Tentamen TC1 15 januari 2010, 14.00-17.00 uur, zaal C2 (Gorlaeus).

1. **Basisinzichten**

Geef van de onderstaande beweringen aan of ze waar of niet waar zijn (er hoeven geen argumenten gegeven te worden; het mag wel, maar doe dit pas op het moment dat je klaar bent met de rest van het tentamen):

(a) Het is onmogelijk om het golfkarakter van electronen waar te nemen met behulp van een één-spleet diffractie-experiment. Dit kan alleen door een twee-spleet diffractie-experiment uit te voeren.

(b) Volgens Planck en Einstein zijn er geen aanwijzingen te vinden dat electromagnetische golven zich quantummechanisch gedragen. Alle aspecten van electromagnetische golven kunnen volledig uitgelegd worden op basis van de klassieke theorie van Maxwell.

(c) Voor hermitische operatoren geldt dat eigenfuncties behorende bij verschillende eigenwaarden orthogonaal zijn.

(d) De meest waarschijnlijke waarde van een individuele meting aan quantummechanisch systemen is de verwachtingswaarde van de desbetreffende hermitische operator.

(e) De impuls in een quantum mechanisch systeem is altijd gequantiseerd.

(f) De energie van het electron in het waterstofatoom is hoger in de 2p dan in de 2s eigenfunctie.

(g) Het is mogelijk dat de eigenwaarden van een hermitische operator complex zijn.

(h) De waarschijnlijkheid van tunnelen door een barrière voor een waterstofatoom is hetzelfde als voor een deuterium atoom.

(i) Newtons postulaat $ma=F$ voor macroscopische lichamen volgt uit de quantummechanica.

(j) Volgens de Born-Oppenheimer benadering is de elektronische energie parametrisch afhankelijk van de kerncoördinaten.

(k) Het is mogelijk de grond-toestand energie te vinden door de verwachtingswaarde van de hamiltoniaan voor alle mogelijk kwadratisch integreerbare, genormeerde functies, die voldoen aan de randvoorwaarden te berekenen en daaruit de laagste verwachtingswaarde te selecteren.

(l) Voor deeltjes met een halftallige spin (zoals electronen) blijkt dat de golffunctie niet verandert als twee identieke deeltjes verwisseld worden.

(m) Volgens de MO-LCAO theorie heeft de HOMO voor homonucleaire twee-atomige moleculen geen knoopvlak die door de bindingsas gaat.

(n) De atomaire orbitalen (AO's) overlap zou niet veranderen door wijziging van de angular structuur van een molecuul.

(o) De verwachtingswaarde voor systemen in stationaire toestanden kan óók voor tijd-onafhankelijk operatoren in de tijd veranderen.

Totaal vraag 1: 20 punten, 2.5 punt aftrek per niet juist antwoord.

2. **Operatoren en eigenfuncties**

Gegeven de twee operatoren $\hat{A} = y\dfrac{\partial}{\partial x}$ en $\hat{B} = x\dfrac{\partial}{\partial y}$, en de functie $f(x,y) = e^{-a(x^2+y^2)}$ (a is een parameter)

Bereken (a) $(\hat{A}+\hat{B})f(x,y)$ (3 punten)

(b) $\hat{A}\hat{B}f(x,y)$ (3 punten)

(c) $\hat{B}\hat{A}f(x,y)$ (3 punten)

Beantwoord de vraag

(d) Kan je functies vinden die eigenfuncties van zowel $\hat{A}$ als $\hat{B}$ zijn? Waarom wel/niet? (3 punten)

(e) Onder welke voorwaarde is $f(x,y) = e^{-a(x^2+y^2)}$ een eigenfunctie van de operator $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$? (3 punten).

Totaal vraag 2: 15 punten.

3. **Deeltje in een 2D-doos**

De energie van een deeltje in een 2D-doosje (V=0 in doos, oneindig groot buiten doos) kan worden geschreven als:

$$E = \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2}\right)$$

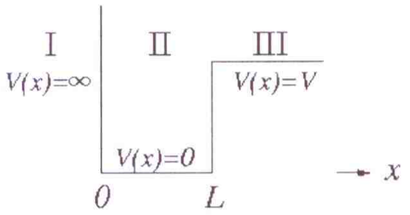
(a) Beschouw het geval: L1 = L2. Geef een voorbeeld van degeneratie.

(b) Is degeneratie ook mogelijk als L1 $\neq$ L2? Zo ja, geef een voorbeeld.

Totaal vraag 3: 10 punten.

4. **Deeltje in potentiaal put**

Voor een potentiaal (zie ook figuur) geldt $V(x)=V$ voor $x>L$ (gebied III), $V(x)=0$ voor $0\leq x\leq L$ (gebied II), en $V(x)=\infty$ voor $x<0$ (gebied I).



(a) Stel de Schrödinger vergelijking op voor een deeltje met massa m onder invloed van deze potentiaal. Doe dit apart voor gebied II en III. (5 punten)

De oplossing van de Schrödinger vergelijking is voor de energie $0<E<V$ in gebied II en III steeds een lineaire combinatie van exponentiële functies met positieve en negatieve exponent. Het deeltje kan zich niet in gebied I bevinden:

$$\psi^{I}(x)=0$$
$$\psi^{II}(x)=A'e^{-ikx}+B'e^{ikx}$$
$$\psi^{III}(x)=A''e^{-\kappa x}+B''e^{\kappa x}$$

(b) Laat door substitutie in de Schrödinger vergelijking zien wat de relatie tussen k en de energie E en de massa m van het deeltje is. En wat is de relatie tussen κ en de energie E en de massa m? (5 punten)

(c) Voor het gegeven energie interval is de constante B'' nul. Waarom? (5 punten)

Toepassen van de voorwaarden van continuïteit van de eigenfunctie ter plekke van $x=0$, en van continuïteit van de eigenfunctie en zijn eerste afgeleide ter plekke van $x=L$ levert drie vergelijkingen op.

(d) Geef deze drie vergelijkingen. (5 punten)

(e) Geef een schets van de (genormaliseerde) golffunctie met de laagste energie. Verklaar kort. (5 punten)

(f) Schets ook de (genormaliseerde) golffunctie met de laagste energie in het geval dat $V(x)=\infty$ voor $x<0$ en $x>L$ (gebieden I en III) en $V(x)=0$ voor $0\leq x\leq L$ (gebied II). Is de laagste energie voor een deeltje in de