AARHUS UNIVERSITET

Det Naturvidenskabelige Fakultet | Vintereksamen 2004/05

FAG: Fysik 202

OPGAVESTILLER: Karlheinz Langanke/Axel Svane

Antal sider i opgavesættet (inkl. forsiden): 7

Eksamensdag: mandag dato: 10. måned: januar år: 2005 kl.: 09:00-13:00

Eksamenslokale: Aulaen, bygn. 412, Nordre Ringgade

Tilladte hjælpemidler: Alle sædvanlige hjælpemidler.

Materiale der udleveres eksaminanden:

Opgavesættet indeholder 3 opgaver med i alt 17 spørgsmål.
De enkelte spørgsmål vægtes ens ved bedømmelsen.

Opgaveteksten følger på de næste 3 sider!

Efter den danske opgavetekst følger en kopi af opgavesættet på engelsk (3 sider).

Opgave 1.

En partikel med massen m bevæger sig i et en-dimensionalt harmonisk oscillator potential $V(\hat{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$, hvor ω er frekvensen og $\hat{x}$ er stedoperatoren. Egentilstandene og egenværdierne for Hamiltonoperatoren H er givet ved (for $n = 0, 1, 2, ...$):

$$H|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle.$$

I det følgende kan man med fordel benytte hæve- og sænke-operatorerne (step-op og step-ned operatorer):

$$a_+ = \frac{1}{\sqrt{2m}}(\hat{p} + im\omega\hat{x}) \qquad a_- = \frac{1}{\sqrt{2m}}(\hat{p} - im\omega\hat{x}),$$

hvor $\hat{p}$ er impulsoperatoren.

1. Beregn forventningsværdien $\langle n|\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}|n\rangle$.

2. Beregn forventningsværdierne af den kinetiske energi, givet ved operatoren $T = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, samt den potentielle energi, $V(\hat{x})$, i tilstanden $|n\rangle$.

3. Beregn overgangs-matrixelementet $\langle n|\hat{x}^2|m\rangle$ mellem de to tilstande $|n\rangle$ and $|m\rangle$.

4. Paritetsoperatoren $\hat{\pi}$ anti-kommuterer med sted- og impuls-operatorerne, dvs. $\hat{\pi}\hat{x} = -\hat{x}\hat{\pi}$ og $\hat{\pi}\hat{p} = -\hat{p}\hat{\pi}$. Vis, at $[H, \hat{\pi}] = 0$ for den harmoniske oscillators Hamiltonoperator H.

Opgave 2.

En partikel er beskrevet ved den en-dimensionale Hamiltonoperator H med de normerede egenfunktioner $\phi_n(x)$ og egenenergierne ϵ_n, dvs.:

$$H\phi_n(x) = \epsilon_n \phi_n(x) \qquad (n = 0, 1, 2...). \tag{1}$$

Spektret er ikke-udartet. Hamiltonoperatoren H kommuterer med paritets-operatoren $\hat{\pi}$. Følgelig er funktionerne $\phi_n(x)$ også egenfunktioner for paritets-operatoren med

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \phi_n(-x) && n \text{ lige} \\ \phi_n(x) &= -\phi_n(-x) && n \text{ ulige} \end{aligned}$$

1. Partiklen er i egentilstanden med energi ϵ_n. Beregn forventningsværdien af stedoperatoren $\hat{x}$ og impulsoperatoren $\hat{p}$.

Antag nu, at partiklen til tidspunktet $t = 0$ er i superpositions-tilstanden

$$\phi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_0(x) + i\phi_1(x)).$$

2. Beregn forventningsværdien af stedoperatoren $\hat{x}$ til tiden $t = 0$. (Udtryk resultatet ved hjælp af størrelserne $x_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_m^\star(x) x \phi_n(x)$.)

3. Bestem bølgefunktionen $\phi(x, t)$ til ethvert senere tidspunkt $t > 0$.

4. Beregn forventningsværdien af stedoperatoren $\hat{x}$ til ethvert senere tids-punkt $t > 0$.

Nu betragtes et fysisk system bestående af to identiske spinløse partikler ($k = 1, 2$), som hver for sig er beskrevet ved Hamiltonoperatoren og egen-funktionerne introduceret i ligning (1) ovenfor. Systemets Hamiltonoperator er derfor givet ved $H_{tot} = H_1 + H_2$, hvor

$$\begin{aligned} H_k \phi_{n_k}(x_k) &= \epsilon_{n_k} \phi_{n_k}(x_k) && (k = 1, 2) \\ H_{tot} \psi_m(x_1, x_2) &= E_m \psi_m(x_1, x_2). \end{aligned}$$

Her er index m brugt til at nummerere egentilstandene for to-partikel systemet.

5. Vis, at egenfunktionerne for H_{tot} kan skrives

$$\psi_m(x_1, x_2) = \phi_{n_1}(x_1)\phi_{n_2}(x_2),$$

og udtryk egenenergierne E_m ved en-partikel egenenergierne.

6. Beregn forventningsværdien af stedoperatoren $\hat{x} = \hat{x}_1 + \hat{x}_2$ i egentil-standen $\psi_m(x_1, x_2)$.

7. Hvad er egenenergien for H_{tot} i den første exciterede tilstand? Hvad er udartningen af denne tilstand?

Opgave 3.

L_x, L_y, L_z betegner de 3 cartesiske komponenter af impulsmoment operatoren. De normerede samtidige egenfunktioner for $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ og L_z betegnes $|l, m\rangle$, dvs.:

$$L^2|l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l, m\rangle$$

$$L_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle.$$

Et fysisk system er beskrevet ved tilstanden

$$|\phi\rangle = N(|1, 0\rangle + \frac{i}{2}|2, 0\rangle).$$

1. Normèr tilstanden $|\phi\rangle$.
2. Er $|\phi\rangle$ en egentilstand for L^2 og/eller for L_z?
3. Hvad er sandsynligheden for, at en måling af operatoren L^2 i tilstanden $|\phi\rangle$ giver resultatet $6\hbar^2$?
4. Hvad er sandsynligheden for, at en måling af operatoren L_z i tilstanden $|\phi\rangle$ giver resultatet $\hbar$?
5. Beregn forventningsværdien $\langle\phi|L^2|\phi\rangle$.
6. Beregn forventningsværdien $\langle\phi|L_x|\phi\rangle$.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2005

Opgave 1. (35 %)

Betragt en partikel med massen m, beskrevet ved Hamiltonoperatoren for en én-dimensional harmonisk oscillator:

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

hvor ω er oscillatorens frekvens og $\hat{x}$ og $\hat{p}$ betegner operatorerne for sted og impuls. De normerede egenfunktioner for $\hat{H}$ betegnes $\phi_n(x)$ med tilhørende egenenergier $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, hvor $n = 0, 1, 2, ...$

Partiklens bølgefunktion er til tiden $t = 0$ givet ved:

$$\psi(x, t = 0) = A\left(\phi_0(x) + 2i\phi_2(x)\right).$$

1. Bestem A, så ψ er normeret.
2. Hvad er middelværdien af energien i tilstanden ψ?
3. Hvad er spredningen på energien i tilstanden ψ?
4. Bestem partiklens bølgefunktion $\psi(x, t)$ til ethvert senere tidspunkt t.

Nu betragtes en perturbation givet ved

$$\hat{H}' = \alpha\hat{p},$$

hvor α er en konstant.

5. Udtryk $\hat{H}'$ ved stepoperatorerne $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$.
6. Vis, at energiskiftet af den n'te egentilstand er 0 til første orden i α.
7. Beregn 2. ordens energiskiftet for den n'te egentilstand.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2005

Opgave 2. (25 %)

I et 3-dimensionalt underrum er de fysiske variable A og B beskrevet ved matricerne:

$$\mathbf{A} = a \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}; \qquad \mathbf{B} = b \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

hvor a og b er konstanter.

1. Vis, at tilstanden givet ved vektoren:

   $$\psi = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

   er en egenvektor for både $\mathbf{A}$ og $\mathbf{B}$, og bestem de respektive egenværdier.

2. Bestem kommutatoren $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$.

3. Bestem de resterende egenværdier med tilhørende egenvektorer for $\mathbf{B}$.

4. Et fysisk system er beskrevet ved tilstanden givet ved vektoren:

   $$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

   En måling af den fysiske observable B foretages på systemet. Bestem de mulige udfald af denne måling samt sandsynlighederne for, at disse udfald indtræffer.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2005

Opgave 3. (25 %)

I denne opgave betragtes et brintatom, hvis normerede stationære tilstande betegnes $|nlm\rangle$, hvor n er hovedkvantetallet og l og m er kvantetallene hørende til $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$:

$$\hat{L}^2|nlm\rangle = l(l+1)\hbar^2|nlm\rangle$$
$$\hat{L}_z|nlm\rangle = m\hbar|nlm\rangle.$$

Som sædvanlig introduceres operatorerne

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad \text{og} \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

Vi ser bort fra spin og finstruktur.

Et brintatom er beskrevet ved den normerede bølgefunktion:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|210\rangle + |211\rangle\right).$$

1. Gør rede for, at $|\psi\rangle$ er en energiegentilstand, og bestem den tilhørende energi. Er $|\psi\rangle$ en egentilstand for $\hat{L}^2$?

2. Bestem middelværdien af $\hat{L}_z$ i tilstanden $|\psi\rangle$. Gør rede for, at der om spredningerne på de observable $\hat{L}_x$ og $\hat{L}_y$ må gælde uligheden

$$\sigma(\hat{L}_x)\sigma(\hat{L}_y) \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

3. Beregn $\hat{L}_+|\psi\rangle$ og $\hat{L}_-|\psi\rangle$.

4. Beregn forventningsværdierne $\langle\hat{L}_x\rangle$ og $\langle\hat{L}_y\rangle$ i tilstanden $|\psi\rangle$.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2005

Opgave 4. (15 %)

En partikel bevæger sig på x-aksen i et potential, $V(x)$. Grundtilstandens bølgefunktion er

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^4\right),$$

hvor a er en konstant af dimension længde. Endvidere vides det, at $V(a) = 0$.

1. Bestem $V(x)$ samt grundtilstandsenergien.

NB: ψ som angivet ovenfor er ikke normeret. Normering ønskes ikke foretaget.

Kvantemekanik, Augusteksamen 2005

Opgave 1. (30 %)

En partikel med massen m, er beskrevet ved Hamiltonoperatoren for en én-dimensional harmonisk oscillator:

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

Her er ω oscillatorens frekvens og $\hat{x}$ og $\hat{p}$ betegner operatorerne for sted og impuls.
De normerede egenfunktioner for $\hat{H}$ betegnes $\phi_n(x)$ med tilhørende egenenergier $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, hvor $n = 0, 1, 2, \ldots.$
Partiklens bølgefunktion er til tiden $t = 0$ givet ved:

$$\psi(x, t = 0) = A\left(\sqrt{3}i\phi_1(x) + \phi_3(x)\right).$$

1. Bestem A, så ψ er normeret.
2. Bestem middelværdien af energien i tilstanden ψ. Bestem tillige de klassiske vendepunkter svarende til denne energi.
3. Angiv partiklens bølgefunktion $\psi(x, t)$ til ethvert senere tidspunkt t. Med $P(x, t)$ betegnes sandsynlighedstætheden på x-aksen. Gør rede for, at $P(x, t)$ er en periodisk funktion i tiden, og bestem perioden, T.
4. Opskriv et udtryk for sandsynligheden for, at partiklen ved en måling af dens position findes til at være uden for det klassisk tilgængelige område. Udtrykket ønskes angivet ved $P(x, t)$ men ønskes ikke eksplicit beregnet.

Nu betragtes en operator givet ved

$$\hat{H}' = k\left(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\right).$$

hvor k er en positiv konstant.

5. Vis, at $\hat{H}'$ er hermitesk.
6. Udtryk $\hat{H}'$ ved stepoperatorerne $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$.
7. Beregn forventningsværdien af $\hat{H}'$ i tilstanden $\psi(x, t = 0)$.

Kvantemekanik, Augusteksamen 2005

Opgave 2. (25 %)

To spin-løse partikler med massen m bevæger sig i et potential på x-aksen givet ved den uendelige potentialbrønd:

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

Her er a brøndens bredde.

Først antages at partiklerne er skelnelige.

1. Bestem energi og bølgefunktion for grundtilstanden for de to partikler.
2. Bestem energierne og udartningerne af de tre laveste exciterede niveauer.

I de følgende 2 spørgsmål antages det, at partiklerne er uskelnelige bosoner.

3. Bestem nu energierne, udartningerne og bølgefunktionerne for grundtilstanden samt de tre laveste exciterede niveauer.

En vekselvirkning mellem de to bosoner beskrives ved perturbationsoperatoren:

$$\hat{H}' = g\delta(x_1 - x_2),$$

hvor g er en konstant, δ er Diracs deltafunktion, og x_1 og x_2 er de to partiklers koordinater i brønden.

4. Beregn energiskiftet af grundtilstanden, til første orden i vekselvirkningsparameteren g.

Vink: der gælder:

$$\int \sin^4(bx)dx = \frac{3x}{8} - \frac{\sin(2bx)}{4b} + \frac{\sin(4bx)}{32b}$$

Kvantemekanik, Augusteksamen 2005

Opgave 3. (25 %)

I denne opgave betragtes et impulsmoment, $\vec{L}$, hvis normerede fælles egentilstande for $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$ betegnes $|l,m\rangle$, hvor l og m er de tilhørende kvantetal:

$$\hat{L}^2|l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle$$
$$\hat{L}_z|l,m\rangle = m\hbar|l,m\rangle.$$

Som sædvanlig introduceres operatorerne

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad \text{og} \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

1. Beregn kommutatoren $[\hat{L}_+, \hat{L}_-]$.

Betragt nu det tre-dimensionale underrum, $\mathcal{H}$, der svarer til kvantetallet $l = 1$, dvs. som er udspændt af tilstandene $|1,-1\rangle$, $|1,0\rangle$ og $|1,1\rangle$.

2. Udtryk operatorene $\hat{L}_z$ og $\hat{L}^2$ som matricer i $\mathcal{H}$.

En fysisk tilstand er beskrevet ved den normerede bølgefunktion:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(|1,-1\rangle - 2|1,1\rangle\right).$$

3. Angiv $|\psi\rangle$ som en vektor i $\mathcal{H}$. Bestem forventningsværdien af $\hat{L}_z$ i tilstanden $|\psi\rangle$.
4. Udtryk operatorene $\hat{L}_+$ og $\hat{L}_-$ som matricer i $\mathcal{H}$, og check resultatet fra spørgsmål 1.
5. Bestem egenværdier og egenvektorer for operatoren $\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2$ inden for underrummet $\mathcal{H}$.

Kvantemekanik, Augusteksamen 2005

Opgave 4. (20 %)

En partikel bevæger sig i tre rumlige dimensioner i et sfærisk symmetrisk potential, $V(r)$. Som sædvanlig faktoriserer vi energi-egenfunktionerne i en radial og en vinkel-afhængig del:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi),$$

og indfører $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$.

Vi ser nu på to bundne tilstande i $V(r)$, beskrevet ved funktionerne, $u_1(r)$ og $u_2(r)$. Disse er altså løsninger til radialligningen med energierne E_1 og E_2, og svarende til kvantetallene n_1l_1 og n_2l_2, henholdsvis.

For disse funktioner gælder der:

$$\frac{d}{dr}\left\{u_1(r)\frac{du_2(r)}{dr} - u_2(r)\frac{du_1(r)}{dr}\right\} = \frac{2m}{\hbar^2}\left\{E_1 - E_2 - [V_{eff,1}(r) - V_{eff,2}(r)]\right\} u_1(r)u_2(r) \;, \tag{1}$$

hvor $V_{eff,i}$, $(i = 1,2)$, er det effektive potential i radialligningen.

1. Vis relationen (1).
2. Vis ud fra (1), at hvis $E_1 \neq E_2$, men $l_1 = l_2$, da gælder
$$\int_0^\infty u_1(r)u_2(r)dr = 0.$$
3. Vis endvidere, at hvis $E_1 = E_2$, men $l_1 \neq l_2$, da gælder
$$\int_0^\infty R_1(r)R_2(r)dr = 0.$$

Opgave 1. (40 %)

Betragt en partikel med massen m, beskrevet ved Hamiltonoperatoren for en én-dimensional harmonisk oscillator:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

hvor $\hat{T}$ og $\hat{V}$ er operatorer for kinetisk og potentiel energi:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}; \qquad \hat{V} = \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2.$$

Her er ω oscillatorens frekvens og $\hat{x}$ og $\hat{p}$ betegner operatorerne for sted og impuls. De normerede egenfunktioner for $\hat{H}$ betegnes $\phi_n(x)$ med tilhørende egenenergier $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, hvor $n = 0, 1, 2, ...$

Partiklens bølgefunktion er til tiden $t = 0$ givet ved:

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{5}} \left(2\phi_0(x) + i\phi_2(x)\right).$$

1. Hvad er middelværdien af energien i tilstanden ψ?
2. Hvilke udfald er mulige ved en måling af partiklens energi, og hvad er sandsynligheden for disse udfald?
3. Bestem partiklens bølgefunktion $\psi(x, t)$ til ethvert senere tidspunkt t.

Nu betragtes en perturbation givet ved

$$\hat{H}' = \lambda \left(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}\right),$$

hvor λ er en reel konstant.

4. Vis, at $\hat{H}'$ er hermitisk, samt at kommutatoren $[\hat{T}, \hat{V}]$ er proportional med $\hat{H}'$.
5. Vis, at $\hat{H}'$ kan udtrykkes ved hjælp af hæve- og sænke-operatorerne $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$ (se Griffiths' ligning [2.47]) som:
   $$\hat{H}' = c(\hat{a}_+^2 - \hat{a}_-^2),$$
   og bestem konstanten c.
6. Gør rede for, at 1. ordens energiskiftet *i grundtilstanden* $\phi_0(x)$ forårsaget af perturbationen $\hat{H}'$ er 0.
7. Beregn 1. ordens energiskiftet *i tilstanden* $\psi(x, 0)$ forårsaget af perturbationen $\hat{H}'$.
8. Beregn 2. ordens energiskiftet *i grundtilstanden* $\phi_0(x)$ forårsaget af perturbationen $\hat{H}'$.

Opgave 2. (30 %)

I denne opgave betragtes en partikel med massen m, der bevæger sig på x-aksen i et potentiale givet ved den endelige potentialbrønd. Det vil sige, at potentialfuntionen er:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad |x| > a \\ -V_0 & \text{for} \quad |x| \leq a, \end{cases}$$

hvor V_0 er en positiv konstant (af dimension energi), og a en konstant længde.

En skare af bølgefuntioner er beskrevet ved

$$\psi_k(x) = A(k)e^{-k|x|},$$

hvor k er en parameter (dimension invers længde), der løber gennem alle positive værdier.

1. Bestem $A(k)$, så $\psi_k(x)$ er normeret.

2. Beregn middelværdien af den kinetiske energi i tilstanden beskrevet ved ψ_k, under anvendelse af omskrivningen:

$$< \psi_k|\hat{p}^2|\psi_k >= ||\hat{p}\psi_k||^2.$$

3. Udfør en variationsregning og vis, at den værdi af parameteren k, der bedst bestemmer grundtilstandsenergien for partiklen, tilfredsstiller en ligning på formen

$$k = B\exp(-2ka),$$

hvor B er en konstant. Bestem B. (Ligningen kan ikke umiddelbart løses eksplicit, så dette ønskes ikke!)

4. Betragt tilfældet $V_0 = \alpha\frac{1}{2a}$ for α lig en konstant, og betragt grænseovergangen $a \to 0$, svarende til, at potentialbrønden bliver smallere og smallere men samtidigt dybere og dybere. Løs ligningen fra sp. 3, og bestem den tilhørende estimerede grundtilstandsenergi. Sammenlign med det forventede eksakte resultat i denne grænse og kommentér.

Opgave 3. (30 %)

Et fysisk system er beskrevet ved et tre-dimensionelt underrum $\mathcal{H}$ udspændt af de tre ortonormale tilstande $|1>$, $|2>$ og $|3>$, der er egentilstande for systemets Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned} \hat{H}|1> &= \epsilon|1> \\ \hat{H}|2> &= 2\epsilon|2> \\ \hat{H}|3> &= 3\epsilon|3>, \end{aligned}$$

hvor ϵ er en konstant.

1. Udtryk $\hat{H}$ som en matrix, $\mathbf{H}$, i underrummet $\mathcal{H}$, idet $|1>$, $|2>$ og $|3>$ vælges som hhv. første, anden og tredie basisvektor.

En fysisk observabel A er i samme basis repæsenteret ved matricen

$$\mathbf{A} = a \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

hvor a er en konstant.

2. Beregn middelværdi og spredning af observablen A i tilstanden $|1>$.

3. Vis, at
$$|\psi> = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(|1> + |2> - 2|3>\right)$$
er en egenvektor for $\mathbf{A}$ og bestem den tilhørende egenværdi.

4. Hvilke resultater vil man generelt kunne opnå ved en måling af den fysiske observable A?

5. Systemet vides i et givet eksperiment at være i tilstanden $|2>$. Hvad er sandsynligheden for, at en måling af observablen A giver værdien $2a$?

Opgave 1. (25 %)

Denne opgave omhandler den 1-dimensionale harmoniske oscillator.

De normerede energiegentilstande betegnes $|n\rangle$, hvor $n = 0, 1, 2, ...$

To operatorer er givet ved:

$$\hat{A} = \alpha(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)$$

$$\hat{B} = i\beta(\hat{a}_+^2 - \hat{a}_-^2),$$

hvor α og β er reelle tal, og $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$ er de sædvanlige stige-operatorer (jvf. Griffiths afsnit 2.3.1).

1. Beregn $\hat{A}|n\rangle$ og $\hat{B}|n\rangle$.
2. Beregn middelværdi og spredning for såvel $\hat{A}$ som $\hat{B}$ i tilstanden $|n\rangle$.
3. Bestem kommutatoren $[\hat{A}, \hat{B}]$.
4. Opskriv en ulighed, som må gælde for produktet af spredningerne på $\hat{A}$ og $\hat{B}$ i en vilkårlig tilstand.

Opgave 2. (30 %)

En partikel med massen m bevæger sig på x-aksen i en uendelig potentialbrønd. Det vil sige, at potentialfuntionen er:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad 0 < x < a \\ \infty & \qquad \text{ellers} \end{cases}$$

hvor a angiver brøndens bredde.

De normerede energiegentilstande i brønden betegnes $\phi_n(x)$, hvor $n = 1, 2, 3, ...$

Til tiden $t = 0$ er partiklens bølgefunktion givet ved:

$$\psi(x, t = 0) = A\left(i\sqrt{2}\phi_1(x) + \sqrt{3}\phi_2(x)\right).$$

1. Bestem konstanten A, således at ψ er normeret.
2. Hvilke udfald er mulige ved en måling af partiklens energi, og hvad er sandsynligheden for disse udfald? Bestem middelværdien af energien, $\langle E \rangle$.
3. Angiv partiklens bølgefunktion $\psi(x, t)$ til ethvert senere tidspunkt t, og beregn middelværdien af partiklens position, $\langle x \rangle(t)$. Vis, at $\langle x \rangle(t)$ er periodisk og bestem perioden, T. Sammenlign med den periode man ville finde i følge den klassiske mekanik for en partikel, der bevæger sig i potentialet V med energien $\langle E \rangle$.
4. Bestem middelværdien af partiklens impuls, $\langle \hat{p} \rangle(t)$, for ethvert tidspunkt $t > 0$.

Vink:

$$\int_0^{\pi} z sin(z) \sin(2z)\, dz = \frac{-8}{9}.$$

Opgave 3. (30 %)

I denne opgave betragtes et brintatom, idet spin og finstruktureffekter negligeres. De normerede energiegenfunktioner betegnes

$$\phi_{n\ell m}(\vec{r}),$$

hvor n er hovedkvantetallet, og ℓ og m er de sædvanlige kvantetal hørende til henholdsvis $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$. Som sædvanlig indfører vi tillige operatorerne

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

1. Vis, at $\phi_{n\ell m}$ er en egenfunktion for operatoren $\hat{L}_+\hat{L}_-$, og bestem egenværdien.

2. Betragt tilstanden

   $$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{21-1}(\vec{r}) + i\phi_{211}(\vec{r})\right).$$

   Gør rede for, at ψ er en egenfunktion for energien samt for $\hat{L}^2$, men ikke for $\hat{L}_z$.

3. Betragt nu det 3-dimensionale underrum, $\mathcal{H}$, udspændt af ϕ_{21-1}, ϕ_{210} og ϕ_{211}. Opskriv matrixrepræsentationen af $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$, $\hat{L}_+$ og $\hat{L}_-$ i underrummet $\mathcal{H}$.

4. Bestem matrixrepræsentationen af $\hat{L}_x$ i $\mathcal{H}$.

5. Bestem samtlige egenværdier og egenvektorer for $\hat{L}_x$ i underrummet $\mathcal{H}$.

Opgave 4. (15 %)

En partikel bevæger sig på en x-akse i potentialet

$$V(x) = kx^n,$$

hvor k er en konstant og n er et positivt lige heltal. Med $|\psi\rangle$ betegnes en normeret egenfunktion for Hamiltonoperatoren med egenværdi E.

1. Vis ved hjælp af virialsætningen, at

$$\langle\psi|\hat{V}|\psi\rangle = \frac{2}{n+2}E$$

$$\langle\psi|\hat{T}|\psi\rangle = \frac{n}{n+2}E,$$

hvor $\hat{V}$ og $\hat{T}$ betegner operatorerne for henholdsvis potentiel og kinetisk energi.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2007

Opgave 1. (40 %)

En partikel med massen m er beskrevet ved Hamiltonoperatoren for en én-dimensional harmonisk oscillator med frekvensen ω. De normerede energiegen-funktioner betegnes $\phi_n(x)$ med tilhørende egenenergier $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, hvor $n = 0, 1, 2, ...$

Som sædvanlig introduceres hæve- og sænke-operatorerne $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$, se evt. Griffiths [2.47].

Partiklens bølgefunktion betegnes $\psi(x,t)$. Til tiden $t = 0$ er den givet ved:

$$\psi(x,0) = A\left(\hat{a}_+ - \hat{a}_+^2\right)\phi_0(x).$$

1. Udtryk $\psi(x,0)$ som en linearkombination af energiegenfuntionerne og bestem A, således at ψ er normeret.
2. Hvis en energimåling udføres på partiklen i tilstanden $\psi(x,0)$, hvilke udfald er da mulige ved målingen, og hvad er sandsynligheden for disse udfald?
3. Beregn middelværdi og spredning af energien i tilstanden $\psi(x,0)$.
4. Beregn forventningsværdien (middelværdien) af kommutatoren $[\hat{a}_+, \hat{a}_-]$ i tilstanden $\psi(x,0)$.
5. Bestem partiklens bølgefunktion $\psi(x,t)$ til ethvert tidspunkt t.
6. Angiv sted-operatoren $\hat{x}$ ved $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$ og udtryk $\hat{x}\,\psi(x,t)$ som en linear-kombination af energiegenfunktioner.
7. Beregn forventningsværdien af $\hat{x}$ i tilstanden ψ til ethvert tidspunkt t, $< x > (t)$.
8. Beregn forventningsværdien af impulsen i tilstanden ψ til ethvert tids-punkt t, $< p > (t)$.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2007

Opgave 2. (30 %)

I denne opgave betragtes et brintatom, hvis normerede stationære tilstande betegnes $|nlm\rangle$, hvor n er hovedkvantetallet, og l og m er kvantetallene hørende til $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$:

$$\hat{L}^2|nlm\rangle = l(l+1)\hbar^2|nlm\rangle$$
$$\hat{L}_z|nlm\rangle = m\hbar|nlm\rangle.$$

Som sædvanlig introduceres operatorerne

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad \text{og} \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

Vi ser bort fra spin og finstruktur.

I et givet eksperiment er brintatomet beskrevet ved den normerede bølgefunktion:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|210\rangle + |211\rangle - i|21\text{-}1\rangle\right).$$

1. Gør rede for, at $|\psi\rangle$ er en energiegentilstand, og bestem den tilhørende energiegenværdi. Er $|\psi\rangle$ en egentilstand for $\hat{L}^2$? Er $|\psi\rangle$ en egentilstand for $\hat{L}_z$?

Betragt operatoren

$$\hat{H}' = \alpha\left(\hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x\right),$$

hvor α er en reel konstant.

2. Gør rede for, at $\hat{H}'$ er hermitisk.
3. Udtryk $\hat{H}'$ ved $\hat{L}_+$ og $\hat{L}_-$ og beregn forventningsværdien af $\hat{H}'$ i tilstanden $|\psi\rangle$.
4. Betragt det tre-dimensionale underrum udspændt af $|21\text{-}1\rangle$, $|210\rangle$ og $|211\rangle$. Gør rede for, at H' afbilder dette underrum ind i sig selv. Udtryk $\hat{H}'$ som en matrix i dette underrum og bestem de tilhørende egenværdier.
5. Bestem normerede egenvektorer for $\hat{H}'$ i dette tre-dimensionale underrum. Udtryk $|\psi\rangle$ som en linearkombination af egenvektorerne og verificer herved forventningsværdien beregnet i spørgsmål 3.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2007

Opgave 3. (30 %)

I denne opgave betragtes en partikel med massen m, der bevæger sig på x-aksen i et step-potentiale givet ved:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x \leq 0 \\ V_0 & \text{for} \quad x > 0, \end{cases}$$

hvor V_0 er en positiv konstant. Vi søger energiegentilstandene for dette potential. Der er ingen bundne tilstande i potentialet $V(x)$, hvorfor de søgte energiegentilstande er spredningstilstande.

1. Betragt først en energiegenværdi, E, med $E > V_0$. Vis, at en funktion på formen
$$\psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & \text{for} \quad x \leq 0 \\ Te^{iqx} & \text{for} \quad x > 0, \end{cases}$$
er en løsning til den stationære Schrödingerligning. Udtryk k ved E og bestem, hvordan størrelserne q, R og T afhænger af k.

2. Betragt dernæst tilfældet, hvor energien er mindre end potential-steppet: $0 < E < V_0$. Hvilken funktionel form skal en løsning nu have i området $x > 0$?

3. I fortsættelse af tilfældet $0 < E < V_0$ søger vi en løsning til den stationære Schrödingerligning med formen
$$\psi_k(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx} \qquad \text{for} \quad x \leq 0.$$
Bestem R, så $\psi_k(x)$ bliver en løsning. Vis, at R kan skrives på formen
$$R = e^{2i\delta_k},$$
hvor δ_k er reel (betegnes faseskiftet).

Opgave 1. (35 %)

En partikel med massen m bevæger sig på x-aksen i en uendelig potentialbrønd, således at potentialfuntionen er:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad 0 < x < a \\ \infty & \quad\quad \text{ellers} \end{cases},$$

hvor a angiver brøndens bredde.

De normerede energiegentilstande i brønden betegnes $\psi_n(x)$, hvor $n = 1, 2, 3, ...$

Til tiden $t = 0$ er partiklens bølgefunktion givet ved:

$$\phi(x, t = 0) = A\left(i\psi_N(x) - \psi_{N+1}(x)\right),$$

for et givet heltal N.

1. Bestem konstanten A, således at ϕ er normeret.
2. Beregn middelværdien af energien i $\phi(x, t = 0)$.
3. En energimåling udføres på partiklen i tilstanden ϕ. Hvilke udfald er mulige ved målingen, og hvad er sandsynligheden for disse udfald?
4. Beregn spredningen på energien i tilstanden ϕ.
5. Bestem partiklens bølgefunktion $\phi(x, t)$ til ethvert senere tidspunkt t.
6. Beregn middelværdien af partiklens impuls til ethvert tidspunkt. Resultatet ønskes udtrykt ved matrixelementet $\langle\psi_N|\hat{p}\psi_{N+1}\rangle \equiv \beta$, hvor $\hat{p}$ er impulsoperatoren. En eksplicit beregning af β ønskes **ikke**.
7. Vis, at middelværdien af partiklens position svinger harmonisk i tiden og bestem perioden. Sammenlign med perioden, som man ville finde i følge den klassiske mekanik, for en partikel med en energi lig den beregnede middelenergi i sp. 2.

Opgave 2. (35 %)

Et fysisk system er beskrevet ved et tre-dimensionelt underrum $\mathcal{V}$ udspændt af de tre ortonormale tilstande $|1\rangle$, $|2\rangle$ og $|3\rangle$, som er egenfunktioner for Hamiltonoperatoren $\hat{H}^0$ med egenværdier ϵ, 2ϵ og 3ϵ, hvor ϵ er et positivt reelt tal:

$$\hat{H}^0|n\rangle = n\epsilon|n\rangle, \quad \text{for } n = 1, 2, 3.$$

1. Udtryk $\hat{H}^0$ som en matrix i underrummet $\mathcal{V}$, idet $|1\rangle$, $|2\rangle$ og $|3\rangle$ vælges som hhv. første, anden og tredie basisvektor.

Om en anden operator, $\hat{B}$, der beskriver den fysiske observable B, gælder der:

$$\begin{aligned} \hat{B}|1\rangle &= |3\rangle \\ \hat{B}|2\rangle &= -|2\rangle \\ \hat{B}|3\rangle &= |1\rangle, \end{aligned}$$

2. Udtryk ligeledes $\hat{B}$ som en matrix, $\mathbf{B}$, i underrummet $\mathcal{V}$.
3. Bestem matrixrepræsentationen for kommutatoren $[\hat{H}^0, \hat{B}]$ i $\mathcal{V}$.
4. Beregn middelværdi og spredning af de observable E og B i tilstanden

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle + i|3\rangle\right).$$

5. Opskriv ubestemthedsrelationen for de observable, E (energien) og B, der beskrives ved operatorerne $\hat{H}^0$ og $\hat{B}$. Vis at ubestemthedsrelationen er opfyldt i tilstanden $|\psi\rangle$.

Nu betragtes en situation, hvor en perturbation proportional med $\hat{B}$ introduceres. Det vil sige den samlede Hamiltonoperator for systemet er

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \alpha\hat{B},$$

hvor α er en lille parameter.

6. Beregn førsteordens energiskiftene for tilstandene $|n\rangle$, $n = 1, 2, 3$.
7. Beregn andenordens energiskiftene for tilstandene $|n\rangle$, $n = 1, 2, 3$. I dette spørgsmål negligeres evt. bidrag fra tilstande uden for underrummet $\mathcal{V}$.

Opgave 3. (30 %)

I denne opgave betragtes en kvantemekanisk partikel i tre rumlige dimensioner. Hamiltonoperatoren er givet ved den sfærisk symmetriske harmoniske oscillator:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V},$$

hvor $\hat{T}$ og $\hat{V}$ er operatorerne for kinetisk og potentiel energi:

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} \\ \hat{V} &= \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{r}^2. \end{aligned}$$

Her betegner m og ω hhv. partiklens masse og oscillatorens karakteristiske vinkelfrekvens.

Vi betragter bølgefunktioner på formen

$$\psi_a(r) = N e^{-r/a},$$

hvor a er en positiv længde, der i det følgende betragtes som en variabel parameter.

1. Bestem N således at ψ_a er normeret.
2. Bestem middelværdien af r^2 i tilstanden ψ_a.
3. Bestem $\hat{p}^2\psi_a$ og dernæst middelværdien af $\hat{p}^2$ i tilstanden ψ_a.
4. Bestem middelværdien af energien i tilstanden ψ_a og skitser denne som funktion af a.
5. Bestem ved hjælp af en variationsregning det bedste bud på grundtilstandsenergien inden for funktionsskaren beskrevet ved ψ_a. Sammenlign med den eksakte grundtilstandsenergi.

Vink: der gælder

$$\int_0^\infty u^n e^{-u} du = n!,$$

for alle ikke-negative hele tal n.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2008

Opgave 1. (40 %)

Denne opgave omhandler den harmoniske oscillator i én dimension. Hamilton-operatoren er givet ved

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V},$$

hvor

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \qquad \text{og} \qquad \hat{V} = \frac{1}{2}m\omega\hat{x}^2$$

er operatorerne for henholdsvis den kinetiske og den potentielle energi. $\hat{x}$ og $\hat{p}$ er operatorerne for sted og impuls, og m betegner massen og ω frekvensen af oscillatoren. De normerede energiegenfunktioner for $\hat{H}$ betegnes $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, ...$, således at

$$\hat{H}|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle.$$

Som sædvanlig indføres hæve- og sænke-operatorerne $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$, se evt. Griffiths [2.47].

1. Betragt en vilkårlig energiegentilstand $|n\rangle$. Udtryk $\hat{x}$ og $\hat{p}$ ved $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$, og bestem dernæst hver af tilstandene

$$|\psi_1\rangle = \hat{x}|n\rangle \qquad \text{og} \qquad |\psi_2\rangle = \hat{p}|n\rangle$$

som en linearkombination af energiegentilstande.

2. Bestem normen af $|\psi_1\rangle$ og $|\psi_2\rangle$. Udled herfra det velkendte resultat:

$$\langle n|\hat{V}|n\rangle = \langle n|\hat{T}|n\rangle.$$

3. Vis, at kommutatoren $[\hat{T}, \hat{V}]$ er proportional med operatoren $\hat{B}$ givet ved

$$\hat{B} = \hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}$$

4. Udtryk i forlængelse af spørgsmål 1. tilstanden $\hat{x}^2|n\rangle$ som en linearkombination af energiegentilstande, og bestem normen af denne tilstand.

5. Vis under anvendelse af relationen $\hat{T} = \hat{H} - \hat{V}$, at

$$\langle n|\hat{T}^2|n\rangle = \langle n|\hat{V}^2|n\rangle.$$

6. Bestem nu spredningerne på potentiel og kinetisk energi, $\sigma(V)$ og $\sigma(T)$, i tilstanden $|n\rangle$.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2008

Opgave 2. (40 %)

I denne opgave betragtes et brintatom, hvis Hamiltonoperator betegnes $\hat{H}_0$. De normerede stationære tilstande betegnes ψ_{nlm}, hvor n er hovedkvantetallet, og l og m er kvantetallene hørende til $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0\psi_{nlm} &= E_n\psi_{nlm}\\ \hat{L}^2\psi_{nlm} &= l(l+1)\hbar^2\psi_{nlm}\\ \hat{L}_z\psi_{nlm} &= m\hbar\psi_{nlm}.\end{aligned}$$

Vi ser bort fra spin og finstruktur. Som sædvanlig introduceres operatorerne

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad \text{og} \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

1. Vis, at operatoren $\hat{L}_-\hat{L}_+$ er hermitisk.
2. Beregn $\hat{L}_-\hat{L}_+\psi_{nlm}$.

Brintatomet pålægges en perturbation

$$\hat{H}' = \gamma\hat{L}_-\hat{L}_+,$$

hvor γ er en reel konstant, således at den samlede energioperator er $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$. I det følgende betragtes kun tilstande inden for det endelige underrum, $\mathcal{V}$, udspændt af $n = 2$, $l = 1$ tilstandene ψ_{21-1}, ψ_{210} og ψ_{211}.

3. Udtryk $\hat{H}$ som en matrix i underrummet $\mathcal{V}$, idet ψ_{21-1}, ψ_{210} og ψ_{211} vælges som henholdsvis første, anden og tredie basisvektor.

I et givet eksperiment er systemet til tidspunktet $t = 0$ i den normerede tilstand

$$\phi(t=0) = \frac{1}{\sqrt{5}}(i\psi_{210} + 2\psi_{211})$$

4. Hvilke udfald er mulige ved en energimåling på systemet i denne tilstand, og med hvilke sandsynligheder forekommer disse?
5. Beregn middelværdi og spredning for energien i tilstanden ϕ.

Om en operator $\hat{A}$, der beskriver den fysiske størrelse A, gælder der:

$$\begin{aligned}\hat{A}\psi_{21-1} &= 0\\ \hat{A}\psi_{210} &= a\psi_{211}\\ \hat{A}\psi_{211} &= a\psi_{210},\end{aligned}$$

hvor a er en reel konstant.

6. Angiv bølgefunktionen $\phi(t)$ til ethvert senere tidspunkt t og beregn middelværdien af A i tilstanden ϕ til ethvert tidspunkt $t \geq 0$.

Opgave 3. (20 %)

Med $\psi(\vec{r})$ betegnes en bølgefunktion for en partikel i tre dimensioner. Hamiltonoperatoren er givet som

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r}),$$

hvor $\hat{V}$ er potentialfunktionen, og m betegner partiklens masse.

Middelværdien af impulsen i tilstanden ψ er

$$\langle \psi, \hat{\vec{p}}\psi \rangle = \vec{p}_0,$$

og middelværdien af energien er

$$\langle \psi, \hat{H}\psi \rangle = E_0.$$

En anden tilstand er givet ved

$$\phi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}},$$

hvor $\vec{k}$ betegner en konstant vektor.

1. Beregn middelværdierne af impuls og energi i tilstanden ϕ.
2. Antag, at ψ faktisk er en egenfunktion for $\hat{H}$. Vis, at ϕ da er en egenfunktion for operatoren $\hat{H}_1$ givet ved

   $$\hat{H}_1 = \hat{H} - \frac{\hbar}{m}\vec{k} \cdot \hat{\vec{p}}.$$

   Bestem tillige egenværdien for $\hat{H}_1$ hørende til ϕ.

Kvantemekanik, Augusteksamen 2008

Opgave 1. (30 %)

Betragt en partikel med massen m, beskrevet ved Hamiltonoperatoren for en én-dimensional harmonisk oscillator:

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

hvor ω er oscillatorens frekvens og $\hat{x}$ og $\hat{p}$ betegner operatorerne for sted og impuls. De normerede energiegenfunktioner for $\hat{H}$ betegnes $|n\rangle$, hvor $n = 0, 1, 2, ...$, således at

$$\hat{H}|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle.$$

Som sædvanlig indføres hæve- og sænke-operatorerne $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$, se evt. Griffiths [2.47].

Partiklens normerede bølgefunktion er givet ved:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3\rangle + |2\rangle).$$

1. Hvilke energier vil kunne opnås ved en energimåling på partiklen i denne tilstand? Hvad er sandsynlighederne for at disse energier måles?

2. Bestem middelværdi og spredning for energien i tilstanden $|\psi\rangle$.

3. Udtryk stedoperatoren $\hat{x}$ ved $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$ og bestem middelværdien af positionen $\langle x\rangle$ i tilstanden $|\psi\rangle$.

4. Gør rede for, at operatoren $\hat{a}_-^2\hat{a}_+^2$ er hermitisk.

5. Vis, at kommutatoren $[\hat{a}_-^2, \hat{a}_+^2]$ er proportional med $\hat{H}$.

Kvantemekanik, Augusteksamen 2008

Opgave 2. (40 %)

I et 3-dimensionalt underrum er de fysiske variable A og B beskrevet ved matricerne:

$$\mathbf{A} = a\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \mathbf{B} = b\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

hvor a og b er reelle konstanter.

1. Vis, at tilstanden givet ved vektoren:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

   er en egenvektor for både **A** og **B**, og bestem de respektive egenværdier.

2. Bestem kommutatoren $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$.

3. Gør rede for, at $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]\psi = 0$.

4. Bestem de resterende egenværdier med tilhørende egenvektorer for **A**.

Et fysisk system er beskrevet ved tilstanden givet ved vektoren:

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

5. Bestem middelværdi og spredning af observablen B i denne tilstand.

6. En måling af den fysiske observable A foretages på systemet beskrevet ved tilstanden ϕ. Bestem de mulige udfald af denne måling samt sandsynlighederne for, at disse udfald indtræffer.

Kvantemekanik, Augusteksamen 2008

Opgave 3. (30 %)

I denne opgave betragtes et brintatom, hvis normerede stationære tilstande betegnes ψ_{nlm}, hvor n er hovedkvantetallet, og l og m er kvantetallene hørende til $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$. De radiale komponenter af ψ_{nlm} fremgår af Griffiths' tabel 4.7. Vi ser bort fra spin og finstruktur.

Til tidspunktet $t = 0$ vides brintatomet at være i en tilstand beskrevet ved bølgefunktionen

$$\phi(\vec{r}, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{5}}(\psi_{100}(\vec{r}) + 2\psi_{200}(\vec{r})).$$

1. Gør rede for, at ϕ er normeret.

2. Beregn middelværdien af den potentielle energi, $\langle V \rangle$, til tidspunktet $t = 0$.

   (Vink: Man kan få brug for, at der for alle ikke-negative hele tal n gælder:
   $$\int_0^\infty u^n e^{-bu} du = \frac{n!}{b^{n+1}} \qquad (b > 0).\ )$$

3. Angiv bølgefunktionen $\phi(\vec{r}, t)$ til ethvert senere tidspunkt.

4. Gør rede for, at middelværdien af den potentielle energi, $\langle V \rangle$, er en periodisk funktion af tiden, og bestem perioden.

Opgave 1. (25 %)

I denne opgave betragtes et brintatom, hvis normerede stationære tilstande betegnes ψ_{nlm}. Her er n hovedkvantetallet, og l og m er kvantetallene hørende til $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$:

$$\hat{L}^2\psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2\psi_{nlm}$$
$$\hat{L}_z\psi_{nlm} = m\hbar\psi_{nlm}.$$

Vi ser bort fra spin. Som sædvanlig introduceres operatorerne

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad \text{og} \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

1. Vis, at $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z$.
2. Vis, at ψ_{nlm} er egenfunktion for $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$ og bestem den tilhørende egenværdi.
3. Bestem tilstanden $\phi = \hat{L}_x\psi_{210}$, udtrykt som en linearkombination af brintbølgefunktioner.
4. Vis, at ψ_{210} er en egenfunktion for $\hat{L}_x^2$ og bestem egenværdien.

Opgave 2. (35 %)

Et fysisk system er beskrevet ved et tre-dimensionelt underrum $\mathcal{V}$ udspændt af de tre ortonormale tilstande ϕ_a, ϕ_b og ϕ_c, der er egentilstande for systemets Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned}\hat{H}\phi_a &= \epsilon\phi_a \\ \hat{H}\phi_b &= 3\epsilon\phi_b \\ \hat{H}\phi_c &= 5\epsilon\phi_c,\end{aligned}$$

hvor ϵ er en reel konstant.

I et givet eksperiment er systemet til tiden $t = 0$ i den normerede tilstand

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\phi_a + 2\phi_b - i\phi_c\right)$$

1. Hvilke udfald er mulige ved en energimåling på systemet i tilstanden $\psi(0)$, og hvad er deres sandsynlighed?
2. Beregn middelværdi og spredning af energien i tilstanden $\psi(0)$.
3. Angiv systemets tilstand $\psi(t)$ til ethvert senere tidspunkt.
4. Udtryk $\hat{H}$ som en matrix, $\mathbf{H}$, i underrummet $\mathcal{V}$, idet ϕ_a, ϕ_b og ϕ_c vælges som hhv. første, anden og tredie basisvektor. Angiv tillige $\psi(0)$ som vektor i $\mathcal{V}$.

En fysisk observabel A er repræsenteret ved operatoren $\hat{A}$, der i samme basis repæsenteres ved matricen

$$\mathbf{A} = \alpha\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

hvor α er en reel konstant.

5. Bestem forventningsværdien af A i tilstanden $\psi(0)$.
6. Vis, at ϕ_b er en egentilstand for $\hat{A}$ og bestem den tilhørende egenværdi.
7. Hvilke resultater vil man generelt kunne opnå ved en måling af den fysiske observable A (inden for underrummet $\mathcal{V}$)?

Opgave 3. (40 %)

Denne opgave omhandler den harmoniske oscillator i én dimension. Hamilton-operatoren er givet ved

$$\hat{H}_0 = \hat{T} + \hat{V},$$

hvor

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \qquad \text{og} \qquad \hat{V} = \frac{1}{2} m\omega_0^2 \hat{x}^2$$

er operatorerne for henholdsvis den kinetiske og den potentielle energi. $\hat{x}$ og $\hat{p}$ betegner sted- og impuls-operatorerne, m betegner massen, og ω_0 betegner frekvensen af oscillatoren. De normerede energiegenfunktioner for $\hat{H}_0$ betegnes $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, ...$, således at

$$\hat{H}_0|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega\, |n\rangle.$$

Som sædvanlig indføres hæve- og sænke-operatorerne $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$, se evt. Griffiths [2.47].

1. Vis, at $\hat{x}$ kan udtrykkes på formen

   $$\hat{x} = \frac{b_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-)$$

   og bestem b_0. Bestem dernæst for enhver værdi af n tilstanden

   $$|f_n\rangle = \hat{x}^2|n\rangle$$

   som en linearkombination af energiegentilstande.

2. Bestem normen af $|f_n\rangle$. Bestem tillige forventningsværdien af $\hat{x}^4$ i tilstanden $|n\rangle$.

En perturbation givet ved

$$\hat{H}' = \alpha\hat{x}^4,$$

hvor α betegner en reel positiv konstant, pålægges nu systemet.

3. Beregn ved 1. ordens perturbationsregning energiskiftet, ΔE_n, af hver af tilstandene $|n\rangle$ forårsaget af $\hat{H}'$.

(fortsættes)

Opgave 3. (fortsat)

Nu indledes en variationsregning for Hamiltonoperatoren $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, hvor man betragter en skare af funktioner på formen

$$\psi_b(x) = N(b)\exp(-\frac{x^2}{2b^2}) \qquad \text{med } N(b) = \left(\pi b^2\right)^{-\frac{1}{4}}.$$

Her er b variationsparameteren, der er reel og positiv, og $N(b)$ er valgt så ψ_b er normeret.

4. Gør rede for, at ψ_b er grundtilstands-bølgefunktion for en harmonisk oscillator med frekvens $\omega(b)$, og bestem $\omega(b)$.

5. Bestem forventningsværdierne af $\hat{T}$ og $\hat{V}$ i tilstanden ψ_b. Dette spørgsmål kan med fordel besvares ved hjælp af virialsætningen.

6. Bestem forventningsværdien af $\hat{H}$ i tilstanden ψ_b og skitser denne som funktion af b.

7. Med E_{var} betegnes det bud på grundtilstandsenergien, som man ville finde, dersom variationsregningen førtes til ende. E_{var} ønskes **ikke** beregnet her, men argumentér for, at E_{var} må tilfredsstille ulighederne:

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_0 \leq E_{var} \leq \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + \Delta E_0,$$

hvor ΔE_0 er energiskiftet fundet for grundtilstanden ved perturbationsregningen i spørgsmål 3.

Opgave 1. (40 %)

Denne opgave omhandler en partikel med massen m, der bevæger sig i et harmonisk oscillator potential i én dimension. Potentialet er karakteriseret ved oscillatorens frekvens ω. De normerede energiegenfunktioner betegnes $\psi_n(x)$ med $n = 0, 1, 2, ...$
Som sædvanlig indføres hæve- og sænke-operatorerne $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$, se evt. Griffiths (2. udgave, [2.47]).

Til tiden $t = 0$ er partiklen beskrevet ved bølgefunktionen

$$\phi_a(x) = \psi_0(x) + 2i\psi_1(x).$$

1. Normér ϕ_a.
2. Hvilke udfald er mulige ved en energimåling på systemet i tilstanden ϕ_a, og hvad er deres sandsynlighed?
3. Beregn middelværdien af energien i tilstanden ϕ_a.
4. Vis, at tilstanden
$$\phi_b(x) = (\hat{a}_+ + \hat{a}_-)\phi_a(x)$$
er ortogonal på ϕ_a.
5. Angiv bølgefunktionen ϕ_a til ethvert senere tidspunkt t.
6. Beregn forventningsværdien af partiklens position til ethvert tidspunkt t i tilstanden ϕ_a.
7. Beregn forventningsværdien af partiklens impuls til ethvert tidspunkt t i tilstanden ϕ_a.

Opgave 2. (40 %)

I et tre-dimensionelt underrum, $\mathcal{V}$, er de fysiske observable A og B repræsenteret ved matricerne

$$\mathbf{A} = a \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{og} \qquad \mathbf{B} = b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

hvor a og b er reelle konstanter.

I et givet eksperiment er et fysisk system beskrevet ved den normerede tilstand

$$\underline{\psi} = \tfrac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

1. Beregn middelværdi og spredning af størrelsen B i tilstanden $\underline{\psi}$.

Det oplyses, at middelværdi og spredning af størrelsen A i tilstanden $\underline{\psi}$ er

$$< A >= \frac{2}{3} a \qquad \text{og} \qquad \sigma(A) = \frac{\sqrt{8}}{3} a$$

(ønskes ikke vist).

2. Beregn forventningsværdien af kommutatoren mellem **A** og **B** i tilstanden $\underline{\psi}$ og vis, at ubestemthedsrelationen (Griffiths, [3.62]) er opfyldt for observablene A og B i denne tilstand.

3. Vis, at

$$\underline{\phi} = \tfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

   er fælles egenfunktion for **A** og **B** og bestem de tilhørende egenværdier.

4. Hvilke resultater vil man generelt kunne opnå ved en måling af den fysiske observable B (inden for underrummet $\mathcal{V}$)?

5. Hvad er sandsynligheden for, at en måling af størrelsen B i tilstanden $\underline{\psi}$ giver værdien 0?

Opgave 3. (20 %)

En partikel med massen m bevæger sig i et 3-dimensionalt sfærisk symmetrisk potentiale $V(r)$. Partiklen er beskrevet ved bølgefunktionen $\psi(r)$ givet ved udtrykket:

$$\psi(r) = N(r+a)e^{-r/a},$$

hvor N er en normeringskonstant, og a er en positiv reel konstant med dimension længde.

Det vides, at $\psi(r)$ er bølgefunktion for grundtilstanden i potentialet $V(r)$, samt at grundtilstandens energi er $E = 0$.

1. Bestem $V(r)$ og skitser denne funktion.
2. Skitser tillige $|\psi(r)|^2$ og angiv det område, der svarer til det klassisk forbudte område.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2010

Opgave 1. (30 %)

Betragt en partikel med massen m, beskrevet ved Hamiltonoperatoren for en én-dimensional harmonisk oscillator:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

hvor $\hat{T}$ og $\hat{V}$ er operatorer for kinetisk og potentiel energi:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}; \qquad \hat{V} = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2.$$

Her er ω oscillatorens frekvens og $\hat{x}$ og $\hat{p}$ betegner operatorerne for sted og impuls. Som sædvanlig indføres hæve- og sænke-operatorerne $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$, se evt. Griffiths (2. udgave, [2.47]).

De normerede egenfunktioner for $\hat{H}$ betegnes $\phi_n(x)$ med tilhørende egenenergier $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, hvor $n = 0, 1, 2, ...$

En observabel, K, er beskrevet ved operatoren $\hat{K}$ givet ved

$$\hat{K} = \hat{a}_+\hat{H}\hat{a}_-.$$

1. Vis, at $\hat{K}$ er en hermitisk operator.
2. Vis, at enhver af egenfunktionerne $\phi_n(x)$ også er egenfunktion for $\hat{K}$, og bestem den tilhørende egenværdi.

Partiklens tilstand er til tiden $t = 0$ beskrevet ved den normerede bølgefunktion:

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{5}}\left(2\phi_1(x) + i\phi_2(x)\right).$$

3. Hvilke udfald er mulige ved en måling af partiklens energi i denne tilstand, og hvad er sandsynligheden for disse udfald?
4. Bestem partiklens bølgefunktion $\psi(x, t)$ til ethvert senere tidspunkt t.
5. Udtryk $\hat{p}$ ved $\hat{a}_+$ og $\hat{a}_-$, og bestem middelværdien af impulsen i tilstanden ψ til ethvert senere tidspunkt t.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2010

Opgave 2. (30 %)

I denne opgave betragtes et brintatom, hvis normerede stationære tilstande betegnes ψ_{nlm}, hvor n er hovedkvantetallet, og l og m er kvantetallene hørende til $\hat{L}^2$ og $\hat{L}_z$. I de første tre underspørgsmål ses bort fra spin.

I et givet eksperiment vides brintatomet at være i en tilstand beskrevet ved bølgefunktionen

$$\phi(\vec{r}) = A(\psi_{100}(\vec{r}) + \sqrt{2}\psi_{211}(\vec{r})).$$

1. Bestem konstanten A, så ϕ er normeret.
2. Bestem middelværdi og spredning af L_z i tilstanden ϕ.
3. Udtryk $\hat{L}_x$ ved stige operatorerne (Griffiths' [4.105]). For hvilke tilstande ψ_{nlm} gælder det, at $\hat{L}_x\psi_{nlm}$ er en egenfunktion for $\hat{L}_z$?

Nu inkluderes spin i beskrivelsen af brintatomet, idet vi indfører spinor-notationen som i Griffiths' §4.4.1, med operatorerne for spin givet ved Pauli's spinmatricer i ligningerne [4.145] og [4.147].

4. Vis, at enhver spinor på formen

$$\begin{pmatrix} f(\vec{r}) \\ f(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

er en egenvektor for $\hat{S}_x$ og bestem egenværdien.

5. Vis, at enhver spinor på formen

$$\begin{pmatrix} \psi_{nlm}(\vec{r}) \\ b\psi_{nl(m+1)}(\vec{r}) \end{pmatrix},$$

hvor $m < l$, og b er et vilkårligt komplekst tal, er en egentilstand for z-komposanten af det totale impulsmoment, $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$. Bestem egenværdien.

Kvantemekanik, Sommereksamen 2010

Opgave 3. (40 %)

Et fysisk system er beskrevet ved et tre-dimensionelt underrum $\mathcal{V}$ udspændt af de tre ortonormale tilstande $|1\rangle$, $|2\rangle$ og $|3\rangle$. En fysisk størrelse, A, er beskrevet ved operatoren $\hat{A}$, for hvilken der gælder:

$$\begin{aligned} \hat{A}|1\rangle &= a(|1\rangle - i|2\rangle) \\ \hat{A}|2\rangle &= a(i|1\rangle + |2\rangle) \\ \hat{A}|3\rangle &= -2a|3\rangle, \end{aligned}$$

hvor a er en reel konstant.

1. Udtryk $\hat{A}$ som en matrix, $\mathbf{A}$, i underrummet $\mathcal{V}$, idet $|1\rangle$, $|2\rangle$ og $|3\rangle$ vælges som hhv. første, anden og tredie basisvektor.

2. Vis, at
$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|2\rangle)$$
er en egentilstand for $\hat{A}$ og bestem den tilhørende egenværdi.

3. Hvilke resultater vil man generelt kunne opnå ved en måling af den fysiske observable A?

Systemets Hamiltonoperator er i samme basis beskrevet ved matricen:

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

hvor ω er en konstant frekvens.

4. Vis, at tilstanden givet ved vektoren
$$|\phi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ 0 \\ -i\sin(\omega t) \end{pmatrix},$$
tilfredsstiller den tidsafhængige Schrödinger ligning.

5. Med hvilken sandsynlighed, $P_{2a}(t)$, vil man i tilstanden $|\phi(t)\rangle$ måle størrelsen A til at have værdien $2a$?

Skriftlig eksamen, foråret 2011

Eksamensstiller: Klaus Mølmer

Dette sæt består af tre opgaver med en række delspørgsmål. Hvert spørgsmål tæller med den angivne andel af den samlede besvarelse.

Opgave 1

Betragt brintatomet, beskrevet ved den sædvanlige Hamiltonoperator

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}.$$

Der ses bort fra spin i denne opgave.

Det tre-dimensionelle Hilbertrum, $\mathcal{H}$, er udspændt af de tre elektrontilstande i brintatomet med $n = 2$, $l = 1$, og $m = 0, \pm 1$.

a) (5 %) Hvad er forventningsværdien af stedoperatoren x i de tre tilstande? Hint: Betragt først ϕ-integralet.

b) (5 %) Udtryk stedoperatoren x som en matrix virkende på $\mathcal{H}$. Hint: Betragt først ϕ- og derefter θ-integralet ved bestemmelsen af matrixelementerne.

c) (10 %) Vis, at

$$x^2 = \langle r^2 \rangle_{2p} \begin{pmatrix} 2/5 & 0 & -1/5 \\ 0 & 1/5 & 0 \\ -1/5 & 0 & 2/5 \end{pmatrix}$$

udtrykker operatoren x^2 som en matrix virkende på $\mathcal{H}$, hvor $\langle r^2 \rangle_{2p}$ er middelværdien af r^2 i $2p$ tilstandene.

d) (5 %) Forklar, hvorfor matricen for x^2, angivet i spørgsmål c), ikke er lig med kvadratet på matricen for x, fundet i spørgsmål b).

Antag nu, at atomet er udsat for en perturbation på formen:

$$H' = \alpha x^2.$$

e) (5 %) Bestem skiftet ΔE_1 af grundtilstandens energi på grund af H' ved første ordens perturbationsregning. Benyt Bohr radius a som længdeenhed i besvarelsen. Hint: benyt at grundtilstanden er sfærisk symmetrisk til at forsimple beregningen.

f) (10 %) Bestem ved hjælp af første ordens perturbationsregning de tre energiniveauer for en elektron i 2. hovedskal (n=2) med $l = 1$ i brintatomet, udsat for perturbationen H'. Benyt $\langle r^2 \rangle_{2p}$ som enhed i besvarelsen.

Opgave 2

En partikel med masse m bevæger sig i et potential, der kan skrives som summen af en tiltrækkende delta-funktion og en endelig potentialbarriere

$$V(x) = -\lambda\delta(x) + \{ \begin{array}{l} 0 \text{ for } x < 0 \\ V_0 \text{ for } x \geq 0. \end{array}$$

Både λ og V_0 har positive talværdier.

a) (5 %) Skitser potentialet, og angiv hvilke matematiske funktioner, der beskriver en bunden tilstands løsning til Schrödingers ligning i områderne med $x < 0$ og $x > 0$. Antag, at E er energien for den bundne tilstand og udtryk bølgefunktionens parametre ved E.

b) (5 %) Hvad er fortegnet på partiklens middelpositionen, $\langle x \rangle$, i den bundne tilstand?

c) (5 %) Angiv de randbetingelser, bølgefunktionen og dens afledte skal opfylde i omegnen af $x = 0$, og udnyt de særlige regler for bølgefunktionens afledte i et delta-funktionspotential til at vise, at $\kappa_+ + \kappa_- = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}$, hvor $\kappa_\pm$ betegner bølgefunktionens eksponentielle aftagen for henholdsvis positive og negative x-værdier.

d) (5 %) Vis, at potentialet ikke har en bunden tilstand, hvis V_0 er større end en bestemt værdi V_0^{max}. Bestem V_0^{max}, udtrykt ved m, $\hbar$ og λ.

e) (10 %) Antag, at $V_0 < V_0^{max}$ og find værdien af den bundne tilstands energi, udtrykt ved m, $\hbar$, V_0 og λ. Hvad sker der med energien, når $V_0 \rightarrow V_0^{max}$?

Opgave 3

Betragt to uafhængige harmoniske oscillatorer, beskrevet ved ”stige-operatorerne” $a_-,\ a_+$ og $b_-,\ b_+$, med de sædvanlige kommutatorrelationer: $[a_-, a_+] = 1,\ [b_-, b_+] = 1$. Operatorerne a og b kommuterer indbyrdes, fx $[a_-, b_+] = 0$.

Vi definerer tre nye operatorer for det samlede system af begge oscillatorer,

$$L_1 = \hbar(a_+b_- + b_+a_-)/2,\ L_2 = \hbar(a_+b_- - b_+a_-)/2i \text{ og } L_3 = \hbar(a_+a_- - b_+b_-)/2$$

a) (10 %) Vis, at operatorerne L_i indbyrdes opfylder kommutatorrelationerne for komponenterne $L_x,\ L_y,\ L_z$ af et *impulsmoment*.

b) (10 %) Vis, at det totale impulsmoment, $L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ kan udtrykkes ved de harmoniske oscillatorers operatorer som $L^2 = \hbar^2(\frac{a_+a_- + b_+b_-}{2})(\frac{a_+a_- + b_+b_-}{2} + 1)$.

c) (5 %) Vi lader $|l, m\rangle$ betegne egentilstandene for L^2 og L_3. Hvad er sammenhængen mellem kvantetallene l og m og de sædvanlige kvantetal $n_a,\ n_b$ for de to harmoniske oscillatorer?

d) (5 %) Udtryk stigeoperatorerne L_+ og L_- for impulsmomentet, først ved L_1 og L_2 og dernæst ved oscillatorernes stigeoperatorer. Udnyt relationerne $a_-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,\ a_+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ (og tilsvarende for b-operatorerne) og sammenhængen fundet i spørgsmål c) til at bestemme virkningen af L_+ og L_- på tilstanden $|l, m\rangle$. Vis, at resultatet $[4.120], [4.121]$ i lærebogen fremkommer.

Re-eksamen, August 2011.

Eksamensstiller: Klaus Mølmer

Dette sæt består af tre opgaver med en række delspørgsmål. Den relative vægt af de forskellige spørgsmål er angivet som en procentsats.

Opgave 1

En partikel med masse m bevæger sig i et brøndpotential med uendeligt høje potentialvægge ved $x = 0$ og ved $x = a$, hvor $a > 0$,

$$V(x) = \begin{cases} \infty, \text{ for } x \leq 0 \text{ og for } x \geq a \\ 0, \text{ for } 0 < x < a. \end{cases}$$

Egentilstandene for Hamiltonoperatoren med brøndpotentialet er givet ved $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$.

Partiklen antages til tiden $t = 0$ at være beskrevet ved bølgefunktionen

$$\psi(x) = \begin{cases} A(\frac{5}{8} \sin \frac{\pi x}{a} - \frac{5}{16} \sin \frac{3\pi x}{a} + \frac{1}{16} \sin \frac{5\pi x}{a}), \text{ for } 0 < x < a \\ 0, \text{ for alle andre x-værdier,} \end{cases}$$

hvor A er en reel og positiv normeringskonstant.

a) (10 %) Opskriv bølgefunktionen ψ som en linearkombination af egentilstandene $\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$. Bestem normeringskonstanten A og koefficienterne c_n, så bølgefunktionen er korrekt normeret.

b) (5 %) Argumenter for, at middelværdien $< x >$ af stedkoordinaten i tilstanden ψ har værdien $a/2$.

c) (5 %) Bestem middelværdien og standardafvigelsen af energien for partiklen i tilstanden ψ ud fra sandsynlighederne $(|c_1|^2, |c_3|^2, |c_5|^2) = (\frac{100}{126}, \frac{25}{126}, \frac{1}{126})$. Giv svaret i enheder af $\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

d) (5 %) Tilstanden ψ er ikke en stationær tilstand, men vil udvikle sig periodisk i tid, så $\psi(x, t+T) = \psi(x, t)$. Brug løsningen til den tidsafhængige Schrödingerligning til at vise, at $T = \frac{4ma^2}{\pi\hbar}$ er perioden for denne periodiske tidsudvikling.

e) (10 %) Opskriv bølgefunktionen til $t = T/2$ og angiv den rumlige sandsynlighedsfordeling udtrykt ved fordelingen til tiden $t = 0$. Til hvilket tidspunkt efter $t = 0$ antager bølgefunktionen tidligst den samme rumlige sandsynlighedsfordeling som til $t = 0$?

Opgave 2

Betragt brintatomet, beskrevet ved den sædvanlige Hamiltonoperator

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}.$$

Der ses bort fra spin, og vi benytter den sædvanlige notation ψ_{nlm} for egentilstande med hovedkvantetal, n, angulært moment kvantetal l, og magnetisk kvantetal m.

Vi udsætter atomet for et konstant elektrisk felt E langs z-aksen, beskrevet ved perturbationen,

$$H' = eEz.$$

a) (5 %) Vis, at grundtilstandens energi i første ordens perturbationsregning ikke ændres af perturbationen H'.

b) (5 %) Vis, at $\langle\psi_{nlm}|z|\psi_{n'l'm'}\rangle = 0$ for $m \neq m'$.

c) (10 %) Lad W betegne matrixelementet, $W \equiv \langle\psi_{200}|H'|\psi_{210}\rangle$. Vis, at $W = -3eEa$, hvor a er Bohr radius.

d) (5 %) Vi betragter nu brintatomets tilstande i 2. hovedskal. Udnyt resultaterne, opnået ovenfor, og opskriv virkningen af H' i dette 4-dimensionale rum som en matrix med matrixelementerne $\langle\psi_{2lm}|H'|\psi_{2l'm'}\rangle$. Det kan benyttes uden bevis, at middelværdierne $\langle\psi_{nlm}|z|\psi_{nlm}\rangle = 0$ på grund af brinttilstandenes rumlige symmetri.

e) (10 %) Benyt degenereret perturbationsregning til at bestemme de perturberede energier i brintatomets 2. hovedskal under påvirkning af H'. Hvad er middelværdien af z i de fire tilhørende tilstande?

Opgave 3

Vi betragter en-dimensionel spredning af en partikel med massen m på en potential-barriere givet ved en delta-funktion ved positionen $x = a > 0$,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta(x-a),$$

hvor α er en positiv konstant.

Vi ser på en stationær løsning for en partikel, der nærmer sig barrieren fra negative x-værdier, og vi antager, at bølgefunktionens stedafhængighed kan skrives som $\psi(x) = e^{ikx}$ for $x > a$, hvor k er bølgetallet.

a) (5 %) Bestem partiklens energi.

b) (10 %) Angiv kontinutitetsegenskaberne for bølgefunktionen og dens afledte i punktet $x = a$ og vis, at bølgefunktionen antager formen $(1 + \frac{im\alpha}{\hbar^2 k})e^{ikx} - \frac{im\alpha}{\hbar^2 k}e^{2ika}e^{-ikx}$ for $x < a$.

c) (5 %) Hvad er reflektions- og transmissionskoefficienten for deltafunktions-barrieren?

Vi tilføjer nu en deltafunktionsbrønd, $-\alpha\delta(x)$, i $x = 0$, så partiklen er beskrevet ved Hamiltonoperatoren,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - \alpha\delta(x) + \alpha\delta(x-a).$$

d) (10 %) Bølgefunktionens værdier for $x > a$ og for $0 < x < a$ er stadig som givet i teksten og i spørgsmål b). Angiv bølgefunktionens stedafhængighed for $x < 0$, og vis, at uafhængigt af barrierestyrken α opnås fuld transmission for en partikel, der nærmer sig barrieren fra negative x-værdier, hvis afstanden, a, mellem barrieren og brønden er et heltal multipliceret med π/k.

Kvantemekanik. Sommer 2013

Eksamens varighed: 4 timer.

Tilladte hjælpemidler: Alle sædvanlige hjælpemidler.

Antal sider i opgavesættet: 3 sider. Opgavesættet indeholder 3 opgaver. Vægtningen af de enkelte delspørgsmål er angivet i parentes.

Opgave 1

En partikel med masse m, der bevæger sig langs x-aksen, er beskrevet ved den stedafhængige bølgefunktion

$$\psi_b(x) = N \cdot \exp(-b|x|),$$

hvor b er reel og positiv, og N er en positiv normeringskonstant.

a) (10 point) Bestem normeringkonstanten N og angiv middelværdien og variansen af partiklens stedkoordinat som funktion af b.

b) (10 point) Vis, at middelværdien af partiklens kinetiske energi (beskrevet ved operatoren $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$) har værdien $\langle E_{kin}\rangle = \frac{\hbar^2 b^2}{2m}$ i tilstanden $\psi_b(x)$ (vær påpasselig med bidrag fra funktionens variation omkring $x = 0$).

c) (10 point) Bestem sandsynlighedsfordelingen for partiklens impuls.

Antag, at partiklen befinder sig i et potential beskrevet ved

$$V(x) = -V_0 \cdot \exp(-c|x|),$$

hvor V_0 og c er positive konstanter.

d) (5 point) Vis, at middelværdien af partiklens potentielle energi er givet ved $\langle V\rangle = -\frac{2bV_0}{2b+c}$ i tilstanden $\psi_b(x)$.

e) (5 point) Redegør for, hvordan man kan bestemme en øvre grænse for grundtilstandsenergien for partiklen i potetialet $V(x)$ (du skal ikke bestemme værdien her, da det kræver løsning af en trediegradsligning). Vis, at der eksisterer en bunden tilstand i potentialet $V(x)$ for alle $V_0 > 0$ og $c > 0$.

Opgave 2

En partikel med masse m bevæger sig i et sfærisk symmetrisk potential $V(r)$ i tre dimensioner, hvor $r = |\vec{r}|$. Potentialet er tiltrækkende, og $V(r) \to 0$ for $r \to \infty$. Den eksakte grundtilstand for partiklen er givet ved bølgefunktionen

$$\psi(\vec{r}) = N(r+b)\exp(-r/b),$$

hvor b er en positiv konstant, og N er en (positiv) normeringskonstant.

a) (10 point) Angiv kvantetallene (l, m) for tilstandens angulære moment, og angiv de korrekt normerede udtryk for vinkeldelen $Y(\theta, \phi)$ og radialdelen $R(r)$ af bølgefunktionen $\psi(\vec{r})$.

Vi betragter nu funktionen $u(r) = r \cdot R(r)$, som opfylder radialligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + V(r)u(r) = Eu(r).$$

b) (10 point) Udnyt radialligningen og kendskabet til $u(r)$ til at bestemme grundtilstandsenergien E og r-afhængigheden af den potentielle energi $V(r)$.

Systemet udsættes for en perturbation i form af et potential $V_1(\vec{r}) = \alpha z^2$, hvor α er en reel konstant.

c) (10 point) Bestem skiftet i grundtilstandens energi som følge af V_1 ved hjælp af første ordens pertubationsregning.

Opgave 3

Betragt et Hilbertrum med tre basisvektorer $|1\rangle$, $|2\rangle$ og $|3\rangle$, og en Hamiltionoperator, som i den valgte basis er beskrevet ved matricen

$$H = \hbar\Omega \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

hvor Ω er en konstant med dimension s^{-1}.

a) (5 point) Bestem egenværdierne og egenvektorerne for H.

b) (10 point) Vis, at

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}(\cos(\sqrt{2}\Omega t) + 1)|1\rangle + \frac{1}{2}(\cos(\sqrt{2}\Omega t) - 1)|2\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}\sin(\sqrt{2}\Omega t)|3\rangle$$

er en løsning til den tidsafhængige Schrödingerligning med den angivne Hamiltonoperator.

Betragt operatoren

$$B = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

hvor ω er en konstant med dimension s^{-1}.

c) (5 point) Beregn kommutatoren, $C = [H, B]$, udtrykt som en matrix.

d) (10 point) Bestem middelværdien og variansen af H og B i tilstanden med $c_1 = 1/\sqrt{2}, c_2 = 0, c_3 = i/\sqrt{2}$.

Opgave 1

Betragt brintatomet, beskrevet ved Hamilton-operatoren

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

Vi ser bort fra spin og kernens medbevægelse.

a) (5 points) Hvad er middelværdien af afstanden r mellem kernen og elektronen i egentilstanden ψ_{320} med $n = 3$, $l = 2$ og $m = 0$? Benyt Bohr-radius a som længdeenhed ved angivelse af svaret.

b) (5 points) Hvad er middelværdien af $1/r$ i tilstanden ψ_{320}?

Brintatomet udsættes nu for perturbationen

$$H' = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\delta e^2}{r},$$

hvor den dimensionsløse parameter $\delta \ll 1$.

c) (5 points) Tilstandende med $n = 3$ er udartede (degenererede). Redegør for, at perturbationsregning alligevel giver anledning til det simple udtryk for førsteordensenergiskiftet, $E^1_{320} = \langle\psi_{320}|H'|\psi_{320}\rangle$. Beregn E^1_{320}.

d) (10 points) $H + H'$ er en Hamilton-operator med kendte egenværdier og egentilstande. Bestem energien af den eksakte egentilstand for $H + H'$ med kvantetallene $n = 3$, $l = 2$, $m = 0$.

e) (10 points) Vi studerer nu vinkelfordelingen for partiklen, beskrevet ved ψ_{320}. Angiv som funktion af vinklen θ_0 sandsynligheden for, at man ved en måling vil finde elektronen i en retning, der har vinklen θ i forhold til z-aksen, med $\theta \leq \theta_0$. Angiv talværdier for denne sandsynlighed for $\theta_0 = 0°, 30°, 90°$ og $180°$.

Det oplyses, at $Y_2^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$ og $R_{32}(r) = \frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-3/2}(\frac{r}{a})^2\exp(-r/3a)$.

Opgave 2

Der gives to løsninger $\psi(t)$ og $\phi(t)$ til den tidsuafhængige Schrödinger-ligning med den samme Hamilton-operator H.

a) (5 points) Differentier det indre produkt $\langle\psi(t)|\phi(t)\rangle$ og vis, at det indre produkt mellem to løsninger til den tidsafhængige Schrödinger-ligning er uafhængigt af tiden t.

Et kvantemekanisk system er beskrevet ved et tre-dimensionalt Hilbert-rum og en Hamilton-operator H_u, der kan skrives som en matrix,

$$H_u = \frac{u}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

b) (10 points) Bestem egenværdier og de tilhørende egenvektorer for H_u.

En anden Hamilton-operator H_v virker på et Hilbert-rum med tre basistilstande $|1\rangle$, $|2\rangle$ og $|3\rangle$. H_v har de tre egenværdier $-v, 0, v$ med tilhørende egenvektorer $|e_1\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle$, $|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|3\rangle)$, $|e_3\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle$.

c) (10 points) Opskriv tilstanden $|\psi\rangle = |1\rangle$ som en linearkombination af $|e_1\rangle$, $|e_2\rangle$, $|e_3\rangle$, og bestem matrix-elementet $\langle 1|H_v|1\rangle$.

d) (10 points) Angiv en formel for den tidsafhængige tilstand $|\psi(t)\rangle$ i basen $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ for $t > 0$, med begyndelsesværdien $|\psi(t = 0)\rangle = |1\rangle$.

Opgave 3

Betragt en partikel med masse m i et en-dimensionalt harmonisk oscillatorpotential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$.

Ved behandling med den "algebraiske metode" indføres operatorerne $a_\pm$, udtrykt ved impuls og stedoperatoren for partiklen, $a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x)$.

a) (5 points) Grundtilstanden ψ_0 opfylder, $a_-\psi_0 = 0$. Vis, at det fører til en førsteordens differentialligning for $\psi_0(x)$, med løsningen $\psi_0(x) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$. Normeringskonstanten A ønskes ikke bestemt.

Vi definerer nu bølgefunktionen ψ_α som egentilstanden for a_- operatoren, d.v.s., som løsning til egenværdiligningen, $a_-\psi_\alpha = \alpha\psi_\alpha$, hvor α er et komplekst tal. ψ_α kaldes en *kohærent* tilstand.

b) (5 points) Benyt egenværdiligningen for ψ_α til at bestemme middelværdierne $\langle x\rangle$ og $\langle p\rangle$ i tilstanden ψ_α.

c) (10 points) Antag nu, at α er et reelt tal, og vis, at egenværdiligningen da giver anledning til en Gauss-formet bølgefunktion. Check, at $\psi_\alpha(x)$ giver samme værdi for $\langle x\rangle$, som du bestemte i spørgsmål b).

Lad $\mu > \nu$ være reelle, positive tal, og betragt bølgefunktionen ψ_S, som er løsning til ligningen, $(\mu a_- + \nu a_+)\psi_S = 0$. ψ_S kaldes en *squeezed* tilstand.

d) (10 points) Opskriv ligningen for ψ_S som en førsteordens differentialligning for $\psi_S(x)$. Løs denne ligning, og bestem middelværdien og variansen af stedkoordinaten x i tilstanden ψ_S.

Opgave 1

Betragt en partikel med masse m i det uendelige brønd-potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 \leq x \leq a, \\ \infty & \text{ellers.} \end{cases}$$

Til tiden $t = 0$ er bølgefunktionen for partiklen givet ved:

$$\Psi(x,0) = N\left(5\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + 12\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right),$$

hvor N er en positiv, reel konstant.

a) (5 point) Bestem konstanten N, så bølgefunktionen bliver normeret.

b) (5 point) Angiv bølgefunktionen $\Psi(x,t)$ for ethvert senere tidspunkt.

c) (5 point) Angiv de mulige resultater af en måling af partiklens totale energi samt sandsynlighederne for hvert af disse resultater.

d) (5 point) Beregn middelværdien og spredningen af partiklens totale energi. Angiv svarene i enheder af $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

e) (10 point) Beregn den tidsafhængige sandsynlighed $P(0 \leq x \leq \frac{a}{2}, t)$ for at finde partiklen i den venstre halvdel af brønden.

Opgave 2

En partikel med masse m bevæger sig som en to-dimensionel harmonisk oscillator beskrevet ved Hamiltonoperatoren

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2\right) = \hbar\omega\left(a_+^{(x)}a_-^{(x)} + a_+^{(y)}a_-^{(y)} + 1\right),$$

hvor $a_\pm^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\mp ip_x + m\omega x\right)$ og $a_\pm^{(y)} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\mp ip_y + m\omega y\right)$ er de sædvanlige hæve- og sænkeoperatorer defineret for både x og y koordinaterne.

a) (5 point) Udnyt, at Hamiltonoperatoren kan skrives som $H = H_x + H_y$ til at vise, at produktbølgefunktioner på formen $\Psi(x, y) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)$ er løsninger til den stationære Schrödingerligning, hvor $\psi_{n_x}(x)$ og $\psi_{n_y}(y)$ er de velkendte løsninger til den en-dimensionelle harmoniske oscillator med kvantetallene n_x og n_y.

b) (5 point) Angiv totalenergien som funktion af n_x og n_y.

c) (10 point) Vi definerer nu operatoren $Q = xp_y - yp_x$ og betragter det to-dimensionelle underrum udspændt af basisfunktionerne $\{\psi_0(x)\psi_1(y),\, \psi_1(x)\psi_0(y)\}$. Vis, at matrix-repræsentationen for Q i denne basis er givet ved

$$[Q] = i\hbar\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}.$$

d) (10 point) Systemet udsættes nu for perturbationen $H' = \alpha Q$. Bestem ved en første-ordens perturbationsregning energiskiftet for tilstandene på underrummet fra spørgsmål (c) og opskriv også de eksplicitte (x, y)-afhængige og normerede funktionsudtryk for de tilhørende energi-egenfunktioner.

Opgave 3

Vi betragter brintatomet, beskrevet ved Hamiltonoperatoren

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r},$$

og vi anvender den sædvanlige notation ψ_{nlm} for egentilstande med hovedkvantetal n, angulært moment kvantetal l, og magnetisk kvantetal m.

Til et tidspunkt er elektronen beskrevet ved tilstanden $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{100} + i\psi_{211})$.

a) (5 point) Angiv for tilstanden Ψ de mulige resultater af en måling af elektronens totale energi samt sandsynligheden for hvert af disse resultater.

b) (5 point) Angiv for tilstanden Ψ de mulige værdier af en måling af L^2, og beregn middelværdien $\langle L^2 \rangle$.

c) (10 point) Vis, at matrix-elementerne $\langle \psi_{100}|x|\psi_{211}\rangle$ og $\langle \psi_{100}|y|\psi_{211}\rangle$ er henholdsvis $-2^7 a/3^5$ og $-2^7 ia/3^5$, hvor a er Bohr radius. Bemærk, kun ϕ-integralet er forskelligt i de to beregninger.

d) (10 point) Beregn forventningsværdierne $\langle L_z \rangle$, $\langle L_z^2 \rangle$, $\langle x \rangle$ og $\langle y \rangle$ for tilstanden Ψ.

e) (10 point) Benyt Heisenbergs usikkerhedsrelation til at beregne en nedre grænse for spredningen σ_x af mulige måleresultater for elektronens x-koordinat i tilstanden Ψ. Det kan benyttes uden bevis, at $[L_z, x] = i\hbar y$.