Tentamen QM1a (05 November 2009)

Algemeen:
— de duur van het tentamen is 3 uur.
— er mag geen boek en geen eigen formuleblad worden gebruikt (sommige formules vind je wel op het laatste ogavenbladje.

Niet vergeten:
• *schrijf leesbaar en identificeer alles wat je opschrijft duidelijk met (deel–)vraag nummers!*
• *lever iedere opgave op een afzonderlijk vel in!*
• *Vermeld bij alle opgaven welk tentamen je doet!*
• *Schrijf op ieder vel je naam!*

Opgave 1 - Concepten en Begrippen

Voor elk van de volgende vragen kan een bondig antwoord volstaan (wees zo volledig als nodig is maar vermijd irrelevante uitweidingen).

a. Waardoor wordt in de quantummechanica een toestand van een systeem beschreven?

Oplossing: Door een golffunctie $\Psi(x,t)$ als oplossing van de Schrödinger-vergelijking.

b. Schrijf de operator voor de impuls van een deeltje op.

Oplossing:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

c. Hoe groot is de constante van Planck ongeveer? (h of $\hbar$, een decimaal is voldoende - let op de eenheid.)

Oplossing: $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ Js of $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Js

d. Door welke operatie verkrijg je uit de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking de *tijdsonafhankelijke* Schrödingervergelijking? **Oplossing:** Door scheiding van variabelen.

e. Hoe schrijf je de Hamiltoniaan in de quantummechanica?

Oplossing:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x).$$

f. Wat is de samenhang tussen $\Psi(x,t)$ en $\psi(x)$ voor een stationaire toestand?

Oplossing:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}.$$

g. Wat betekent de onzekerheidsrelatie van Heisenberg?

Oplossing: De spreiding van de plaats en van de impuls kan je niet tegelijkertijd willekeurig verkleinen. Kleine spreiding in de plaats houdt een grote spreiding in de impuls in en andersom. Opmerking: Als iemand alleen de onzekerheidsrelatie als formule opschrijft zal dat een halve punt kunnen opleveren.

h. Wat wordt bedoeld met “tunneling”? Is er een klassiek analogon?

Oplossing: Met “tunneling” wordt het verschijnsel bedoeld dat een deeltje een potentiaalbarrière kan passeren óók als de energie van het deeltje minder is dan de hoogte van de potentiaalberg. Er is geen analogon in de klassieke mechanica van puntdeeltjes.

i. Geef de commutatierelatie tussen plaats en impuls aan.

Oplossing:

$$[x, p] = i\hbar.$$

j. Waarom is de stationaire oplossing voor een vrij deeltje fysisch niet toegestaan?

Oplossing: Omdat de stationaire oplossingen niet normeerbaar zijn.

(*1 punt per vraag*)

Opgave 2 - Harmonische Oscillator

a. De ladderoperatoren zijn gegeven door:

$$a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega x \mp ip) .$$

Toon met hulp van de canonieke commutatierelatie tussen x en p aan dat

$$[a_-, a_+] = 1.$$

(*1 punt*)

Oplossing:

$$[a_-, a_+] = \frac{1}{2\hbar m\omega}[m\omega x + ip, m\omega x - ip] = \frac{1}{2\hbar m\omega} \{[m\omega x, -ip] + [ip, m\omega x]\} = \frac{-im\omega}{2\hbar m\omega} 2[x,p] = 1$$

b. Toon met hulp van de commutatierelatie tussen de ladderoperatoren aan dat:

$$\left[(a_+)^2, a_-\right] \equiv a_+a_+a_- - a_-a_+a_+ = -2a_+$$

Bereken met hulp van deze relatie de operator:

$$\hat{Q} \equiv \left[(a_+)^2, (a_-)^2\right] \equiv a_+a_+a_-a_- - a_-a_-a_+a_+.$$

Toon aan dat:

$$\hat{Q} = -\frac{4}{\hbar\omega}\hat{H}$$

geldt.
(*2 punten*)

Oplossing:

$$\begin{aligned}
[(a_+)^2, a_-] &= a_+a_+a_- - a_-a_+a_+ \\
&= a_+a_+a_- - a_+a_-a_+ - [a_-, a_+]a_+ = a_+a_+a_- - a_+a_-a_+ - a_+ \\
&= a_+a_+a_- - a_+a_+a_- - a_+[a_-, a_+] - a_+ = a_+a_+a_- - a_+a_+a_- - a_+ - a_+ = -2a_+
\end{aligned}$$

Voor $\hat{Q}$ vind je dan:

$$\begin{aligned}
\hat{Q} &= a_+a_+a_-a_- - a_-a_-a_+a_+ \\
&= a_-a_+a_+a_- + [(a_+)^2, a_-]a_- - a_-a_-a_+a_+ \\
&= a_-a_-a_+a_+ + a_-[(a_+)^2, a_-] + [(a_+)^2, a_-]a_- - a_-a_-a_+a_+ \\
&= -2a_-a_+ - 2a_+a_- = -4a_+a_- - 2 = -4\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right) = -\frac{4}{\hbar\omega}\hat{H}
\end{aligned}$$

c. Toon door herhaaldelijk toepassen van a_+ op de grondtoestand

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

aan dat de tweede aangeslagen toestand gegeven is door:

$$\psi_2 = A\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right).$$

Toon door normalisatie dat

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}.$$

(3 punten)

Oplossing:

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= A_1 a_+ \psi_0 = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \\
&= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{-m\omega x}{\hbar} + m\omega x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \\
&= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_2(x) &= A_2 a_+ \psi_1 = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \\
&= A_1 A_2 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} + \hbar\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \frac{m\omega}{\hbar} x^2 + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} m\omega x^2\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \\
&= A_1 A_2 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(-1 + \frac{2m\omega}{\hbar}x^2\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \\
&\equiv A \left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)
\end{aligned}$$

De normalisatie levert:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^* \psi_2 dx &= |A|^2 \cdot 2 \left[\int_0^\infty \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^2 x^4 \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) dx \right. \\
&\quad \left. - \int_0^\infty 2\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) dx + \int_0^\infty \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) dx \right] \\
&= |A|^2 \cdot 2 \left[\left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \cdot \frac{3}{2} - \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} + \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \cdot \frac{1}{2}\right] = |A|^2 \cdot 2 \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \overset{!}{=} 1
\end{aligned}$$

d. Toon met hulp van de ladderoperatoren aan dat:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n dx = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

en

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_{n+2} dx = \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{(n+2)(n+1)}.$$

(1.5 punten)

Oplossing: De operator x^2 is:

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a_+a_+ + a_+a_- + a_-a_+ + a_-a_-).$$

In de integraal leveren termen als $\psi_n^* a_+ a_+ \psi_n$ and $\psi_n^* a_- a_- \psi_n$ producten van orthogonale functies op. Er blijft dus alleen:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n dx &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* a_+ a_- \psi_n dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* a_- a_+ \psi_n dx\right) \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{n \cdot n} + \sqrt{(n+1)(n+1)}\right) = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right).
\end{aligned}$$

In de tweede integraal levert alleen de term met $\psi_n^* a_- a_- \psi_{n+2}$ een eindige bijdrage op. We vinden:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_{n+2} dx &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* a_- a_- \psi_{n+2} dx\right) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{(n+2)(n+1)}.\end{aligned}$$

e. Voor $t = 0$ is het deeltje in de toestand:

$$\Psi(x,0) = B\left(b_0\psi_0(x) + b_2\psi_2(x)\right)$$

met b_0 en b_2 reëel. Bepaal B uit de normalisatie. Geef de tijdsafhankelijke golffunctie $\Psi(x,t)$ aan en toon aan dat de verwachtingswaarde van de plaats in de toestand $\Psi(x,t)$ $\langle x\rangle = 0$ is. Toon met hulp van de relaties uit (d) aan dat de spreiding kan geschreven worden als:

$$\sigma_x^2 = |B|^2 \frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{b_0^2}{2} + \frac{5b_2^2}{2} + \sqrt{2} b_0 b_2 \cos 2\omega t\right).$$

(2.5 punten)

Oplossing: Omdat de gemixte termen met $\psi_0\psi_2$ geen bijdrage leveren (orthogonaliteit) hebben we:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0)^*\Psi(x,0)dx &= |B|^2\left(\int_{-\infty}^{\infty} b_0^2\psi_0^2 dx + \int_{-\infty}^{\infty} b_2^2\psi_2^2 dx\right) = |B|^2\left(b_0^2 + b_2^2\right) \overset{!}{=} 1 \\ \Rightarrow B = \frac{1}{\sqrt{b_0^2+b_2^2}}.\end{aligned}$$

De tijdsafhankelijke golffunctie is:

$$\Psi(x,t) = B\left[b_0\,\psi_0(x)\exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right) + b_2\,\psi_2(x)\exp\left(-i\frac{5\omega}{2}t\right)\right].$$

De verwachtingswaarde van de positie:

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* x \Psi(x,t) dx \\ &= |B|^2\left[b_0^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x\psi_0 dx + b_2^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2 x\psi_2 dx + b_0 b_2\exp\left(-i2\omega t\right)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x\psi_2 dx + b_0 b_2 \exp\left(+i2\omega t\right)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2 x\psi_0 dx\right]\end{aligned}$$

Omdat in alle integralen hier oneven functies staan wordt $\langle x\rangle = 0$. De spreiding kunnen we dan uitrekenen als:

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 &= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)^* x^2\Psi(x,t)dx \\ &= |B|^2\left[b_0^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x^2\psi_0 dx + b_2^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2 x^2\psi_2 dx + b_0 b_2\exp\left(-i2\omega t\right)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x^2\psi_2 dx + b_0 b_2\exp\left(+i2\omega t\right)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2 x^2\psi_0 dx\right]\end{aligned}$$

Met

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2 x^2\psi_0 dx = \left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x^2\psi_2 dx\right)^* = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x^2\psi_2 dx$$

kunnen we schrijven:

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 &= |B|^2\left[b_0^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x^2\psi_0 dx + b_2^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_2 x^2\psi_2 dx + b_0 b_2 2\cos\left(2\omega t\right)\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0 x^2\psi_2 dx\right] \\ &= |B|^2\left[b_0^2\frac{\hbar}{m\omega}\frac{1}{2} + b_2^2\frac{\hbar}{m\omega}\frac{5}{2} + b_0 b_2 2\cos\left(2\omega t\right)\frac{\hbar}{2m\omega}\sqrt{2}\right] \\ &= |B|^2\frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{b_0^2}{2} + \frac{5b_2^2}{2} + \sqrt{2} b_0 b_2\cos 2\omega t\right).\end{aligned}$$

Opgave 3 - Transmissie door een barriere

Beschouw de potentiaal

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < -a & (I) \\ V_1 & : \quad -a < x < 0 & (II) \\ V_2 & : \quad 0 < x < b & (III) \\ 0 & : \quad b < x & (IV) \end{cases} \tag{1}$$

met $E = V_2 > V_1 > 0$.

a. Geef de algemene oplossingen van de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking voor de vier gebieden

$$\begin{array}{lcl} I: & : & x < -a \\ II: & : & -a < x < 0 \\ III: & : & 0 < x < b \\ IV: & : & b < x \end{array}$$

aan. (Let op in gebied III: kijk hier expliciet naar de Schrödingervergelijking!) Beperk de oplossingen tot een deeltje dat van links ($-\infty$) komt. Maak een tekening van een mogelijke oplossing.
(*3 punten*)

Oplossing: De algemene oplossingen zijn:

$$\begin{array}{lcl} \psi_I & : & = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_{II} & : & = Ce^{ilx} + De^{-ilx} \\ \psi_{III} & : & = F + Gx \\ \psi_{IV} & : & = He^{ikx} + Ie^{-ikx}, \end{array}$$

met

$$k \equiv \frac{\sqrt{2m(E)}}{\hbar}; \qquad l \equiv \frac{\sqrt{2m(E-V_1)}}{\hbar}.$$

Als het deeltje alleen van links komt is er aanvullend $I = 0$.

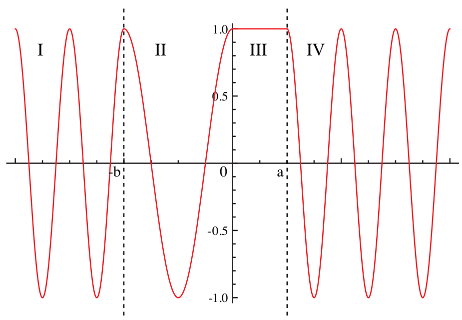

Figure 1: Het reële gedeelte van een mogelijke oplossing voor de golffunctie.

b. Stel de randvoorwaarden in $x = -a$, $x = 0$ en $x = b$ op. Toon aan dat de transmissiecoëfficiënt gegeven is door

$$T^{-1} = \left[1 + \frac{k^2b^2}{4}\right]\cos^2(la) + \left[\left(\frac{k^2+l^2}{2kl}\right)^2 + \frac{l^2b^2}{4}\right]\sin^2(la) + \left[kb\frac{k^2+l^2}{2kl} - lb\right]\sin(la)\cos(la). \tag{2}$$

met:

$$k \equiv \frac{\sqrt{2m(E)}}{\hbar}; \qquad l \equiv \frac{\sqrt{2m(E-V_1)}}{\hbar} \tag{3}$$

(5 punten)

Oplossing: Continuiteit bij $x = -a$:

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{-ila} + De^{ila} \tag{4}$$

Continuiteit van de afgeleide bij $x = -a$:

$$Ae^{-ika} - Be^{ika} = \frac{l}{k}\left(Ce^{-ila} - De^{ila}\right) \tag{5}$$

Continuiteit bij $x = 0$:

$$C + D = F \tag{6}$$

Continuiteit van de afgeleide bij $x = 0$:

$$C - D = -\frac{i}{l}G \tag{7}$$

Continuiteit bij $x = b$:

$$F + Gb = He^{ikb} \tag{8}$$

Continuiteit van de afgeleide bij $x = b$:

$$G = ikHe^{ikb} \tag{9}$$

Uit (4) en (5) maak je:

$$A = \frac{1}{2}e^{ika}\left[\left(1 + \frac{l}{k}\right)Ce^{-ila} + \left(1 - \frac{l}{k}\right)De^{ila}\right]. \tag{10}$$

Uit (6) en (7) maak je de volgende twee relaties:

$$C = \frac{1}{2}\left(F - \frac{i}{l}G\right) \tag{11}$$

en

$$D = \frac{1}{2}\left(F + \frac{i}{l}G\right). \tag{12}$$

Met (9) heb je zo een relatie tussen G en H en samen met (8) krijg nog:

$$F = (1 - ikb)He^{ikb}. \tag{13}$$

Invullen van (9) en (13) in (11) en (12) levert:

$$C = \frac{1}{2}\left(1 - ikb + \frac{k}{l}\right)He^{ikb} \tag{14}$$

en

$$D = \frac{1}{2}\left(1 - ikb - \frac{k}{l}\right)He^{ikb}. \tag{15}$$

Uiteindelijk kunnen we dan (14) en (15) invullen in (10):

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2}e^{ika}e^{ikb}H\left[\left(1 + \frac{l}{k}\right)\left(1 - ikb + \frac{k}{l}\right)\frac{1}{2}e^{-ila} + \left(1 - \frac{l}{k}\right)\left(1 - ikb - \frac{k}{l}\right)\frac{1}{2}e^{ila}\right] \\ &= \frac{1}{2}e^{ika}e^{ikb}H\left[(2 - ikb)\cos(la) + \left(-lb - i\frac{k^2 + l^2}{kl}\right)\sin(la)\right]. \end{aligned} \tag{16}$$

De transmissiecoëfficiënt krijg je dan door:

$$T^{-1} = \frac{|A|^2}{|H|^2} = \frac{1}{4}\left[(2 + ikb)\cos(la) + \left(-lb + i\frac{k^2 + l^2}{kl}\right)\sin(la)\right]\left[(2 - ikb)\cos(la) + \left(-lb - i\frac{k^2 + l^2}{kl}\right)\sin(la)\right], \tag{17}$$

wat je kan vereenvoudigen naar (2).

c. Toon aan dat je bij benadering in het geval $b \ll 1/k$ en $b \ll 1/l$ kan schrijven:

$$T^{-1} = 1 + \left[\left(\frac{k^2 + l^2}{2kl} \right)^2 - 1 \right] \sin^2(la) \tag{18}$$

Geef verder een benadering aan voor de transmissiecoëfficiënt (2) voor het geval $a \ll 1/l$.
(2 punten)

Oplossing: Voor $b \ll 1/k$ en $b \ll 1/l$ kan je alle termen met kb en lb ten opzichten van termen van de orde van grootte 1 verwaarlozen, dus er blijft van (2):

$$T^{-1} = \cos^2(la) + \left(\frac{k^2 + l^2}{2kl} \right)^2 \sin^2(la) = 1 + \left[\left(\frac{k^2 + l^2}{2kl} \right)^2 - 1 \right] \sin^2(la). \tag{19}$$

Voor $a \ll 1/l$ heb je $\cos(la) \approx 1$ en $\sin(la) \ll 1$, en dus:

$$T^{-1} = 1 + \frac{k^2 b^2}{4}. \tag{20}$$

Formuleblad:

(Onderstaande relaties kunnen gebruikt worden, maar het is (natuurlijk!) niet per se *noodzakelijk* er één of meer te gebruiken!)

$$\sin(a \pm b) = \sin a \cos b \pm \cos a \sin b$$
$$\cos(a \pm b) = \cos a \cos b \mp \sin a \sin b$$

$$\int x \sin(ax) dx = \frac{1}{a^2} \sin(ax) - \frac{x}{a} \cos(ax)$$
$$\int x \cos(ax) dx = \frac{1}{a^2} \cos(ax) + \frac{x}{a} \sin(ax)$$

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos\theta$$

$$\cosh^2 a = 1 + \sinh^2 a$$

$$\int_0^\infty x^n \exp\left(-\frac{x}{a}\right) dx = n! a^{n+1}$$

$$\int_0^\infty x^{2n} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) dx = \sqrt{\pi}\, \frac{(2n)!}{n!} \left(\frac{a}{2}\right)^{2n+1}$$

$$\int_0^\infty x^{2n+1} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) dx = \sqrt{\pi}\, \frac{n!}{2} a^{2n+2}$$

$$\int_a^b f \frac{dg}{dx} dx = -\int_a^b \frac{df}{dx} g dx + fg\Big|_a^b$$