos(qx)dx = \frac{\sin(p-q)x}{2(p-q)} + \frac{\sin(p+q)x}{2(p+q)} \qquad p \neq q$$

2.1 Skitsér bølgefunktionen samt potentialet før og efter flytningen af væggene. Angiv et udtryk for $\psi(x, t=0)$.

2.2 Hvad er sandsynligheden for at en måling af energien umiddelbart efter flytning af væggene giver $E = \frac{\hbar^2\pi^2}{32mL^2}$?

2.3 Hvis man måler energien af et stort antal systemer i den beskrevne tilstand til t>0, hvad er middelværdien af de målte energier?

2.4 Angiv en betingelse for størrelsen af den hastighed, væggene skal flyttes udad med, for at flytningen kan betragtes som momentan.

Opgave 3
I et Stern-Gerlach eksperiment sendes atomer gennem et inhomogent magnetfelt. Hvis magnetfeltet er rettet langs z-aksen, splitter atomerne op i flere 'bundter' med forskellig afbøjning langs z-aksen. Kraften, der forårsager afbøjningen, er proportional med z-komposanten af atomets magnetiske moment, μ. Vi ved nu, at der er to bidrag til det magnetiske moment: $\vec{\mu}_s = -\frac{g_s\mu_B}{\hbar}\vec{S}$ og $\vec{\mu}_l = -\frac{g_l\mu_B}{\hbar}\vec{L}$, hvor $\vec{S}$ er spin og $\vec{L}$ er bane-angulært moment. De øvrige størrelser er i denne sammenhæng at betragte som proportionalitetskonstanter.
Det oprindelige Stern-Gerlach eksperiment blev udført i 1922 med sølvatomer. I 1927 gennemførte Phipps og Taylor eksperimentet med brintatomer i grundtilstanden. Hvad observerede Phipps og Taylor i deres eksperiment og hvorfor er Stern-Gerlach eksperimentet banebrydende i kvantemekanikken?

Exam for "Quantum mechanics"

June 23, 2014. 10:00 - 14:00

- The test consists of 3 exercises.
- The test is worth 100 points in total.

During the test:

- You are allowed to use your golden sheet, the course formula sheet, and differential equation road map.
- You are *not* allowed to use any electronic equipment, books or any additional notes.

Good Luck!

Problem 1 (35 points)

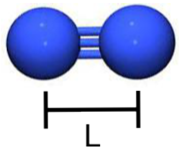


Figure 1

The nitrogen molecule consists of two covalently bonded nitrogen atoms. In this problem we study the initial state of one of the electrons forming the bond. First, assume that the position of the electron is $0 \leq x \leq L$, where L is the bond length $L = 1.1$ Å. The system will be treated as a one particle system, and we describe the electron's state by a simple one dimensional wave function. The potential is given by the infinite square well such that the potential is zero in this interval and infinite otherwise.

1 a: The nitrogen molecule is in the gas phase, $T \approx 100$ K, and the rest mass of the electron is $m_e = 9.1 \times 10^{-31}$ kg. Use the system length, temperature and electron mass to argue why we need quantum mechanics to describe this system.

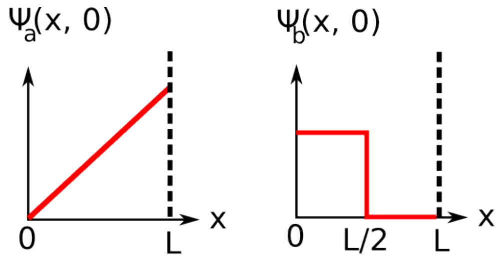


Figure 2

From experiments we guess two possible initial wave functions. They are shown in figure 2. $\Psi_a(x,0)$ and $\Psi_b(x,0)$ are given by

$$\Psi_a(x,0) = Ax \ , \quad \text{and} \quad \Psi_b(x,0) = \begin{cases} \sqrt{2/L} & 0 \leq x \leq L/2 \\ 0 & L/2 < x \leq L \end{cases}$$

1 b: Consider $\Psi_a(x,0)$ only. First, show that $A = \sqrt{3/L^3}$. How does standard deviation σ_x of the position operator x depend on L?

1 c: At $t = 0$ we assume the electron to be in the state $\Psi_a(x, 0)$, when we measure the energy. What is the probability of finding the electron in its ground state as a result of the measurement? Answer the same question if instead the initial state is $\Psi_b(x, 0)$. Recall, the stationary wave function for the ground state is

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) .$$

1 d: The measurement also reveals that at $t = 0$ the probability of measuring a zero momentum is zero. Show that $\Psi_b(x, 0)$ cannot be the initial wave function. Help: you must first find the momentum space function $\Phi_b(p, 0)$.

Problem 2 (30 points)

Consider two operators $\widehat{Q}$ and $\widehat{P}$

$$\widehat{Q} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\phi^2} \quad \text{and} \quad \widehat{P} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d}{d\phi} ,$$

where ϕ is a polar angle $0 \leq \phi \leq 2\pi$. The observable represented by $\widehat{Q}$ is denoted q, and is the rotational kinetic energy of a rigid rotator.

2 a: Show that $\widehat{P}$ does not represent a quantum mechanical observable.

2 b: Show that the rotational kinetic energy, q, and the polar coordinate $\widehat{\phi} = \phi$ are incompatible observables. Help: First show that the commutator is

$$[\widehat{Q}, \widehat{\phi}] = -\frac{i\hbar}{I}L_z ,$$

where $L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\phi}$.

2 c: Find the uncertainty relation between q and ϕ.

2 d: Explain how you will determine whether q is a conserved quantity? (No explicit calculation is needed here!)

Problem 3 (35 points)

In this problem an electron is at rest in a magnetic field. The field points in the z-direction and the magnetic field strength $B(t)$ can be a function of time (e.g. we can crank up the field). The Hamiltonian is

$$\widehat{H}^0 = -\gamma B(t)\widehat{S}_z = -\frac{\gamma\hbar}{2}\begin{pmatrix} B(t) & 0 \\ 0 & -B(t) \end{pmatrix},$$

where γ is the gyromagnetic ratio.

3 a: First, we let $B(t)$ be a simple linear function of time

$$B(t) = A\,t\,,$$

and the particle be in an initial spin state

$$\boldsymbol{\chi}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Write down the time dependent Schrödinger equation for the spin state. Show that the solution for the problem is

$$\boldsymbol{\chi}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\gamma At^2} \\ e^{-i\gamma At^2} \end{pmatrix}.$$

3 b: Does the increasing field change the magnitude of the spin?

3 c: Find the time dependent expectation values for all three spin components S_x, S_y and S_z. Give a physical interpretation of the results.

We now let the magnetic field be constant with field strength B_0 in the z-direction. Also, we introduce a small additional field in the x-direction with strength ϵB_0. We will treat this as a perturbation. The total Hamiltonian is

$$\widehat{H} = \widehat{H}^0 + \widehat{H}' = -\gamma B_0\widehat{S}_z - \gamma\epsilon B_0\widehat{S}_x = -\frac{\gamma B_0\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & \epsilon \\ \epsilon & -1 \end{pmatrix}.$$

3 d: Show that the first order corrections to the energies for the spin up and spin down states are zero.

3 e: Argue what the lowest-order non-zero correction is.

End of exam

Exam for "Quantum mechanics"

August 27, 2014. 10:00 - 14:00

- The test consists of 3 problems.
- The test is worth 100 points in total.

During the test:

- You are allowed to use your golden sheet, the course formula sheet, and differential equation road map.
- You are *not* allowed to use any electronic equipment, books or any additional notes.

Good Luck!

Problem 1 (35 points)

Consider a particle in the one dimensional harmonic potential. First, we study the situation were the initial state, $t = 0$, is given by a linear combination of the ground state, $\psi_0(x)$, and the n'th excited state, $\psi_n(x)$,

$$\Psi_a(x,0) = A(\psi_0(x) + 2\psi_n(x)), \quad n = 1, 2, \ldots$$

1 a: Use the properties of $\psi_0(x)$ and $\psi_n(x)$ to show that $A = 1/\sqrt{5}$.

1 b: We now carry out a measurement of the energy at $t = 0$. What is the probability of measuring the ground state energy, E_0? What is the probability of measuring the n'th excited state energy, E_n?

1 c: Show that the expectation value of the position, $\langle x \rangle$, is zero for even n and non-zero for odd n at $t = 0$.

Next we study the situation where the initial state is

$$\Psi_b(x,0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2a}} & -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{otherwise .} \end{cases}$$

1 d: First show that the standard deviation at $t = 0$ of the position is $\sigma_x = a/\sqrt{3}$. Then use this result to find a lower limit for the standard deviation of the momentum.

1 e: What is the probability current at $t = 0$ for both initial states Ψ_a and Ψ_b?

Problem 2 (30 points)

A two state system given by the *ket* $|s(t)\rangle$ depends on time t and *not* on position x. We have the Hamiltonian

$$\widehat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & -i\sqrt{2} \\ i\sqrt{2} & 2 \end{pmatrix} .$$

2 a: Show that $\widehat{H}$ is a valid quantum mechanical operator.

2 b: Find the corresponding energies. (You may express your result in terms of $\hbar\omega$.) Is the system degenerate?

At time $t = 0$ the system is in the state $|s(0)\rangle$ given by

$$|s(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \tag{1}$$

2 c: Write up the Schrödinger equation for the system. From this find the time evolution of the system state $|s(t)\rangle$.

2 d: Find the expectation value for the energy corresponding to the initial state given by Eq. (1).

Problem 3 (35 points)

An atom is placed in an electric field which is independent on space, but decays exponentially over time as

$$\mathbf{E} = E_0 e^{-\gamma t}\mathbf{k} .$$

E_0 is the initial field strength, γ gives the decay rate, and $\mathbf{k}$ is the unit vector parallel to the z-axis. The field can bring the atom from eigenstate ψ_a with energy E_a to eigenstate ψ_b with energy E_b by excitation of an electron. Recall that the state is given by

$$\Psi(t) = c_a(t)\psi_a e^{-\frac{iE_a}{\hbar}t} + c_b(t)\psi_b e^{-\frac{iE_b}{\hbar}t} .$$

In this exercise we shall use time dependent perturbation theory to analyze the problem. The perturbation Hamiltonian is

$$H' = -qE_0 z e^{-\gamma t} ,$$

where z is the spatial coordinate and q is the fundamental charge.

3 a: Show that elements H'_{bb} and H'_{ba} in the perturbation matrix, $\mathbf{H}'$, are

$$H'_{bb} = 0 \quad \text{and} \quad H'_{ba} = -qE_0 e^{-\gamma t}\langle\psi_b|z|\psi_a\rangle.$$

3 b: The system starts out in state a. Show that first-order perturbation gives the following approximation to $c_b(t)$

$$c_b^1(t) = \frac{iqE_0\langle\psi_b|z|\psi_a\rangle}{\hbar(i\omega_0 - \gamma)}\left[e^{(i\omega_0-\gamma)t} - 1\right] , \quad \omega_0 = \frac{E_b - E_a}{\hbar} .$$

3 c: Assume that the energy difference between states a and b is small, i.e., $\omega_0 \ll \gamma$. Give an expression for the probability of measuring the system in state b as a function of time. Show that the maximum probability is $(qE_0\langle\psi_b|z|\psi_a\rangle)^2/(\hbar\gamma)^2$ and sketch the function.

3 d: Keeping in mind that the analysis is based on first-order perturbation theory, what is the upper limit for the maximum probability given in problem 3c above? How does this relate to the field strength E_0?

End of exam

Roskilde Universitet

Masters module in Physics. Quantum Mechanics

Tuesday June 16, 2015. 10.00-14.00

No help materials permitted other than the provided formula sheet and your own personal formula sheet. Answers may be written in Danish or English.

The exam consists of two pages with three independent problems. All ten sub-questions have equal weight in evaluation.

Question 1: Operators

1.1. If ψ_A and ψ_B are eigenstates of an operator O with the same eigenvalue a, show that any linear combination of them is also an eigenstate of O with eigenvalue a (i.e. the set of eigenstates corresponding to a given eigenvalue is a subspace).

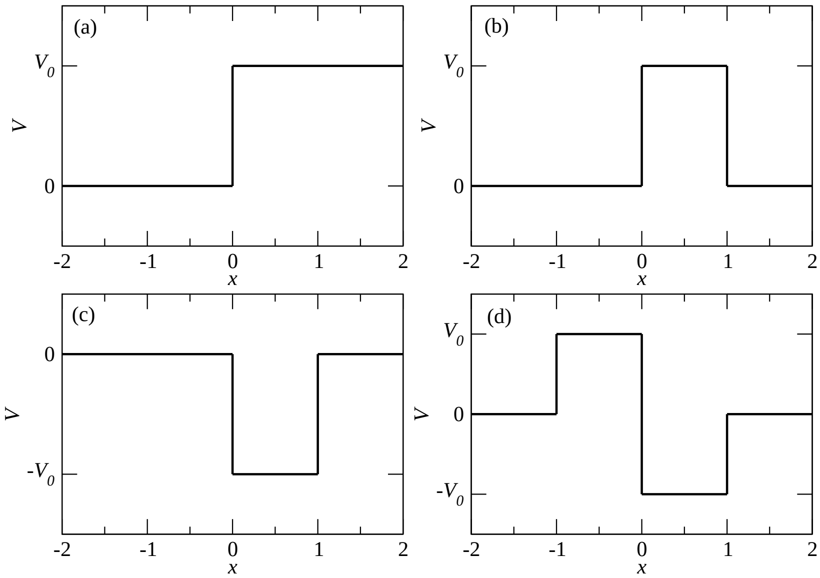
1.2. Considering the subspace of eigenstates of O with eigenvalue a, suppose B is another operator. We are interested in whether B takes vectors out of the subspace or not– what condition will guarantee that $B\psi$ is still in the sub-space, ie still an eigenstate of O with eigenvalue a, given that ψ is? You should justify your answer mathematically.

We now focus on the Hydrogen atom wavefunctions ψ_{nlmm_s} where n is the principal quantum number, l and m are the usual quantum numbers associated with orbital angular momentum (L^2 and L_z respectively) and m_s (represented by an up- or down-arrow) is the quantum number associated with S_z. Define $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ as the total angular momentum.

1.3. Take the three states $\psi_a = \psi_{321\downarrow}$, $\psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{321\downarrow} + \psi_{321\uparrow}\right)$ and $\psi_c = \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_{211\downarrow} + \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_{210\uparrow}$. For each of them, and for each of the operators L_z, J_z and S_x (note: x-component!), say whether the state is an eigenstate or not, giving the eigenvalue if it is and calculating the expectation value otherwise. Express your results in the form of a table.

1.4. Calculate the effect of applying the operator $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ to each term in state ψ_c above, as well as to the combination ψ_c itself (hint: rewrite in terms of raising and lowering operators). Comment on the results given that this state is actually an eigenstate of J^2.

Question 2: One-dimensional scattering



Consider the four one-dimensional scattering potentials shown in the figure, and a scattering experiment where the particle is incident from the left (coming from $x = -\infty$).

2.1. For each potential, sketch the wave function (real part) for (i) $E > V_0$ and (ii) $E < V_0$. Your sketch doesn't have to be quantitatively accurate, but changes in the nature of the wavefunction from one region to the next should be clear (you may include labels/captions on your sketch for clarification).

2.2. For the first case (Fig (a), step potential), calculate the reflection coefficient R for an incident particle with energy $E > V_0$. What happens in the limits $E \to \infty$ and $E \to V_0$?

Question 3: 2D harmonic oscillator

Consider the 2-D oscillator Hamiltonian

$$H_0 = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2\right). \tag{1}$$

We will also be considering the perturbation

$$H' = -\lambda xy. \tag{2}$$

3.1. Show that product states $\psi_{mn}(x, y) \equiv \psi_m(x)\psi_n(y)$, where ψ_n (one subscript) represents an ordinary 1D harmonic oscillator energy eigenstate, are eigenstates of the unperturbed Hamiltonian H_0 and give the energy of such a state.

3.2. Still considering the unperturbed Hamiltonian, give the lowest 4 distinct energies, giving the degeneracy and state(s) for each one.

3.3. Calculate the first order correction to the ground state energy.

3.4. Calculate the first order correction to the energy of first excited state due to the perturbation H'. Hint: write $x = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}(a_+^x + a_-^x)$ etc.

Roskilde Universitet

Masters module in Physics. Quantum Mechanics re-exam

Wednesday August 19, 2015. 10.00-14.00

No help materials permitted other than the provided formula sheet and your own personal formula sheet. Answers may be written in Danish or English.

The exam consists of two pages with three independent problems. All ten sub-questions have equal weight in evaluation.

Question 1: Coupled spin states

Consider the spin-state(s) of two electrons; we ignore the spatial state, except to note that they are separated spatially so that it is possible to make measurements on each one separately. At a certain time they are in the spin-singlet state $\psi_S = A(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$ (this could happen, even though they are spatially separated, as a result of some previous interaction between them). We are also interested in the "middle" of the triplet states, $\psi_{T,0} = B(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$

1.1. Normalize the states ψ_S and $\psi_{T,0}$ (determine A and B)

1.2. Suppose, with the state ψ_S we measure the z-component of the first electron's spin. What are the possible values and their corresponding probabilities, and the expectation value?

1.3. Rewrite the singlet state in terms of the one-spin states $\rightarrow$ and $\leftarrow$, the eigenstates of the operator S_x (the x-component of the spin of either electron; these eignestates are sometimes denoted $\chi_{\pm}^{(x)}$). What is the expectation value of S_x (when applied to the first electron)?

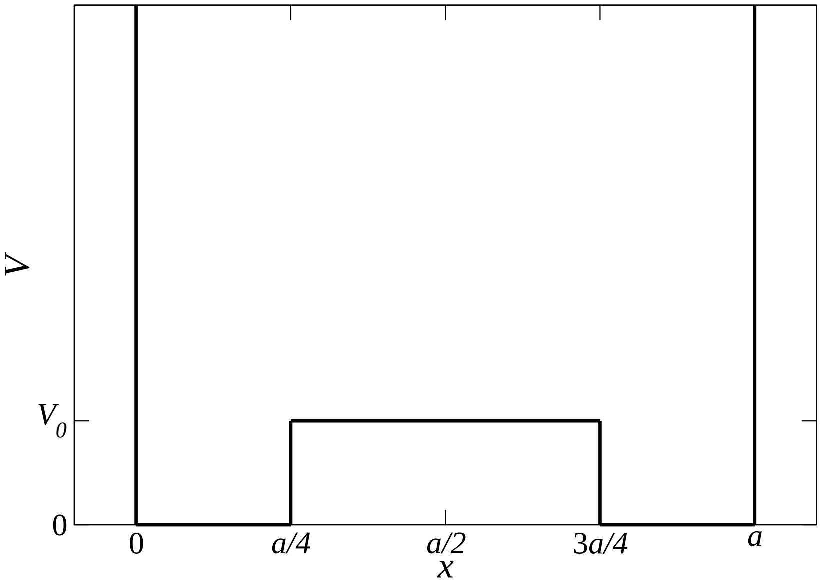
1.4. The states ψ_S and $\psi_{T,0}$ are part of the "coupled basis" in which dot-product of the spins $\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}$ is diagonal. Show that $S_z^{(1)}$, the z-component of the spin of the first electron, is not diagonal in this basis by calculating its matrix element between ψ_S and $\psi_{T,0}$.

Question 2: Operators

2.1. Show that the eigenvalues of a Hermitian operator are real.

2.2. If ψ_A and ψ_B are eigenstates of an operator O with the same eigenvalue a, show that any linear combination of them is also an eigenstate of O with eigenvalue a (i.e. the set of eigenstates corresponding to a given eigenvalue is a subspace).

Question 3: Square well with a bump



We consider the one-dimensional infinite square well with an extra bump in the middle of height V_0 and width $a/2$. We are particularly interested in the ground state for different values of V_0.

3.1. Discuss qualitatively the behavior of the ground state (wave-function and energy) in the limit of (a) V_0 going to zero and (b) V_0 going to infinity. Make a sketch of the ground state wavefunction in each case.

3.2. Calculate the first-order perturbation theory estimate of the ground state energy. Under what circumstances would this be expected to be a good estimate of the ground state energy?

The remaining questions involve writing down the form of the exact wave-function in the different regions (to the left of, within, and to the right of the bump) and determining the equations that result from requiring the different pieces to match. Note: thinking about symmetry may simplify the problem.

3.3. Assuming that the ground state energy is greater than V_0, write down the form of the exact wave-function in each region and determine the equations that result from matching the expressions at the boundaries. Show that there enough equations to determine all the unknown quantities but do not try to solve them.

3.4. Assuming that the ground state energy is less than V_0, write down the form of the exact wave-function in each region and determine the equations that result from matching the expressions at the boundaries. Show that there enough equations to determine all the unknown quantities but do not try to solve them.

Roskilde University,

Master's Module, Quantum Mechanics.

Thursday the 23rd of June 2016 from 10.00 to 14.00.

Closed-book exam: No extra materials allowed beyond the formula sheet included with this examination set and your own golden sheet (this includes no calculators).

This four hour written examination consists of THREE problems with a total of TEN questions on TWO pages. Each of the ten questions have equal weights of 10%.

Problem 1: The infinite square well

Imagine a single particle with mass m in the infinite square well potential with bounds at 0 and a: $V(x) = 0$ for $0 < x < a$ and $V(x) = \infty$ otherwise. The wavefunction $\Psi(x,t)$ has the initial form

$$\Psi(x,0) = A\sin^5(\pi x/a) \tag{1}$$

for $0 < x < a$ and zero otherwise. Here, A is a normalization constant. It can be convenient to use that

$$\sin^5(y) = \frac{5}{8}\sin(y) - \frac{5}{16}\sin(3y) + \frac{1}{16}\sin(5y). \tag{2}$$

Question 1.1: Write the initial wavefunction as a linear combination of normalized stationary solutions $\psi_n(x)$: $\Psi(x,0) = \sum_n c_n\psi_n(x)$. Choose the values of c_n such that $\Psi(x,0)$ is normalized.

Question 1.2: For the state $\Psi(x,0)$, what are the probabilities of measuring the system to have the energies $\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ and $\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$, respectively?

Question 1.3: Write-up the time-dependent Schrödinger equation and give an expression for the time-dependent wavefunction $\Psi(x,t)$ in terms of the eigenfunctions $\psi_n(x)$. Ensure that the wavefunction is normalized.

Problem 2: The hydrogen atom

The electron in a hydrogen atom is in the state described by:

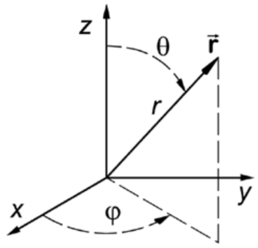
$$\psi(\vec{r}) = A[3\psi_{100}(\vec{r})\chi_- - \sqrt{2}\psi_{210}(\vec{r})\chi_+ + \psi_{31-1}(\vec{r})\chi_+] \tag{3}$$

where A is a normalization constant, $\psi_{nlm}(\vec{r})$ is a normalized hydrogen atom spatial stationary state and χ is the spin part of the total wavefunction.

Question 2.1: Normalize $\psi(\vec{r})$ and find the average value of the energy of the electron.

Question 2.2: Find the expectation value $\langle L_z\rangle$ of the z-component of the angular momentum. What is the probability that a measurement of the square of the angular momentum gives $6\hbar$?

Question 2.3: Is $\psi(\vec{r})$ an eigenfunction for $\hat{S}_z$? What is the expectation value $\langle S_z\rangle$ of $\hat{S}_z$? What is the expectation value $\langle S_y\rangle$ of $\hat{S}_y$?



A hydrogen atom is placed in an electric field such that the potential energy $V(r,\theta) = \gamma r\cos(\theta)$ is added to the Coulomb interaction between electron and the nucleus. γ is a small and positive constant. The figure above shows the definition of the coordinates r and θ – i.e. the z-axis is the polar axis. Spin and finestructure can be disregarded.

Question 2.4: Find to first order the ground state energy of the hydrogen atom in the field.

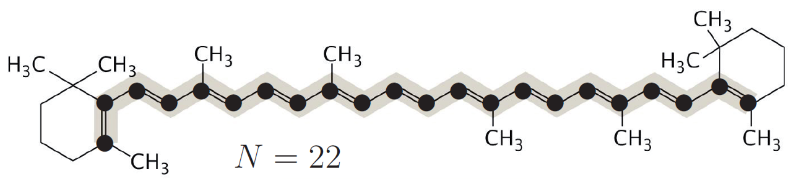
Question 2.5: Determine how many levels the first excited state splits up into after application of the field, and present the arguments leading to your answer. The only matrix elements different from zero are $\langle\psi_{200}|V|\psi_{210}\rangle = \langle\psi_{210}|V|\psi_{200}\rangle = -3\gamma a$, where a is the Bohr radius.

Mathematical tool box: The determinant of the 4×4 matrix

$$\overline{\overline{M}} = \begin{pmatrix} d_1 & b & 0 & 0 \\ a & d_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_4 \end{pmatrix} \quad \text{is } \det(\overline{\overline{M}}) = (d_1 d_2 - ab)d_3 d_4. \tag{4}$$

Problem 3: The biomolecule β-carotene

β-carotene is the biomolecule responsible for the orange color of carrots. The molecule is linear and 22 of its electrons are delocalized and can be modeled as being confined in an infinite square well potential. The well is marked with gray on the chemical structure below. For simplicity we model the 22 delocalized electrons as a system of non-interacting spin $\frac{1}{2}$ fermions. The de Broglie wavelength of an electron is $\lambda_\mathrm{B} = h/\sqrt{3m_e k_\mathrm{B} T}$.



Question 3.1: Argue why the system must be treated with quantum and not classical mechanics at room temperature.

Question 3.2: Make an energy level diagram with the electron configuration in the ground state Ψ_1 and the first excited state Ψ_2. Give an expression for the wavelength λ of a photon, which by absorption can excite the system from Ψ_1 to Ψ_2. How is this related to the color of a carrot?

END OF EXAMINATION SET.

Roskilde University,

Master's Module, Quantum Mechanics.

Friday the 26th of August 2016 from 10.00 to 14.00.

CLOSED-BOOK EXAM: NO EXTRA MATERIALS ALLOWED BEYOND THE FORMULA SHEET INCLUDED WITH THIS EXAMINATION SET AND YOUR OWN GOLDEN SHEET (THIS INCLUDES NO CALCULATORS).

This four hour written examination consists of TWO problems with a total of TEN questions on TWO pages. Each of the ten questions have equal weights of 10%.

Problem 1: The harmonic quantum oscillator

Imagine a particle with mass m confined in the one-dimensional harmonic oscillator potential: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ where x is the position, $\omega = \sqrt{k/m}$ is the angular frequency of the oscillator and k is the spring constant. The wavefunction $\Psi(x,t)$ has the initial form

$$\Psi(x,0) = A(5\psi_0 + 4\psi_2 + 2\sqrt{2}\psi_4) \tag{1}$$

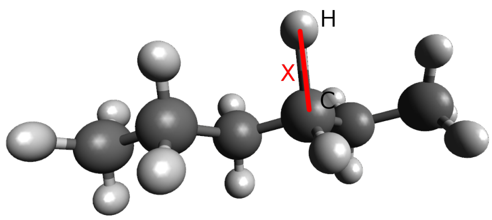
where A is a normalization constant and ψ_n are the usual normalized stationary solutions.

Question 1.1: Determine A such that $\Psi(x,0)$ is normalized, and for this state calculate the probabilities of measuring the system to have the energies $\frac{1}{2}\hbar\omega$ and $\frac{1}{4}\hbar\omega$, respectively.

Question 1.2: Let $j = 0, 1, 2, 3, \ldots$ be a positive integer and consider $\Psi(x,0)$. Give symmetry arguments to why the expectation value of the operators with the form x^{2j} have non-zero expectation values while the expectation values of the operators with the form x^{2j+1} have expectation values of zero. Use the operators x and x^2 to describe the experimental outcome of repeated measurements of the particle positions of systems prepared in the initial state $\Psi(x,0)$ (you do not need to compute actual numbers).

Question 1.3: The term κx^2 is added to $V(x)$ where κ is a real positive constant. What is the physical interpretation of this change? Assume that κ is small and calculate an approximation to first order in κ of the new ground state energy.

Next, model the stretching of a C-H covalent bond in a hydrocarbon-molecule as a one-dimensional quantum oscillator. The picture below show an example of such a bond stretching along the direction highlighted in red. The strength of the covalent bond determines the spring constant k. Assume that the mass of the remainder of the molecule is infinite relative to the mass of the hydrogen.



Question 1.4: In an experiment at ambient conditions, the value of the dimensionless number $\frac{k_B T}{\hbar\omega}$ is measured to 0.45. Argue from this that quantum and not classical mechanics is needed to describe the system.

Question 1.5: Determine the wavelength λ of a photon that through an absorption process can excite the system from the ground state ψ_0 to the first excited state ψ_1 (in terms of m and k). Assume that the hydrogen atom of mass m is replaced by a deuterium atom of mass $2m$ without any change in the spring constant k. Determine the photon wavelength now necessary to accomplish the same absorption process.

Problem 2: The quantum Zeno effect

A Hermitian operator, $\hat{A}$, represents a physical property of a system. The states of the system exist in a two-dimensional space. An orthonormal basis is given by the two states $|1\rangle$ and $|2\rangle$, which are eigenstates corresponding to different eigenvalues for $\hat{A}$:

$$\hat{A}|1\rangle = a_1|1\rangle$$

and

$$\hat{A}|2\rangle = a_2|2\rangle,$$

$a_1 \neq a_1$. The Hamiltonian operator, $\hat{H}$, is given by: $\hat{H}|1\rangle = \beta|2\rangle$ and $\hat{H}|2\rangle = \beta|1\rangle$, where β is a real positive constant.

Question 2.1: Express $\hat{H}$ as a matrix and find the energy eigenvalues, E_+ and E_-. Show that the corresponding normalized energy eigenvectors, $|+\rangle$ and $|-\rangle$, are given by

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle$$

and

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle$$

where $\hat{H}|+\rangle = E_+|+\rangle$ and $\hat{H}|-\rangle = E_-|-\rangle$.

Question 2.2: The system is in the state $|1\rangle$ at time $t = 0$. Give an expression in terms of $|1\rangle$ and $|2\rangle$ for the state of the system at all later times, t.

Question 2.3: What is the probability, $P_{a_1}(t)$, that a measurement at time t, of the physical property corresponding to $\hat{A}$ gives the result a_1?

Question 2.4: $P_n(t)$ is the probability that a measurement at time t of the physical property corresponding to $\hat{A}$, gives the result a_1, if previously $(n-1)$ measurements of the same property (with no specification of the outcome) were done at times $\frac{t}{n}, 2\frac{t}{n}, 3\frac{t}{n}, \ldots, (n-1)\frac{t}{n}$. As an example, $P_2(t)$ is the probability that a measurement at time t gives the result a_1, given that a measurement was done at time $t/2$, no matter the result of this first measurement. Argue first that $P_2(t) > P_{a_1}(t/2)P_{a_1}(t/2)$. Then argue that

$$P_n(t) > \left[P_{a_1}(t/n)\right]^n.$$

Question 2.5: $P_{a_1}(t)$ can for small t be expressed as $P_{a_1}(t) = 1 - \frac{\beta^2}{\hbar^2}t^2$. Show, using the inequality from question 2.4, that $P_n(t) \to 1$ for $n \to \infty$ and give a physical interpretation of this result – this is the so-called quantum Zeno effect as observed in 1989 for a two-level atomic system.

The identity $\lim_{n\to\infty}(1 + \frac{x}{n^2})^n = 1$ for all x, is useful.

End of examination set.