Departement Natuur- en Sterrenkunde, Faculteit Bètawetenschappen, UU.
In elektronische vorm beschikbaar gemaakt door de $\mathcal{TBC}$ van A−Eskwadraat.
Het college QME1b werd in 2005/2006 gegeven door prof. dr. J.J. Koenderink.

Quantummechanica 1a (QME1b)
31 januari 2006

Opgave 1

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

a) Hoe luidt het (algemeen) "onzekerheidsprincipe" voor een paar fysische grootheden, uitgedrukt in termen van de bijbehorende operatoren?

b) Zoals bekend luidt het zogenaamde "energie-tijd onzekerheidsprincipe" $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$. Wat is (precies!) de betekenis van Δt?

c) Wat is de afmeting van de "Bohr straal" (ongeveer)?

d) Geef de kanonieke commutatierelaties voor de componenten van het impulsmoment.

e) Wat zijn de toestanden van de twee spin $\frac{1}{2}$ deeltjes in een samengestelde $s = 1$, $m = 0$ (triplet) toestand?

f) Waarom beschrijft $|\uparrow\downarrow\rangle$ geen stationaire toestand van een systeem van twee spin $\frac{1}{2}$ deeltjes met $s = 0$?

g) Waarom zijn de "bolfuncties" ($Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$) niet van nut bij het beschrijven van de golffunctie voor de spin-toestand van deeltjes?

h) Welke "kracht" is in het geding als men over *"exchange forces"* spreekt?

i) Hoe luidt het "Pauli uitsluitingsprincipe"?

j) Waarom is de Slater-determinant ($\det |\psi_i(\mathbf{r_j})|$) zo handig bij het beschrijven van de toestand van identieke fermionen?

Opgave 2

Beschouw een deeltje met spin $\frac{1}{2}$.

a) Wat zijn de eigenwaarden en eigenvectoren van $\hat{S}_x, \hat{S}_y$ en $\hat{S}_z$?

b) Beschouw het deeltje in een eigentoestand van $\hat{S}_x$. Wat zijn de mogelijke meetresultaten (met bijbehorende waarschijnlijkheden) voor de z-component van de spin?

c) Op tijd $t = 0$ is het deeltje in de eigentoestand van $\hat{S}_x$ bij eigenwaarde $+\hbar/2$. We schakelen een magnetisch veld langs de Z-richting aan zodat de Hamiltoniaan gegeven wordt door

$$\hat{H} = -\gamma B \hat{S}_z,$$

(B het magnetisch veld, γ de gyromagnetische verhouding). Laat zien dat de toestand op tijd $t > 0$ door

$$|\psi(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\mathrm{e}^{+\frac{\mathrm{i}\gamma B}{2}t} |\uparrow\rangle + \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\gamma B}{2}t} |\downarrow\rangle \right),$$

gegeven wordt.

d) Wat zijn de mogelijke waarden bij meting van $\hat{S}_x$ en $\hat{S}_z$ op tijd $t > 0$ en met welke waarschijnlijkheden? Verklaar eventuele verschillen.

e) Wat zijn de verwachte waarden bij meting van $\hat{S}_x$ en $\hat{S}_z$ op tijd $t > 0$?

Opgave 3

Een porphyrinering is een molecuul dat deel uitmaakt van o.a. chlorofyll en haemoglobine. Een aantal fysische eigenschappen worden beschreven door het eenvoudige model van een cirkelvormig pad met straal $r = 4$ Åwaarover 18 electronen bewegen. We verwaarlozen interacties tussen de electronen onderling en ook het hoekmoment, d.w.z., één electron beschouwen we als een "vrij deeltje in één dimensie" met periodieke randvoorwaarde van periode $2\pi r$.

a) Laat zien dat de energieniveaus van een enkel electron gegeven worden door

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2mr^2}k^2 \text{ met } k = \ldots, -2, -1, 0, +1, +2, \ldots,$$

waarbij m de massa van het electron voorstelt. Wat zijn de bijbehorende golffuncties? (Geef de positie van een electron aan via de hoekparameter ϑ.)

b) Beschouw de grondtoestand van het systeem. Hoe zijn de 18 electronen over de energieniveaus uit a) verdeeld? Wat is de waarde van de energie van de grondtoestand?

c) Wat is de laagste electronisch geëxciteerde toestand van het molecuul?

d) Wat is de golflengte van de electromagnetische straling waarmee het molecuul door absorptie van de grondtoestand naar de eerste aangeslagen toestand kan overgaan?

Ter herinnering:

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

Formele relaties:

$$\int z^n \sin z \, \mathrm{d}z = -z^n \cos z + n \int z^{n-1} \cos z \, \mathrm{d}z, \tag{1}$$

$$\int z^n \cos z \, \mathrm{d}z = z^n \sin z - n \int z^{n-1} \sin z \, \mathrm{d}z, \tag{2}$$

$$\ln \cos z = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \, 2^{2n-1} \, (2^{2^n} - 1) B_{2n}}{n(2n)!} \, z^{2n}, \tag{3}$$

$$\int_0^\infty \frac{\cos mt}{1+t^2} \, \mathrm{d}t = \frac{\pi}{2} \mathrm{e}^{-m}, \tag{4}$$

$$\int_0^\infty x^n \mathrm{e}^{-x/a} \, \mathrm{d}x = n! a^{n+1}, \tag{5}$$

$$\int_0^\infty x^{2n} \mathrm{e}^{-x^2/a^2} \, \mathrm{d}x = \sqrt{\pi} \frac{(2n)!}{n!} \left(\frac{a}{2}\right)^{2n+1}, \tag{6}$$

$$\int_0^\infty x^{2n+1} \mathrm{e}^{-x^2/a^2} \, \mathrm{d}x = \frac{n!}{2} a^{2n+2}. \tag{7}$$

Natuurkundige definities:

$$J(x,t) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right). \tag{8}$$

$$\text{Comptongolflengte van het electron } \frac{h}{mc} = 0.0242\text{Å} \tag{9}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$\hbar = 1.05457 \times 10^{-34}\text{Js}, \tag{11}$$

$$c = 2.99792 \times 10^{8}\text{m/s}, \tag{12}$$

$$m_e = 9.10938 \times 10^{-31}\text{kg}, \tag{13}$$

$$e = 1.60218 \times 10^{-19}\text{C}, \tag{14}$$

$$\epsilon_0 = 8.85419 \times 10^{-12}\text{C}^2/\text{Jm}, \tag{15}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = 1/137.036, \tag{16}$$

$$-E_1 = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2} = 13.6057\text{eV}. \tag{17}$$