Tentamen QM1a (9 November 2006), opgaven en antwoorden

— De vragen zijn conform het tentamen, hier zijn de oplossingen achter de deelvragen ingevoegd.
— De "opmerkingen" maken geen deel uit van de oplossing, maar zijn gegeven ter verduidelijking.

Opgave 1

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: Een toestand wordt beschreven door een golffunctie.

b. Welke eisen moeten aan de golffunctie gesteld worden?

Oplossing: De golffunctie moet normeerbaar zijn en voldoen aan de Schrödingervergelijking.

c. Hoe kan je de golffunctie fysisch interpreteren?

Oplossing: Volgens de Born interpretatie is de fysische betekenis van de golffunctie ψ dat $\psi^*\psi$ een waarschijnlijkheidsdichtheid voorstelt.

d. Wanneer heeft de golffunctie een oscillerend en wanneer een monotoon (dus alleen steigend of dalend) karakter?

Oplossing: Als de totale energie groter is dan de potentiële energie heeft de golffunctie een oscillerend, anders een monotoon karakter.

e. Wat is de Hamiltoniaan in de quantummechanica?

Oplossing: De Hamiltoniaan is de operator van de totale energie (dus kinetisch + potentieel).
Opmerking: Mag ook door een formule uitgedrukt worden.

f. 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.

g. 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.

h. Wat zijn de eigenschappen van een stationaire toestand?

Oplossing: Voor stationaire toestanden veranderen verwachtingswaarden van observabelen niet. Ze hebben scherp bepaalde energieën.

i. Wat gebeurt er met een toestand ψ_n van de harmonische oscillator als je de ladderoperatoren a_+ of a_- daarop toepast?

Oplossing: $a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$ en $a_-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$.
Opmerking: Het kan ook alleen in woorden gezegd worden. Dus de factoren $\sqrt{n+1}$ en $\sqrt{n}$ zijn niet geeist voor een punt.

j. Waarom stelt het vrij deeltje in de quantummechanica een groter probleem voor dan verwacht?

Oplossing: Omdat de stationaire oplossingen niet normeerbaar zijn.

Opgave 2

Beschouw het systeem van de oneindige put, d.w.z., een deeltje met massa m in de potentiaal:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : \quad -L/2 < x < L/2 \\ \infty & : \quad \text{anders.} \end{cases}$$

a. Toon dat

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \text{ met } n = 1, 3, 5, \ldots$$

en

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \text{ met } n = 2, 4, 6, \ldots$$

stationaire toestanden zijn van dit systeem en dat de energieën gegeven zijn als:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\, n^2.$$

Oplossing: De golffunctie ψ_n ingevuld in het linkerlid van de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking levert

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} = -\frac{\hbar^2}{2m}(-\frac{n\pi}{L}\frac{n\pi}{L})\,\psi_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,n^2\,\psi_n = E_n\psi_n,$$

verder is

$$\psi_n(-L/2) = \psi_n(L/2) = 0,$$

en

$$\int_{-L/2}^{L/2} |\psi_n(x)|^2\, dx = 1,$$

daarmee is het gestelde aangetoond.
Opmerking: Er wordt niet gevraagd de golffunctie *af te leiden* door de Schrödingervergelijking met randvoorwaarden op te lossen, ze is immers gegeven!

b. Bereken de onzekerheid in de plaats $\Delta x = \sqrt{< x^2 > - < x >^2}$ en in de impuls $\Delta p = \sqrt{< p^2 > - < p >^2}$ voor de toestand ψ_n met een willekeurig n. Is dat in overeenstemming met de onzekerheidsrelatie van Heisenberg? Voor welke n vind je de kleinste waarde van $\Delta x \Delta p$ een hoe groot is die ongeveer?

Oplossing: Het is fysisch evident dat $\langle x \rangle = 0$ en $\langle p \rangle = 0$. Verder is voor oneven n:

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \textstyle\int_{-L/2}^{L/2} \psi_n^*(x)\, x^2\, \psi_n(x)\, dx = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2} x^2 \cos^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\, dx = \\ &= \textstyle\frac{2L^2}{(n\pi)^3}\int_{-n\pi/2}^{n\pi/2} y^2 \cos^2 y\, dy = \frac{2L^2}{(n\pi)^3}\int_{-n\pi/2}^{n\pi/2} \frac{y^2}{2}\,[1+\cos(2y)]\, dy = \\ &= \textstyle\left(\frac{L}{2}\right)^2 \left[\frac{1}{3} - \frac{2}{(n\pi)^2}\right],\end{aligned}$$

en voor even n:

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \textstyle\frac{2L^2}{(n\pi)^3}\int_{-n\pi/2}^{n\pi/2} y^2 \sin^2 y\, dy = \frac{2L^2}{(n\pi)^3}\int_{-n\pi/2}^{n\pi/2} \frac{y^2}{2}\,[1-\cos(2y)]\, dy = \\ &= \textstyle\left(\frac{L}{2}\right)^2 \left[\frac{1}{3} - \frac{2}{(n\pi)^2}\right],\end{aligned}$$

(met gebruik van het gegeven lijstje van relaties) en

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_n^*(x)\,(2mE_n)\,\psi_n(x)\, dx = 2mE_n,$$

(gebruik makend van de Schrödingervergelijking en de normering van de golffuncties). Dus $\Delta x = \frac{L}{2}\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}}$, en asymptotisch voor grote n hebben we $\Delta x = \frac{L}{2\sqrt{3}}$, en $\Delta p = \frac{\pi\hbar n}{L}$.

De Heisenbergonzekerheidsrelatie is

$$\Delta x\, \Delta p = \frac{L}{2}\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}}\,\frac{\pi\hbar n}{L} = \frac{\hbar}{2}\left[\pi n\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}}\right] \geq \frac{\hbar}{2},$$

omdat

$$\pi n\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}} \geq 1,$$

is inderdaad aan de ongelijkheid voldaan en hebben we voor de grondtoestand een bijna gelijkheid. De kleinste waarde is $1.1357\ldots$ voor $n = 1$.

c. Hoe ziet de tijdsafhankelijke golffunctie van een stationaire toestand van de oneindige put eruit? Hoe schrijf je een golffunctie $\Psi(x,t)$ met willekeurige beginvoorwaarden $\Psi(x,0)$ in termen van de stationaire oplossingen? Welke stationaire oplossingen zijn belangrijk als je naar een beschrijving van

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} B(x + L/2) & : \; -L/2 < x < -L/4 \\ -Bx & : \; -L/4 < x < L/4 \\ B(x - L/2) & : \; L/4 < x < L/2 \end{cases}$$

zoekt (Hint: maak een tekening van deze golffunctie).

Oplossing: De golffunctie is:

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t}.$$

of

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t}.$$

De oplossing is een lineaire combinatie:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n \text{ oneven}} c_n\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t} + \sum_{n \text{ even}} s_n\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t}$$

met

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\int_{-L/2}^{L/2}\cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\Psi(x,0)dx.$$

en

$$s_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\int_{-L/2}^{L/2}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\Psi(x,0)dx.$$

Voor de voorbeeldgolffunctie gebruik je alleen oneven oplossingen (ten opzichte van het centrum van de put), dus functies met even n (de sin).

d. Beschouw nu de golffunctie met de beginvoorwaarden:

$$\Psi(x,0) = A\left[\psi_j(x) + \psi_l(x)\right]$$

met $l > j$. Normeer de functie. Bereken de waarschijnlijkheidsdichtheid en de verwachtingswaarde van de plaats als functie van de tijd. (Toevoeging: Integrale die niet van de tijd afhangen kan je laten staan - je hoeft deze nu niet expliciet te berekenen!) Toon dat je bij benadering voor $l = j + 1$ en $j \gg 1$ het gedrag kan beschrijven als een oscillatie met de hoekfrequentie

$$\omega = \frac{\pi^2 \hbar j}{mL^2}.$$

Oplossing: De golffunctie van de gevraagde toestand is

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_j(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} + \psi_l(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_l t} \right),$$

dus de waarschijnlijkheidsdichtheid is

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \frac{1}{2} \left(\psi_j^2 + \psi_l^2 + 2\psi_j \psi_l \cos\left[(E_l - E_j) \frac{t}{\hbar} \right] \right).$$

We krijgen voor de verwachte positie

$$\langle x \rangle = \cos\left[(E_l - E_j) \frac{t}{\hbar} \right] \int_{-L/2}^{L/2} x \psi_j(x) \psi_l(x)\, dx = \frac{L}{2} + A \cos\left[(E_l - E_j) \frac{t}{\hbar} \right].$$

Dus het deeltje gaat periodiek heen en weer met hoekfrequentie

$$\omega = \frac{1}{\hbar}(E_l - E_j) = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} l^2 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} j^2 \right) = \frac{\pi^2 \hbar}{2mL^2}(l^2 - j^2).$$

De benadering levert:

$$\omega = \frac{\pi^2 \hbar}{2mL^2}((j+1)^2 - j^2) \approx \frac{\pi^2 \hbar j}{mL^2}.$$

e. Toon aan dat de "herhalings-periode" van een willekeurige toestand $\Psi(x,t)$ in de oneindige put gegeven is door

$$T = \frac{4mL^2}{\pi \hbar},$$

dus naar deze tijd keert iedere golffunctie terug naar de begintoestand. (Hint: Vergelijk $\Psi(x,T)$ met $\Psi(x,0)$.)

Oplossing: De willekeurige golffunctie kan je schrijven als

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L} x \right) e^{-i(n^2 \pi^2 \hbar / 2ma^2)t} + \ldots.$$

Het is:

$$\frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2ma^2} T = \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2ma^2} \frac{4mL^2}{\pi \hbar} = 2\pi n^2$$

en dus voor ieder n:

$$\exp\left[-i \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2ma^2}(t+T) \right] = \exp\left[-i \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2ma^2}(t) \right] \exp\left[-i 2\pi n^2 \right] = \exp\left[-i \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2ma^2}(t) \right].$$

Opmerking: Het is voldoende dit voor een geval (cos of sin) op te schrijven.

Opgave 3

Beschouw de potentiaal

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < -L \qquad (I) \\ +V_0 & : \quad -L < x < L \qquad (II) \\ 0 & : \quad x > L \qquad (III) \end{cases} \tag{1}$$

voor een deeltje dat van links ($-\infty$) komt en energie E met $0 < E < V_0$ heeft.

a. Geef de oplossingen van de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking voor de drie gebieden aan.

Oplossing: Met de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = [E - V(r)]\,\psi,$$

vind je als oplossingen in (I):

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \text{ met } k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE},$$

in (II):

$$\psi_{II}(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, \text{ met } \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)},$$

en in (III):

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx}, \text{ met } k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE},$$

waarbij gebruik gemaakt is van het gegeven dat het deeltje van links komt.

b. Stel de randvoorwaarden in $x = \pm L$ op. Gebruik de vergelijkingen om een samenhang tussen de amplitude A van de van links inlopende golf en de amplitude F van de naar rechts uitlopende golf te vinden en toon dat de transmissiecoëfficiënt gegeven is door:

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}\sinh^2\left(\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right). \tag{2}$$

Oplossing: Continuïteit van de golffunctie in $x = -L$:

$$Ae^{-ikL} + Be^{+ikL} = Ce^{-\kappa L} + De^{+\kappa L} \tag{3}$$

en in $x = +L$:

$$Ce^{+\kappa L} + De^{-\kappa L} = Fe^{+ikL}. \tag{4}$$

Continuiteit van de eerste afgeleide in $x = -L$:

$$ik\left(Ae^{-ikL} - Be^{+ikL}\right) = \kappa\left(Ce^{-\kappa L} - De^{+\kappa L}\right) \tag{5}$$

en in $x = +L$:

$$\kappa\left(Ce^{+\kappa L} - De^{-\kappa L}\right) = ikFe^{+ikL}. \tag{6}$$

Uit (3) en (5) volgt:

$$2Ae^{-ikL} = \left(1 - i\frac{\kappa}{k}\right)Ce^{-\kappa L} + \left(1 + i\frac{\kappa}{k}\right)De^{\kappa L} \tag{7}$$

en met (4) en (6) vindt je:

$$2Ce^{\kappa L} = \left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right)Fe^{-ikL}, \tag{8}$$

$$2De^{-\kappa L} = \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right)Fe^{-ikL}. \tag{9}$$

C en D uit (8) en (9) kan je invullen in (7):

$$2Ae^{-ikL} = 2Fe^{ikL}\left[\cosh(2\kappa L) + i\frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k}\sinh(2\kappa L).\right] \tag{10}$$

De transmissiecoëfficiënt is dan:

$$\begin{aligned} T^{-1} &= \left|\frac{A}{F}\right|^2 = 1 + \left[1 + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{(2\kappa k)^2}\right]\sinh^2(2\kappa L) && (11) \\ &= 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}\sinh^2\left(\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right). && (12) \end{aligned}$$

c. Kan je alle parameters van de golffunctie uit de randvoorwaarden bepalen? Is de golffunctie normeerbaar? Hoe zal je dit probleem realistisch kunnen aangaan? Kunnen we met een zekere waarde van de energie rekenen? Wat betekent dat voor het berekenen van transmissie en reflectie?

Oplossing: Er is een onbepaaldheid vanwege een willekeurige factor (bijv. A), maar die heeft geen invloed op de fysisch meetbare transmissie en reflectie coëfficiënten omdat die alleen van amplitude *verhoudingen* afhangen.

De golffunctie is niet normeerbaar omdat we van een vrij deeltje ($\Psi(x,t) = A\exp(i(kx - \omega t))$ met constante "waarschijnlijkheidsdichtheid" $\Psi^*\Psi = |A|^2$) zijn uitgegaan. Eigenlijk zouden we met een golfpakket moeten rekenen, dat een superpositie van toestanden met verschillende energieën is. De berekeningen met vlakke golven zijn dus benaderingen voor deeltjes met energieën in de buurt van E.

d. In het boek wordt de transmissiecoëfficiënt voor een potentiaal:

$$V'(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < -L \qquad (I) \\ -V_0 & : \quad -L < x < L \qquad (II) \\ 0 & : \quad x > L \qquad (III) \end{cases}$$

en energie $E > 0$ berekent als:

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)}\sin^2\left(\frac{2L}{\hbar}\sqrt{2m(E + V_0)}\right).$$

Gebruik deze vergelijking om de transmissie (2) voor de potentiaal $V(x)$ in deze opgave te bepalen.

Oplossing: Je kan in deze vergelijking het teken van V_0 veranderen en $\sin(ix) = i\sinh(x)$ gebruiken.

e. Discusseer het gedrag van T uit deel b. als functie van de energie. Toon dat je bij benadering kan schrijven:

- voor $E \ll V_0$:

$$T = \frac{4E}{V_0 \sinh^2\left(2L\sqrt{2m(V_0)}/\hbar\right)}.$$

- voor $E \approx V_0$:

$$T^{-1} = 1 + \frac{2mV_0^2}{E}\frac{L^2}{\hbar^2}.$$

Oplossing: De benadering voor $E \ll V_0$ vindt je direct door $V_0 - E \approx V_0$ in te zetten. Voor kleine E kan je dan de 1 in vergelijking (12) verwaarlozen. De benadering voor $E \approx V_0$ vindt je door $\sinh x \approx x$ voor kleine x te gebruiken.

Uit de benaderingen kan je duidelijk zien dat de transmissiecoëfficiënt met de energie groeit en voor $E \to 0$ ook $T \to 0$ geldt.

Ter herinnering:

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

$$\sin 2x = 2 \sin x \cos x,$$
$$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x.$$