

# Examen Kwantummechanica: theorie

2009-2010, eerste zittijd, 3de Bachelor Fysica en Sterrenkunde

22 januari 2010, 14:00

1. Gegeven de generator voor een infinitesimale translatie

$$\hat{T}(\mathbf{d}\mathbf{r}) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{d}\mathbf{r}$$

- (a) Bereken

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{T}(\mathbf{d}\mathbf{r}') | \mathbf{r}' \rangle$$

tot op lineaire orde in  $\mathbf{d}\mathbf{r}'$  en leid hieruit de commutatierelaties tussen positie en momentum af.

- (b) Werk met een infinitesimale translatie op een toestand  $|\Psi\rangle$  en leid hieruit de momentumoperator in de configuratierepresentatie af.
- (c) Bepaal de eigentoestanden van  $\hat{\mathbf{p}}$  in de configuratierepresentatie (met correcte Dirac-delta normering).
2. (a) Tijdsafhankelijke perturbatietheorie voor een niet-ontaard energiespectrum.
- (b) Bewijs het onbepaaldheidsprincipe van Heisenberg

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} | \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle |$$

# Examen Kwantummechanica: oefeningen

2009-2010, eerste zittijd, 3de Bachelor Fysica en Sterrenkunde

22 januari 2010, 14:00

## 1. Verstrengelde spins:

Beschouw een systeem van twee spin- $\frac{1}{2}$  deeltjes, beschreven door de Hamiltoniaan

$$\hat{H} = J_x \sigma_x^1 \otimes \sigma_x^2 + J_z \sigma_z^1 \otimes \sigma_z^2$$

met  $J_x$  en  $J_z$  koppelingsconstanten, en  $\sigma_{x,z}^{1,2}$  de Pauli-matrices inwerkend op respectievelijk de eerste en de tweede spin.

- Diagonaliseer de Hamiltoniaan, m.a.w. bereken de energie-eigenwaarden en bijbehorende eigenvectoren.
- Indien de twee spins zich op tijdstip  $t = 0$  in de toestand  $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$  bevinden, bereken dan de tijdsgeëvolueerde toestand  $|\psi(t)\rangle$ .
- Bereken de totale dichtheidsmatrix  $\rho_{\text{tot}}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ .
- Bereken daaruit de dichtheidsmatrix voor de eerste spin, door over de vrijheidsgraden van de tweede spin te sporen:  $\rho_1(t) = \text{Tr}_2(\rho_{\text{tot}}(t))$ .
- Op welke tijdstippen is er geen verstrengeling (*entanglement*) tussen de eerste en de tweede spin. En op welk moment beschrijft de dichtheidsmatrix een maximaal verstrengelde toestand?

**Extra:** Voor een kwantummechanische toestandsvector is de tijdsevolutie unitair:  $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$  met  $U(t)$  een unitaire matrix. Voor de corresponderende dichtheidsmatrix geldt dan  $\rho(t) = U(t)\rho(0)U(t)^\dagger$ . Wordt de tijdsevolutie van  $\rho_1(t)$  eveneens beschreven door zulke unitaire transformatie? Denk hierbij na over hoe een unitaire transformatie die eigenwaarden van een matrix verandert.

## 2. Morse-oscillator:

In de kwantumchemie wordt een diatomische molecule vaak beschreven als een systeem van twee puntdeeltjes. Als het massamiddelpunt wordt afgesplitst, blijft een driedimensionaal ééndeeltesprobleem over voor de relatieve coördinaat die de vector tussen de twee atomen beschrijft. Typische interne bewegingen van zulke diatomische molecule zijn vibraties en rotaties. Deze worden gemodelleerd met behulp van een sferisch symmetrische potentiaal, de Morse-potentiaal, gegeven door

$$V_{\text{Morse}}(r) = D_c \left\{ 1 - e^{-b(r-r_c)} \right\}^2,$$

met  $D_c$  de dissociatie-energie,  $r_c$  de evenwichtsafstand en  $b$  een parameter die de sterkte van de vibraties beschrijft.

- De eigenfuncties van de Hamiltoniaan met de Morse-potentiaal worden gekenmerkt door de kwantumgetallen van het angulaair moment,  $l$  en  $m$ , die de rotaties beschrijven, en door het radiële kwantumgetal  $\nu$  dat de vibraties beschrijft. Gegeven de opsplitsing

$$\psi_{\nu lm}(r) = \frac{R_{\nu,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$

bepaal dan de differentiaalvergelijking waaraan  $R_{v,l}(r)$  moet voldoen uit de Schrödinger-vergelijking

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{Morse}}(r)\right)\psi_{v,l,m}(\mathbf{r}) = E_{v,l}\psi_{v,l,m}(\mathbf{r})$$

(b) Voor  $l = 0$  wordt de differentiaalvergelijking voor  $R_{v,l}(r)$  uiteindelijk gegeven door

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{Morse}}(r)\right)R_{v,l}(r) = E_{v,l}R_{v,l}(r)$$

Wordt van de Morse-potentiaal nu een Taylor-ontwikkeling gemaakt in  $x = r - r_c$ , dan vinden we tot op vierde orde:

$$\left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}}_{\hat{H}^{(0)}} + D_e b^2 x^2 \underbrace{- D_e b^3 x^3}_{\hat{V}^a} + \underbrace{\frac{7}{12} D_e b^4 x^4}_{\hat{V}^b} + \dots\right)R_{v,0}(x) = E_{v,0}R_{v,0}(x)$$

In de laagste orde is dit (niet geheel onverwacht) een harmonische oscillator met  $\omega = \sqrt{2D_e b^2/m}$ . In principe is het domein van  $x$  beperkt tot  $[-r_c, +\infty[$ . Voor  $r_c b \gg 1$  kunnen we dit zonder problemen verwaarlozen. De energie-eigenwaarden van  $\hat{H}^{(0)}$  worden dan gegeven door  $E_{v,0}^{(0)} = \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right)$  met de bijbehorende eigenfuncties  $|R_{v,0}^{(0)}\rangle = |\nu\rangle$  van de harmonische oscillator.

Pas nu tijdsafhankelijke storingsrekening toe op de termen  $\hat{V}^a$  en  $\hat{V}^b$ .

- Bepaal voor elk energieniveau  $\nu$  de **eerste** orde en **tweede** orde energiecorrecties veroorzaakt door de term  $\hat{V}^a$ . Dit kan volledig algebraïsch, door gebruik te maken van de creatie- en annihilatie-operatoren

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger).$$

- Bepaal eveneens voor elk energieniveau  $\nu$  de **eerste** orde energiecorrecties veroorzaakt door de term in  $\hat{V}^b$ .
- Tel alles samen en vind

$$E_{v,0} = \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{\hbar b^2}{2m\omega}$$

Wonderbaarlijk genoeg, heb je nu de exacte (niet-perturbatieve) energie-eigenwaarden gevonden. Dit betekent echter niet dat de invloed van alle hogere orde termen en hogere orde correcties van deze termen beperkt is tot het corrigeren van de verwaarloosde ondergrens  $x = -r_c$ . In tegenstelling tot de harmonische oscillatorpotentiaal is de Morse-potentiaal begrensd, bij  $r = +\infty$  bereikt hij de waarde  $V(r) = D_e$ . Bijgevolg kunnen geen gebonden toestanden met energie  $E_{v,0} > D_e$  en is het aantal gebonden toestanden eindig. Bovenstaande energie-eigenwaarden zijn dus slechts geldig tot een zekere waarde  $\nu = \nu_{\text{max}}$ .