Uitwerking Tentamen Quantummechanica 1

26 maart 2012

Opgave 1.

a. Oplossingen van de tijdonafhankelijke Schrödingervergelijking voor $x < 0$ hebben de gedaante $\exp(\pm ikx)$ met $E = \hbar^2 k^2/(2m)$, en voor $x > 0$ de gedaante $\exp(\pm ik'x)$ met $E = \hbar^2 k'^2/(2m) + E_0$. Een deeltje dat van links (vanuit $-\infty$) invalt kan worden teruggekaatst en doorgelaten. De term $\exp(-ik'x)$ ontbreekt dan voor $x > 0$. Dat leidt tot de gegeven vorm van de golffunctie voor $x < 0$ en voor $x > 0$.

b. De eis dat $\psi(x)$ continu is bij $x = 0$ geeft de vergelijking $A + B = C$. De eis dat $d\psi/dx$ continu is bij $x = 0$ geeft de vergelijking $ik(A+B) = ik'C$. Dat geeft twee vergelijkingen voor de verhoudingen B/A en C/A, met de oplossingen

$$\frac{B}{A} = -\frac{k - k'}{k + k'} \,, \; \frac{B}{A} = \frac{2k}{k + k'} \;.$$

c. Invullen van de gedaante voor de golffunctie $\psi(x)$ in de uitdrukking voor J geeft $J = J_-$ voor $x < 0$, en $J = J_+$ voor $x > 0$, met

$$J_- = \frac{\hbar k}{m}(|A|^2 - |B|^2) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 \frac{4k'k}{(k + k')^2} \;,$$

$$J_+ = \frac{\hbar k'}{m}|C|^2 = \frac{\hbar k'}{m}|A|^2 \frac{4k^2}{(k + k')^2} = J_- \;.$$

d. De afleidingen voor B/A en C/A uit b. blijven geldig, met de substitutie $k' \to i\kappa$.

e. Omdat $\frac{B}{A} = -\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}$ geldt $R = |B|^2/|A|^2 = 1$.

Opgave 2.

a. Het is duidelijk dat zowel $\hat{T}$ als $\hat{V}$ gesplitst kan worden in drie delen, één voor elke Cartesische coördinaat.

b. Elke deel-Hamiltoniaan $\hat{H}_i$ werkend op een product als gegeven levert een bijbehorende partiële energiewaarde op. De totale Hamiltoniaan heeft dus een eigenwaarde die de som is van deeleigenwaarden.

c. Deze deeleigenwaarden zijn $E_{xn} = \hbar\omega_1(n+1/2) = \hbar\omega(n+1/2)$, $E_{ym} = \hbar\omega_1(m+1/2) = \hbar\omega(m+1/2)$, $E_{zp} = \hbar\omega_2(p+1/2) = \hbar\omega(2p+1)$.

d. De afzonderlijke functies evolueren als een eendimensionale harmonische oscillator, elk met een frequentie als gegeven, zodat $\Psi(\mathbf{r},t) = \psi_x(x,t)\psi_y(y,t)\psi_z(z,t)$. Hierbij geldt dat

$$\psi_x(x,t) = \exp(-i\omega t/2)[\psi_{x0}(x) + \psi_{x1}(x)\exp(-i\omega t)]/\sqrt{2}$$

$$\psi_y(y,t) = \exp(-i\omega t/2)[\psi_{y0}(y) + \psi_{y1}(y)\exp(-i\omega t)]/\sqrt{2}$$

$$\psi_z(z,t) = \exp(-i\omega t)[\psi_{z0}(z) + \psi_{z1}(z)\exp(-2i\omega t)]/\sqrt{2}$$

e. De meetuitkomsten van de energie zijn onafhankelijk van de tijd. De gegeven golffunctie bevat 8 termen, met eigenwaarden $\hbar\omega(2+n+m+2p)$, met n, m en p elk gelijk aan 0 of 1. Dat levert 5 mogelijke uitkomsten, die bepaald worden door de som $n+m+2p = N$: $N=0$ voor $(n,m,p) = (0,0,0)$, $N=1$ voor $(n,m,p) = (1,0,0)$ en $(n,m,p) = (0,1,0)$, $N=2$ voor $(n,m,p) = (1,1,0)$ en $(n,m,p) = (0,0,2)$, $N=3$ voor $(n,m,p) = (1,0,1)$ en $(n,m,p) = (0,1,1)$, en tenslotte $N=4$ voor $(n,m,p) = (1,1,1)$. De energiewaarden zijn dus $E = \hbar\omega(2+N)$ met de kans 1/8 voor $N=0$ en $4N=4$, en de kansen 1/4 voor $N=1$, $N=2$ en $N=3$.

Opgave 3.

a. Volgens de optelregel van impulsmomenten zijn de mogelijke eigenwaarden van $\hat{\mathbf{S}}^2$ gelijk aan $\hbar^2 s(s+1)$ waarbij s loopt van s_1+s_2 naar $|s_1-s_2|$. Dus $s=1$ of $s=0$. De eigenwaarden van $\hat{S}_z$ zijn $\hbar m_s$ waarbij m_s loopt van s tot $-s$. Dus bij $s=1$ horen de waarden $m_s = 1$, 0 en -1, en bij $s=0$ hoort de waarde $m_s=0$.

b. Omdat $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{(1)} + \hat{\mathbf{S}}^{(2)}$ geldt ook $\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{S}}^{(1)})^2 + (\hat{\mathbf{S}}^{(2)})^2 + 2\hat{\mathbf{S}}^{(1)}\cdot\hat{\mathbf{S}}^{(2)}$. Daaruit volgt de gegeven gelijkheid. Toestanden $|s,m_s\rangle$ zijn eigentoestand van $\hat{\mathbf{S}}^2$, $\hat{S}_z$, $(\hat{\mathbf{S}}^{(1)})^2$ en $(\hat{\mathbf{S}}^{(2)})^2$, en dus ook van $\hat{\mathbf{S}}^{(1)}\cdot\hat{\mathbf{S}}^{(2)}$. De eigenwaarden van $\hat{\mathbf{S}}^{(1)}\cdot\hat{\mathbf{S}}^{(2)}$ zijn dus $\hbar^2[s(s+1) - 3/4 - 3/4]/2$. De toestanden $|1,m_s\rangle$ hebben dus de eigenwaarde $\hbar^2/4$, de toestand $|0,0\rangle$ heeft de eigenwaarde $-3\hbar^2/4$.

c. De toestand $|\uparrow\uparrow\rangle$ is eigentoestand van $\hat{S}_z^{(1)}$ en van $\hat{S}_z^{(2)}$, en dus ook van de som $\hat{S}_z$. Dit is de enige eigentoestand van $\hat{S}_z$ met eigenwaarde $\hbar m_s = \hbar$, dus met $m_s = 1$. Omdat er geen hoger quantumgetal m_s voorkomt, moet het quantumgetal s ook de waarde 1 hebben.

d. Volgens de regel $\hat{S}_\pm|s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)}|s, m_s \pm 1\rangle$ geldt $\hat{S}_-|1, 1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle$. Omdat $\hat{S}_z = \hat{S}_z^{(1)} + \hat{S}_z^{(2)}$ is dat hetzelfde als $(\hat{S}_-^{(1)} + \hat{S}_-^{(2)})|\uparrow\uparrow\rangle$. Daaruit volgt dat $|1, 0\rangle = (|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$.

e. De toestand $|s, m_s\rangle = |0, 0\rangle$ is eigentoestand van $\hat{S}_z$ met eigenwaarde 0, en staat loodrecht op de toestand $|1, 0\rangle$. Daaruit volgt dat
$|0, 0\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ (afgezien van een mogelijke fasefactor). Dat betekent dat $|\uparrow\downarrow\rangle = (|1, 0\rangle + |0, 0\rangle)\sqrt{2}$. De gegeven toestand kunnen we nu schrijven als
$|\uparrow\uparrow\rangle \cos(\theta/2) + |\uparrow\downarrow\rangle \sin(\theta/2) = \cos(\theta/2)|1, 1\rangle + \sin(\theta/2)(|1, 0\rangle + |0, 0\rangle)/\sqrt{2}$.
Dat is een som van eigentoestanden van $\hat{\mathbf{S}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{S}}^{(2)}$. Dat geeft voor de verwachtingswaarde van deze operator
$(\hbar^2/4)[\cos^2(\theta/2) + \sin^2(\theta/2)/2] - (3\hbar^2/4)\sin^2(\theta/2)/2$,
ofwel
$(\hbar^2/4)[cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2)] = (\hbar^2/4)\cos\theta$.