## Tentamen Quantummechanica 1, 9 februari 2010

Dit tentamen vindt van 14:00 tot 17:00 plaats. Het bestaat uit **drie** opgaven (op **vier** pagina's) die onafhankelijk van elkaar te maken zijn. Bij dit tentamen zijn geen documenten toegestaan. Schrijf uw naam en studentnummer op ieder antwoordblad dat u inlevert. Lastige opgaven zijn met een asterisk(*) aangegeven.

### Opgave 1: Een deeltje in een periodieke potentiaal (35 punten)

Een deeltje met massa $m$ bevindt zich in een ééndimensionale periodieke potentiaal $V(x)$ met periode $2a$ die gegeven wordt door:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{voor } -a/2 \leq x \leq a/2, \\ V_0 & \text{voor } a/2 \leq x \leq 3a/2 \text{ met } V_0 > 0, \end{cases}$$

en $V(x+2a) = V(x)$ voor alle $x$.

1.1 Wij zoeken naar oplossingen van de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking met een energie $E$ die voldoet aan $0 < E < V_0$.

a) Schets de potentiaal $V(x)$ tussen $x = -3a$ en $x = 3a$.

b) Geef de algemene vorm van de oplossing in de volgende gebieden:
Gebied I: $-a/2 \leq x \leq a/2$ met golffunctie $\psi_I$;
Gebied II: $a/2 \leq x \leq 3a/2$ met golffunctie $\psi_{II}$.
Maak gebruik van de volgende definities:

$$q \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

*Hint:* probeer de oplossingen in elk gebied te schrijven als een som van een even en oneven functie ten opzichte van het midden van dit gebied.

1.2 Aan welke randvoorwaarden moet de golffunctie voldoen in het punt $a/2$? Geef de expliciete vergelijkingen.

1.3 We gaan nu op zoek naar een *periodieke* oplossing die ook *even* is (symmetrisch ten opzichte van $x = 0$). De oplossing $\psi(x)$ voldoet dus aan de voorwaarden: $\psi(x+2a) = \psi(x)$ en $\psi(x) = \psi(-x)$.

a) Bewijs dat deze voorwaarden inhouden dat $\psi_{II}$ *even* is ten opzichte van $x = a$, oftewel: $\psi(a+y) = \psi(a-y)$.
*Hint:* bewijs eerst dat $\psi_{II}(a/2) = \psi_{II}(3a/2)$.

b) Geef vervolgens de algemene vorm van de golffuncties $\psi_I$ en $\psi_{II}$ in dit specifieke geval. De randvoorwaarden hoeven niet gebruikt te worden.

c) Toon tenslotte aan dat de energie bepaald wordt door de volgende vergelijking:

$$k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = q \tanh\left(\frac{qa}{2}\right).$$

Z.O.Z.

1.4 Wij gaan er nu vanuit dat $E \ll V_0$ en wij beschouwen het grensgeval $qa \gg 1$, zodat $\tanh\left(\frac{qa}{2}\right) \approx 1$. In deze limiet kan de afhankelijkheid van $q$ in $E$ verwaarloosd worden en gaat $q$ over in:

$$q \to q_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}.$$

a) Laat zien hoe de toegestane energieën op een grafische manier te vinden zijn. Voer hiervoor de dimensieloze grootheden $z \equiv ka$ en $z_0 \equiv q_0 a$ in. Laat ook een schets van de grafieken zien!

b) Kijk nu naar het limietgeval $z_0 \to \infty$. Wat is dan de laagst mogelijke oplossing voor $z$ van de vergelijking waarvan in 1.4a) de grafische oplossing gevraagd werd?

* c) Als $z_0 \gg 1$, maar niet $z_0 \to \infty$, ligt de laagste mogelijke oplossing voor $z$ iets van het antwoord van 1.4b) af. Splits $z$ op als $z = z^\infty - \epsilon$, waarbij $z^\infty$ het antwoord op 1.4b) is en $\epsilon$ een kleine correctie daarop en bepaal $\epsilon$ tot op eerste orde in $z_0^{-1}$. Gebruik dit resultaat vervolgens om $E$ tot op eerste orde in $(q_0 a)^{-1}$ te bepalen.

1.5 We kunnen ook op zoek gaan naar een *even* golffunctie (ten opzichte van $x = 0$) die "*anti-periodiek*" is. Deze voldoet dan aan de voorwaarde:

$$\psi(x + 2a) = -\psi(x).$$

a) Bewijs dat deze golffunctie *oneven* moet zijn ten opzichte van $x = a$, d.w.z.: $\psi(a + y) = -\psi(a - y)$ en geef de expliciete vorm van $\psi_I$ en $\psi_{II}$.

b) Waarom is het bij de even anti-periodieke toestand niet evident dat voldoen aan de randvoorwaarden in $x = a/2$ automatisch inhoudt dat deze aan de randvoorwaarden in alle randpunten ($x = a/2 + na$, met $n = 0, \pm 1, \ldots$) voldoet? *Hint:* Kijk naar de periode van de even anti-periodieke golffunctie.

c) Laat zien dat dit desalniettemin het geval is.

1.6 a) Schets de twee gevonden golffuncties tussen $x = -3a$ en $x = 3a$ met twee verschillende kleuren of soorten lijnen.

* b) Leg kwalitatief uit waarom de even symmetrisch-periodieke toestand de grondtoestand zou kunnen zijn.

## Opgave 2: Het viriaaltheorema (30 punten)

Beschouw een deeltje met massa $m$ in een ééndimensionale harmonische potentiaal met krachtconstante $k = m\omega^2$. De orthonormale oplossingen van de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking worden gegeven door $|\psi_n\rangle$ met energie $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. De ladderoperatoren zijn als volgt gedefiniëerd:

$$a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x),$$

en hun werking op de stationaire toestanden wordt gegeven door:

$$a_+ |\psi_n\rangle = \sqrt{n+1}\, |\psi_{n+1}\rangle \,,$$
$$a_- |\psi_n\rangle = \sqrt{n}\, |\psi_{n-1}\rangle \,.$$

Van de klassieke (niet-quantummechanische) harmonische oscillator weten we dat hij voldoet aan het zogenaamde viriaaltheorema: $\langle V \rangle = \langle T \rangle$.

2.1 Controleer of de quantummechanische harmonische oscillator in toestand $|\psi_n\rangle$ voldoet aan dezelfde relatie door de verwachtinswaarden van de potentiële energie $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ en de kinetische energie $T = \frac{p^2}{2m}$ uit te rekenen.
*Hint:* het is niet nodig integralen uit te rekenen.

Het doel van de rest van deze opgave is om het quantummechanische viriaaltheorema in drie dimensies af te leiden. Hierbij maken we gebruik van de quantummechanische bewegingsvergelijking voor een tijdsonafhankelijke operator Q: $\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, Q] \rangle$.

2.2 Gebruik de quantummechanische bewegingsvergelijking om te laten zien dat:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rangle = 2\langle T \rangle - \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle.$$

*Hint 1:* Probeer deze vergelijking allereerst in één dimensie af te leiden; kijk dus naar $\frac{d}{dt}\langle x p_x \rangle$. Laat vervolgens zien hoe dit resultaat gegeneraliseerd kan worden.
*Hint 2:* Gebruik de expliciete uitdrukking voor de impulsoperator om $[f(x), p_x]$ uit te rekenen, waarbij $f(x)$ een willekeurige, analytische functie van $x$ is.

2.3 Leg uit dat voor een stationaire toestand de bij 2.2 gevonden vergelijking reduceert tot $2\langle T \rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle$. Dit is het viriaaltheorema in drie dimensies.

2.4 Hoe ziet het viriaaltheorema er uit voor een driedimensionale, isotrope, harmonische oscillator (potentiaal $V = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$)?

## Opgave 3: Een spin-1 deeltje (35 punten)

Op het college is bij de behandeling van het spinimpulsmoment uitgebreid ingegaan op een deeltje met $s = 1/2$. Bij deze opgave zullen we nu de aandacht vestigen op een spin-1 deeltje. De algebra voor $s = 1$ is iets ingewikkelder dan die voor $s = 1/2$, maar alle berekeningen verlopen analoog zoals in deze opgave duidelijk zal worden.

3.1 Voordat we iets zinnigs kunnen doen, moeten we eerst de matrixrepresentatie van de spinoperatoren $S^2, S_x, S_y$ en $S_z$ bepalen. Net als bij $s = 1/2$ schrijven we de matrixrepresentatie in eigentoestanden van $S_z$.

a) Geef de matrixrepresentatie van $S^2$ en $S_z$ voor het spin-1 deeltje.
*Hint:* Kijk naar de werking van $S^2$ en $S_z$ op de spinkets $|s m_s\rangle$.

b) Voor het vinden van de matrixrepresentatie van $S_x$ en $S_y$ hebben we eerst die voor $S_\pm$ nodig. Vind, gebruikmakend van de relatie:

$$S_\pm |s m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)}\, |s(m_s \pm 1)\rangle$$

de matrixrepresentatie van $S_+$ en $S_-$.

Z.O.Z.

c) Bepaal nu met $S_\pm = S_x \pm iS_y$ de matrixrepresentatie van $S_x$ en $S_y$.

d) Laat vervolgens aan de hand van deze matrixrepresentaties zien dat $S_x$ en $S_y$ dezelfde eigenwaarden hebben als $S_z$ (zoals te verwachten was).

e) Bepaal tenslotte de genormaliseerde eigentoestanden van $S_x$.

Met een analoge berekening kan gevonden worden dat de genormaliseerde eigentoestanden van $S_y$ gelijk zijn aan:

$$|\pm, y\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}, \qquad |0, y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

waarbij $|\pm, y\rangle$ de eigentoestanden zijn behorende bij de hoogste/laagste eigenwaarde van $S_y$ en $|0, y\rangle$ de eigentoestand is bij de middelste eigenwaarde van $S_y$.

3.2 Wij voeren nu een tweetal meetexperimenten uit.

a) Bij de eerste meting meten wij als eerste $S_z$. De uitkomst van deze meting is $+\hbar$. Onmiddellijk daarna meten wij $S_y$. Wat zijn de mogelijke uitkomsten en bijbehorende waarschijnlijkheden?

b) Bij de tweede meting meten wij allereerst $S_y$. De uitkomst van deze meting is $-\hbar$. Vervolgens meten wij $S_z$. Ommiddellijk hierna meten wij weer $S_y$. Wat zijn de mogelijke uitkomsten en bijbehorende waarschijnlijkheden als de meetwaarde van $S_z$ onbekend is?