DEPARTEMENT NATUUR- EN STERRENKUNDE, FACULTEIT BÈTAWETENSCHAPPEN, UU.
IN ELEKTRONISCHE VORM BESCHIKBAAR GEMAAKT DOOR DE $\mathcal{TBC}$ VAN A−Eskwadraat.
HET COLLEGE NS-202B WERD IN 2005/2006 GEGEVEN DOOR DHR. J. KOENDERINK.

Uitwerking[1] Quantummechanica 1 (NS-202b) 10 november 2005

Opgave 1

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

a) Waarom heeft een in een eindig interval opgesloten deeltje een grondtoestand van eindige energie?

Uitwerking: De onzekerheidsrelatie $\Delta x\,\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ levert $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2L}$ als L de grootte van het interval is. Dan is de kinetische energie $E \geq \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8mL^2}$.
Opmerking Voor taalkundig begaafden: Je kunt hetzelfde ook in woorden zeggen.

b) Welke eisen moeten aan de golffunktie gesteld worden en waarom?

Uitwerking: De golffunktie moet normeerbaar zijn en voldoen aan de Schrödingervergelijking.

c) Op welke manier en in hoeverre kan de golffunktie enige fysische betekenis krijgen, ook als men complexe waarden moet toelaten?

Uitwerking: Volgens de Born interpretatie is de fysische betekenis van de golffunktie ψ dat $\psi^*\psi$ (dat is reëel) een waarschijnlijkheidsdichtheid voorstelt.

d) Waarom wordt de "δ–funktie put" wel met een "*ondiepe* put" vergeleken?

Uitwerking: Een potentiaalput heeft een energiespectrum met tenminste één (voor een "ondiepe put") niveau. De δ–funktie put heeft ook precies één gebonden toestand.

e) Wordt het "instorten van de golffunktie" (E: "*collapse of the wavefunction*") door de Schrödingervergelijking beschreven? Zowèl, hoe dan? Zo niet, waardoor dan?

Uitwerking: Nee, de Schrödingervergelijking beschrijft de tijdsevolutie van het systeem tussen twee metingen. Na een meting is de golffunktie plotseling veranderd omdat onze kennis van de toestand van het systeem door de meting plotseling anders is.

f) Wanneer heeft de golffunktie een oscillerend en wanneer een monotoon karakter?

Uitwerking: Als de kinetische energie groter is dan de potentiële energie heeft de golffunktie een oscillerend, anders een monotoon karakter.

g) Wat wordt bedoeld met "tunneling"? Is er een klassiek analogon?

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

h) Wanneer gaat de "merkwaardig product regel" $A^2+B^2=(A+\mathrm{i}B)(A-\mathrm{i}B)$ op voor operatoren A en B (niet méér dan één of twee regels afleiding!).

Uitwerking: We hebben de berekening

$$(A+\mathrm{i}B)(A-\mathrm{i}B) = AB - \mathrm{i}AB + \mathrm{i}BA + B^2 = A^2 + B^2 - \mathrm{i}(AB-BA) = A^2+B^2-\mathrm{i}[A,B],$$

dus de merkwaardig product regel gaat alleen op als de operatoren commuteren.
Opmerking: Voor rekenwonders: Hier wordt geen afleiding gevraagd dus je kunt ook het antwoord direct opschrijven en de conclusie trekken (dat wordt wèl gevraagd!).

[1] Deze uitwerkingen zijn met de grootste zorg gemaakt. In geval van fouten kan de $\mathcal{TBC}$ niet verantwoordelijk worden gesteld, maar wordt zij wel graag op de hoogte gesteld: `tbc@a-eskwadraat.nl`

i) Bereken (niet meer dan één of twee regels afleiding!) de commutator $[x, p]$.

Uitwerking: Met een *willekeurige* "testfunktie" f krijgen we de berekening

$$[x,p]\,f = (xp - px)\,f = (x\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x)\,f = x\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}(xf)}{\mathrm{d}x} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}(xf' - f - xf') = \mathrm{i}\hbar f,$$

(waarbij de Leibnitz kettingregel gebruikt is) zodat $[x, p] = \mathrm{i}\hbar$ omdat de testfunktie willekeurig gekozen mag worden.

Opmerking: Let op: Hier wordt nadrukkelijk een afleiding gevraagd, de (eventueel goede) uitkomst opschrijven is dus niet voldoende!

j) Waarom is het begrip "simultane meting van twee fysische grootheden" in de quantummechanica wèl problematisch en klassiek niet?

Uitwerking: Als de operatoren die corresponderen met twee fysische grootheden niet commuteren hangt het resultaat van een sequentie van meting van de één en de ander van de volgorde af. Het concept "simultane meting" kan dan geen betekenis toegekend worden. Dit probleem doet zich in de klassieke opvatting niet voor.

Opgave 2

Beschouw het systeem van het "deeltje in een doosje", d.w.z., een gebonden deeltje (potentiële energie $V(x) = 0$ voor $0 < x < L$, elders ∞). De massa van het deeltje is m.

a) Laat zien dat het energieschema gegeven is door

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,n^2, \quad n = 1, 2, \dots\ ,$$

en toon aan dat de stationaire toestanden gegeven worden door

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$

Uitwerking: De golffunktie ψ_n ingevuld in het linkerlid van de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking levert

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

verder is

$$\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0,$$

en

$$\int_0^L \psi_n(x)^2\,dx = 1,$$

daarmee is het gestelde aangetoond.

Opmerking: Merk op: Er wordt niet gevraagd de golffunktie *af te leiden* door de Schrödingervergelijking met randvoorwaarden op te lossen, ze is immers gegeven!

b) Schat met behulp van de onzekerheidsrelatie de energie van de grondtoestand en vergelijk dit met de exacte waarde.

Uitwerking: De golffunktie van de grondtoestand moet op de rand nul zijn en heeft een maximum in het midden. We kunnen de strooiing dus schatten als $\Delta x = \frac{L}{4}$. (De preciese voorfactor kan natuurlijk best een factor twee (maar geen factor tien) er naast zitten!) De impuls is met gelijke kans $\pm p$, dus we kunnen de strooiïng schatten als $\Delta p = p$ (kan er natuurlijk ook wel een beetje naast zitten, maar zeker geen factor tien). Nu is $E = \frac{p^2}{2m}$. We schatten dus $\Delta x = L/4$ en $\Delta p = p = \sqrt{2mE}$. Dan krijgen we voor de actie:

$$\Delta x\,\Delta p = \frac{L}{4}\sqrt{2mE} = L\sqrt{\frac{mE}{8}} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

en we verwachten dat (voor de grondtoestand) er een bijna gelijkheid zal zijn. We krijgen dan ook

$$L\sqrt{\frac{mE}{8}} \approx \frac{\hbar}{2},$$

waaruit voor de energie van de grondtoestand volgt $E \approx \frac{2\hbar^2}{mL^2}$, terwijl de werkelijke waarde $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ is. We zitten er dus (maar) een factor $\frac{\pi^2}{4}$ (dat is bijna 2) naast.

c) Bereken de onzekerheid in de plaats en in de impuls en controleer de onzekerheidsrelatie van Heisenberg voor de stationaire toestanden als funktie van n. Vergelijk met de klassieke verwachting. (Aanwijzing: Geef van voorkomende constanten aan hoe ze asymptotisch van n afhangen en wat extreme waarden (ongeveer) zijn.)

Uitwerking: Het is fysisch evident dat $\langle x\rangle = \frac{L}{2}$ en $\langle p\rangle = 0$. Verder is

$$\langle x^2\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x)\,x^2\,\psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \frac{2}{L}\int_0^L x^2\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\,\mathrm{d}x = L^2\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right],$$

(met gebruik van het gegeven lijstje van integralen) en

$$\langle p^2\rangle = \int_0^L \psi_n^*(x)\,(2mE_n)\,\psi_n(x)\,\mathrm{d}x = 2mE_n,$$

(gebruik makend van de Schrödingervergelijking en de normering van de golffunkties). 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

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

(kleinste waarde 1.1357... voor $n = 1$) is inderdaad aan de ongelijkheid voldaan en hebben we voor de grondtoestand een bijna gelijkheid. **Opmerking:** Het al voldoende aan te geven dat de kleinste waarde van $\Delta x\,\Delta p$ iets boven $\frac{\hbar}{2}$ ligt en asymptotisch evenredig met n toeneemt. **Oplossing 2$^{\text{de}}$ deel van deze vraag:** Klassiek is de plaats uniform verdeeld, zodat $\langle x\rangle = \frac{L}{2}$ en

$$\langle x^2\rangle = \int_0^L \frac{1}{L}x^2\,\mathrm{d}x = \frac{L^2}{3},$$

dus $\Delta x = \frac{L}{2\sqrt{3}}$, en de impuls is met 50% kans $+\sqrt{2mE}$ en $-\sqrt{2mE}$, zodat $\langle p\rangle = 0$ en

$$\langle p^2\rangle = \frac{1}{2}(+\sqrt{2mE})^2 + \frac{1}{2}(-\sqrt{2mE})^2 = 2mE = \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{L^2},$$

dus $\Delta p = \frac{\pi\hbar n}{L}$. We zien dat de asymptotische quantummechanische verwachting voor grote energie precies met de klassieke verwachting overeenstemt.

d) Toon aan dat de klassieke "ratel(hoek–)frequentie" (één periode is één maal heen en weer) gegeven is door

$$\omega_{\text{klassiek}} = \frac{2\pi}{L}\sqrt{\frac{E}{2m}}.$$

Uitwerking: De snelheid is $v = \frac{p}{m} = \frac{\sqrt{2mE}}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$. De periode (tijd nodig om één maal heen en weer te gaan) is dus $T = \frac{2L}{v} = L\sqrt{\frac{2m}{E}}$. Daarmee wordt de gevraagde hoekfrequentie $\omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi}{L}\sqrt{\frac{E}{2m}}$ waarmee het gestelde aangetoond is.

e) Beschouw nu de golffunktie bestaande uit de lineaire combinatie met gelijke coëfficiënten van de n^{de} en de $(n+1)^{\mathrm{ste}}$ toestand voor $n \gg 1$. Bereken de verwachtingswaarde voor de positie als funktie van de tijd. Vergelijk met onderdeel **d**. (Aanwijzing: Het is niet nodig optredende constanten via integratie expliciet te berekenen als je kunt laten zien dat ze toch niet van de tijd afhangen en ongelijk nul zijn!)

Uitwerking: De golffunktie van de gevraagde toestand is

$$\chi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t} + \psi_{n+1}(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{n+1}t}\right),$$

dus de waarschijnlijkheidsdichtheid is

$$\chi^*(x,t)\chi(x,t) = \frac{1}{2}\left(\psi_n^2 + \psi_{n+1}^2 + 2\psi_n\psi_{n+1}\cos[(E_{n+1}-E_n)\frac{t}{\hbar}]\right).$$

We krijgen voor de verwachte positie

$$\langle x\rangle = \frac{\cos[(E_{n+1}-E_n)\frac{t}{\hbar}]}{2}\int_0^L x\psi_n(x)\psi_{n+1}(x)\,\mathrm{d}x = A\,\cos[(E_{n+1}-E_n)\frac{t}{\hbar}].$$

Opmerking: Merk op: De waarde van de integraal is $-\frac{4L}{\pi^2}\frac{n(n+1)}{(1+2n)^2}$, maar het is al voldoende om op te merken dat een een factor is die niet van de tijd afhangt en ongelijk nul is, en er wordt niet gevraagd ze expliciet te berekenen.

vervolg oplossing: Dus het deeltje gaat periodiek heen en weer met amplitude $\frac{L}{\pi^2}$ (voor grote n; aangeven dat de amplitude eindig is is al voldoende) en hoekfrequentie

$$\omega = \frac{1}{\hbar}(E_{n+1}-E_n) = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n+1)^2 - \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2\right) \approx \frac{\pi^2\hbar}{2mL^2}2n = \frac{\pi^2\hbar n}{mL^2},$$

terwijl de klassieke verwachting

$$\omega = \frac{2\pi}{L}\sqrt{\frac{E_n}{2m}} = \frac{\pi^2\hbar n}{mL^2},$$

is. Dat komt dus precies met de hoekfrequentie van de superpositie van ψ_n en ψ_{n+1} overeen.

Opgave 3

Beschouw de verstrooiïng aan de stap–potentiaal

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \quad \text{voor } x<0,\\ V(x) &= V_0>0 \quad \text{voor } x\geq 0, \end{aligned}$$

voor een deeltje dat van links $(-\infty)$ komt en kinetische energie $E>0$ heeft.

a) Los de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking voor $x<0$ en $x>0$ afzonderlijk op. **Uitwerking:**

De tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking links is

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_-}{\mathrm{d}x^2} = E\psi_-,$$

met oplossing

$$\psi_-(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \text{ met } k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE},$$

en rechts

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_+}{\mathrm{d}x^2} + V_0\psi_+ = E\psi_+,$$

met oplossing

$$\psi_+(x) = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}lx}, \text{ met } l = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-V_0)},$$

waarbij gebruik gemaakt is van het gegeven dat het deeltje van links komt. Merk op dat l imaginaire waarden zal aannemen voor $E<V_0$, we krijgen dan ook automatisch de juiste oplossing (met $\psi_+(+\infty)=0$).

b) Stel de randvoorwaarden in $x = 0$ op. Hoe gebruiken we de randvoorwaarden in $x = \pm\infty$?

Uitwerking: Eén randvoorwaarde is continuïteit van de golffunktie in $x = 0$. Dit geeft aanleiding tot de vergelijking

$$\psi_-(0) = \psi_+(0), \text{ of } A + B = C.$$

De andere randvoorwaarde is continuiteit van de eerste afgeleide. Dit geeft aanleiding tot de vergelijking

$$\frac{\mathrm{d}\psi_-}{\mathrm{d}x}|_{x=0} = \frac{\mathrm{d}\psi_+}{\mathrm{d}x}|_{x=0}, \text{ of } k(A - B) = lC,$$

De oplossing is dus

$$A = \frac{1}{2}(1 + \frac{l}{k})C,$$
$$B = \frac{1}{2}(1 - \frac{l}{k})C,$$

waarbij C nog een willekeurig te kiezen (eventueel complexe) constante is. De randvoorwaarden in $x = -\infty$ gebruiken we niet omdat we geen normeerbare oplossingen hebben. De randvoorwaarde in $x = +\infty$ gebruiken we in het geval $E < V_0$, we kiezen dan de oplossing $\mathrm{e}^{\lambda x}$ ($\lambda = \mathrm{i}\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)} = -\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}$) en niet de oplossing $\mathrm{e}^{-\lambda x}$ (ook een oplossing van de Schrödingervergelijking, maar één die naar ∞ gaat voor $x = +\infty$).

c) Schrijf nu de golffunktie op. Waarom is ze niet normeerbaar? Welke aspecten van de golffunktie blijven noodzakelijk onbepaald? Waarom heeft dit geen fysische consequenties?

Uitwerking: De golffunktie is

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{C}{2}((1 + \frac{l}{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + (1 - \frac{l}{k})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}), \text{ voor } x < 0 \\ &= C\mathrm{e}^{\mathrm{i}lx} \text{ voor } x > 0,\end{aligned}$$

waarbij k en l reeds gegeven zijn in het antwoord op onderdeel **a**. Er is een onbepaaldheid vanwege de willekeurige factor C, maar die heeft geen invloed op de fysisch meetbare transmissie en reflectie coëfficiënten omdat die alleen van amplitude *verhoudingen* afhangen. De golffunktie is niet normeerbaar omdat we van een vrij deeltje ($\Psi(x,t) = A\exp(\mathrm{i}(kx - \omega t))$ met constante "waarschijnlijkheidsdichtheid" $\Psi^*\Psi = |A|^2$) zijn uitgegaan i.p.v. een golfpakketje.

d) Wat zijn de reflectie en transmissiecoëfficiënten? Bespreek het verloop als funktie van de kinetische energie van het deeltje.

Uitwerking: Links van de oorsprong kunnen we de amplitudes van de gereflecteerde en invallende golf direct vergelijken. Voor de reflectiecoëfficiënt krijgen we dus

$$R = \left|\frac{1 - \frac{l}{k}}{1 + \frac{l}{k}}\right|^2 = \left|\frac{k - l}{k + l}\right|^2,$$

daarmee wordt de transmissiecoefficient

$$T = 1 - R.$$

Opmerking: Opmerking: Het is *fout* om hier $T = |C/A|^2$ te zetten. Als je het op deze manier wilt doen kun je het beste van de waarschijnlijkheidsstromen (uitdrukking in de tabel gegeven) uitgaan. **vervolg oplossing:** De waarde van $\frac{l}{k}$ hangt alleen van de verhouding $\frac{E}{V_0}$ af, want $\frac{l}{k} = \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}$. Als $E > V_0$ gaat de reflectie monotoon naar nul als E naar ∞. Als $l = \mathrm{i}\lambda$ (zuiver imaginair, d.w.z., het geval $E < V_0$, komt er

$$R = \left|\frac{k - \mathrm{i}\lambda}{k + \mathrm{i}\lambda}\right|^2 = \left(\frac{k - \mathrm{i}\lambda}{k + \mathrm{i}\lambda}\right)^* \left(\frac{k - \mathrm{i}\lambda}{k + \mathrm{i}\lambda}\right) = \left(\frac{k + \mathrm{i}\lambda}{k - \mathrm{i}\lambda}\right)\left(\frac{k - \mathrm{i}\lambda}{k + \mathrm{i}\lambda}\right) = 1,$$

d.w.z., alles wordt gereflecteerd (zoals we fysisch ook verwachten) en $T = 1 - 1 = 0$, dus er komt niets door.

e) Laat zien dat de transmissie in het geval $E < V_0$ nul is. Hoe kan het dan dat de *golffunktie* toch *ongelijk nul* is op het oneindig interval $(0, +\infty)$?

Uitwerking: Er is in dit geval toch geen transmissie want $\psi(\infty) = 0$ voor $E < V_0$. De golf rechts van de oorsprong transporteert niets (de waarschijnlijkheidsstroom (uitdrukking gegeven in de tabel!) is nul omdat $\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} = 0$ voor reëele ψ). Dus ook al kan het deeltje wel "door de muur lekken", het kan toch niet "ontsnappen".

Opmerking: Antwoorden zoals "*dat komt door het tunneleffect*", of "*in de QM kan nu eenmaal alles*" zijn niet konkreet genoeg!

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:

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

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

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

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

Natuurkundige definitie:

$$J(x,t) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right). \tag{5}$$