Tentamen TC1, Dinsdag 25 oktober 2016, 14:00-17:00 uur, Gorlaeus, HAVZ.

1. **Basisinzichten**

(a) Als gevolg van de Born interpretatie van Ψ, moet Ψ aan wiskundige voorwaarden voldoen. Wat zijn deze voorwaarden? (2.5 punt)

(b) Wat is de fysische betekenis van de verwachtingswaarde van een operator $\hat{A}$ in een staat Ψ, en hoe kan die verwachtingswaarde worden uitgerekend? (2.5 punt)

(c) Aan welke randvoorwaarde(n) moet(en) de eigentoestanden van de één-dimensionale harmonische oscillator voldoen? (2.5 punt)

(d) Een kwantummechanische harmonische oscillator heeft een nulpuntsenergie. Waar of niet waar? Verklaar uw antwoord op basis van de onzekerheidsrelatie van Heisenberg. (2.5 punt)

(e) Wanneer noemen we de observeerbare grootheden die bij twee operatoren horen *compatibel*? (2.5 punt)

(f) Iedere functie φ die een kwantummechanisch systeem beschrijft kan geschreven worden als een lineaire combinatie van de eigenfuncties van een Hermitische operator. Waar of niet waar? Verklaar je antwoord. (2.5 punt)

(g) Beschouw de volgende superpositie van twee vlakke golven met energieën E_1 en E_2 :

$$\Psi(x,t) = Ae^{ik_1x}e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + Be^{ik_2x}e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}$$

Laat zien dat dit geen stationaire toestand is. (5 punten)

(h) Een operator wordt hermitisch genoemd als geldt:

$$\int (\hat{H}\phi)^* \psi dx = \int \phi^* (\hat{H}\psi) dx$$

Laat zien dat twee eigenfuncties van een Hermitische operator die corresponderen met verschillende eigenwaarden orthogonaal zijn. (Gebruik de gegeven definitie van Hermiticiteit voor uw antwoord) (5 punten)

Totaal vraag 1: 25 punten.

2. Operatoren, eigenfuncties en eigenwaarden

2.1 Gegeven: twee operatoren die een gemeenschappelijk stel eigenfuncties hebben. Laat zien dat deze twee operatoren commuteren.

(4 punten)

2.2 Laat zien dat de volgende identiteit geldt:

$$[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}$$

(4 punten)

2.3 Gegeven de impuls operator $\hat{p}_x$, beschouw de volgende functies:

a) $f(x) = e^{-ax}$

b) $g(x) = e^{-iax}$

c) $h(x) = e^{-ax^2}$

waar a een reële parameter is.

Bepaal welke van deze functies een eigenfunctie van de operator $\hat{p}_x$ is, en wat de behorende eigenwaarden zijn.

(6 punten)

2.4 De functie $\Psi(x) = Dsin(\frac{3\pi x}{l})$ is een eigenfunctie van de Hamiltoniaan voor een deeltje in één-dimensionele doos.

a. Wat is de bijbehorende energie?

(3 punten)

b. Bepaal de coëfficiënt D door het opleggen van de normalisatie voorwaarde.

Hint: gebruik de standaardintegraal: $\int sin^2(bx)dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2bx)}{4b}$

(3 punten)

2.5 Beschouw de operator $\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$ en de functie $sin\theta e^{-\alpha r}$, waarin α een reële parameter is. Is die functie een eigenfunctie van de operator? Als de functie een eigenfunctie is, wat is dan de bijbehorende eigenwaarde?
(2 punten)

2.6 Bepaal de commutator $\left[\frac{d^2}{dx^2}, x\right]$ door werking op een willekeurige functie $f(x)$.
(3 punten)

Totaal vraag 2: 25 punten.

3. Eenvoudige QM systemen

3.1 Vrij deeltje in twee dimensies (x,y)

a. Stel de tijdsonafhankelijke Schrödinger vergelijking op voor een vrij deeltje dat in het x, y-vlak beweegt.
(3 punten)

b. In het algemeen worden de corresponderende eigentoestanden gegeven door functies van x en y: $\psi\,(x, y)$. Gegeven de vorm van de Hamiltoniaan, laat zien dat het mogelijk is om de variabelen te scheiden en te transformeren van de oplossing van de twee-dimensionale differentiaalvergelijking naar de oplossing van twee één-dimensionale vergelijkingen.
(6 punten)

c. Beschouw eerst de één-dimensionale vergelijking in de x-richting. Laat zien dat $exp(ikx)$ een eigentoestand van de corresponderende Hamiltoniaan is.
(2 punten)

d. Wat is de bijbehorende eigenwaarde?
(2 punten)

e. Is de energie van dit vrij deeltje gekwantiseerd?
(2 punten)

f. Geef één reden op grond waarvan de energie van een vrij deeltje positief moet zijn.
(3 punten)

3.2 Deeltje in een doos.

a. Stel de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking op voor een deeltje in een potentiaal: $V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 \leq x \leq l \\ \infty, & x > l \end{cases}$
(3 punten)

b. Een algemene oplossing van die Schrödinger vergelijking in het gebied waar de potential nul is, kan worden geschreven als

$$\Psi(x) = Ccos(kx) + Dsin\,(kx)$$

Gebruik de randvoorwaarden aan de golffunctie om C en k te bepalen.
(3 punten)

c. Laat zien dat de energie van het systeem gekwantiseerd is.
(3 punten)

d. Beschouw een elektron in een doos met lengte 10 Bohr. Reken de energie uit van het foton nodig om het elektron van de toestand n=3 naar de toestand n=4 te exciteren. Het is handig om de energie in atomaire eenheden te berekenen (a.u.): in deze a.u. wordt $\hbar$=1, de elektron massa m=1 a.u., and the Bohr radius a_0=1 a.u. De atomaire energie-eenheid heet de Hartree (1 Hartree ~27,2 eV).
(3 punten)

Totaal vraag 3: 30 punten.

4. **Het waterstofatoom.**

4.1 De Schrödingervergelijking (SV) voor het H-atoom is

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}\right]\psi = E\psi$$

In welke set coördinaten laat deze vergelijking zich gemakkelijk oplossen, en waarom?

(3 punten)

4.2 Beschouw de aangeslagen *2s* eigentoestand van de H-atoom Hamiltoniaan (n = 2, l = 0):

$$\psi_{200}(r,\theta,\phi) = \left(\frac{1}{32\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

a. Voor welke waarde(n) van *r* heeft deze golffunctie nulpunten? (3 punten)

b. Is dit ook een eigenfunctie van de potentiaal operator? Verklaar je antwoord.
(3 punten)

c. Is dit een eigenfunctie van andere operatoren? Zo ja, van welke operatoren? Wat zijn de bijbehorende eigenwaarden?
(3 punten)

4.3 Beschouw de $2p_z$ eigenfunctie:

$$\psi_{2p_z}(r,\theta,\phi) = [R_{21}(r)][Y_1^0(\theta,\phi)] = \left[\left(\frac{1}{24}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\right]\left[\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta\right]$$

a. Stel de radiële distributiefunctie $P(r) = r^2R^2(r)$ op voor deze eigenfunctie.
(3 punten)

b. Bereken de afstand van de kern voor dit geval, waarin de radiële distributiefunctie *P(r)* van deze toestand één of meer maxima heeft.
(5 punten)

Totaal vraag 4: 20 punten.