NTNU **Institutt for fysikk**

Faglig kontakt under eksamen:
Professor Arne Brataas
Telefon: 73593647

Eksamen i TFY4205 Kvantemekanikk
Mandag 8. august 2005
9:00–13:00

Tillatte hjelpemidler: Alternativ C
Godkjent lommekalkulator.
K. Rottman: *Matematisk formelsamling*
Barnett and Cronin: *Mathematical formulae*

Sensur faller før 22. august 2005.

Dette oppgavesettet er på 4 sider.

Oppgave 1. Harmonisk oscillator

Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ for en harmonisk oscillator i én dimensjon er gitt ved:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \tag{1}$$

$$= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right). \tag{2}$$

Her er:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}, \tag{3}$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p} \tag{4}$$

og posisjons-operatoren $\hat{q}$ og impuls-operatoren $\hat{p}$ oppfyller kommutatorrelasjonen:

$$[\hat{p}, \hat{q}] = \frac{\hbar}{i}.$$

Vi kan også uttrykke $\hat{q}$ og $\hat{p}$ ved $\hat{a}$ og $\hat{a}^\dagger$:

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right), \hat{p} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right). \tag{5}$$

For grunnlag for det følgende oppgis (skal ikke vises)

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \tag{6}$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \tag{7}$$

der $|n\rangle$ er ortonormale egenvektorer til $\hat{H}$.

a) Vis (på grunnlag av det ovenstående) at:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1\,.$$

b) Vis at den normerte tilstanden $|\alpha\rangle$ gitt ved

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\,, \tag{8}$$

er egenvektor til annihilasjonsoperatoren $\hat{a}$ med egenverdi α, der α er et vilkårlig komplekst tall.

c) Bestem forventningsverdiene for operatoren $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ i tilstandene $|n\rangle$ og $|\alpha\rangle$. Hvorfor kalles $\hat{n}$ antallsoperatoren?

d) Vis at vi har følgende forventningsverdier for $\hat{q}$ i tilstandene $|n\rangle$ og $\alpha\rangle$:

$$\langle n|\hat{q}|n\rangle = 0\,, \tag{9}$$

$$\langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\alpha + \alpha^*)\;. \tag{10}$$

e) Vis at:

$$\Delta p \cdot \Delta q = \hbar/2 \tag{11}$$

for tilstanden $|\alpha\rangle$. Beregn også $\Delta p \cdot \Delta q$ for tilstanden $|n\rangle$.

f) Ovenfor har vi betraktet de tidsuavhengige tilstandene $|n\rangle$ og $|\alpha\rangle$. De tilsvarende tidsavhengige tilstandene (som er løsninger av den tidsavhengige Schrödingerligningen) er gitt ved:

$$|n,t\rangle = \exp\left(-i(n+\frac{1}{2})\omega t\right)|n\rangle \tag{12}$$

og

$$|\alpha,t\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n,t\rangle\;. \tag{13}$$

Det kan vises (skal *ikke* gjøres her) at $\langle\hat{n}\rangle$, Δp og Δq har samme verdier for $|n,t\rangle$ og $|\alpha,t\rangle$ som for henholdsvis $|n\rangle$ og $|\alpha\rangle$. Når $\hat{n} \to \infty$, vil da $|\alpha,t\rangle$ (for α reell) og/eller $|n,t\rangle$ inneholde beskrivelser som på noen vi nærmer seg den klassiske fysikks beskrivelse av en harmonisk oscillator? Begrunn svaret både for $|\alpha,t\rangle$ og $|n,t\rangle$.

Oppgitt:

For α reell gjelder:

$$|\langle q|\alpha,t\rangle|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left(-(x-\sqrt{2}\alpha\cos\omega t)^2\right), \tag{14}$$

der

$$x = q\sqrt{m\omega\hbar}\,. \tag{15}$$

Oppgave 2. Tidsuavhengig perturbasjonsteori

Første ordens energikorreksjon er i Rayleigh-Schrödingers perturbasjonsteori gitt ved:

$$\lambda E_n^{(1)} = \langle n|\lambda\hat{V}|n\rangle \,, \tag{16}$$

der $|n\rangle$ er egentilstand til den uperturberte Hamiltonoperatoren $\hat{H}^{(0)}$. $\lambda\hat{V}$ er perturbasjonen og altså lik $\hat{H} - \hat{H}^{(0)}$ der H er den aktuelle Hamiltonoperatoren.

I denne oppgaven kan du også få bruk for følgende:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq|q\rangle\langle q| = 1 \,. \tag{17}$$

$$\langle q_2|F(\hat{p},\hat{q})|q_1\rangle = F\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_2}\right)\delta(q_2 - q_1) \,. \tag{18}$$

Bølgefunksjonen for éndimensjonal harmonisk oscillator i grunntilstanden:

$$\psi_0(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-m\omega q^2/(2\hbar)\right) . \tag{19}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2n} \exp\left(-x^2\right) = \sqrt{\pi}\frac{1\cdot 3\cdot 5\cdots(2n-1)}{2^n} \,, \tag{20}$$

der $n = 1, 2, 3, \ldots$.

a) $\lambda\hat{V}$ er ovenfor uttrykt ved den generelle formalismen. Anta at vi betrakter et éndimensjonalt problem og at $\hat{V}$ bare er avhengig av konstanter og posisjonsoperatoren $\hat{q}$. Omform uttrykket for $\lambda E_n^{(1)}$ til bølgemekanikk-formalismen (i posisjonsrommet) bl.a. ved bruk av fullstendighetsrelasjonen, dvs. vis at:

$$\lambda E_n^{(1)} = \int dq \psi_n^*(q)\lambda V(q)\psi_n(q) \,, \tag{21}$$

der ψ_n er egenfunksjon til $\hat{H}$. Benytt som kjent at $\psi_n(q) = \langle q|n\rangle$.

b) Beregn grunntilstandsenergien $E_0 \approx E_0^{(0)} + \lambda E_1^{(1)} = \frac{1}{2}\hbar\omega + \lambda E_0^{(1)}$ ved Rayleigh-Schrödinger perturbasjonsteori (se pkt. a) for:

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 \tag{22}$$

og

$$\lambda\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}^{(0)} = \lambda\hat{q}^6 \,, \tag{23}$$

der λ er en liten reell og positiv konstant.

c) Vis at for enhver kvadratisk integrerbar funksjon f gjelder følgende:

$$\frac{\int d\tau f^*\hat{H}f}{\int d\tau f^* f} \geq E_0 \,, \tag{24}$$

der E_0 er den laveste egenverdien til Hamiltonoperatoren $\hat{H}$.

Vi tenker oss at vi ville benytte denne ulikheten (dvs. benytte Rayleigh-Ritz varisjonsmetode) til å beregne en øvre skranke E_{RR} for E_0 for Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ gitt under pkt. b). Vi tenker oss videre at vi benytter prøvefunksjonen:

$$f = \exp\left(-aq^2\right), \tag{25}$$

der a er en varierbar parameter. Hvilket resultat, det for E_0 i pkt. b) eller det vi her ville få for E_{RR}, vil ligge nærmest den korrekte grunntilstandsenergien for $\hat{H}$? Begrunn svaret!

(Merk at det ikke er nødvendig med meget regnearbeid for å kunne svare på dette.)