Eksamen 74326 Kvantemekanikk 2

15. august 1998.

Løsningsskisse

Oppgave 1

a) For en dreieimpulsoperator $\vec{A}$ gjelder

$[A_x, A_y] = i\hbar A_z$ (syklisk). Vi har

$$[L_x \pm S_x, L_y \pm S_y] = [L_x, L_y] + [S_x, S_y] = i\hbar(L_z + S_z)$$

Altså er $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$, men $[J_x^{(-)}, J_y^{(-)}] \neq i\hbar J_z^{(-)}$.

Konklusjon: $\vec{J}$ er dreieimpulsoperator, $\vec{J}^{(-)}$ er ikke.

b) Generelt: For $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ oppfyller kvantetallene triangelulikheten

$$|J_1 - J_2| \le J \le J_1 + J_2$$

I dette tilfellet er altså J lik $\frac{3}{2}$ eller $\frac{1}{2}$. (J halvtallig fordi J_z er halvtallig)

Vi har $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$, $|1,1\rangle$, $|1,0\rangle$ og $|1,-1\rangle$ som byggesteiner, dvs 6 produkttilstander.

Ordnet etter egenverdien av $J_z = L_z + S_z$:

Produkttilstand	$J_z/\hbar$
$\lvert\uparrow\rangle\lvert 1,1\rangle$	$3/2$
$\lvert\uparrow\rangle\lvert 1,0\rangle$	$1/2$
$\lvert\downarrow\rangle\lvert 1,1\rangle$	$1/2$
$\lvert\uparrow\rangle\lvert 1,-1\rangle$	$-1/2$
$\lvert\downarrow\rangle\lvert 1,0\rangle$	$-1/2$
$\lvert\downarrow\rangle\lvert 1,-1\rangle$	$-3/2$

Vi må ha

$$\left|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\right\rangle = |\uparrow\rangle|1,1\rangle$$

$$\left|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle = \alpha|\uparrow\rangle|1,0\rangle + \beta|\downarrow\rangle|1,1\rangle$$

$$\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \gamma|\uparrow\rangle|1,-1\rangle + \delta|\downarrow\rangle|1,0\rangle$$

$$\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\right\rangle = |\downarrow\rangle|1,-1\rangle,$$

med ukjente koeffisienter $\alpha, \beta, \gamma, \delta$. For å finne disse anvender vi stigeoperatoren $J_- = L_- + S_-$ på $\left|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\right\rangle$:

$$J_-\left|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{1\cdot 2 - 1\cdot 0}\,|\uparrow\rangle|1,0\rangle + \hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{3}{2} + \tfrac{1}{2}\cdot\tfrac{1}{2}}\,|\downarrow\rangle|1,1\rangle$$

$$= \hbar\sqrt{2}\,|\uparrow\rangle|1,0\rangle + \hbar\,|\downarrow\rangle|1,1\rangle$$

Så $\alpha = \sqrt{2}\,\beta$. Normering krever $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

Gir $\beta = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $\alpha = \sqrt{\frac{2}{3}}$.

$$\left|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\downarrow\rangle|1,1\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|\uparrow\rangle|1,0\rangle$$

Ved å anvende J_- på denne kan vi bestemme $\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle$. Alternativt ved å anvende J_+ på $\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\right\rangle$. Vi får

$$\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|\uparrow\rangle|1,-1\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\downarrow\rangle|1,0\rangle$$

En vilkårlig fasefaktor kan multipliseres inn

Det gjenstår å bestemme

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = a|\uparrow\rangle|1,0\rangle + b\,|\downarrow\rangle|1,1\rangle$$
$$|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = c|\uparrow\rangle\,|1,-1\rangle + d\,|\downarrow\rangle|1,0\rangle.$$

$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle$ er ortogonal på $|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle$ som gir

$$a\sqrt{\tfrac{2}{3}} + b\sqrt{\tfrac{1}{3}} = 0, \quad \text{dvs} \quad \underline{a=\sqrt{\tfrac{1}{3}},\ b=-\sqrt{\tfrac{2}{3}}}$$

på fasefaktor nær. Tilsvarende

$$c=\sqrt{\tfrac{1}{3}},\quad d=-\sqrt{\tfrac{2}{3}}:$$

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\uparrow\rangle|1,0\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|\downarrow\rangle|1,1\rangle$$
$$|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\uparrow\rangle|1,-1\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|\downarrow\rangle|1,0\rangle.$$

Oppgave 2

Vi trenger $\quad \frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial\psi^+}{\partial t}\psi + \psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t}$

Innsetting fra Diraclikningen og dens adjungerte,

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -c\vec{\alpha}\,\nabla\psi - i\beta\,\frac{mc^2}{\hbar}\psi$$
$$\frac{\partial\psi^+}{\partial t} = -c\,\nabla\psi^+\vec{\alpha} + i\,\frac{mc^2}{\hbar}\psi^+\beta$$

gir
$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -c\,\nabla\psi^+\vec{\alpha}\,\psi + i\,\frac{mc^2}{\hbar}\psi^+\beta\psi$$
$$-c\,\psi^+\vec{\alpha}\,\nabla\psi - i\,\frac{mc^2}{\hbar}\psi^+\beta\psi$$
$$= -c\left(\nabla\psi^+\vec{\alpha}\psi + \psi^+\vec{\alpha}\nabla\psi\right) = -c\,\nabla\left[\psi^+\vec{\alpha}\psi\right] = -\nabla\vec{j}.$$

Altså er
$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\vec{j} = 0, \quad \text{q.e.d.}$$

Da $\rho = \psi^+\psi = (\psi_1^*\,\psi_2^*\,\psi_3^*\,\psi_4^*)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{4}|\psi_i|^2$ er $\rho \geq 0$.

Oppgave 3.

a) Born-Oppenheimer metoden går ut på å forenkle et generelt komplisert kvantemekanisk problem ved å skille bevegelsen til de mye tyngre atomkjernene fra de lette elektronene. Atomkjernene tenkes da liggende i ro mens en løser elektron-problemet. Energien (egenverdiene) til det siste problemet kan da brukes som et potensial (som varierer med atomavstander) i det første. [Deretter kan minima i det siste gi stabile molekyl-konfigurasjoner det atomene vibrerer om likevekt. Det funne potensialet kan så brukes til å løse det kvantemekaniske problemet for kjernene (i den grad avvik fra harmonisk potensial er av betydning).]

b) Med X fast vil V bli et potensial for en enkelt harmonisk oscillator der origo er forskøvet. En finner

$$V = \tfrac{1}{2}\left[AX^2 + C\left(x^2 + 2\tfrac{B}{C}Xx\right)\right] = \underline{\tfrac{1}{2}\left[\left(A - \tfrac{B^2}{C}\right)X^2 + C\left(x - \tfrac{B}{C}X\right)^2\right]}$$

Med X fast er altså origo for den lette partikkelen i posisjonen $x_0 = \frac{B}{C}X$. Ved så å sammenlikne med standardformen $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ for harmonisk oscillator ser en at egenfrekvensen blir

$$m\omega^2 = C$$

$$\omega = \underline{\underline{\sqrt{C/m}}}$$

Energien til den lette partikkelen $[E_n = \hbar\omega(\tfrac{1}{2}+n)]$ er uavhengig av X i leddet $C(x-x_0)^2$ (da valg av origo $x_0 = \frac{B}{C}X$ ikke påvirker denne). Potensialet til den tunge partikkelen blir følgelig

$$V = \tfrac{1}{2}\left(A - \tfrac{B^2}{C}\right)X^2 + \text{konst.}$$

som igjen er en harmonisk oscillator med egenfrekvensen bestemt av

$$M\Omega^2 = A - \frac{B^2}{C}$$

$$\Omega = \underline{\underline{\sqrt{\frac{1}{M}\left(A - \frac{B^2}{C}\right)}}}$$

Oppgave 4.

Setter inn i Schrödingerlikningen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = (H_0 + H')|\psi\rangle$$

$$\sum_n \left(i\hbar\, \dot{c}_n(t)|n\rangle + E_n c_n(t)|n\rangle\right) e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$= \sum_n \left(E_n c_n(t)|n\rangle + c_n(t) H'|n\rangle\right) e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$e^{-iE_f t/\hbar}\langle f| \quad \Big| \quad \sum_n i\hbar\, \dot{c}_n |n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_n c_n(t) H'|n\rangle e^{-iE_n t/\hbar}$$

Denne likningen skalarmultipliseres med $e^{-iE_f t/\hbar}\langle f|$. Ved å benytte ortogonaliteten $\langle f|n\rangle = \delta_{fn}$ finnes dermed

$$i\hbar\, \dot{c}_f = \sum_n c_n(t)\, M_{fn}\, e^{i\omega_{fn} t}$$

der $\omega_{fn} = (E_f - E_n)/\hbar$ og $M_{fn} = \langle f|H'|n\rangle$.

Integrering gir så

$$i\hbar\, c_f(t) = i\hbar\, c_f(0) + \sum_n \int_0^t e^{i\omega_{fn} t'} c_n(t') M_{fn}\, dt'$$

der $c_f(0)$ er integrasjonskonstant bestemt av tilstanden ved $t=0$. Til første orden kan en sette $c_n(t') \approx c_n(0)$ på høyre side i uttrykket over slik at resultatet blir

$$\underline{\underline{c_f(t) = c_f(0) + \frac{1}{i\hbar}\sum_n \int_0^t dt'\, e^{i\omega_{fn} t'} M_{fn}\, c_n(0)}}$$

b/ Med M_{fn} uavhengig av tiden får en integralet

$$I = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{fn} t'} dt' = \frac{1}{i\hbar\omega_{fn}} \Big|_0^t e^{i\omega_{fn} t'} = \frac{1}{i\hbar\omega_{fn}}\left(e^{i\omega_{fn} t} - 1\right)$$

$$= \frac{e^{\frac{1}{2}i\omega_{fn} t}\left(e^{\frac{1}{2}i\omega_{fn} t} - e^{-\frac{1}{2}i\omega_{fn} t}\right)}{i\hbar\,\omega_{fn}} = \frac{2e^{\frac{1}{2}i\omega_{fn} t}\sin(\frac{1}{2}\omega_{fn} t)}{\hbar\,\omega_{fn}}$$

$$|I|^2 = II^* = \left(\frac{t}{\hbar}\right)^2 \left[\frac{\sin(\frac{1}{2}\omega_{fn} t)}{\frac{1}{2}\omega_{fn} t}\right]^2 = \left(\frac{t}{\hbar}\right)^2 \left[\frac{\sin(\Delta E \frac{t}{2\hbar})}{\Delta E \frac{t}{2\hbar}}\right]^2$$

$$\longrightarrow \left(\frac{t}{\hbar}\right)^2 \frac{2\hbar}{t}\pi\,\delta(\Delta E) = \underline{t\,\frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(\Delta E)}$$

Når systemet starter i tilstand $n = i$ er $c_i(0) = 1$ og $c_f(0) = 0$. Så følgelig finner en $(i \neq f)$

$$P_{i\to f} = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}|c_f(t)|^2 = \frac{1}{t}|I|^2 |M_{fi}|^2 \underset{(t\to\infty)}{=} \underline{\underline{\frac{2\pi}{\hbar}|M_{fi}|^2\,\delta(\Delta E)}}$$

$(\Delta E = \Delta E_f - \Delta E_i)$