Tentamen Quantummechanica 1 8 maart 2004

10.00 – 13.00 uur

1. Beschouw een deeltje met massa m in een ééndimensionale harmonische-oscillator potentiaal (krachtconstante k). Voor de orthonormale oplossingen $\psi_n(x)$ van de tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking bij eigenwaarden $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n = 0,1,2,\ldots)$ geldt

$$\hat{a}_+|\psi_n\rangle = \sqrt{(n+1)\hbar\omega}\,|\psi_{n+1}\rangle$$
$$\hat{a}_-|\psi_n\rangle = \sqrt{n\hbar\omega}\,|\psi_{n-1}\rangle$$

waarin $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ en $\hat{a}_\pm$ de ladderoperatoren representeren

$$\hat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2m}}\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \pm im\omega x\right\}$$

a. Bereken de verwachtingswaarde van de potentiële energie in de toestand $|\psi_n\rangle$.

b. Laat zien dat in het algemeen geldt
$$\frac{d}{dt}\langle xp_x\rangle = 2\langle T\rangle - \left\langle x\frac{dV}{dx}\right\rangle$$

c. Leid uit de vergelijking onder b af welke eenvoudige relatie er bestaat tussen $\langle T\rangle$ en $\langle V\rangle$ voor de harmonische oscillator in een toestand $\psi_n(x)$.

d. Geef de eigenwaarden van de Schrödingervergelijking en de mogelijke waarden van de quantumgetallen voor een drie-dimensionale isotrope harmonische oscillator.

2. De toestandsfuncties voor de gebonden toestanden van het waterstofatoom kunnen worden geschreven als

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi).$$

Zij representeren eigenfuncties van de Hamiltonoperator $\hat{H}$ bij eigenwaarden $E = \frac{1}{n^2}E_1$ waarbij de absolute waarde van E_1 de ionisatiepotentiaal van het waterstofatoom in de grondtoestand voorstelt en $n\,(=1,2,3,\ldots)$ het hoofdquantumgetal.

a. Leid de uitdrukking voor $\hat{L}_z$ (de z-component van het baanimpulsmoment) in bolcoördinaten af.

b. Laat zien dat ψ_{nlm} eigentoestanden van $\hat{L}_z$ representeren. Bij welke eigenwaarden?

c. De functies $\psi_{21\pm1}(r,\theta,\varphi)$ zijn complexe functies.

Een reële functie krijgen wij door de volgende lineaire combinatie te bekijken:
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{211} + \psi_{21-1}\}$$
Beargumenteer kort of deze lineaire combinatie wederom een eigenfunctie is van $\hat{H}$ en/of $\hat{L}_z$.

d. Bereken de verwachtingswaarde van r^2 voor een elektron in de ψ_{200} toestand van waterstof. Geef, zonder berekening, de verwachtingswaarde van x^2 voor dit elektron en beargumenteer kort uw antwoord.

3. Stel het elektron in een waterstofatoom bevindt zich in de gecombineerde plaats- en spintoestand

$$R_{21}\left\{\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,Y_1^0\chi_+ + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,Y_1^1\chi_-\right\}$$

a. Welke waarde(n) kunnen wij vinden bij meting van het kwadraat van het baanimpulsmoment $\left(L^2\right)$ in deze toestand en met welke waarschijnlijkheid zullen wij die waarde(n) vinden?
b. Idem voor de z-component van het spinimpulsmoment $\left(S_z\right)$?
c. Als wij de positie van het elektron meten, wat is de waarschijnlijkheidsdichtheid dat wij het elektron ter plekke r, θ, φ vinden?

4. Bekijk een deeltje met spinquantumgetal $s = \frac{3}{2}$

a. Bepaal de matrixrepresentatie van $\hat{S}_x$ in de basis van eigentoestanden van $\hat{S}_z$. Maak daarbij gebruik van de spin-up en spin-down operatoren $\hat{S}_\pm \equiv \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$.
b. Bepaal de eigenwaarden van $\hat{S}_x$.
c. Als wij een magneetveld ter grootte B aanleggen in de z-richting, wat zijn dan de mogelijke meetresultaten als wij de energie meten?

5. Beschouw het hydride ion (H^-) in de $(1s)^2$ grondtoestandsconfiguratie.

a. Geef de Hamiltonoperator voor dit ion als wij in de potentiële energie de Coulombinteractie meenemen.
b. Kunnen de elektronen zich in de grondtoestand in een triplet spintoestand bevinden? Licht uw antwoord kort toe.
c. Geef de toestandsfunctie (baan en spin) voor de grondtoestand van H^- in de vorm van een Slater determinant.