Opgaven bij het college Kwantummechanica 2
Week 4

Opgave 8: Periodieke potentialen en translatiesymmetrie!!!

Beschouw de beweging langs de x-as van een spin-0 deeltje met massa m onder invloed van een potentiaal $V(x)$. De potentiaal is periodiek met een periode die wordt gegeven door de vaste roosterafstand $d > 0$. De bijbehorende Hamilton-operator heeft dan de vorm

$$\hat{H} \;=\; \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}) \;, \qquad \text{met} \qquad V(x) \;=\; V(x \pm d) \;.$$

(i) Laat zien dat voor een willekeurige translatie langs de x-as over een afstand a de plaatsoperator $\hat{x}$ transformeert als $\hat{x}' \equiv \hat{U}_T(a)\,\hat{x}\,\hat{U}_T^\dagger(a) \;=\; \hat{x} - a\,\hat{1}$, waarbij $\hat{U}_T(a)$ de unitaire operator is behorende bij deze translatie.
Hint: gebruik dat $\big[\hat{x}, F(\hat{x},\hat{p}_x)\big] \;=\; i\hbar\,\dfrac{\partial F}{\partial \hat{p}_x}\,(\hat{x},\hat{p}_x)$.

(ii) Toon aan dat de Hamilton-operator van het beschouwde systeem invariant is onder de discrete translatie over de roosterafstand d, oftewel $\hat{H}' \equiv \hat{U}_T(d)\,\hat{H}\,\hat{U}_T^\dagger(d) \;=\; \hat{H}$.
Hint: gebruik dat $V(\hat{x})$ transformeert als $V(\hat{x}')$.

(iii) Leg uit waarom er een complete set simultane eigenfuncties van $\hat{H}$ en $\hat{U}_T(d)$ bestaat.

(iv) Laat $|\psi_\phi\rangle$ nu zo'n eigenfunctie zijn van zowel $\hat{H}$ als $\hat{U}_T(d)$ bij de eigenwaarden E_ϕ respectievelijk $\mathrm{e}^{-i\phi}$, met $\phi \in (-\pi, \pi]$. Leid dan de zogenaamde Bloch-conditie af:

$$\psi_\phi(x) \;\equiv\; \langle x|\psi_\phi\rangle \;=\; \mathrm{e}^{-i\phi}\,\langle x+d|\psi_\phi\rangle \;\equiv\; \mathrm{e}^{-i\phi}\,\psi_\phi(x+d) \;.$$

Hint: gebruik hiervoor het verband tussen $\langle x+d|$ en $\langle x|$ uit het dictaat.

(v) – Schrijf de energie-eigentoestanden als $\psi_\phi(x) \;=\; \exp(i\phi x/d)\,u_\phi(x)$. Welke eis legt de Bloch-conditie dan op aan de functie $u_\phi(x)$?
– Wat valt je op aan de ruimtelijke waarschijnlijkheidsverdeling van deze toestanden?

(vi) Neem tenslotte aan dat het systeem in feite ringvormig is en zichzelf herhaalt na translatie over een geheeltallig aantal roosterafstanden Nd. Om te garanderen dat de ruimtelijke golffunctie netjes enkelvoudig is volgt hieruit de periodiciteitsconditie $\psi_\phi(x+Nd) = \psi_\phi(x)$. Hoeveel verschillende waarden kan $\phi \in (-\pi, \pi]$ nu aannemen?

Met de hier beschreven kwantummechanische aspecten van periodiciteit zijn bijvoorbeeld de bijzondere eigenschappen van elektronen in metalen te verklaren.

Opgave 9: **Rotaties, spin en spinprecessie!!!** (*spinvectoren en magneetvelden*)

Beschouw een systeem bestaande uit één spin-s deeltje. Het systeem wordt in de spinruimte beschreven door de genormeerde spinvector $|\chi_s\rangle$. Bij een eindige rotatie over een hoek α rond de z-as gaat deze spinvector over in $|\chi'_s\rangle = \exp\big(-i\alpha\hat{S}_z/\hbar\big)|\chi_s\rangle$.

(i) Gebruik de commutatierelaties voor spinoperatoren om te laten zien dat

$$\langle\chi'_s|\hat{\vec{S}}|\chi'_s\rangle \;=\; \langle\chi_s|\exp\big(i\alpha\hat{S}_z/\hbar\big)\,\hat{\vec{S}}\,\exp\big(-i\alpha\hat{S}_z/\hbar\big)|\chi_s\rangle \;\equiv\; \vec{F}(\alpha)$$

voldoet aan de differentiaalvergelijkingen

$$\frac{\mathrm{d}F_x(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha} = -\,F_y(\alpha) \quad , \quad \frac{\mathrm{d}F_y(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha} = F_x(\alpha) \qquad \text{en} \qquad \frac{\mathrm{d}F_z(\alpha)}{\mathrm{d}\alpha} = 0\;.$$

(ii) Leid hiermee het volgende verband af tussen de spinverwachtingswaarden behorende bij de getransformeerde en de oorspronkelijke spintoestand:

$$\begin{aligned}
\langle\chi'_s|\hat{S}_x|\chi'_s\rangle &= \cos(\alpha)\,\langle\chi_s|\hat{S}_x|\chi_s\rangle - \sin(\alpha)\,\langle\chi_s|\hat{S}_y|\chi_s\rangle\;,\\
\langle\chi'_s|\hat{S}_y|\chi'_s\rangle &= \sin(\alpha)\,\langle\chi_s|\hat{S}_x|\chi_s\rangle + \cos(\alpha)\,\langle\chi_s|\hat{S}_y|\chi_s\rangle\;,\\
\langle\chi'_s|\hat{S}_z|\chi'_s\rangle &= \langle\chi_s|\hat{S}_z|\chi_s\rangle\;.
\end{aligned}$$

Komt dit verband tussen de twee sets verwachtingswaarden je bekend voor?

(iii) De spinvectoren $|\chi_s\rangle$ en $|\chi'_s\rangle$ kunnen als volgt worden ontbonden in termen van de eigenvectoren χ_{s,m_s} van $\hat{S}_z$ bij de eigenwaarden $m_s\hbar$:

$$|\chi_s\rangle \;\equiv\; \sum_{m_s=-s}^{s} a_{m_s}\,\chi_{s,m_s} \qquad \text{en} \qquad |\chi'_s\rangle \;\equiv\; \sum_{m_s=-s}^{s} a'_{m_s}\,\chi_{s,m_s}\;.$$

Laat zien dat voor deze coëfficiënten geldt dat $a'_{m_s} = \exp(-i\alpha m_s)\,a_{m_s}$.

(iv) Uitdaging: als functie van α hebben de spinverwachtingswaarden in onderdeel (ii) een periode 2π. Ook de transformatie van de spinvector in onderdeel (iii) heeft een specifieke periode, namelijk 2π of 4π. Bepaal de waarden van de spin s waarvoor de periode 4π bedraagt.

(v) Neem aan dat de Hamilton-operator in de spinruimte wordt gegeven door een magnetische spininteractie behorende bij een constant magneetveld $\mathcal{B}$ in de z-richting:

$$\hat{H}^{\,\text{spin}} \;=\; \frac{2\gamma}{\hbar}\,\mathcal{B}\,\hat{S}_z \qquad (\gamma \in \mathbb{R})\;.$$

Stel dat het systeem op tijdstip $t = 0$ in de spintoestand $|\chi_s\rangle$ zit. Toon dan aan dat de tijdsevolutie van dit systeem in het Schrödingerbeeld equivalent is met een rotatie van het bovenstaande type. Deze rotatie wordt spinprecessie genoemd.