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

$$\widehat{T}(\mathrm{d}\boldsymbol{r}) = \widehat{1} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\widehat{\boldsymbol{p}} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

   (a) Bereken

$$\left[\widehat{\boldsymbol{r}}, \widehat{T}(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\right] |\boldsymbol{r}'\rangle$$

   tot op lineaire orde in $\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$ 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 $\widehat{\boldsymbol{p}}$ in de configuratierepresentatie (met correcte Dirac-delta normering).

2. (a) Tijdsonafhankelijke perturbatietheorie voor een niet-ontaard energiespectrum.

   (b) Bewijs het onbepaaldheidsprincipe van Heisenberg

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

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

   (a) Diagonaliseer de Hamiltoniaan, m.a.w. bereken de energie-eigenwaarden en bijbehorende eigenvectoren.

   (b) Indien de twee spins zich op tijdstip $t = 0$ in de toestand $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ bevinden, bereken dan de tijdsgeëvolueerde toestand $|\psi(t)\rangle$.

   (c) Bereken de totale dichtheidsmatrix $\rho_{\text{tot}}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$.

   (d) Bereken daaruit de dichtheidsmatrix voor de eerste spin, door over de vrijheidsgraden van de tweede spin te sporen: $\rho_1(t) = \mathrm{Tr}_2\left(\rho_{\text{tot}}(t)\right)$.

   (e) 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 ééndeeltjesprobleem 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

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

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

   (a) De eigenfuncties van de Hamiltoniaan met de Morse-potentiaal worden gekenmerkt door de kwantumgetallen van het angulair moment, l en m, die de rotaties beschrijven, en door het radiële kwantumgetal v dat de vibraties beschrijft. Gegeven de opsplitsing

$$\psi_{vlm}(\boldsymbol{r}) = \frac{R_{v,l}(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$