Universiteit Utrecht ***Faculteit Natuur- en Sterrenkunde***

KWANTUMMECHANICA I

College – Werkcollege

Prof. Dr. H. W. de Wijn

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H}\psi$$

Julius Instituut, Utrecht, MMII

ISBN 90-393-2695-9

9 789039 326954

Collegesyllabus Kwantummechanica I

Faculteit Natuur- en Sterrenkunde, Universiteit Utrecht
ISBN 90-393-2695-9

1 PUNTSGEWIJZE SAMENVATTING

Planck's kwantumhypothese; Fotonen

- ☐ De zwarte straler werd in de tweede helft van de negentiende eeuw uitgebreid onderzocht, experimenteel door o.a. Kirchhoff en Stefan, en theoretisch thermodynamisch door Boltzmann. Dit leidde tot inzicht over de emittantie $R(\lambda, T)$ als functie van de golflengte λ en de temperatuur T, de wet van Stefan-Boltzmann, $R_{\text{tot}}(T) = \sigma T^4$, voor de totale emittantie, en de verschuivingswet van Wien, $\lambda_{\max} T = b$, voor het maximum van $R(\lambda, T)$.
- ☐ Rayleigh en Jeans probeerden een uitdrukking voor $R(\lambda, T)$ af te leiden door aftellen van trillingsmodes en toekenning, volgens de concepten van de klassieke fysica, van een energie $k_{\mathrm{B}}T$ per mode. Hun uitdrukking divergeert voor kleine golflengte (UV-catastrofe).
- ☐ Planck komt in december 1900 met de kwantumhypothese: De energie van oscillatoren heeft slechts discrete waarden $n\varepsilon_0$. Indien hij bovendien aanneemt dat $\varepsilon_0 = h\nu = hc/\lambda$, dan bereikt hij uitstekende overeenstemming met de experimenten aan de zwarte straler. De constante van Planck h is een nieuwe natuurconstante ($\hbar = h/2\pi$).
- ☐ Het foto-elektrisch effect is de emissie van elektronen uit een geleidende vaste stof onder invloed van licht. Experimenten tonen aan dat, in strijd met de klassieke opvattingen, (1) er een drempelfrequentie is waar beneden geen emissie plaatsvindt, (2) de kinetische energie van de uitgezonden elektronen lineair met de frequentie toeneemt, en (3) deze energie onafhankelijk is van de intensiteit van het licht.
- ☐ Voortbouwend op Planck's hypothese poneert Einstein in 1905 dat het stralingsveld zelf gekwantiseerd is in kwanta $h\nu$ (fotonen).
- ☐ In 1907 laat Einstein zien dat de soortelijke warmte van vaste stoffen in overeenstemming is met energiekwantisatie volgens Planck.
- ☐ Het Compton effect uit 1923, de elastische verstrooiing van een foton aan een elektron, bewijst het deeltjeskarakter van straling. Het botsingsproces voldoet aan behoud van energie en impuls.

Bohr's model voor het H-atoom

- ☐ Aan het einde van de negentiende eeuw was enig inzicht verkregen in de spectra van atomen. Balmer (1885), Lyman en anderen hadden gevonden dat de spectraallijnen van H voldoen aan het verschil van twee "termen,"

$$\frac{1}{\lambda_{ab}} = R_{\mathrm{H}} \left(\frac{1}{n_a^2} - \frac{1}{n_b^2} \right) \ ,$$

waarin R_{H} de Rydberg-constante, en n_a en n_b geheel ($n_a = 2$ geeft de Balmer-reeks).

- ☐ Het elektron was ontdekt in 1897. Experimenten in 1911 van Rutherford toonden aan dat in atomen de positieve lading geconcentreerd is in een kern met zeer kleine afmeting. De consequentie hiervan is dat de veel lichtere elektronen om de kern draaien. Volgens de klassieke Maxwell-theorie zijn deze banen niet stabiel vanwege emissie van straling.

- ☐ Bohr combineerde in 1913 Rutherford's atoom met Planck's kwanta en Einstein's fotonen in zijn model voor het H-atoom. Zijn aannames zijn: (1) Het elektron draait in cirkelvormige banen om een positieve kern en ondervindt in zijn beweging de Coulomb-potentiaal; (2) Alleen banen met een baanimpulsmoment $L = n\hbar$, met n geheel, zijn stabiel; (3) Het elektron straalt geen energie uit in een stabiele baan, maar emissie en absorptie van energie is mogelijk volgens $h\nu = E_a - E_b$ bij overgang van de ene naar een andere stabiele baan. Bohr's theorie verklaart de Balmer-formule, evenals continue spectra, maar niet waarom deze banen stationair zijn.

- ☐ Ook de afmetingen van een atoom volgens Bohr zijn van de goede grootte: De straal van de eerste Bohrse baan van H is $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_\mathrm{e}e^2 \approx 0.53 \times 10^{-10}$ m. De snelheid in deze baan bedraagt $v_0 = \alpha c$, met $\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c \approx 1/137$ de fijnstructuurconstante. Relativistische correcties zijn dus klein. De correctie voor de eindige kernmassa, d.w.z. vervanging van m_e door de gereduceerde massa $\mu = m_\mathrm{e}/(1 + m_\mathrm{e}/M)$, heeft geleid tot de ontdekking van deuterium.

- ☐ Correspondentie-principe van Bohr: De resultaten van kwantummechanica benaderen die van de klassieke theorie in de limiet van grote kwantumgetallen.

- ☐ Een direct bewijs voor de energiekwantisatie van atomen werd in 1914 geleverd door het experiment van Frank en Hertz, de inelastische botsing van elektronen met Hg-atomen.

Hypothese van de Broglie

- ☐ De Broglie's hypothese uit 1923 zegt dat materiële deeltjes evenals elektromagnetische straling golfeigenschappen hebben. Er bestaat een volledige dualiteit tussen golven en deeltjes, waarin de relatie $\lambda = h/p$ niet alleen aan fotonen, maar ook aan materiedeeltjes wordt toegekend. We schrijven ook wel $p = \hbar k$, met $k = 2\pi/\lambda$. De vector $\mathbf{k}$ wijzend in de voortplantingsrichting heet de golfvector.

- ☐ Bohr's baankwantisatie stemt overeen met de Broglie's hypothese.

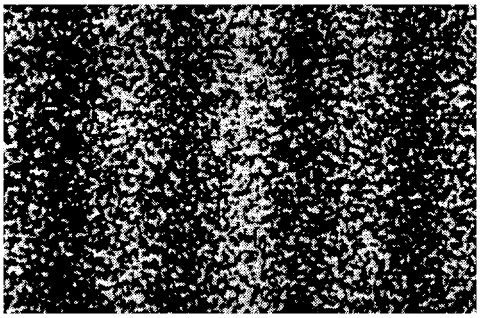
- ☐ De proef van Davisson en Germer uit 1927 over de verstrooiing van elektronen aan het oppervlak van een kristal bevestigt de Broglie's hypothese.

Golffuncties

- ☐ In het twee-spleten-experiment (Young) wordt een diffractiepatroon van deeltjes (fotonen of elektronen) gevonden ten gevolge van interferentie van golven afkomstig van de twee spleten. Het diffractiepatroon bestaat ook bij zeer lage intensiteit. Een individueel deeltje wordt evenwel waargenomen op een bepaalde plaats.

- ☐ Aan een deeltje wordt een golffunctie ofwel toestandsfunctie $\Psi(\mathbf{r}, t)$ toegekend, die alle informatie bevat die wij over het deeltje te weten kunnen komen.

- ☐ In de statistische interpretatie (Born, 1926) heeft de golffunctie de betekenis van een waarschijnlijkheidsdichtheidsamplitude. $P(\mathbf{r}, t)\mathrm{d}\mathbf{r} = \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)\mathrm{d}\mathbf{r} = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r}$ is de waarschijnlijkheid het deeltje op tijdstip t in een volume-element $\mathrm{d}\mathbf{r}$ op plaats $\mathbf{r}$ te vinden.



Het diffractiepatroon in het twee-spleten-experiment uitgevoerd met elektronen.
[A. Tonomura *et al.*, American Journal of Physics **57**, 117 (1989)].

☐ De statistische interpretatie impliceert normering, d.w.z. $\int |\Psi(\mathbf{r},t)|^2\,\mathrm{d}\mathbf{r} = 1$, waarin geïntegreerd wordt over de gehele beschikbare ruimte.

☐ Golffuncties voldoen aan het principe van superpositie, d.w.z. als Ψ_1 en Ψ_2 golffuncties zijn, dan is hun lineaire combinatie $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ ook een golffunctie.

☐ Een zich in de vrije ruimte in de x-richting bewegend deeltje met scherp bepaalde impuls p_x heeft de golffunctie $\Psi(x,t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x x - Et)/\hbar}$. In drie dimensies $\Psi(\mathbf{r},t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)/\hbar}$. Dit is consistent met de klassieke uitdrukking voor een monochromatische vlakke golf $\Psi(\mathbf{r},t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$ tezamen met de kwantummechanische relaties $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ (de Broglie) en $E = \hbar\omega$.

☐ Voor vrije deeltjes levert de differentiaaloperator $p_{x,\mathrm{op}} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ de momentane waarde van de impuls via $p_{x,\mathrm{op}}\Psi = p_x\Psi$. Meer algemeen, $\mathbf{p}_{\mathrm{op}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$. Deze operator wordt later toegepast op een willekeurige golffunctie.

☐ Voor vrije deeltjes kan de energie uit de golffunctie worden verkregen met de operator $E_{\mathrm{op}} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}$. Ook dit wordt later gegeneraliseerd.

Golfpakketten; Onzekerheidsprincipe

☐ Een golfpakket voor een vrij deeltje kan opgebouwd worden als een ruimtelijke Fourier-analyse van vlakke golven,

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x x - Et)/\hbar}\Phi(p_x)\,\mathrm{d}p_x \ ,$$

waarin $E = p_x^2/2m$ en $\Phi(p_x)$ de verdeling van p_x voorstelt.

☐ Normering van $\Phi(p_x)$ impliceert normering van $\Psi(x,t)$ en omgekeerd.

☐ Het golfpakket heeft een beperkte breedte Δx in de reële ruimte. Daarmee correspondeert een beperkte breedte Δp_x van $\Phi(p_x)$ in de p_x-ruimte. Voor een gaussisch golfpakket geldt $\Delta x \Delta p_x = \frac{1}{2}\hbar$, met Δx en Δp_x de halve breedtes op $1/\mathrm{e}$-hoogte. Voor elk ander pakket heeft $\Delta x \Delta p_x$ een grotere waarde.

- ☐ Heisenberg's onzekerheidsprincipe: Het is niet mogelijk plaats en impuls tegelijk te bepalen met een nauwkeurigheid beter dan toegestaan door de onzekerheidsrelaties[1]

$$\Delta x \Delta p_x \geq \tfrac{1}{2}\hbar \ , \quad \Delta y \Delta p_y \geq \tfrac{1}{2}\hbar \ , \quad \Delta z \Delta p_z \geq \tfrac{1}{2}\hbar \ .$$

- ☐ In een bekend Gedanken-experiment wordt met een microscoop waargenomen door welke spleet een deeltje passeert in het twee-spleten-experiment. Het feit van waarneming vernietigt het diffractiepatroon.
- ☐ Een ander Gedanken-experiment, de γ-stralenmicroscoop van Heisenberg, is eveneens een demonstratie van het onzekerheidsprincipe.
- ☐ Complementariteitsprincipe van Bohr: Golf- en deeltjesaspecten van fysische systemen zijn complementair, beide zijn nodig voor een volledige beschrijving, maar doen zich voor afhankelijk van de meetapparatuur.
- ☐ Fourier-analyse van een golfpakket uit vlakke golven van verschillende energie leidt tot de onzekerheidsrelatie $\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2}\hbar$. Een uiting hiervan is dat spectraallijnen een zekere breedte bezitten.

Schrödinger-vergelijking

- ☐ Schrödinger publiceerde in 1926 de naar hem genoemde vergelijking

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \ ,$$

waaraan de golffunctie van een deeltje met massa m onderhevig aan een potentiële energie $V(\mathbf{r}, t)$ moet voldoen. De Schrödinger-vergelijking wordt ook wel geschreven als $\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \mathcal{H} \Psi$, met $\mathcal{H} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(\mathbf{r}, t)$ de Hamiltoniaan.

- ☐ Schrödinger's golfmechanica is equivalent met de een jaar eerder door Heisenberg geïntroduceerde matrixmechanica.
- ☐ De Schrödinger-vergelijking is lineair en homogeen, zodat aan het superpositieprincipe wordt voldaan.
- ☐ De Schrödinger-vergelijking is lineair in $\frac{\partial}{\partial t}$, zodat specificatie van $\Psi(\mathbf{r}, t)$ op zekere tijd voldoende is om $\Psi(\mathbf{r}, t)$ op later tijdstippen te berekenen. $\Psi(\mathbf{r}, t)$ bevat immers alle informatie!
- ☐ Voor $V(\mathbf{r}, t) = 0$ voldoet de vlakke golf.
- ☐ $\Psi(\mathbf{r}, t)$ is continu in plaats en tijd. Voor zover $V(\mathbf{r}, t)$ continu is, zijn $\nabla\Psi(\mathbf{r}, t)$ en $\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t)$ dat ook.
- ☐ $\Psi(\mathbf{r}, t) = 0$ in gebieden waar de potentiaal oneindig is. Vanwege continuïteit moeten in aangrenzende gebieden de oplossingen van de Schrödinger-vergelijking dus voldoen aan de randvoorwaarde $\Psi(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r}\,=\,\mathrm{grens}} = 0$.

Waarschijnlijkheidsdichtheid

- ☐ De Schrödinger-vergelijking behoudt de totale waarschijnlijkheidsdichtheid, ofwel $\frac{\partial}{\partial t} \int P(\mathbf{r}, t)\, \mathrm{d}\mathbf{r} = 0$.

[1] In de literatuur vindt men ook wel $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$, et cetera. De numerieke factor hangt af van de voor de breedtes gehanteerde definitie.

Man *muß* die Ordnung der Wellengleichung nicht auf vier hinaufdrücken, um den Energieparameter aus ihr zu entfernen. Die für die Gültigkeit von (1′) erforderliche Zeitabhängigkeit von ψ läßt zich statt durch (3) auch durch

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \pm \frac{2\pi i}{h} E \psi \tag{3'}$$

ausdrücken. Man kommt dann zu einer der beiden Gleichungen

$$\Delta \psi - \frac{8\pi^2}{h^2} V \psi \mp \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \,. \tag{4''}$$

Wir werden verlangen, daß die komplexe Wellenfunktion ψ einer dieser beiden Gleichungen genüge. Da alsdann die konjugiert komplexe Funktion $\bar{\psi}$ der *anderen* Gleichung genügt, wird man als reelle Wellenfunktion (wenn man sie benötigt) den Realteil von ψ ansehen dürfen. — Im Fall eines konservativen Systems ist (4″) mit (4) wesentlich äquivalent, da sich, wenn V die Zeit nicht enthält, der reelle Operator in das Produkt der zwei konjugiert komplexen zerlegen läßt.

Schrödinger's tijdsafhankelijke golfvergelijking zoals die voor het eerst in de literatuur verscheen [E. Schrödinger, Annalen der Physik **79**, 361 (1926); **79**, 489 (1926); **80**, 437 (1926); **81**, 109 (1926)].

☐ Definiëren we de waarschijnlijkheidsstroomdichtheid $\mathbf{j}$ door $\mathbf{j} = \mathrm{Re}\,\big((\hbar/m\mathrm{i})\Psi^*\nabla\Psi\big) = (\hbar/2m\mathrm{i})[\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi]$, dan geldt in analogie met behoud van materie in de hydrodynamica de continuïteitsvergelijking

$$\frac{\partial P(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0 \;.$$

Verwachtingswaarde

☐ Uitgaand van de statistische interpretatie van $\Psi(\mathbf{r},t)$, wordt de verwachtingswaarde van de plaats $\mathbf{r}$ gegeven door $\langle\mathbf{r}\rangle = \int\Psi^*(\mathbf{r},t)\mathbf{r}\,\Psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}\mathbf{r}$. Meer algemeen, de verwachtingswaarde van een grootheid $f(\mathbf{r},t)$ die alleen van plaats en tijd afhangt is $\langle f(\mathbf{r},t)\rangle = \int\Psi^*(\mathbf{r},t)f(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}\mathbf{r}$.

☐ Analoog geldt $\langle\mathbf{p}\rangle = \int\Phi^*(\mathbf{p},t)\mathbf{p}\,\Phi(\mathbf{p},t)\,\mathrm{d}\mathbf{p}$, waarin $\Phi(\mathbf{p},t)$ de golffunctie in de $\mathbf{p}$-ruimte is. Transformatie naar de reële ruimte levert $\langle\mathbf{p}\rangle = \int\Psi^*(\mathbf{r},t)\mathbf{p}_{\mathrm{op}}\Psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}\mathbf{r}$, met $\mathbf{p}_{\mathrm{op}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$.

☐ Aan een dynamische fysische grootheid $A(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$ kennen we de operator $A_{\mathrm{op}} = A(\mathbf{r},-\mathrm{i}\hbar\nabla,t)$ toe. De verwachtingswaarde van A wordt dan gegeven door[2]

$$\langle A\rangle = \int\Psi^*(\mathbf{r},t)A_{\mathrm{op}}\Psi(\mathbf{r},t)\,\mathrm{d}\mathbf{r} \;.$$

☐ Een operator A_{op} is hermitisch als $\int u^*(A_{\mathrm{op}}v)\,\mathrm{d}\mathbf{r} = \int(A_{\mathrm{op}}u)^*v\,\mathrm{d}\mathbf{r}$ voor alle $u(\mathbf{r})$ en $v(\mathbf{r})$. De Hamiltoniaan $\mathcal{H}$ in de Schrödinger-vergelijking is hermitisch.

[2] Operatoren worden vaak niet expliciet aangeven indien de context duidelijk is: $\int\Psi^*A\Psi\,\mathrm{d}\mathbf{r}$.

- ☐ Verwachtingswaarden moeten reëel zijn, $\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$. Een voldoende voorwaarde hiervoor is hermiticiteit van A_{op}.
- ☐ Het product xp_x is niet hermitisch. Om ervoor te zorgen dat dit product desondanks reële verwachtingswaarden heeft, wordt de bijbehorende operator gesymmetriseerd tot de hermitische combinatie $\frac{1}{2}(xp_x + p_x x)$. Meer algemeen wordt $x^k p_x^l$ gesymmetriseerd tot de hermitische combinatie $\frac{1}{2}(x^k p_x^l + p_x^l x^k)$.
- ☐ De commutator van twee operatoren A en B wordt gedefinieerd door $[A, B] = AB - BA$.
- ☐ $[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = \mathrm{i}\hbar$.
- ☐ Theorema van Ehrenfest: Verwachtingswaarden voldoen aan de klassieke bewegingsvergelijkingen. In het bijzonder $\mathrm{d}\langle x \rangle / \mathrm{d}t = \langle p_x \rangle / m$ en $\mathrm{d}\langle p_x \rangle / \mathrm{d}t = -\langle \partial V / \partial x \rangle$. Het bewijs kan eenvoudig worden geleverd met behulp van[3]

$$\frac{\mathrm{d}\langle A \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \langle [\mathcal{H}, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle .$$

Tijdsonafhankelijke Schrödinger-vergelijking

- ☐ Indien $V(\mathbf{r})$ niet van de tijd afhangt, dan kan het tijdsafhankelijke deel in de Schrödinger-vergelijking worden opgelost door scheiding van variabelen. De oplossing wordt dan

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i} E_n t / \hbar},$$

waarin $\psi_n(\mathbf{r})$ en E_n de fysische acceptabele eigenfuncties en eigenwaarden zijn van de tijdsonafhankelijke Schrödinger-vergelijking

$$\mathcal{H} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) .$$

- ☐ Vanwege hermiticiteit van $\mathcal{H}$ zijn de E_n's reëel en zijn de $\psi_n(\mathbf{r})$'s orthogonaal, behoudens ontaarding. In geval van ontaarding kunnen de $\psi_n(\mathbf{r})$'s orthogonaal gekozen worden.
- ☐ De bij E_n behorende oplossing van de tijdsafhankelijke Schrödinger-vergelijking luidt $\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i} E_n t / \hbar}$. De eigenfunctie $\psi_n(\mathbf{r})$ is genormeerd als $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ dat is.
- ☐ $P_n(\mathbf{r}, t) = \Psi_n^*(\mathbf{r}, t) \Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r})$ is onafhankelijk van de tijd. Om deze reden worden de $\Psi_n(\mathbf{r}, t)$ stationaire toestanden genoemd.
- ☐ Verwachtingswaarden zijn in het algemeen tijdsafhankelijk. Echter, in elke toestand is $\langle E \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n$ onafhankelijk van de tijd ingeval van een tijdsonafhankelijke potentiaal.
- ☐ In een stationaire toestand zijn de verwachtingswaarden van expliciet tijdsonafhankelijke grootheden onafhankelijk van de tijd.
- ☐ Er zijn geen eigentoestanden voor $E < \min(V(\mathbf{r}))$.
- ☐ In één dimensie vertoont $\psi(x)$ een oscillatorisch karakter als $E > V(x)$. Is dit slechts het geval binnen een begrensd gebied, dan gaat $\psi(x)$, vanwege de fysische eis van kwadratische integreerbaarheid, asymptotisch naar nul voor $x \to -\infty$ en $x \to +\infty$. [Waar $V(x) \to \infty$ geldt $\psi(x) = 0$ zonder meer.] De waarden van E waarvoor dit mogelijk

[3] De laatste term is nul als A niet expliciet tijdsafhankelijk is.

Question: How does one determine the initial ψ? Answer: measure a quantity $F(\vec{x}, \vec{p})$. Result of measurement will be one of the e.v.'s of F, say F_n. If F_n is non degenerate ψ immediately after the measurement is the e.f. of F corresponding to given e.v. If there is degeneracy more measurements are needed, as will be seen later.

Fragment uit Fermi's collegedictaat *Physics 341 Quantum Mechanics* (University of Chicago, 1954).

is, de eigenwaarden, zijn discreet (energiekwantisatie). Deze toestanden heten gebonden toestanden. De eigenfunctie van de energetisch laagste toestand heeft geen nulpunten, de n-de toestand daarboven heeft er n.

- ☐ Als links, rechts of aan beide zijden $E > V(x)$ voor alle x, dan is het spectrum van energie-eigenwaarden continu.
- ☐ In één dimensie zijn gebonden toestanden niet ontaard.

Formalisme[4]

- ☐ Postulaat (golffunctie): Aan een fysisch systeem is een (genormeerde) golffunctie $\Psi(\mathbf{r}, t)$ verbonden, die alle informatie bevat die wij kunnen bepalen.
- ☐ $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ontwikkelt zich volgens de tijdsafhankelijke Schrödinger-vergelijking.
- ☐ Golffuncties voldoen aan het principe van superpositie, $\Psi(\mathbf{r}, t) = c_1\Psi_1(\mathbf{r}, t) + c_2\Psi_2(\mathbf{r}, t)$.
- ☐ Postulaat (operatoren): Aan een fysische grootheid $A(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ wordt, volgens de regels reeds uiteengezet, een hermitische operator A_{op} toegevoegd.
- ☐ Postulaat (meetresultaten): De enige mogelijke resultaten van een meting van de grootheid A zijn de eigenwaarden a_n die gevonden worden uit de met A_{op} geassocieerde eigenwaardevergelijking $A_{\mathrm{op}}\psi = a\psi$.
- ☐ De eigenwaarden a_n zijn reëel. Behoudens ontaarding zijn de eigenfuncties ψ_n orthogonaal, en na normering orthonormaal. Eigenfuncties behorende bij ontaarde eigenwaarden kunnen orthogonaal gekozen worden.

---

[4] De formulering van de postulaten is niet eenduidig in de literatuur. In het bijzonder wordt de ontwikkeling van $\Psi(\mathbf{r}, t)$ volgens de tijdsafhankelijke Schrödinger-vergelijking wel als een apart postulaat beschouwd.

☐ Onmiddellijk na een meting van A met als resultaat a_n blijft het systeem achter in de eigentoestand ψ_n ingeval a_n niet ontaard is. Ingeval van ontaarding resulteert een lineaire combinatie van de ontaarde eigentoestanden.

☐ Het resultaat van een meting is onbepaald voorafgaand aan die meting.

☐ De eigenfuncties $\psi_n(\mathbf{r})$ vormen een volledige basis, zodat $\Psi(\mathbf{r},t)$ kan worden ontbonden volgens $\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(\mathbf{r})$. Vanwege orthonormaliteit van de $\psi_n(\mathbf{r})$'s geldt $\sum_n c_n^*(t)c_n(t) = 1$.

☐ Postulaat (statistische interpretatie): Bij meting van de grootheid A is de kans op het meetresultaat a_n gelijk aan $c_n^*(t)c_n(t)$. De verwachtingswaarde $\langle A\rangle$, het gewogen gemiddelde van de resultaten bij meting van A aan een groot aantal identiek geprepareerde systemen, is $\langle A\rangle = \langle\Psi|A_{\text{op}}|\Psi\rangle = \sum_n c_n^*(t)c_n(t)a_n = \sum_n |c_n(t)|^2 a_n$.

☐ Voor een systeem in een zuivere eigentoestand $\psi_n(\mathbf{r})$ van A wordt bij meting van A een scherp bepaald resultaat, namelijk a_n, gevonden.

☐ De onzekerheid om een bepaald resultaat te vinden voor een systeem met een willekeurige golffunctie is inherent aan de kwantummechanica en heeft niets te maken met experimentele fouten.

Eendimensionale voorbeelden

Eendimensionale put met oneindig hoge wanden

☐ De eigenfuncties $\psi_n(x)$ voor de energie zijn sinussen en/of cosinussen met golfvector $k_n = n\pi/2a$; $2a$ is de putbreedte; $n = 1, 2, \ldots$. De eigenfuncties zijn nul op de wanden, en hebben $n-1$ nulpunten tussen de wanden. De eigenwaarden zijn $E_n = \hbar^2 k_n^2/2m$ ten opzichte van de bodem van de put, geheel van kinetische oorsprong.

☐ De laagste eigenwaarde E_1 is niet nul. Dit is een uiting van het onzekerheidsprincipe.

☐ De pariteitsoperator $\mathcal{P}$ spiegelt een golffunctie om het centrum van symmetrie. Is dit de oorsprong, dan houdt dit in dat $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$. Voor de eendimensionale put geldt $\mathcal{P}\psi_n(x) = \pm\psi_n(x)$, d.w.z. de pariteit van de eigenfuncties is even of oneven.

Lineaire harmonische oscillator; $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$

☐ De eigenfuncties zijn $\psi_n(\xi) = N_n \mathrm{e}^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$, waarin $H_n(\xi)$ de Hermite-polynomen zijn, $\xi = \alpha x$ met $\alpha = (mk/\hbar^2)^{1/4}$ de afstand vanuit het centrum in eenheden $1/\alpha$ voorstelt, $n = 0, 1, 2, \ldots$, en N_n de normeringsconstante is. De eigenwaarden zijn de bekende "ladder" $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, met $\omega = (k/m)^{1/2}$.

☐ De Hermite-polynomen zijn gedefinieerd door $H_n(\xi) = (-1)^n \mathrm{e}^{\xi^2} \mathrm{d}^n \mathrm{e}^{-\xi^2}/\mathrm{d}\xi^n$. $H_0(\xi) = 1$, zodat de laagste eigenfunctie geen nulpunten heeft. In het algemeen is het aantal nulpunten gelijk aan n.

☐ De nulpuntsenergie $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ is een uiting van het onzekerheidsprincipe.

☐ De eigenfuncties gaan asymptotisch naar nul voorbij de klassieke omkeerpunten. Het deeltje kan dus buiten de klassieke omkeerpunten aangetroffen worden.

☐ De Hermite-polynomen voldoen aan de recurrente betrekking $H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0$, welke in het bijzonder zijn dienst bewijst bij het uitrekenen van verwachtingswaarden en matrixelementen.

☐ De pariteit van $\psi_n(\xi)$ is afwisselend even en oneven.

- ☐ De genererende functie $G(\xi, s) = \mathrm{e}^{-s^2+2s\xi}$ "genereert" alle $H_n(\xi)$ middels de reeksontwikkeling $G(\xi, s) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) s^n/n!$.
- ☐ In een eigentoestand geldt $\langle x \rangle = 0$ en $\langle p_x \rangle = 0$. Echter $\langle x^2 \rangle \neq 0$ en $\langle p_x^2 \rangle \neq 0$, hetgeen leidt tot de onzekerheidsrelatie $\Delta x \Delta p_x = (n + \frac{1}{2})\hbar$.
- ☐ Voor grote n gaat de waarschijnlijkheidsdichtheid $P(\xi) = |\psi_n(\xi)|^2$ steeds meer lijken op haar klassieke pendant $P(\xi) = 1/\pi(\xi_0^2 - \xi^2)^{1/2}$, met $\pm\,\xi_0$ de klassieke omkeerpunten (Correspondentieprincipe!).

Rechthoekige potentiaalbarrière; $V(x) = V_0 > 0$ voor $0 < x < a$

- ☐ Bij problemen waarin de potentiaal eindige sprongen vertoont, maar verder constant is, wordt de Schrödinger-vergelijking eerst opgelost in de onderscheiden gebieden met een constante potentiaal. Voor $E > V$ levert dit een superpositie van naar rechts en links lopende golven, $\psi(x) = A\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, en voor $E < V$ een superpositie van e-machten, $\psi(x) = C\mathrm{e}^{\kappa x} + D\mathrm{e}^{-\kappa x}$ (Hierbij is als tijdsfactor $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ genomen). De deeloplossingen worden vervolgens met elkaar verbonden met behulp van de eis van continuïteit van $\psi(x)$ en $\mathrm{d}\psi(x)/\mathrm{d}x$.
- ☐ De waarschijnlijkheidsstroomdichtheid is $j = v|A|^2$ voor $\psi(x) = A\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx}$ en $j = -v|B|^2$ voor $\psi(x) = B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, waarin $v = \hbar k/m$ de snelheid. De reflectiecoëfficiënt van de potentiaalbarrière is bijgevolg $R = |B|^2/|A|^2$. De transmissiecoëfficiënt T wordt analoog gedefinieerd. Er geldt $R + T = 1$.
- ☐ Voor de potentiaalbarrière zijn R en T ongelijk nul voor elke $E > 0$ behoudens bijzondere waarden van E waarvoor interferentie van de golffunctie binnen de barrière optreedt.
- ☐ In tegenstelling tot de klassieke mechanica, is er transmissie door de barrière voor $0 < E < V_0$ (tunneleffect) en reflectie voor $E > V_0$. Een voorbeeld van het tunneleffect is de Josephson-junctie.

Impulsmoment

- ☐ Het impulsmoment $\mathbf{L}$ wordt gedefinieerd door $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. De operator van het impulsmoment is $\mathbf{L} = -\mathrm{i}\hbar(\mathbf{r} \times \nabla)$.
- ☐ De commutatierelaties van het impulsmoment luiden $[L_x, L_y] = \mathrm{i}\hbar L_z$, $[L_y, L_z] = \mathrm{i}\hbar L_x$ en $[L_z, L_x] = \mathrm{i}\hbar L_y$.
- ☐ Hieruit kunnen alle andere commutatierelaties van het impulsmoment worden afgeleid met behulp van de "commutatoralgebra" $[B, A] = -[A, B]$, $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$, en $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$.
- ☐ Als de operatoren A en B een gemeenschappelijk stel eigenfuncties hebben, dan geldt $[A, B] = 0$. Omgekeerd, als $[A, B] = 0$, dan hebben A en B een gemeenschappelijk stel eigenfuncties.
- ☐ Belangrijke toepassingen van deze stelling zijn $[\mathbf{L}^2, L_x] = 0$, $[\mathbf{L}^2, L_y] = 0$ en $[\mathbf{L}^2, L_z] = 0$. Echter, $[L_x, L_y] \neq 0$! Gewoonlijk worden voor $\mathbf{L}^2$ en L_z gemeenschappelijke eigenfuncties gekozen.
- ☐ De gemeenschappelijk eigenfuncties $|lm\rangle$ van $\mathbf{L}^2$ en L_z zijn de sferische harmonischen $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Hierin is l het baankwantumgetal en m het magnetische kwantumgetal. Deze zijn heeltallig, terwijl $m = -l, -l + 1, \ldots, +l$.
- ☐ De eigenwaarden van $\mathbf{L}^2$ en L_z zijn $\langle lm|\mathbf{L}^2|lm\rangle = l(l + 1)\hbar^2$ respectievelijk $\langle lm|L_z|lm\rangle = m\hbar$. Voor een bepaalde l zijn de eigenwaarden van $\mathbf{L}^2$ dus $(2l + 1)$-voudig ontaard.

☐ De functies $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ zijn op een constante na gelijk aan $P_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$, met $P_l^{|m|}(w)$ de geassocieerde Legendre polynomen. Ze zijn orthonormaal, d.w.z.

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \; Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta,\varphi) = \delta_{l',l}\delta_{m',m} \;,$$

en vormen een volledige basis. Verder geldt $Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m Y^*_{l,-m}(\theta,\varphi)$.

☐ De functie $Y_{0,0}(\theta,\varphi) = (4\pi)^{-1/2}$ is sferisch symmetrisch. $Y_{1,0}(\theta,\varphi)$ vormt "lobben" om de positieve en negatieve z-as. De lineaire combinaties $[Y_{1,+1}(\theta,\varphi) \pm Y_{1,-1}(\theta,\varphi)]/\sqrt{2}$ vormen lobben om de x- en y-as. Het aantal knoopvlakken van $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ neemt toe met l.

☐ De eigentoestanden en eigenwaarden van $\mathbf{L}^2$ en L_z kunnen tot op zekere hoogte gevisualiseerd worden met het semiklassieke vectormodel, waarin $\mathbf{L}$ met een lengte $\hbar[l(l+1)]^{1/2}$ om de z-as precedeert, terwijl de projectie van $\mathbf{L}$ op de z-as $m\hbar$ bedraagt. In het bijzonder, $\langle L_x\rangle = 0$, $\langle L_y\rangle = 0$ en $\langle L_z\rangle = m\hbar$.

☐ De "raising" en "lowering" operatoren L_+ en L_- worden gedefinieerd door $L_\pm = L_x \pm \mathrm{i}L_y$. Ze zijn elkaars complex toegevoegde, maar ze zijn niet hermitisch.

☐ L_+ en L_- voldoen aan $[\mathbf{L}^2, L_\pm] = 0$ en $[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$. Verder geldt

$$L_\pm|lm\rangle = \hbar\,[l(l+1) - m(m\pm 1)]^{1/2}\,|l, m\pm 1\rangle \;.$$

De operator L_+ voert de eigentoestand $|lm\rangle$ over naar $|l, m+1\rangle$; evenzo leidt L_- tot $|l, m-1\rangle$. Er geldt $L_+|l,l\rangle = 0$ en $L_-|l,-l\rangle = 0$.

Schrödinger-eigenwaardevergelijking in drie dimensies

☐ Als $V(\mathbf{r})$ de gedaante $V_1(x)+V_2(y)+V_3(z)$ heeft, dan kan door separatie van de variabelen x, y en z het probleem gereduceerd worden tot drie eendimensionale problemen. De eigenfuncties zijn dan de producten van eigenfuncties van de eendimensionale problemen, $\Psi(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z)$, en de eigenwaarden de som van de bijbehorende eigenwaarden, $E = E_1 + E_2 + E_3$.

☐ Met de oplossing voor een deeltje in een eendimensionale put is op deze wijze het probleem van de driedimensionale doos met ondoordringbare wanden op te lossen.

☐ Symmetrie van de potentiaal kan leiden tot ontaarding van eigentoestanden. De eigentoestanden van de driedimensionale doos zijn ontaard voor gelijke afmeting van de doos in x-, y- en z-richting, d.w.z. een kubus.

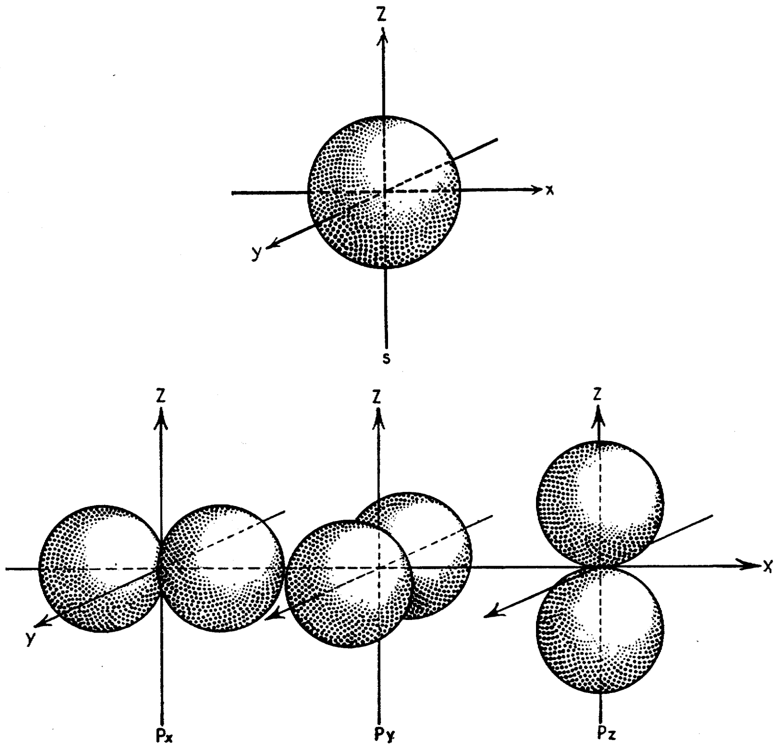
☐ Op dezelfde wijze kan de driedimensionale harmonische oscillator, gegeven door $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(k_1x^2 + k_2y^2 + k_3z^2)$, worden behandeld. Het geval $k_1 = k_2 = k_3$, waarvoor $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}kr^2$, kan ook behandeld worden als een probleem met een centrale potentiaal.

☐ Een centrale potentiaal hangt, wat de plaats betreft, slechts af van de radius r. Dan geldt $[V(r), \mathbf{L}^2] = [V(r), L_z] = 0$.

☐ Aangezien dan $[\mathcal{H}, \mathbf{L}^2] = [\mathcal{H}, L_z] = [\mathbf{L}^2, Lz] = 0$, hebben $\mathcal{H}$, $\mathbf{L}^2$ en L_z een gemeenschappelijk stel eigenfuncties. Hieraan voldoet $\Psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$, met $R(r)$ het radiale deel van de eigenfunctie.

☐ Na substitutie van $R(r) = u(r)/r$ wordt voor $u(r)$ de standaard eendimensionale Schrödinger-eigenwaardevergelijking verkregen, echter met de effectieve potentiaal

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \;.$$



Pooldiagrammen van de absolute waarde van de angulaire eigenfuncties van s- en p-banen [L.Pauling en E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, 1935)].

De laatste term, die nul is voor $l = 0$ (s-toestanden), brengt de centrifugale krachten ten gevolge van rotatie in rekening.

Waterstofatoom

- □ Het H-atoom ($Z = 1$) en waterstofachtige atomen hebben als de centrale potentiaal de Coulomb-attractie tussen elektron en kern, $V(r) = -Ze^2/4\pi\varepsilon_0 r$.
- □ Voor $E < 0$ zijn er gebonden toestanden. Het is handig over te gaan op de dimensieloze radius $\rho = (-8\mu E/\hbar^2)^{1/2} r$. Na de substituties $u(\rho) = \mathrm{e}^{-\rho/2} f(\rho)$ en $f(\rho) = \rho^{l+1} g(\rho)$ volgt uit de radiale Schrödinger-eigenwaardevergelijking een differentiaalvergelijking voor $g(\rho)$. Deze kan geïdentificeerd worden met de differentiaalvergelijking van de geassocieerde Laguerre-polynomen $L_q^p(\rho)$. Hierin zijn p en q heeltallig, terwijl $p \leq q$.
- □ Vergelijking van de twee differentiaalvergelijkingen levert $p = 2l + 1$ en $q = n + l$, waarin $n = 1, 2, \ldots$ het zogenaamde hoofdkwantumgetal voorstelt. Tezamen met het baankwantumgetal $l \leq n - 1$ en het magnetische kwantumgetal $m = -l, -l + 1, \ldots, +l$, kent het H-atoom dus drie kwantumgetallen voor de baanbeweging. Het aantal gebonden toestanden is onbeperkt.
- □ Samengevat zijn de eigenfuncties van het H-atoom $\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Deze functies zijn orthogonaal. Op een door normering te bepalen constante na is $R_{nl} \propto$

$e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$, met $\rho = (2Z/na_\mu)r$ en $a_\mu = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/\mu e^2$. Merk op dat $R_{nl}(r)$ onafhankelijk is van m.

☐ In de spectroscopische notatie worden de eigentoestanden aangeduid met 1s, 2s, 2p, et cetera. Het getal is de waarde van n; de letters s, p, d, f, en verder volgens het alfabet, refereren naar $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$.

☐ De eigenwaarden van de energie zijn $E_n = -R_\mathrm{H} Z^2 hc/n^2$, met $R_\mathrm{H} = \mu e^4/8\varepsilon_0^2 h^3 c$ de Rydberg-constante.

☐ Het Bohr-model is hiermee in overeenstemming.

☐ De eigenwaarden van de energie zijn $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$-voudig ontaard.

☐ De pariteit van $\Psi_{nlm}(\mathbf{r})$ is even voor even l, oneven voor oneven l.

☐ De verwachtingswaarde van $\mathbf{r}$, en dus ook de verwachtingswaarde van het elektrische dipoolmoment $\mathbf{p}_\mathrm{el} = e\mathbf{r}$, is nul. Het H-atoom straalt dus niet in een stationaire toestand, waarmee één van de enigma's van het Bohr-model is verklaard.

☐ De radiale distributiefunctie, i.e. de waarschijnlijkheid het elektron aan te treffen in de bolschil tussen r en $r + \mathrm{d}r$, is $D_{nl}(r)\mathrm{d}r = r^2|R_{nl}(r)|^2\,\mathrm{d}r$. De functie $D_{nl}(r)$ dient onderscheiden te worden van $|\Psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2$!

☐ In de oorsprong is $R_{nl}(r)$ nul voor $l > 0$, maar ongelijk nul en eindig voor $l = 0$ (s-toestanden). Buiten de oorsprong is $R_{nl}(r)$, en dus ook $D_{nl}(r)$, nul voor $n - l - 1$ waarden van r. Ingeval $l = n - 1$ zijn er dus geen nulpunten voor $r > 0$. Het maximum van $D_{10}(r)$ wordt bereikt voor $r = a_\mu$, het maximum van $D_{21}(r)$ voor $4a_\mu$, et cetera, waarin a_μ de straal van de eerste Bohrse baan voorstelt.

Matrixrepresentatie

☐ Gegeven een volledige set basisfuncties $\{\psi_n(\mathbf{r})\}$, bijvoorbeeld de eigenfuncties van één of andere operator, kan de toestand van een systeem even goed beschreven worden door de vector $\mathbf{c}$ van de coëfficiënten c_n in de ontbinding $\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(\mathbf{r})$. Er geldt $c_n(t) = \int \psi_n^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t)\,\mathrm{d}\mathbf{r}$.

☐ Een operator A kan op basis van de functies $\psi_n(\mathbf{r})$ gerepresenteerd worden door de matrix $\mathbf{A}$ waarvan de elementen A_{mn} gegeven worden door de integralen $\langle m|A|n\rangle = \int \psi_m^*(\mathbf{r})A\psi_n(\mathbf{r})\,\mathrm{d}\mathbf{r}$. De matrix $\mathbf{A}$ heeft evenveel rijen als kolommen.

☐ De operator A werkend op een golffunctie $\Psi(\mathbf{r})$ levert een nieuwe golffunctie $X(\mathbf{r}) = A\Psi(\mathbf{r})$. Indien, wederom op de basis $\{\psi_n(\mathbf{r})\}$, $X(\mathbf{r})$ correspondeert met de vector $\mathbf{d}$, dan geldt $\mathbf{d} = \mathbf{Ac}$.

☐ De hermitisch toegevoegde $A^\dagger$ van een matrix $\mathbf{A}$ wordt gedefinieerd door $(A^\dagger)_{mn} = A_{nm}^*$. De matrix $\mathbf{A}$ is hermitisch indien $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$. De matrix $\mathbf{U}$ is unitair indien $\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}$, zodat $\mathbf{UU}^\dagger = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{I}$.

☐ Bij een hermitische operator hoort een hermitische matrix.

☐ Enkele rekenregels voor hermitische matrices (en operatoren) zijn $(c\mathbf{A})^\dagger = c^*\mathbf{A}^\dagger$, $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^\dagger = \mathbf{A}^\dagger + \mathbf{B}^\dagger$, $(\mathbf{AB})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger\mathbf{A}^\dagger$.

☐ Lineaire algebra leert dat een hermitische matrix op diagonaalvorm gebracht kan worden door een geschikt gekozen unitaire transformatiematrix $\mathbf{U}$, d.w.z. $\mathbf{A}' = \mathbf{UAU}^\dagger$. Op de hoofddiagonaal van $\mathbf{A}'$ staan dan de eigenwaarden, terwijl de kolommen van $\mathbf{U}^\dagger$ de eigenvectoren representeren op de basis $\{\psi_n(\mathbf{r})\}$. De eigenwaarden zijn reëel.

☐ De eigenwaarden a_n kunnen ook gevonden worden door oplossen van $\det|\mathbf{A} - a\mathbf{I}| = 0$.

Meer over het impulsmoment

☐ Een vectoroperator $\mathbf{J}$ is een impulsmoment als het voldoet aan de commutator $[J_x, J_y] = \mathrm{i}\hbar J_z$ (met x, y, z cyclisch te verwisselen). Andere commutatierelaties volgen hieruit.

☐ $\mathbf{J}^2$ en J_z hebben een gemeenschappelijke stel eigentoestanden; J_x, J_y en J_z hebben dat onderling niet.

☐ Laat $|jm\rangle$ de gemeenschappelijke eigenfuncties van $\mathbf{J}^2$ en J_z zijn en laat de bijbehorende eigenwaarden van J_z gelijk zijn aan $m\hbar$. De $|jm\rangle$'s zijn orthonormaal, $\langle j'm'|jm\rangle = \delta_{j,j'}\delta_{m,m'}$. Dan volgt uit de commutatierelaties alleen dat de kwantumgetallen j en m beperkt zijn tot $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$ en $m = -j, -j+1, \ldots, +j$. De eigenwaarden van $\mathbf{J}^2$ gelijk zijn aan $j(j+1)\hbar^2$ en dus $(2j+1)$-voudig ontaard voor zekere j.

☐ Halftallige J kunnen niet gerepresenteerd worden in de plaatsrepresentatie.

☐ De matrixrepresentaties van $\mathbf{J}^2$, J_z en $J_\pm$ zijn

$$\begin{aligned}
\langle j'm'|\mathbf{J}^2|jm\rangle &= j(j+1)\hbar^2\delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \ , \\
\langle j'm'|J_z|jm\rangle &= m\hbar\delta_{j,j'}\delta_{m,m'} \ , \\
\langle j'm'|J_\pm|jm\rangle &= \hbar[j(j+1) - m(m\pm 1)]^{1/2}\delta_{j,j'}\delta_{m\pm 1,m'} \ .
\end{aligned}$$

☐ Voor $j = \frac{1}{2}$ worden J_x, J_y en J_z ook wel geschreven als $J_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x$, $J_y = \frac{1}{2}\hbar\sigma_y$, $J_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z$, waarin

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

de Pauli-matrices voorstellen. Voorts geldt $\mathbf{J}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbf{I}$.

☐ Ingeval impulsmomenten worden opgeteld, $\mathbf{J} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$, is het zinvol over te gaan van de basis gevormd door de producten $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ naar de basis $|j_1j_2JM\rangle$ door de unitaire transformatie $|j_1j_2JM\rangle = \sum_{m_1,m_2}|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle\langle j_1j_2m_1m_2|j_1j_2JM\rangle$. De elementen $\langle j_1j_2m_1m_2|j_1j_2JM\rangle$ van de transformatiematrix heten de Clebsch-Gordan-coëfficiënten. Deze zijn nul tenzij $M = m_1 + m_2$ en tevens $\mathbf{j}_1$, $\mathbf{j}_2$ en $\mathbf{J}$ een "driehoek" vormen ($|j_1 - j_2| \le J \le j_1 + j_2$).[5]

Tijdsonafhankelijke storingsrekening

☐ Zeer veel problemen kunnen niet exact worden opgelost, maar wel benaderd door uit te gaan van een probleem waarvoor de eigenfuncties en eigenwaarden bekend zijn, zoals de harmonische oscillator. Voor dit bekende, nulde-orde probleem geldt $\mathcal{H}^{(0)}\psi^{(0)} = E^{(0)}\psi^{(0)}$. We schrijven nu $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(0)} + \lambda\mathcal{H}^{(1)}$ plus eventuele hogere storingstermen, waarin $\mathcal{H}^{(1)}$ de storings-Hamiltoniaan voorstelt en λ de ontwikkelingsparameter is.

☐ In de Schrödinger-eigenwaardevergelijking $\mathcal{H}\psi = E\psi$ worden ook de golffuncties en E ontwikkeld: $\psi = \psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \lambda^2\psi^{(2)} + \ldots$ en $E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \ldots$. Vervolgens worden termen met successievelijke machten van λ bij elkaar genomen. De termen tot

[5] De afleiding hiervan is geen tentamenstof.

eerste orde in λ leveren de eerste-orde-correctie op de eigenenergieën. Voor niet-ontaarde eigentoestanden is deze gelijk aan de verwachtingswaarde van de storings-Hamiltoniaan,

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \mathcal{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle \ .$$

□ Uit de tweede-orde-termen in λ volgt dat de storing andere eigenfuncties in $\psi_n(\mathbf{r})$ inmengt met coëfficiënten $a_{nk}^{(1)} = \langle \psi_k^{(0)} | \mathcal{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle / (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})$ en dat, wederom in afwezigheid van ontaarding, de tweede-orde-correctie op de eigenenergieën gelijk is aan [5]

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \psi_k^{(0)} | \mathcal{H}^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \ .$$

Tijdsafhankelijke storingsrekening

□ De overgangswaarschijnlijkheid van een toestand $\psi_a^{(0)}$ naar een continuüm van eindtoestanden $\psi_b^{(0)}$ ten gevolge van een tijdsafhankelijke storing $\mathcal{H}^{(1)} = A\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega t} + A^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ is in eerste orde (en voor voldoende lange tijdschalen) gelijk aan

$$W_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} |A_{ba}|^2 \rho_b(E_a^{(0)} - \hbar\omega) \ ,$$

waarin $\hbar\omega \approx E_a^{(0)} - E_b^{(0)}$, $A_{ba} = \langle \psi_b^{(0)} | A | \psi_a^{(0)} \rangle$ en $\rho_b(E)$ de dichtheid van de toestanden $\psi_b^{(0)}$ per eenheid van energie voorstelt (Fermi's Golden Rule). [5]

2 DE PAGINA'S VAN HET BOEK

B. H. Bransden & C. J. Joachain, *Introduction to Quantum Mechanics*, first edition (Longman Scientific, 1989); *Quantum Mechanics*, second edition (Pearson Education, 2000).

BIBLIOGRAFIE

P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Edition (Oxford University Press, 1958).
A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Vol. I & II (North-Holland, 1958).
M. Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, 1964).
L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd Edition (McGraw-Hill, 1968).
J. M. Ziman, *Elements of Advanced Quantum Theory* (Cambridge University Press, 1969).
A. Fetter & J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, 1971).
B. H. Bransden & C. J. Joachain, *Introduction to Quantum Mechanics* (Longman Scientific, 1989); *Quantum Mechanics*, second edition (Pearson Education, 2000).
Van Quantum tot Quark (Stichting Teleac, 1989).
F. Schwabl, *Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, 1992).
F. Mandl, *Quantum Mechanics* (Wiley, 1992).
S. M. McMurry, *Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, 1993), met diskette.
J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition (Addison-Wesley, 1994).
D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall, 1995).
G. L. Squires, *Problems in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, 1995).
R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 3rd Edition (Addison Wesley, 1997).
E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd Edition (Wiley, 1998).

3 WERKCOLLEGE

Inhoudsopgave*

*Vraagstukken gebaseerd op tentamenvragen zijn gemerkt met het symbool ⊠.

1. **Eigenschappen van zwarte stralers.** De energiedichtheid (d.w.z. de energie per eenheid van volume) in een ruimte omgeven door zwarte wanden met temperatuur T is in het golflengte-interval $(\lambda, \lambda + \mathrm{d}\lambda)$ volgens Planck

$$\rho(\lambda, T) d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp(hc/\lambda k_\mathrm{B} T) - 1} \, \mathrm{d}\lambda \; .$$

(a) Geef de uitdrukking voor de energiedichtheid in het frequentie-interval $(\nu, \nu + \mathrm{d}\nu)$. Hoe is de afhankelijkheid van ν?

(b) De spectrale emittantie van de zwarte straler (d.w.z. de emissie per eenheid van oppervlak en tijd) wordt gegeven door $R(\lambda, T) = \frac{1}{4} c \, \rho(\lambda, T)$.[1] Geef een uitdrukking voor de golflengte λ_max waarvoor $\rho(\lambda, T)$ en dus $R(\lambda, T)$ maximaal is. Uit deze uitdrukking volgt ook de verschuivingswet van Wien

$$\lambda_\mathrm{max} T = \mathrm{constant} \; .$$

(c) Bereken vervolgens λ_max voor de zon, aannemend dat de zon een zwarte straler is met een temperatuur van 6000 K.[2]

(d) De wet van Stefan-Boltzmann zegt dat de totale energiedichtheid van de zwarte straler gegeven wordt door

$$\rho_\mathrm{tot} = a T^4 \; ,$$

waarin $a = 8\pi^5 k_\mathrm{B}^4 / 15 h^3 c^3$. Bewijs dit door integratie van $\rho(\nu, T)$.[3]

(e) Schat vervolgens welke fractie van de door de zon uitgezonden elektromagnetische energie in het zichtbare gebied (400 nm $\leq \lambda \leq$ 700 nm) ligt.

2. **Foto-elektrisch effect.** Toen Einstein in 1905 zijn hypothese over het foton publiceerde was van het foto-elektrisch effect alleen bekend dat licht kortgolvig moet zijn om elektronen uit een metaal los te maken. Het eerste experiment dat voldoende nauwkeurig was om er conclusies over de geldigheid van Einstein's formule aan te kunnen verbinden werd pas 11 jaar later uitgevoerd door R. A. Millikan [Physical Review **7**, 355 (1916)].

   Millikan belichtte metallisch natrium in vacuüm met ultraviolet licht en mat de energie van de uittredende elektronen door ze met een elektrische potentiaal af te remmen. Het natriumoppervlak werd vlak voor een meting zorgvuldig schoongeschraapt. Als lichtbron diende een kwiklamp, die in het ultraviolet een aantal sterke spectraallijnen uitzendt, gevolgd door een monochromator. Bij 2535, 3126, 3650, 4047, 4339 en 5461 Å golflengte[4] bedroeg de elektrische potentiaal nodig om de uittredende elektronen tot stilstand te brengen respectievelijk +0.51, −0.43, −0.90, −1.28, −1.49 en −2.03 V. Bij deze potentialen moet nog de elektromotorische kracht tussen het natriumoppervlak en de koperen detectie-elektrode, 2.51 V, worden opgeteld.

   Analyseer het historische experiment van Millikan ten aanzien van de geldigheid van Einstein's formule, de constante van Planck, de uittreepotentiaal van natrium en de bijbehorende drempelgolflengte.

---

[1] Dit is een aardig vraagstuk op zichzelf!

[2] Merk op dat de gevoeligheid van het oog maximaal is in het groen ($\lambda \approx 550$ nm).

[3] Gebruik $\int_0^\infty x^3 (\mathrm{e}^x - 1)^{-1} \mathrm{d}x = \Gamma(4)\zeta(4) = \pi^4/15$.

[4] Golflengtes werden indertijd uitgedrukt in Ångstrom; 1 Å $= 10^{-10}$ m.

NATUURCONSTANTEN[a]

c	$= 299792458\ \mathrm{m\,s^{-1}}$ (exact)	R_∞	$= m_e e^4/8\varepsilon_0^2 h^3 c = \alpha/4\pi a_0$
h	$= 6.6260755(40)\times10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$		$= 1.0973731534(13)\times10^{7}\ \mathrm{m^{-1}}$
$\hbar$	$= h/2\pi$	a_0	$= 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2$
	$= 1.05457266(63)\times10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$		$= 0.529177249(24)\times10^{-10}\ \mathrm{m}$
e	$= 1.60217733(49)\times10^{-19}\ \mathrm{C}$	α	$= e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c = 1/137.0359895(61)$
m_e	$= 9.1093897(54)\times10^{-31}\ \mathrm{kg}$ [b]	λ_C	$= h/m_e c = 2.42631058(22)\times10^{-12}\ \mathrm{m}$
M_p	$= 1.6726231(10)\times10^{-27}\ \mathrm{kg}$	μ_0	$= 4\pi\times10^{-7}\ \mathrm{N\,A^{-2}}$ (exact)
μ_B	$= e\hbar/2m_e$	ε_0	$= 1/\mu_0 c^2$ (exact)
	$= 9.2740154(31)\times10^{-24}\ \mathrm{J\,T^{-1}}$		$= 8.854187817\ldots\times10^{-12}\ \mathrm{F\,m^{-1}}$
k_B	$= 1.380658(12)\times10^{-23}\ \mathrm{J\,K^{-1}}$	N_A	$= 6.0221367(36)\times10^{23}\ \mathrm{mol^{-1}}$

[a]Getallen tussen haakjes zijn de standaarddeviaties van de laatste decimalen.
[b]De massa van het elektron wordt ook wel aangeduid met m.

3. **Niveauschema's.** Schets in één figuur de niveauschema's van waterstof (H), deuterium (D) en enkelvoudig geïoniseerd helium (He^+), alle volgens het Bohr-model. Beschrijf kort de overeenkomsten en verschillen tussen deze schema's, en tussen de bijbehorende lijnenspectra.

4. **Muonisch atoom ◘.** Het is mogelijk, bijvoorbeeld in een vaste stof, om het negatief geladen muon (μ^-) in te vangen in een baan rond de kern van een atoom, waarmee het dan gedurende enige tijd een "muonisch atoom" vormt. Het muon heeft een elektrische lading gelijk aan die van het elektron, maar zijn massa is veel groter: $m_\mu \approx 207\ m_e$.

   We nemen aan dat de baan van het muon rondom de kern beschreven kan worden met de kwantumtheorie van Bohr voor het waterstofatoom.

   (a) Hoe luiden de uitgangspunten van de theorie van Bohr voor het waterstofatoom?

   (b) Leidt af dat de straal a_n van de n-de Bohrse baan in waterstofachtige atomen en de energie E_n van het elektron in deze baan gegeven worden door respectievelijk

$$a_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 n^2}{Z m_e e^2}\ , \qquad E_n = -\frac{m_e}{2\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{1}{n^2}\ .$$

   Hierin is $+Ze$ de lading van de kern en m_e de massa van het elektron.

   We passen de theorie van Bohr vervolgens toe op muonisch Cu-atoom ($Z = 29$).

   (c) Bereken de numerieke waarde van de straal van eerste en tweede Bohrse baan alsmede de energie (in eV) van de Lyman Ly_α overgang $n = 2 \to n = 1$. Hoe verhouden de antwoorden zich tot die voor het waterstofatoom ($Z = 1$)?

   (d) De experimentele waarde voor de energie van de genoemde overgang is lager. Welke oorzaken kan men daarvoor aanvoeren?[5]

[5] Zie ook opgave 60.

5. **Donoren in halfgeleiders.** In halfgeleiders als Si of Ge worden vaak, zij het in geringe concentratie, donoren aangebracht. Donoren brengen extra geleidingselektronen met zich mee, die de eigenschappen van halfgeleider in sterke mate beïnvloeden. Veel gebruikte donoren zijn P, As en Sb. Ze leveren elk een enkel geleidingselektron, dat zich in goede benadering rondom de donor beweegt als een elektron in een H-atoom.

   Bereken de straal van de eerste Bohrse baan en de ionisatie-energie (in eV) van het elektron behorende tot een eenwaardige donor in Si en Ge op basis van het Bohr-model. Om de elektronische bandenstructuur in rekening te brengen, geven we de geleidingselektronen een effectieve massa ter grootte $m \approx 0.2\, m_{\mathrm{e}}$ in Si en $m \approx 0.1\, m_{\mathrm{e}}$ in Ge. Verder nemen we de elektrische eigenschappen van het rooster in aanmerking door middel van de relatieve statisch diëlektrische constante $\varepsilon = 11.7$ respectievelijk 15.8.[6]

6. **Compton-verstrooiing.** Een foton met golflengte λ_0 wordt verstrooid aan een elektron onder een hoek θ. Het elektron heeft voor de verstrooiing een impuls ter grootte p in de bewegingsrichting van het foton.

   (a) Toon aan dat de Compton-verschuiving $\Delta\lambda$ dan gegeven wordt door

   $$\Delta\lambda = 2\lambda_0 \frac{(h/\lambda_0 + p)c}{E - pc} \sin^2 \tfrac{1}{2}\theta \ ,$$

   waarin $E = (m^2c^4 + p^2c^2)^{1/2}$.[7]

   (b) Voor welke θ wordt de maximale impulsoverdracht bereikt? Geef voor dat geval een uitdrukking voor de impuls van het elektron na de verstrooiing.

7. **De Broglie-golflengte.** Bereken de de Broglie-golflengte λ voor

   (a) een elektron in de eerste Bohrse baan van waterstof;

   (b) een proton[8] met een kinetische energie van 1 TeV;

   (c) een elektron in een elektronenbuis bij een typische energie van 10 keV;

   (d) een massa van 1 g bewegend met een snelheid van 1 m/s.

8. **Onzekerheidsrelatie voor gaussisch golfpakket.** We beschouwen een gaussisch golfpakketje op tijdstip $t = 0$ (a en σ zijn reëel)

   $$\Psi(x) = A \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2} \right) \ .$$

   (a) Bereken de normeringsconstante A.[9]

   (b) Bereken de gemiddelde positie $\langle x \rangle$.

   (c) Bereken de standaarddeviatie Δx gedefinieerd door $(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$.

---

[6] De werkelijke waarden van de ionisatie-energie zijn een factor 1 tot 2 hoger.

[7] Voor een initieel stilstaand ($p = 0$) elektron geldt $\Delta\lambda = 2\lambda_{\mathrm{C}} \sin^2 \frac{1}{2}\theta$, met λ_{C} de Compton-golflengte.

[8] De diameter van het proton is ongeveer 1 fm = 10^{-15} m.

[9] Gebruik in dit vraagstuk de integralen $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha x^2)\, \mathrm{d}x = (\pi/\alpha)^{1/2}$ en $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2)\, \mathrm{d}x = (1/2\alpha)(\pi/\alpha)^{1/2}$.

(d) Bereken de golffunctie $\Phi(p)$ voor de impuls.

(e) Bereken de gemiddelde impuls $\langle p \rangle$ en de standaarddeviatie Δp, waarbij Δp is gedefinieerd door $(\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle$.

(f) Toon aan dat geldt $\Delta x \Delta p = \frac{1}{2}\hbar$, in overeenstemming met de onzekerheidsrelatie.

9. **Dirac-δ-functie.** De Dirac-δ-functie $\delta(x)$ is gedefinieerd door $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)\,\mathrm{d}x = f(a)$. Is het argument van de δ-functie een functie $g(x)$ van x, dan geldt de meer algemene definitie

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta\big(g(x)\big)|g'(x)|\,\mathrm{d}x = \sum_i f(x_i) \ ,$$

waarin $g'(x) = \mathrm{d}g(x)/\mathrm{d}x$ en de sommatie loopt over alle nulpunten x_i van $g(x)$.[10] Bewijs de eigenschappen

(a) $$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1 \ ,$$

(b) $$\delta(x) = \delta(-x) \ ,$$

(c) $$x\delta(x) = 0 \ ,$$

(d) $$\delta(ax) = |a|^{-1}\delta(x) \ , \qquad (a \neq 0)$$

(e) $$\delta(x^2 - a^2) = |2a|^{-1}[\delta(x-a) + \delta(x+a)] \ , \qquad (a \neq 0)$$

(f) $$\delta\big(g(x)\big) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|} \ ,$$

(g) $$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \ ,$$

(h) $$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(a-x)\delta(x-b)\,\mathrm{d}x = \delta(a-b) \ ,$$

en speciaal voor fysici

(i) $$[\delta(x)] = [x^{-1}] \ ,$$

waarin $[y]$ de dimensie van y aanduidt. Via partiële integratie kan ook aan de "afgeleide" $\delta'(x)$ van $\delta(x)$ een betekenis worden gehecht. Dan geldt

(j) $$\delta'(x) = -\delta'(-x) \ ,$$

(k) $$x\delta'(x) = -\delta(x) \ .$$

De Dirac-δ-functie kan worden gerepresenteerd door functies waarvan de breedte in een limiet naar nul gaat met behoud van het oppervlak onder de functie. Enkele veelgebruikte representaties zijn

(l) $$2\pi\delta(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k \ ,$$ (m) $$\pi\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \ ,$$

[10] In de wiskunde wordt $\delta(x)$ gedefinieerd in de theorie van distributies.

(n) $\pi\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0^+} \dfrac{\sin \varepsilon x}{x}$, (o) $\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0} \dfrac{\theta(x+\varepsilon)-\theta(x)}{\varepsilon}$,

waarin $\theta(x)$ de Heaviside-stapfunctie voorstelt; $\theta(x) = 0$ voor $x < 0$ en $\theta(x) = 1$ voor $x > 0$.

10. **Exponentieel afvallend golfpakket.** Een golfpakket wordt op tijdstip $t = 0$ gegeven door

$$\Psi(x) = C \exp(\mathrm{i}p_0 x/\hbar) \exp(-|x|/2\sigma) \ .$$

(a) Bereken de normeringsconstante C.

(b) Bereken de golffunctie $\Phi(p)$ voor de impuls.[11]

(c) Ga na dat $\Phi(p)$ genormeerd is.[12]

11. **Onzekerheid van elektron in atoom.** Een elektron in een atoom is effectief opgesloten in een ruimte met afmetingen van ongeveer 10^{-10} m.

(a) Bereken de minimale spreidingen Δp_x, Δp_y, Δp_z in de impuls die daaruit volgen.

(b) Beredeneer hoe men uitgaande van Δp_x, Δp_y en Δp_z een schatting kan geven van de verwachtingswaarde van de kinetische energie van het elektron. Bereken vervolgens deze schatting.

12. **Positie-operator in de impulsrepresentatie.** In de plaatsrepresentatie geeft de plaats-operator $\mathbf{r}_{\mathrm{op}}$ werkend op de golffunctie $\Psi(\mathbf{r})$ als resultaat de vector van functies $\mathbf{r}\Psi(\mathbf{r})$.

(a) Toon aan dat in de impulsrepresentatie de plaats-operator, die werkt op de golffunctie $\Phi(\mathbf{p})$, luidt

$$\mathbf{r}_{\mathrm{op}} = -\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \nabla_{\mathbf{p}} \ .$$

(b) Laat zien dat $\mathbf{r}_{\mathrm{op}}$ hermitisch is in zowel de plaats- als de impulsrepresentatie.

13. **Tijdsafhankelijkheid van de verwachtingswaarde: theorema van Ehrenfest.** De verandering met de tijd van de verwachtingswaarde van een expliciet tijdsonafhankelijke grootheid A wordt gegeven door

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle[\mathcal{H}, A]\rangle \ ,$$

waarin $\mathcal{H}$ de Hamiltoniaan voorstelt.

(a) Bewijs deze uitdrukking.[13]

(b) Bewijs dat $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$.

---

[11] Merk op dat de Fourier-getransformeerde van een Gauss-functie een Gauss-functie oplevert (zie opgave 8), de Fourier-getransformeerde van een e-macht e^{-x} een Lorentz-functie $1/(1 + x^2)$ en, omgekeerd, de Fourier-getransformeerde van een Lorentz-functie een e-macht.

[12] $\int (1 + x^2)^{-2} \mathrm{d}x = \frac{1}{2}[\arctan x + x/(1 + x^2)]$.

[13] Gebruik onder andere de hermiticiteit van $\mathcal{H}$.

MAX PLANCK

Max Karl Ernst Ludwig Planck, geboren op 23 april 1858 te Kiel en overleden op 4 oktober 1947 te Göttingen, heeft door zijn werk over zwarte stralers een uitzonderlijke invloed gehad op de ontwikkeling van de natuurkunde.

Planck studeerde in München en Berlijn. In Berlijn volgde hij de colleges van Helmholtz (1821–1894) en Kirchhoff (1824–1887). Helmholtz besteedde weinig aandacht aan zijn colleges en struikelde regelmatig over de stof; Kirchhoff bereidde zijn colleges juist zeer zorgvuldig voor, maar verviel als gevolg daarvan tot eentonigheid. Desondanks leerde Planck naar zijn zeggen zeer veel van dit in onze ogen verfoeilijke onderwijs. Het geringe nut dwong hem namelijk de stof uitgebreid in boeken te bestuderen!

In 1879, 21 jaar oud, behaalde Planck de doctorstitel op een dissertatie over een thermodynamisch onderwerp. In 1885 werd hij *Privatdozent* in de natuurkunde te Kiel en in 1889 hoogleraar te Berlijn. In 1900 stelde Planck, gebruik makend van methoden uit de statistische fysica, de beroemde kwantumhypothese op ter verklaring van een tegenspraak (door Ehrenfest later de "ultravioletcatastrofe" genoemd) in de theorie van de zwarte straling. Hierbij voerde hij een nieuwe natuurconstante in, die nu zijn naam draagt. De kwantumhypothese betekende een volledige breuk met de klassieke opvattingen, waardoor de natuurkunde ingrijpend veranderde. In 1918 werd hem de Nobelprijs toegekend.

Generaties natuurkundigen hebben van zijn didactische gaven de vruchten geplukt. Ook was Planck zeer begaafd als pianist en organist. Hij heeft sterk bijgedragen tot de bloei van de *Deutsche Physikalische Gesellschaft* en was jarenlang redacteur van het toentertijd gezaghebbende *Annalen der Physik.* Het Hitler-regime wees hij principieel af. Tot op hoge leeftijd beoefende hij als ontspanning de bergsport. Een piek in de Dolomieten die hij als eerste beklom is naar hem genoemd. In Duitsland houden de vele Max-Planck-instituten zijn naam in ere.

(c) Gebruik de uitdrukking bewezen in (a) om het theorema van Ehrenfest te bewijzen, d.w.z. de verwachtingswaarden $\langle x\rangle$ en $\langle p_x\rangle$ volgen de klassieke bewegingsvergelijkingen

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\langle p_x\rangle}{m} , \qquad \frac{\mathrm{d}\langle p_x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle ,$$

waarin $V(\mathbf{r})$ de potentiaal voorstelt.

(d) Toon ook aan dat

$$\frac{\mathrm{d}\langle x^2\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\langle xp_x + p_x x\rangle}{m} , \qquad \frac{\mathrm{d}\langle p_x^2\rangle}{\mathrm{d}t} = -\left\langle p_x\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x}p_x\right\rangle .$$

14. **Nulpunten van eigenfuncties.** De eigenfuncties van gebonden toestanden in één dimensie kunnen reëel gekozen worden. Laat ψ_n en ψ_k twee van deze reële golffuncties zijn, met bijbehorende energieën E_n en E_k.

(a) Bewijs uitgaande van de tijdsonafhankelijke Schrödinger-vergelijking dat

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\psi_n'\psi_k - \psi_k'\psi_n) = \frac{2m}{\hbar^2}(E_k - E_n)\psi_n\psi_k ,$$

waarin $\psi_n' = \mathrm{d}\psi_n/\mathrm{d}x$.

(b) We nemen nu aan dat $E_k > E_n$. Laat dan zien dat tussen twee opeenvolgende nulpunten x_0 en x_1 van ψ_n tenminste één nulpunt van ψ_k moet liggen.[14]

15. **Onafhankelijke deelsystemen.** De tijdsafhankelijke Schrödinger-vergelijking luidt

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \mathcal{H}\psi \ .$$

Beschouw nu een systeem van twee onafhankelijke deelsystemen, bijvoorbeeld twee onafhankelijke deeltjes in een potentiaalput met impuls $\mathbf{p}_1$ en plaats $\mathbf{r}_1$, respectievelijk $\mathbf{p}_2$ en $\mathbf{r}_2$. De Hamiltoniaan van het complete systeem kan dus geschreven worden als de *som*

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{r}_2) = \mathcal{H}_\mathrm{d}(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}_1) + \mathcal{H}_\mathrm{d}(\mathbf{p}_2, \mathbf{r}_2) \ ,$$

met $\mathcal{H}_\mathrm{d}$ de Hamiltoniaan waaraan elk deeltje voor zich is onderworpen.

(a) Laat zien dat de golffunctie van het complete systeem geschreven kan worden als het *product*

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi_i(\mathbf{r}_1, t)\psi_j(\mathbf{r}_2, t)$$

van de golffuncties $\psi_i(\mathbf{r}_1, t)$ en $\psi_j(\mathbf{r}_2, t)$ van de individuele deeltjes.[15]

(b) Laat vervolgens zien dat aan deze eigenschap niet voldaan is door een golfvergelijking van de vorm[16]

$$a\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \mathcal{H}\psi \ .$$

16. **Constante potentiële energie.** Een constante V_0 wordt bij de potentiële energie $V(\mathbf{r})$ opgeteld.

(a) Bewijs dat de eigenwaarden van de tijdsonafhankelijke Schrödinger-vergelijking met V_0 worden verhoogd en dat de bijbehorende eigenfuncties $\psi(\mathbf{r})$ ongewijzigd blijven.

(b) Wat gebeurt er met de golffunctie inclusief de tijdsafhankelijkheid?

17. **Potentiële energie met ongelijke asymptoten.** We beschouwen een potentiaal in één dimensie die asymptotisch naar de waarden V_- en V_+ gaat,

$$\lim_{x\to-\infty} V(x) = V_- \ , \qquad \lim_{x\to+\infty} V(x) = V_+ \ ,$$

en een minimum V_0 heeft zodanig dat $V_0 < V_- < V_+$.

[14] Integreer de gelijkheid uit (a) van x_0 tot x_1.

[15] Voor identieke deeltjes moet de golffunctie in het geval van bosonen symmetrisch en in het geval van fermionen antisymmetrische zijn voor verwisseling van de twee deeltjes. De golffunctie luidt dan $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = 2^{-1/2}[\psi_i(\mathbf{r}_1, t)\psi_j(\mathbf{r}_2, t) + \psi_i(\mathbf{r}_2, t)\psi_j(\mathbf{r}_1, t)]$ voor bosonen en $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = 2^{-1/2}[\psi_i(\mathbf{r}_1, t)\psi_j(\mathbf{r}_2, t) - \psi_i(\mathbf{r}_2, t)\psi_j(\mathbf{r}_1, t)]$ voor fermionen. Deze lineaire combinaties voldoen uiteraard ook.

[16] Volgens de statistische interpretatie van Born moet de gecombineerde waarschijnlijkheidsdichtheid van twee onafhankelijke deeltjes geschreven kunnen worden als het product van de twee individuele waarschijnlijkheidsdichtheden. De golfvergelijking onder (b) is dus ongeschikt voor een kwantummechanische beschrijving!

(a) Toon aan dat voor de golffuncties ψ_n van de stationaire toestanden met $E_n < V_+$ geldt dat $\mathrm{Re}\,\psi_n / \mathrm{Im}\,\psi_n$ niet van x afhangt.

(b) Toon aan dat voor deze stationaire toestanden geldt dat $\Pi(p,t) = \Pi(-p,t)$, waarin $\Pi(\mathbf{p},t) = |\Phi(\mathbf{p},t)|^2$ de waarschijnlijkheidsdichtheid in de impulsrepresentatie is. Toon vervolgens aan dat $\langle p \rangle = 0$.

(c) Toon aan dat voor deze stationaire toestanden de stroomdichtheid $j(x,t)$ nul is.

18. **Twee deeltjes: relatieve en zwaartepuntsbeweging ◘.** De tijdsonafhankelijke Schrödinger-vergelijking voor een systeem van twee deeltjes in één dimensie luidt[17]

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_1 - x_2) \right) \psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2) \ .$$

De potentiële energie hangt dus alleen af van de onderlinge afstand van de deeltjes en niet van hun absolute positie. We voeren in de relatieve coördinaat $x = x_1 - x_2$ en de zwaartepuntscoördinaat $X = (m_1 x_1 + m_2 x_2)/M$ met $M = m_1 + m_2$.

(a) Bewijs dat

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial X} \ , \qquad \frac{\partial}{\partial x_2} = -\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial X} \ .$$

(b) Bewijs dat de Schrödinger-eigenwaardevergelijking in de coördinaten x en X luidt

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, X) = E\psi(x, X) \ ,$$

waarin $\mu = m_1 m_2 / M$ de gereduceerde massa voorstelt.

(c) Laat zien dat de oplossingen van deze Schrödinger-eigenwaardevergelijking geschreven kunnen worden in de gefactoriseerde vorm $\psi(x,X) = \varphi(x)\Phi(X)$.[18]

(d) Geef tevens de vergelijkingen voor de afzonderlijke functies $\varphi(x)$ en $\Phi(X)$. Laat zien dat de $\Phi(X)$ een vlakke golf voorstelt.

(e) Laat zien dat de totale impuls $P = p_1 + p_2$ een bewegingsconstante is.[19]

19. **Galilei-transformatie van de Schrödinger-vergelijking.** We beschouwen de Schrödinger-vergelijking

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t)$$

van een systeem van twee deeltjes waarvan de potentiële energie afhangt van de relatieve coördinaat $\mathbf{r}$, maar onafhankelijk is van de coördinaat $\mathbf{R}$ van het zwaartepunt; M is de

[17] Het is niet moeilijk dit te generaliseren tot een systeem van twee deeltjes in drie dimensies. Ook kan dan worden aangetoond dat het impulsmoment van de *relatieve* beweging een bewegingsconstante is in het geval van een centrale potentiaal.

[18] Dit geldt in het algemeen niet binnen eventuele ontaarding.

[19] In de klassieke mechanica is een grootheid een bewegingsconstante als zij niet verandert met de tijd, in de kwantummechanica als de verwachtingswaarde constant is. Dat $\mathrm{d}\langle P \rangle / \mathrm{d}t = 0$ kan door directe berekening worden aangetoond, maar fraaier is het gebruik te maken van de relatie bewezen in opgave 13(a).

totale, μ de gereduceerde massa. Deze vergelijking is invariant voor Galilei-transformatie, d.w.z. gaat over in een vergelijking van dezelfde vorm onder de transformatie $\mathbf{R}' = \mathbf{R} - \mathbf{v}t$ van het coördinatenstelsel $\{\mathbf{R}, \mathbf{r}\}$ naar het ten opzicht daarvan met eenparige snelheid $\mathbf{v}$ bewegende stelsel $\{\mathbf{R}', \mathbf{r}\}$. Toon dit aan.[20]

20. **Harmonische oscillator ◘.** Een eendimensionale harmonische oscillator wordt beschreven door de Hamiltoniaan

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 \ ,$$

waarin m de massa en ω de hoekfrequentie voorstellen.

(a) Maak een schets als functie van x (d.w.z. een kwalitatieve tekening die de essentiële punten bevat) van de eigenfuncties $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$ en $\psi_2(x)$ behorende bij de laagste drie eigenwaarden van de energie. Aan welke voorwaarden moeten eigenfuncties voldoen?

(b) De eigenfuncties zijn orthogonaal. Bewijs dit in het algemeen, uitgaande van hermiticiteit van de Hamiltoniaan.

(c) Wat is pariteit? Welke pariteit hebben $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$ en $\psi_2(x)$?

(d) De harmonische oscillator bevindt zich op tijdstip $t = 0$ in de golffunctie

$$\Psi(x, t = 0) = [\psi_0(x) + \psi_1(x)]/\sqrt{2} \ .$$

Hoe ontwikkelt $\Psi(x, t)$ zich met de tijd?

(e) Wat is de fysische betekenis van $|\Psi(x,t)|^2$? Is $|\Psi(x,t)|^2$ constant in de tijd? En is $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x$ constant in de tijd?

(f) Hoe wordt de verwachtingswaarde $\langle A \rangle$ van een fysische grootheid $A(x, p_x)$ berekend. Wat is volgens de postulaten van de kwantummechanica de betekenis van $\langle A \rangle$?

(g) Hoe groot is de verwachtingswaarde $\langle E \rangle$ van de energie in de toestand gegeven door de golffunctie $\Psi(x,t)$? Bewijs in het algemeen dat $\langle E \rangle$ constant is in de tijd voor elke tijdsonafhankelijke Hamiltoniaan.

(h) Bereken, wederom voor de toestand $\Psi(x,t)$, de verwachtingswaarden $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p_x \rangle$ en $\langle p_x^2 \rangle$.[21] Zijn deze verwachtingswaarden constant in de tijd?

21. **Halve harmonische oscillator.** We beschouwen een deeltje met massa m dat zich bevindt in een eendimensionale harmonische potentiaal, maar waarvan de beweging beperkt wordt door een harde wand in het midden. De potentiaal wordt dus gegeven door

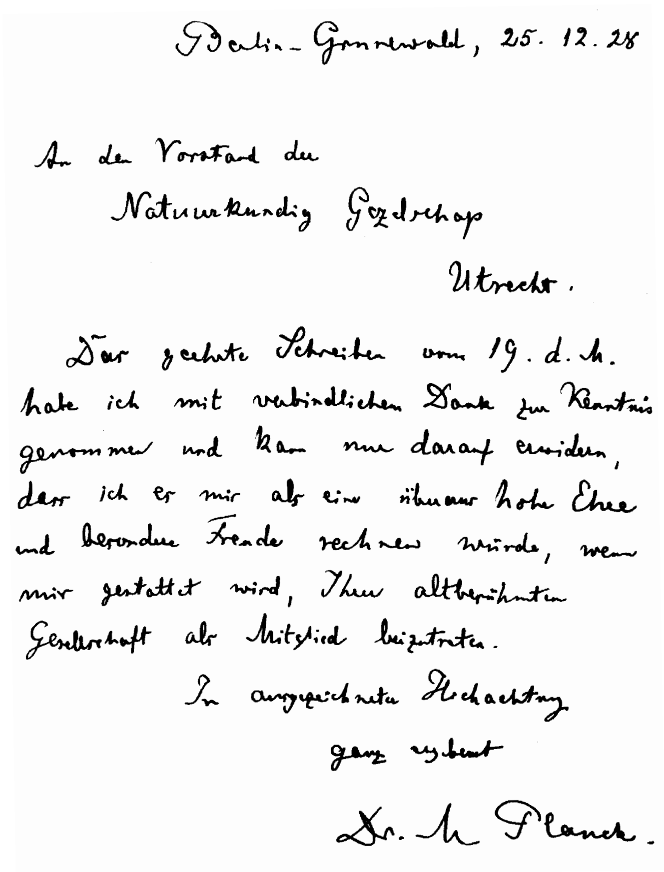
$$V(x) = \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (x > 0) \qquad \text{en} \qquad V(x) \to \infty \quad (x \leq 0)$$

als ω de hoekfrequentie van de niet-beperkte harmonische oscillator voorstelt.

---

[20] De ongewenste termen die de vergelijking na transformatie bevat kunnen geëlimineerd worden door een nieuwe golffunctie $\psi'(\mathbf{R}', \mathbf{r}, t)$ te kiezen die van $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t)$ een goed gekozen fasefactor verschilt. Het is gemakkelijk de bewering uit te breiden tot een systeem van vele deeltjes.

[21] Bereken $\langle x \rangle$ en $\langle x^2 \rangle$ met $\langle A \rangle = \int \Psi^* A \Psi \,\mathrm{d}\mathbf{r}$. $\langle p_x \rangle$ kan uiteraard ook direct berekend worden, maar het is handiger gebruik te maken van het theorema van Ehrenfest. Evenzo volgt $\langle p_x^2 \rangle$ uit $\langle E \rangle = \langle p_x^2 \rangle / 2m + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle$. Eventueel benodigde integralen: $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2)\,\mathrm{d}x = (\pi/a)^{1/2}$, $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-ax^2)\,\mathrm{d}x = (1/2a)(\pi/a)^{1/2}$ en $\int_{-\infty}^{+\infty} x^4 \exp(-ax^2)\,\mathrm{d}x = (3/4a^2)(\pi/a)^{1/2}$.



Berlin-Grunewald, 25. 12. 28

An den Vorstand der
Natuurkundig Gezelschap
Utrecht.

Das geehrte Schreiben vom 19. d. M. habe ich mit verbindlichem Dank zur Kenntnis genommen und kann nun darauf erwidern, dass ich es mir als eine überaus hohe Ehre und besondere Freude rechnen würde, wenn mir gestattet wird, Ihrer altberühmten Gesellschaft als Mitglied beizutreten.

In ausgezeichneter Hochachtung
ganz ergebenst
Dr. M. Planck.

Brief geschreven door Max Planck in 1928, waarin hij het lidmaatschap van het Natuurkundig Gezelschap te Utrecht (opgericht in 1777) aanvaardt.

(a) Aan welke randvoorwaarden moeten de eigenfuncties voldoen?

(b) Bepaal de eigenfuncties en de bijbehorende eigenwaarden uitgaande van de eigenfuncties en eigenwaarden van de gewone harmonische oscillator.

22. **Harmonische oscillator: viriaaltheorema.** Voor een kwantummechanische harmonische oscillator in een eigentoestand is de verwachtingswaarde van de kinetische energie gelijk aan de verwachtingswaarde van de potentiële energie (viriaaltheorema), d.w.z.

$$\langle V \rangle = \tfrac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \tfrac{1}{2}\langle E \rangle \ , \qquad \langle T \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} = \tfrac{1}{2}\langle E \rangle \ ,$$

waarin $\langle E \rangle$ de verwachtingswaarde van de totale energie voorstelt.

(a) Bewijs dit door directe berekening van $\langle x^2 \rangle$ en eventueel $\langle p_x^2 \rangle$.

(b) Bewijs dit door gebruik te maken van de formule afgeleid in opgave 13(a).[22]

[22] Substitueer $A = xp_x + p_x x$. Het rechterlid is dan evenredig met $\langle T \rangle - \langle V \rangle$. Gebruik tenslotte dat het systeem zich in een eigentoestand bevindt.

23. **Eendimensionale rechthoekige put.** Een deeltje met massa m beweegt in een eendimensionale rechthoekige put gegeven door de potentiaal $V(x) = 0$ voor $|x| < a$ en $V(x) \to \infty$ voor $|x| \geq a$.

(a) Bereken de eigenwaarden en eigenfuncties van de energie.

(b) We nemen aan dat de golffunctie van het deeltje op tijdstip $t = 0$ gegeven wordt door

$$\Psi(x, t = 0) = N(a^2 - x^2) \ ,$$

waarin N de normeringsconstante voorstelt. Schrijf $\Psi(x, t = 0)$ als een superpositie van de eigenfuncties.[23]

(c) Hoe ontwikkelt $\Psi(x, t)$ zich met de tijd? En hoe ontwikkelt zich de waarschijnlijkheidsdichtheid $\Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$?

(d) Bepaal de waarschijnlijkheid P_n dat meting van de energie de waarde E_n oplevert, waarbij E_n een eigenwaarde is.

(e) Bepaal de verwachtingswaarde van de energie.[24]

24. **Eendimensionale potentiaalput met een nauwe barrière in het midden ◘.** We beschouwen een deeltje met massa m dat zich beweegt in een potentiaalput met oneindige hoge wanden en een nauwe piek in het midden. De potentiaal wordt dus beschreven door $V(x) = \lambda\delta(x)$ met $\lambda > 0$ voor $-a < x < +a$ en $V(x) \to \infty$ daarbuiten. Een voorbeeld hiervan is een Cooper-paar in een supergeleidende tunneljunctie.

(a) De tijdsonafhankelijke Schrödinger-vergelijking levert ook voor dit probleem de eigenfuncties $\psi_n(x)$ met bijbehorende eigenwaarden E_n ($n = 1, 2, 3, \dots$). We rekenen deze nog niet uit, maar vragen ons wel af aan welke randcondities ze voldoen voor $x = \pm a$. En hoe kunnen de golffuncties $\Psi(x, t)$ behorende bij de eigentoestanden geschreven worden? Waarom worden ze ook wel stationaire toestanden genoemd?

(b) Beredeneer op algemene gronden dat (i) de eigenwaarden van de energie gekwantiseerd zijn, (ii) de eigenfunctie van de grondtoestand geen nulpunten heeft behoudens op de randen en (iii) elke volgend hogere eigenfunctie precies één nulpunt meer bezit.

(c) Beredeneer dat de eigenfuncties even of oneven pariteit hebben. Wat is de pariteit van $\psi_1(x)$, de eigenfunctie met de laagste energie?

(d) We nemen aan dat het deeltje zich op tijdstip $t = 0$ in de toestand beschreven door $\Psi(x, 0) = [2\psi_1(x) + \psi_2(x)]/\sqrt{5}$ bevindt. Hoe ontwikkelt de golffunctie $\Psi(x, t)$ zich met de tijd? Wat is op tijdstip t het resultaat van meting van de energie? En wat is het resultaat van een volgende meting enige tijd daarna?

(e) We gaan ons tenslotte bezig houden met berekening van de eigenfuncties. Laat zien dat de afgeleide $\psi'(x) = \mathrm{d}\psi(x)/\mathrm{d}x$ in het punt $x = 0$ een sprong maakt volgens[25]

$$\lim_{x\to+0} \psi'(x) - \lim_{x\to-0} \psi'(x) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0) \ .$$

[23] $\int x^2 \cos bx \,\mathrm{d}x = (2x/b^2)\cos bx + [(b^2x^2 - 2)/b^3]\sin bx$.

[24] $\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)^{-4} = \pi^4/96$.

[25] Integreer de tijdsonafhankelijk Schrödinger-vergelijking van $-\varepsilon$ tot $+\varepsilon$ en neem vervolgens de limiet $\varepsilon \to 0$.

(f) Beargumenteer dat de stationaire toestanden met *oneven* pariteit niet door de nauwe piek bij $x = 0$ worden beïnvloed. Berekenen de genormeerde eigenfuncties $\psi_n(x)$ van deze toestanden alsmede de bijbehorende eigenwaarden E_n van de energie. Geef vervolgens aan hoe $\psi_n(x)$ en E_n van de *even* toestanden berekend kunnen worden.[26] Geef een schets van de laagste vier eigenfuncties. Geef ook de limiet van de eigenfuncties en eigenwaarden voor $\lambda = 0$ en $\lambda \to \infty$.

25. **Reflectie en transmissie door willekeurige potentiaalberg.** Een kwantummechanisch deeltje in één dimensie beweegt in een potentiaal $V(x)$. De potentiaal $V(x)$ voldoet aan $V(x) > 0$ voor $|x| < L$ en $V(x) = 0$ voor $|x| > L$, maar is overigens willekeurig gekozen. We willen aantonen dat, bij gegeven energie E, de reflectiecoëfficiënt R en de transmissiecoëfficiënt T onafhankelijk zijn van de *richting* waarin het deeltje invalt.

We gaan uit van de stationaire toestand $\psi(x)$ van een zich in de positieve richting invallend deeltje met energie E, d.w.z.

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} + b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \,, && (x < -L) \\ \psi(x) &= c\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} \,, && (x > +L) \end{aligned}$$

waarin $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ en waarin b en c complexe getallen voorstellen.

(a) Geef uitdrukkingen voor de reflectiecoëfficiënt R en de transmissiecoëfficiënt T van het zich in de positieve x-richting bewegend deeltje.

(b) Bewijs dat $R + T = 1$.[27]

(c) Geef nu een uitdrukking voor de stationaire toestand van eenzelfde deeltje dat met energie E in de negatieve x-richting reist, waarbij de coëfficiënten uitgedrukt zijn in b en c.[28]

(d) Bereken de reflectie- en de transmissiecoëfficiënten voor een in de negatieve x-richting invallend deeltje. Vergelijk het resultaat met het resultaat voor het in de positieve x-richting invallende deeltje.

26. **Totale reflectie door potentiaalstap ◘.** Beschouw een deeltje dat zich beweegt in een potentiaal die stapsgewijze toeneemt, d.w.z. $V(x) = 0$ voor $x < 0$ en $V(x) = V_0$ voor $x > 0$; $V_0 > 0$. Het deeltje heeft een energie E met $0 < E < V_0$. Men kan bijvoorbeeld denken aan een geleidingselektron nabij het oppervlak van een metaal.

(a) Laat zien dat voor $x < 0$ de eigenfunctie van het deeltje geschreven kan worden als een superpositie van twee lopende golven, d.w.z. $\Psi(x,t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$ met

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \,,$$

---

[26] Schrijf, rekening houdend met de randcondities voor $x = \pm a$, de algemene oplossing van de tijdsonafhankelijke Schrödinger-vergelijking in de intervallen $x \in [-a, 0]$ en $[0, +a]$ als $\psi(x) = A\sin[k(a+x)]$ respectievelijk $\psi(x) = A\sin[k(a-x)]$. Met de vergelijking afgeleid in (e) volgt dan een transcendente vergelijking voor k.

[27] Gebruik de continuïteitsvergelijking om aan te tonen dat de stroomdichtheid j niet van x afhangt.

[28] Neem een lineaire combinatie van $\psi(x)$ en $\psi^*(x)$; $\psi^*(x)$ is een oplossing van de Schrödinger-vergelijking als $\psi(x)$ dat is!

en dat voor $x > 0$ de eigenfunctie gekarakteriseerd wordt door een exponentieel verval met de afstand,

$$\psi(x) = D\mathrm{e}^{-\kappa x} \ .$$

Hierin stellen A, B, D, k en κ constanten voor; k en κ zijn reëel en positief. Druk k en κ uit in E en V_0. Waarom is voor $x > 0$ de eigenfunctie $\psi(x) = C\mathrm{e}^{+\kappa x} + D\mathrm{e}^{-\kappa x}$ met $C \neq 0$ niet acceptabel?

(b) Aan welke randvoorwaarden moet worden voldaan om de eigenfuncties voor $x < 0$ en $x > 0$ met elkaar te verbinden in het punt $x = 0$?

(c) Leid vervolgens af dat

$$B/A = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \qquad \text{en} \qquad D/A = 1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \ ,$$

waarin $\alpha = -2\arctan[(V_0/E - 1)^{1/2}]$.

(d) Laat zien dat onder de gegeven omstandigheden een van $x < 0$ komend, zich in positieve richting bewegend deeltje door de potentiaalstap totaal wordt gereflecteerd. Beschouw daartoe de waarschijnlijkheidsstroomdichtheid. Laat ook zien dat het deeltje zich niettemin kan bevinden in het gebied $x > 0$.

(e) Wat gebeurt er met de golffunctie wanneer we het deeltje met een detector waarnemen in het gebied $x > 0$? De detector heeft verwaarloosbare afmetingen.

27. **Gedeeltelijke reflectie door potentiaalstap: "brekingsindex" ◘.** In tegenstelling tot de klassieke mechanica, loopt in de kwantummechanica een deeltje de kans gedeeltelijk gereflecteerd te worden door een potentiaalsprong ook als zijn energie groter is dan de potentiaal. Analoog aan de optica kan de kans hiertoe worden uitgedrukt met behulp van een "brekingsindex."

Om dit aan te tonen beschouwen we een deeltje met massa m dat vanuit negatieve x-richting komend beweegt in een potentiaal die bij $x = 0$ stapsgewijze toeneemt of afneemt, d.w.z. $V(x) = 0$ voor $x < 0$ en $V(x) = V_0$ voor $x > 0$. Het deeltje heeft energie $E > \max(0, V_0)$.

(a) Laat zien dat voor zowel $x < 0$ als $x > 0$ de eigenfunctie van het deeltje geschreven kan worden als een superpositie van lopende golven, d.w.z. $\Psi(x,t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$ met

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \ , \qquad && (x < 0) \\ \psi(x) &= C\mathrm{e}^{+\mathrm{i}k'x} \ , && (x > 0) \end{aligned}$$

waarbij vast is aangenomen dat het deeltje, eenmaal voorbij de potentiaalstap, nooit meer terugkeert. Druk k en k' uit in E en V_0.

(b) Aan welke voorwaarden moet worden voldaan om de eigenfuncties voor $x < 0$ en $x > 0$ met elkaar te verbinden in het punt $x = 0$? Leid vervolgens af dat

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'} \qquad \text{en} \qquad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'} \ .$$

(c) Laat zien dat de waarschijnlijkheidsstroomdichtheid gelijk is aan

$$j = v(|A|^2 - |B|^2) \ , \qquad (x < 0)$$

NIELS BOHR

Niels Henrik David Bohr, geboren op 1 oktober 1885 te Kopenhagen en aldaar overleden op 18 november 1962, behoort met Einstein tot de grootste natuurkundigen uit het begin van de twintigste eeuw. Zijn grote werk, het scheppen van de theorie van het waterstofatoom, verrichtte hij in 1913. Hij bouwde daarbij voort op het atoommodel van Rutherford, maar had de moed om met gedurfde hypotheses de klassieke theorie aan te passen aan de nieuwe kwantuminzichten. Hij was met dit atoommodel in aanraking gekomen tijdens eerdere verblijven bij Rutherford zelf en bij J. J. Thomson.

Ook daarna heeft nog veel gedaan wat slechts de allergrootsten gegeven is: het principe van complementariteit van golf- en deeltjeskarakter en andere bijdragen aan de interpretatie van de kwantummechanica en voorts de druppeltheorie van de kern. Bewonderenswaardig zijn de breedte en subtiliteit van zijn hypotheses en de manier waarop hij ze uitwerkte. Natuurkundige grootheden als de Bohr-straal en het Bohr-magneton zijn naar hem genoemd. Bohr publiceerde betrekkelijk weinig. Zijn grote invloed kwam eerder tot uiting in persoonlijke omgang, brieven en discussies op congressen alsmede door de "Kopenhaagse school" die zich om hem vormde. Wat betreft de interpretatie van de kwantummechanica leidde dit tot de formulering van de standaard "Kopenhaagse interpretatie."

Bohr was vanaf 1916 hoogleraar in de theoretische natuurkunde te Kopenhagen. In 1922 ontving hij de Nobelprijs voor de natuurkunde. In 1943 wist hij met een vissersboot uit het door de Duitsers bezette Denemarken te ontkomen met als uiteindelijke bestemming de Verenigde Staten, waar hij betrokken was bij het Manhattan-project. Na de tweede wereldoorlog zette hij zich onder andere in voor de wereldvrede.

$$j = v'|C|^2 \ , \qquad\qquad (x > 0)$$

waarin $v = \hbar k/m$ en $v' = \hbar k'/m$. Gebruik $j = (\hbar/2m\mathrm{i})[\psi^*(\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x) - (\mathrm{d}\psi^*/\mathrm{d}x)\psi]$.

(d) Geef vervolgens uitdrukkingen voor de reflectie- en transmissiecoëfficienten R en T. Laat ook zien dat $R + T = 1$.

(e) Het is mogelijk, analoog aan de optica, een "brekingsindex" te definiëren volgens $n = \lambda/\lambda' = k'/k$. Toon dat

$$R = \left(\frac{1-n}{1+n}\right)^2 \qquad \text{en} \qquad T = \frac{4n}{(1+n)^2} \ .$$

28. **Reflectie en transmissie van rechthoekige potentiaalput ◘.** We beschouwen een rechthoekige put met potentiaal $V(x) = -V_0$ ($V_0 > 0$) voor $|x| < a$ en $V(x) = 0$ voor $|x| > a$. Een deeltje met energie $E > 0$ valt in van links. De oplossing van de Schrödinger-vergelijking schrijven we in het externe gebied als

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \ , \qquad (x < -a)$$
$$\psi(x) = C\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} \ , \qquad (x > +a)$$

waarin $k = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$, en in het interne gebied als

$$\psi(x) = F\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\alpha x} + G\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha x} \ ,$$

waarin $\alpha = [2m(V_0 + E)/\hbar^2]^{1/2}$.

(a) Toon aan dat de reflectiecoëfficiënt R en transmissiecoëfficiënt T gegeven worden door

$$R = \left(1 + \frac{4E(V_0 + E)}{V_0^2 \sin^2(\alpha L)}\right)^{-1} , \qquad T = \left(1 + \frac{V_0^2 \sin^2(\alpha L)}{4E(V_0 + E)}\right)^{-1} ,$$

waarin $L = 2a$.

(b) Schets T als functie van E/V_0 voor $V(x)$ met “sterkte-parameter” $\gamma = (2mV_0 a^2/\hbar^2)^{1/2}$ ter grootte van $\gamma = 10$.

29. **Reflectie en transmissie van hoge en smalle potentiaalbarrière ◘.** We willen de reflectie en transmissie bepalen van een kwantummechanisch deeltje door een zeer hoge en zeer smalle potentiaalbarrière. Een voorbeeld hiervan is tunneling van een elektron door een dun metallisch folie. Het deeltje heeft massa m en beweegt in één dimensie. We schrijven voor de potentiaal

$$\begin{aligned} V(x) &= S/a \ , \qquad (-\tfrac{1}{2}a \le x \le +\tfrac{1}{2}a) \\ V(x) &= 0 \ , \qquad (|x| > \tfrac{1}{2}a) \end{aligned}$$

en nemen de limiet $a \to 0$.[29]

(a) Neem aan dat de functie $\psi(x)$ een oplossing is van de tijdsonafhankelijke Schrödinger-vergelijking. Neem ook aan dat $\psi(x)$ constant is binnen de barrière, met waarde $\psi(0)$. Toon dan aan dat voor de afgeleiden van $\psi(x)$ juist links en juist rechts van de barrière geldt[30]

$$\left[\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right]_{x=0^+} - \left[\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right]_{x=0^-} = \frac{2mS\psi(0)}{\hbar^2} .$$

In de limiet $a \to 0$ vertoont de afgeleide van $\psi(x)$ dus een sprong.

(b) We laten het deeltje nu met vaste energie E invallen vanuit de negatieve x-richting en laten het gedeeltelijk weerkaatsen aan de barrière. De golffunctie van het deeltje kan dus geschreven worden als $\Psi(x,t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$ met

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \ , \qquad (x < 0) \\ \psi(x) &= C\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} \ . \qquad (x > 0) \end{aligned}$$

Wat stellen de verschillende termen voor? Druk k uit in E. Bereken B en C bij gegeven A.

(c) Bereken de bijdragen tot de waarschijnlijkheidsstroomdichtheid

$$J = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}} \left[\psi^* \left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right) - \left(\frac{\mathrm{d}\psi^*}{\mathrm{d}x}\right)\psi\right] .$$

Definieer en bereken vervolgens de reflectiecoëfficiënt R en de transmissiecoëfficiënt T. Hoe hangen R en T af van de energie van het inkomende deeltje?

---

[29] Men kan $V(x)$ ook schrijven als $V(x) = S\delta(x)$. De aanname omtrent $\psi(x)$ in deelopgave (a) is dan niet nodig.

[30] Integreer de Schrödinger-vergelijking over het interval $[-\frac{1}{2}a, +\frac{1}{2}a]$ en neem de limiet $a \to 0$.

30. **Reflectie en transmissie van elektron en proton door potentiaalbarrière.** Bereken de reflectie- en transmissiecoëfficiënten voor zowel een elektron als een proton dat met een kinetische energie van 1 eV invalt op een rechthoekige potentiaalbarrière met hoogte $V_0 = 2$ eV en breedte 0.1 nm. Waarom is het verschil veel groter dan de verhouding van de massa's?

31. **Josephson-effect ◘.** In 1962 voorspelde B. D. Josephson zeer fundamentele kwantumeffecten in de elektrische geleiding tussen twee supergeleiders gescheiden door een dunne isolerende laag. Een realisering van zo'n Josephson-junctie is Al-Al_2O_3-Al in vloeibare helium. In een supergeleider wordt het elektrisch ladingstransport verzorgd door Cooper-paren, quasi-deeltjes van paren geleidingselektronen met lading $q = -2e$, maar zonder baanmoment en spin. De golffunctie van Cooper-paren kan macroscopische afmetingen hebben, en door de isolerende laag tunnelen mits deze dun genoeg is (enkele atoomafstanden).

   (a) We beschouwen de golffuncties ψ_1 en ψ_2 van de Cooper-paren ter weerszijden van de isolerende laag. We nemen aan dat ψ_1 en ψ_2 voldoen aan de Schrödinger-vergelijkingen

   $$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = U_1\psi_1 + K\psi_2 \ , \qquad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = U_2\psi_2 + K\psi_1 \ ,$$

   waarin U_1 en U_2 de energie van de Cooper-paren ter weerszijden van de junctie voorstelt. Wat is de fysische betekenis van de operator $\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial t)$? En wat stelt K in deze vergelijkingen voor?

   (b) We leggen een spanningsverschil V over de junctie aan, zodat $U_1 = +\frac{1}{2}qV$ en $U_2 = -\frac{1}{2}qV$ indien we gemakshalve het nulpunt van de energie precies daartussen kiezen. Aangezien het faseverschil van ψ_1 en ψ_2 een belangrijke rol blijkt te spelen, schrijven we $\psi_1 = A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_1}$ en $\psi_2 = A_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_2}$, met A_1, A_2, θ_1 en θ_2 alle reëel. [De gemeenschappelijke tijdsafhankelijke factor is niet relevant.] Toon door substitutie in de Schrödinger-vergelijkingen aan dat

   $$\begin{aligned}
   \dot{A}_1 &= +A(K/\hbar)\sin(\theta_2 - \theta_1) \ , \\
   \dot{A}_2 &= -A(K/\hbar)\sin(\theta_2 - \theta_1) \ , \\
   \dot{\theta}_1 &= -(K/\hbar)\cos(\theta_2 - \theta_1) - \tfrac{1}{2}qV/\hbar \ , \\
   \dot{\theta}_2 &= -(K/\hbar)\cos(\theta_2 - \theta_1) + \tfrac{1}{2}qV/\hbar \ ,
   \end{aligned}$$

   waarbij is verondersteld dat de junctie bestaat uit identieke supergeleiders, zodat $A_1, A_2 \approx A$.

   (c) Laat zien dat $\dot{A}_1 + \dot{A}_2 = 0$, maar dat $\dot{A}_1$ en $\dot{A}_2$ elk voor zich niet nul hoeven te zijn. Beredeneer dat dit betekent dat door de junctie een elektrische stroom mogelijk is.

   (d) Laat zien dat *zonder* elektrische spanning het faseverschil $\theta_2 - \theta_1$ tussen ψ_1 en ψ_2 constant is, maar dat desondanks een *gelijk*stroom door de junctie mogelijk is. Dit verschijnsel heet het gelijkstroom-Josephson-effect.

   (e) Indien een *gelijk*spanning $V \neq 0$ wordt aangelegd, neemt $\theta_2 - \theta_1$ lineair toe met de tijd. Toon dit aan. Laat ook zien dat dan een *wissel*stroom met hoekfrequentie $\omega = |qV/\hbar|$ door de junctie stroomt. Dit verschijnsel heet het wisselstroom-Josephson-effect.

32. **Tweedimensionale potentiaalput ◘.** Een deeltje met massa m beweegt in een tweedimensionale put met vierkante doorsnede en oneindig hoge wanden. De potentiaal wordt dus gegeven door $V(x, y) = 0$ voor $|x| < a$ en $|y| < a$, terwijl daarbuiten $V(x, y) \to \infty$.

(a) Aan welke randvoorwaarden moeten de eigenfuncties voldoen? Waarom?

(b) Bepaal de eigenfuncties en eigenwaarden en de energie. Schets de eigenfuncties voor de laagste twee eigenwaarden.

(c) Beargumenteer dat de eigenfuncties even danwel oneven pariteit hebben.

(d) Hoe interpreteert men het feit dat de laagste eigenwaarde niet gelijk aan nul is?

(e) Laat zien dat de verwachtingswaarden van x, x^2, p_x en p_x^2 in de grondtoestand gelijk zijn aan[31]

$$\langle x \rangle = 0 \ , \qquad \langle x^2 \rangle = \frac{2a^2}{\pi^2}\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right) \ , \qquad \langle p_x \rangle = 0 \ , \qquad \langle p_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4a^2}\pi^2 \ .$$

(f) Laat vervolgens zien dat voor een willekeurige richting x' in het (x,y)-vlak de Heisenberg-onzekerheidsrelatie luidt

$$\Delta x' \Delta p_{x'} = \left(\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}\right)^{1/2} \hbar \ .$$

33. **Commutatierelaties.**

(a) Bewijs, uitgaande van $[x_i, p_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{i,j}$ $(i,j = 1,2,3;\ x_1 = x,\ x_2 = y,\ x_3 = z;\ p_1 = p_x,\ p_2 = p_y,\ p_3 = p_z)$, de commutatierelaties

$$[L_i, x_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}x_k \ .$$

Hierin is ε_{ijk} is het Levi-Civita antisymmetrische symbool; $\varepsilon_{ijk} = 1$ voor de even permutaties ijk = 123, 231 en 312, $\varepsilon_{ijk} = -1$ voor de oneven permutaties ijk = 321, 132 en 213, en $\varepsilon_{ijk} = 0$ voor alle andere ijk.

(b) Bewijs ook de commutatierelaties

$$[L_i, p_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}p_k \ .$$

34. **Tweedimensionale harmonische oscillator.** Een tweedimensionale isotrope harmonische oscillator wordt beschreven door de Hamiltoniaan

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu}(p_x^2 + p_y^2) + \tfrac{1}{2}\mu\omega^2(x^2 + y^2) \ .$$

(a) Geef de eigentoestanden en de eigenwaarden van $\mathcal{H}$, uitgaande van de bekende eigentoestanden $\psi_n(x)$ en eigenwaarden van de eendimensionale harmonische oscillator.

(b) Geef de ontaardingsgraad van de energie-eigenwaarden.

(c) We voeren in de poolcoördinaten r en φ door te schrijven $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$. Leid de operator $\mathcal{H}$ in poolcoördinaten af.

(d) De operator voor het impulsmoment is $L = xp_y - yp_x$. Bewijs dat in poolcoördinaten

$$L = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

[31] $\int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \cos^2 x \, \mathrm{d}x = \frac{1}{2}\pi$ en $\int_{-\pi/2}^{+\pi/2} x^2 \cos^2 x \, \mathrm{d}x = \frac{1}{24}\pi^3 - \frac{1}{4}\pi$.

ERWIN SCHRÖDINGER

Erwin Schrödinger, geboren op 12 augustus 1887 in Wenen en overleden op 4 januari 1961 in het dorpje Alpbach in zijn geliefde Tirol, heeft met de door hem geformuleerde golfmechanica een essentiële bijdrage geleverd aan de kwantummechanica.

Schrödinger studeerde in Wenen en volgde onder andere gedurende acht opeenvolgende semesters de colleges in de theoretische natuurkunde van Boltzmann's opvolger Hasenöhrl. Hij promoveerde in 1910. Een aansluitend assistentschap in de experimentele natuurkunde leerde hem het experiment als doorslaggevend te beschouwen. Gedurende de eerste wereldoorlog was hij officier van de artillerie, maar gebruikte zijn vrije tijd voor verdere studie. Hij keerde eind 1918 terug naar Wenen, verbleef vervolgens voor korte perioden in Jena, Stuttgart en Breslau (het huidige Wrocław in Polen), en aanvaardde in 1920 het hoogleraarschap in Zürich dat eerder bekleed was door Einstein en Von Laue.

In Zürich wijdde Schrödinger zich aan de statistische mechanica, de relativiteitstheorie en de theorie van het kleurenzien. Na de publicatie eind 1924 van de Broglie's hypothese over het golfkarakter van deeltjes, begreep hij onmiddellijk de betekenis van het nieuwe concept. In januari 1926 leidde zijn werk hierover tot de formulering van de golfmechanica, waarin kwantisatie niet langer ad hoc wordt ingevoerd, zoals in de oude Bohr-Sommerfeld theorie, maar op natuurlijke wijze volgt uit een eigenwaardeprobleem. Korte tijd daarna interpreteerde Born de golffunctie als de amplitude van een waarschijnlijkheid, en ontstond door toedoen van Bohr de "Kopenhaagse interpretatie." Schrödinger kon deze echter moeilijk aanvaarden en hield vast aan de opvatting dat het elektron als zodanig een golfverschijnsel zou zijn. Wel toonde hij aan dat de abstracte matrixmechanica van Heisenberg, daterend uit 1925, wiskundig equivalent is met de golfmechanica.

In 1927 accepteerde Schrödinger het prestigieuze aanbod om Planck op te volgen in Berlijn. Zes jaar later, verontwaardigd over de houding van het Hitler-regime jegens vooraanstaande geleerden, verhuisde hij naar Oxford. Nauwelijks aangekomen, vernam hij de Nobelprijs voor de natuurkunde te hebben gewonnen, samen met Dirac. In 1936 dreef heimwee hem terug naar Oostenrijk, waar hij een hoogleraarschap in Graz aanvaardde. In 1938, kort na de *Anschluss*, werd hij door de nieuwe machthebbers ontslagen. Met hulp van vrienden emigreerde Schrödinger hals over kop naar Dublin in Ierland met een tussenstop in Gent. In Dublin hield hij zich bezig met de relativiteitstheorie, de statistische mechanica en de filosofie en grondslagen van de natuurkunde. In 1956 keerde hij definitief naar Oostenrijk terug.

en bewijs dat $[\mathcal{H}, L] = 0$.

(e) Bewijs dat $\mathcal{H}$ en L gemeenschappelijke eigenfuncties van de vorm

$$\psi_m(r,\varphi) = R_m(r)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$$

hebben, met m een geheel getal.

(f) Leid de vergelijking af waaraan $R_m(r)$ moet voldoen.

(g) Geef ook een stel eigenfuncties van $\mathcal{H}$ die geen eigenfuncties van L zijn.

35. **Legendre-polynomen.** Bewijs voor Legendre polynomen $P_l(w)$ de recurrente betrekkingen[32]

$$(l+1)P_{l+1}(w) = (2l+1)wP_l(w) - lP_{l-1}(w) \ ,$$

$$(1-w^2)\frac{\mathrm{d}P_l(w)}{\mathrm{d}w} = -lwP_l(w) + lP_{l-1}(w) \ .$$

36. **Lineaire operatoren.** Stel dat voor twee lineaire operatoren A en B geldt $[A,B] = \lambda$, met λ een complex getal.

    (a) Bewijs dat $[A, B^n] = n\lambda B^{n-1}$.[33]

    (b) Bewijs dat als A en B hermitische operatoren zijn λ imaginair is.

37. **Theorema van Ehrenfest voor de planaire starre rotator ◘.** We beschouwen een planaire starre rotator (twee in een vlak gelegen, op vaste onderlinge afstand om elkaar draaiende massapunten) beschreven door de Hamiltoniaan

$$\mathcal{H} = \frac{L^2}{2I} + V(\varphi) \ .$$

L is het impulsmoment, I is het traagheidsmoment en φ is de hoek in het vlak. Uiteraard staat **L** loodrecht op het vlak en is $V(\varphi)$ enkelwaardig. Deze Hamiltoniaan beschrijft bijvoorbeeld de gehinderde rotatie van een twee-atomig molecuul ingebouwd in een vaste stof.

(a) Toon aan uitgaand van de definitie $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ in cartesische coördinaten (Kies **L** loodrecht op het vlak) dat de operator van het impulsmoment gegeven wordt door

$$L = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi} \ .$$

(b) Bewijs de commutatierelatie $[L, \varphi] = -\mathrm{i}\hbar$.

(c) Formuleer het theorema van Ehrenfest in woorden.

(d) Bewijs dat in het algemeen de verandering met de tijd van de verwachtingswaarde van een expliciet tijdsonafhankelijke grootheid A gegeven wordt door

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle[\mathcal{H}, A]\rangle \ .$$

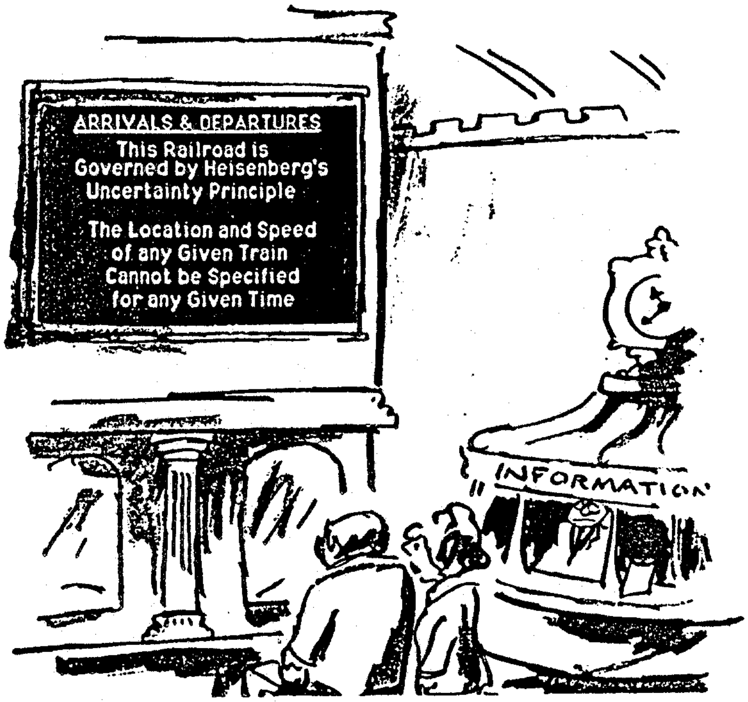
(e) Gebruik (d) om te laten zien dat voor de planaire starre rotator het theorema van Ehrenfest luidt

$$\frac{\mathrm{d}\langle\varphi\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{\langle L\rangle}{I} \ , \qquad \frac{\mathrm{d}\langle L\rangle}{\mathrm{d}t} = -\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}\varphi}\right\rangle \ .$$

---

[32] Vermenigvuldig links en rechts van het gelijkteken met s^l, sommeer over l en druk elk van de sommaties tenslotte uit in de genererende functie $(1-2ws+s^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(w)s^l$.

[33] Gebruik volledige inductie.



Cartoon door Sidney Harris© (reproduced with permission).

38. **Impulsmoment ◘.**

(a) Toon aan, uitgaande van de commutatierelaties $[L_x, L_y] = \mathrm{i}\hbar L_z$, $[L_y, L_z] = \mathrm{i}\hbar L_x$ en $[L_z, L_x] = \mathrm{i}\hbar L_y$, dat voor het impulsmoment $\mathbf{L}$ geldt

$$[\mathbf{L}^2, L_z] = 0 \ .$$

(b) In het algemeen geldt $[A, B] = 0$ als twee operatoren A en B een gemeenschappelijk stel eigenfuncties hebben. Bewijs dit. Bewijs, voor niet-ontaarde eigentoestanden, ook het omgekeerde, d.w.z. dat twee commuterende operatoren een gemeenschappelijk stel eigenfuncties hebben.

(c) Het impulsmoment bevindt zich in een eigentoestand $|lm\rangle$ van zowel $\mathbf{L}^2$ als L_z. Bekend verondersteld mag worden dat de bijbehorende eigenwaarden gelijk zijn aan $l(l+1)\hbar^2$ en $m\hbar$, en voorts dat

$$L_\pm |lm\rangle = \hbar[l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} |l, m \pm 1\rangle \ .$$

Toon aan dat in de eigentoestand $|lm\rangle$ voor de verwachtingswaarden geldt

$$\langle L_z \rangle = m\hbar \ ,$$

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0 \ ,$$

$$\langle \mathbf{L}^2 \rangle = l(l+1)\hbar^2 \ ,$$

$$\langle L_x L_z \rangle = \langle L_y L_z \rangle = 0 \ ,$$

$$\langle L_z^2 \rangle = m^2\hbar^2 \ ,$$
$$\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \tfrac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2 \ .$$

(d) De z'-as maakt een hoek α met de z-as. Wat zijn voor de eigentoestand $|lm\rangle$ de verwachtingswaarden van $L_{z'}$ en $L_{z'}^2$?

(e) Van een impulsmoment is slechts bekend dat meting van $\mathbf{L}^2$ het resultaat $6\hbar^2$ heeft opgeleverd. Welke resultaten zal een daarop volgende meting van L_x, L_y of L_z kunnen opleveren?

39. **H-atoom: verwachtingswaarden.** Toon aan dat voor het waterstofatoom in een stationaire toestand $|nlm\rangle$ geldt [34]

(a) $\langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle = 0$, [35]

(b) $\langle r \rangle = \tfrac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]a_0$,

(c) $\langle r^2 \rangle = \tfrac{1}{2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]n^2 a_0^2$,

(d) $\left\langle \dfrac{1}{r^3} \right\rangle = \dfrac{2}{l(l+1)(2l+1)n^3 a_0^3}$. [36]

40. **H-atoom ◘.**

(a) Laat zien dat de stationaire toestanden van het waterstofatoom geschreven kunnen worden in de gefactoriseerde vorm

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \ ,$$

waarin r, θ, φ bolcoördinaten voorstellen en $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ de sferische harmonischen. [37] Maak hierbij gebruik van de operator voor de kinetische energie in bolcoördinaten

$$K = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right] \ ,$$

[34] (a) is gemakkelijk algemeen te bewijzen. Maak voor (b) en (c) gebruik van de genererende functie voor Laguerre-polynomen, maar u kunt zich ook beperken tot het uitwerken van enkele specifieke gevallen, bijvoorbeeld $|nlm\rangle = |100\rangle$ en $|21m\rangle$. Merk verder op dat voor een waterstof-achtig atoom (He^+, defect in halfgeleider) a_0 overal vervangen moet worden door a_0/Z.

[35] Het H-atoom bezit in een stationaire toestand dus geen elektrisch dipoolmoment, zoals Bohr in 1913 al voorspelde!

[36] De verwachtingswaarde $\langle r^{-3} \rangle$ bepaalt de hyperfijnstructuur, d.w.z. de dipool-dipool-interactie tussen het magnetisch moment van de kern enerzijds en de magnetische momenten verbonden aan het baanmoment $\mathbf{l}$ en de spin $\mathbf{s}$ van het elektron anderzijds. Ter plaatse van de kern, waar s-elektronen ($l = 0$) een zekere waarschijnlijkheidsdichtheid bezitten, divergeert r^{-3}. Desondanks levert precieze berekening een fraaie uitdrukking op voor de hyperfijninteractie van s-elektronen, namelijk de Fermi-contactinteractie $\mathcal{H}_{\rm hfs} = -(8\pi/3)\boldsymbol{\mu}_{\rm e}\cdot\boldsymbol{\mu}_{\rm N}\delta(\mathbf{r})$, waarin $\boldsymbol{\mu}_{\rm e}$ en $\boldsymbol{\mu}_{\rm N}$ de magnetische momenten van elektron en kern zijn.

[37] $Y_{00}(\theta,\varphi) = (1/4\pi)^{1/2}$, $Y_{10}(\theta,\varphi) = (3/4\pi)^{1/2}\cos\theta$, $Y_{1,\pm1}(\theta,\varphi) = \mp(3/8\pi)^{1/2}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$.

waarin $\mathbf{L}$ het impulsmoment en μ de gereduceerde massa is. Laat zien dat de Schrödinger-eigenwaardevergelijking waaraan de radiale eigenfunctie $R_{nl}(r)$ moet voldoen luidt

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right] R(r) = ER(r) \ .$$

(b) Wat is de fysische betekenis van de term met $l(l+1)$?

(c) Toon aan dat de radiale eigenfuncties van een elektron in een 1s-baan ($n = 1$, $l = 0$) en een 2p-baan ($n = 2$, $l = 1$), respectievelijk

$$R_{10}(r) = N_{10}\mathrm{e}^{-r/a_\mu} \ ,$$
$$R_{21}(r) = N_{21}(r/a_\mu)\mathrm{e}^{-r/2a_\mu} \ ,$$

inderdaad oplossingen zijn van de radiale Schrödinger-vergelijking; N_{10} en N_{21} zijn normeringsconstanten; $a_\mu = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/\mu e^2$ is de straal van de eerste Bohrse baan.

(d) Bereken ook de bijbehorende energieën.

(e) Geef de definitie van de pariteitsoperator. Wat is de pariteit van $\psi_{100}(r,\theta,\varphi)$ en $\psi_{210}(r,\theta,\varphi)$?

(f) Vat de kern op als een bolletje met straal R. Laat zien dat gemiddeld over het volume van de kern een 1s-elektron een waarschijnlijkheidsdichtheid ongelijk nul heeft en een 2p-elektron een verwaarloosbare waarschijnlijkheidsdichtheid van de orde $(R/a_\mu)^2$.

(g) Laat zien dat in een willekeurige toestand de verwachtingswaarde van de energie alsmede de verwachtingswaarden $\langle \mathbf{L}^2\rangle$ en $\langle L_z\rangle$ van het impulsmoment $\mathbf{L}$ behouden zijn, d.w.z. tijdsonafhankelijk zijn.

(h) Kan een tijdsafhankelijke storing $\mathcal{H}^{(1)} = -\mathbf{p}\cdot\mathbf{E}\cos\omega t$, met $\mathbf{p} = e\mathbf{r}$ het elektrisch dipoolmoment, een overgang induceren tussen de toestanden ψ_{210} en ψ_{100}? Niet-nul zijnde integralen hoeven niet te worden uitgewerkt.

41. **Tritium-atoom ◘.** Tritium (^{3}H) is een isotoop van waterstof: Een enkel elektron is onderhevig aan de Coulomb-potentiaal $V(r) = -Ze^2/4\pi\varepsilon_0 r$ van een enkelvoudig geladen kern ($Z = 1$). Het is dus een voorbeeld van een probleem met een centrale potentiaal, zodat de stationaire toestanden geschreven kunnen worden in de gefactoriseerde vorm

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \ ,$$

waarin r,θ,φ bolcoördinaten voorstellen en $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ sferische harmonischen.[38]

(a) Bereken de verwachtingswaarde van de positie $\mathbf{r}$ van het elektron in een stationaire toestand. Bereken voor de 1s-grondtoestand de verwachtingswaarde van de radius r. Wat is de meest waarschijnlijke radius?

(b) Het tritium-atoom bevindt zich in de grondtoestand wanneer de ^{3}H-kern door radioactieve β^--emissie plotseling vervalt in een ^{3}He-kern. Hierbij verlaat het β^--deeltje, dat een energie heeft van 18.6 keV, het nieuw gevormde He$^+$-ion zonder noemenswaardige invloed op de golffunctie van het om de kern voortbewegende elektron. Beredeneer dat het He$^+$-ion zich direct na het radioactieve verval niet in zijn grondtoestand bevindt.

[38] De in het vraagstuk benodigde integralen zijn $\int_0^\infty r^n\mathrm{e}^{-sr}\,\mathrm{d}r = n!/s^{n+1}$ (Laplace-getransformeerde van r^n). Voorts is $Y_{00}(\theta,\varphi) = (4\pi)^{-1/2}$.

(c) Een willekeurige golffunctie $\Psi(r,\theta,\varphi)$ van het elektron kan ontbonden worden in de eigenfuncties $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ volgens $\Psi(r,\theta,\varphi) = \sum_{nlm} c_{nlm}\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ met

$$c_{nlm} = \int \psi^*_{nlm}(r,\theta,\varphi)\Psi(r,\theta,\varphi)\, r^2\, \mathrm{d}r\, \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi \ ,$$

waarbij geïntegreerd wordt over het gehele volume. Bewijs deze uitdrukking.

(d) Aannemend dat het tritium-atoom zich voor het radioactieve verval in zijn grondtoestand bevond, welke kans heeft men om direct aansluitend aan het verval het He-atoom aan te treffen in een toestand met $l \neq 0$? En welke kans is er de 1s- en 2s-toestanden aan te treffen?[39] Welke spectrale emissies verwacht men na het radioactieve verval?

42. **Deeltje in bolvormige potentiaalput.** Een kwantummechanisch deeltje met massa m bevindt zich in een driedimensionale bolvormige potentiaalput met oneindig hoge wanden, zodat $V(r) = 0$ voor $r < a$ en $V(r) \to \infty$ voor $r \geq a$.

(a) Laat zien, gebruik makend van de kinetische energie in bolcoördinaten

$$K = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right] \ ,$$

waarin $\mathbf{L}$ het impulsmoment en μ de gereduceerde massa is, dat dat voor een centrale potentiaal de stationaire toestanden geschreven kunnen worden in de vorm $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$, waarin $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ de sferische harmonischen voorstellen.

(b) Laat vervolgens zien dat het radiale deel $R_{nl}(r)$ na de substitutie $R_{nl}(r) = u(r)/r$ voldoet aan de Schrödinger-eigenwaardevergelijking

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)\right)u(r) = Eu(r) \ .$$

(c) Wat zijn de randcondities voor $u(r)$? Bepaal de genormeerde eigenfuncties en energie-eigenwaarden van de stationaire toestanden met impulsmoment $l = 0$.

(d) Op het tijdstip $t = 0$ is de toestand gegeven door $\Psi(r,\theta,\varphi,0) = (\psi_0 + \psi_1)/\sqrt{2}$, waarin ψ_0 en ψ_1 de eigenfuncties van de grondtoestand en de laagste aangeslagen toestand met impulsmoment $l = 0$ voorstellen. Bereken de tijdsafhankelijke golffunctie $\Psi(r,\theta,\varphi,t)$. Bereken ook de verwachtingswaarde $\langle E\rangle$ van de energie.

(e) Laat zien dat voor $l = 1$ het radiale deel gegeven wordt door[40]

$$u(r) = \frac{\sin(k_n r)}{k_n r} - \cos(k_n r) \ .$$

Bepaal de mogelijke k_n en geef een schatting van de bijbehorende energie-eigenwaarden.

(f) Wat de pariteit van de toestanden voor $l = 0$ en $l = 1$?

(g) Wat is ontaardingsgraad van de energie-eigenwaarden? Verschilt deze van het H-atoom, eveneens een voorbeeld van een centrale potentiaal?

---

[39] De resulterende verwachtingswaarde van de energie is lager dan de oorspronkelijke. Het verschil ter grootte van enkele eV moet uiteindelijk opgenomen zijn door het β^--deeltje!

[40] De algemene oplossing voor $R_{nl}(r)/q$ wordt gegeven door de sferische Bessel-functies $j_l(\rho)$ met $\rho = k_n r$.

43. **Deeltje in bolschil: eigentoestanden en druk ◘.** We beschouwen een kwantummechanisch deeltje dat zich bevindt in een bolschil. Een voorbeeld hiervan is een elektron in een metaallaagje van uniforme dikte aangebracht op een colloïdaal bolletje van SiO_2. Voor de bijbehorende centrale potentiaal schrijven we $V(r) = 0$ in het interval $a < r < b$ en $V(r) \to \infty$ daarbuiten. Zoals gebruikelijk maken we voor de oplossing van dit probleem gebruik van de gemeenschappelijke eigenfuncties van $\mathbf{L}^2$ en L_z, waarin $\mathbf{L}$ het impulsmoment voorstelt, d.w.z. de sferische harmonischen $Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

(a) Laat zien, voor het gemak zonder ontaarding te beschouwen, dat twee operatoren een gemeenschappelijk stel eigenfuncties hebben als ze commuteren. Pas de zojuist bewezen stelling toe op $\mathbf{L}^2$, L_z en de Hamiltoniaan behorende bij $V(r)$ in poolcoördinaten,

$$\mathcal{H}(r, \theta, \varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right] + V(r) \ ,$$

om aan te tonen dat $\mathbf{L}^2$, L_z en $\mathcal{H}$ inderdaad een gemeenschappelijke stel eigenfuncties hebben. Hierbij gaan we uit van $[L_x, L_y] = \mathrm{i}\hbar L_z$ met cyclische verwisseling van x, y en z om te bewijzen dat $[\mathbf{L}^2, L_z] = 0$.

(b) Laat vervolgens zien dat de gemeenschappelijke eigenfuncties van $\mathbf{L}^2$, L_z en $\mathcal{H}$ geschreven kunnen worden in de vorm $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Toon ook aan dat het radiale deel $R_{nl}(r)$ voldoet aan de ééndimensionale Schrödinger-vergelijking

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + V_{\text{eff}}(r)\right)u(r) = Eu(r) \ , \tag{1}$$

waarin $u(r) = rR_{nl}(r)$ en $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + l(l+1)\hbar^2/2mr^2$. Wat is de fysische betekenis van de tweede term in $V_{\text{eff}}(r)$? Aan welke randvoorwaarden moet $u(r)$ voor de onderhavige $V(r)$ voldoen?

(c) Laat vervolgens zien dat voor de onderhavige $V(r)$ en $l = 0$ de oplossingen van de tijdsafhankelijke Schrödinger-vergelijking luiden

$$E_n = \frac{\hbar^2\alpha_n^2}{2m} \qquad \text{en} \qquad \psi_{n00}(r, \theta, \varphi) = N_n\frac{\sin[\alpha_n(r-a)]}{r} \ ,$$

waarin $\alpha_n = n\pi/(b-a)$, $N_n = [1/2\pi(b-a)]^{1/2}$ en n een geheel getal ≥ 1 is.

(d) Tenslotte berekenen de druk die het elektron in de toestand ψ_{n00} uitoefent of het SiO_2-bolletje. Daartoe variëren we de straal a met een klein, negatief bedrag Δa, en wel zodanig langzaam dat het elektron zich in de zich wijzigende toestand blijft bevinden. De verrichte arbeid bedraagt dan $-(\mathrm{d}E_n/\mathrm{d}a)\Delta a$ en de totale kracht op het bolletje bijgevolg $\mathrm{d}E_n/\mathrm{d}a$. Hieruit leiden we vervolgens een uitdrukking voor de druk af. Is de druk microscopisch, mesoscopisch of macroscopisch voor SiO_2-bolletjes en metaallaagjes met afmetingen van enkele nanometers?

44. **Operatoren.**

(a) Bewijs dat voor een willekeurige lineaire operator A en een willekeurig complex getal c geldt dat

$$(cA)^\dagger = c^* A^\dagger \ .$$

(b) Bewijs dat voor twee lineaire operatoren A en B geldt dat

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \ .$$

PRIJSVRAAG

Maak zelf een tentamenopgave! De opgave moet representatief zijn voor een deel van de behandelde stof. Een door u ontworpen opgave kan bij de docent worden ingeleverd tot uiterlijk een week voor het eerstvolgende tentamen.

Prijzen: Uw opgave wordt — ook voor u geheel onverwacht — verwerkt in het tentamen. Verder kan aan inzenders "credit" verleend worden.

(c) Bewijs dat de operator $C = \mathrm{i}[A,B]$ hermitisch is als A en B hermitisch zijn.

45. **Matrixrepresentatie van impulsmoment.**

(a) Geef voor $j = \frac{1}{2}$, 1 en $\frac{3}{2}$ de matrixrepresentatie van de impulsmoment-operatoren J_+, J_-, J_x, J_y, J_z en $\mathbf{J}^2$ op basis van de eigenvectoren van J_z en $\mathbf{J}^2$. Welke matrices zijn hermitisch?

(b) Diagonaliseer de matrices voor J_x, J_y, J_z en $\mathbf{J}^2$ teneinde de eigenwaarden te bepalen.

(c) Bepaal ook de eigenvectoren van J_x en J_y voor de gevallen $j = \frac{1}{2}$ en 1.

46. **Inproduct.** Toon aan dat het inproduct $\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{d}$ van twee toestandsvectoren $\mathbf{c}$ en $\mathbf{d}$ behouden is onder een unitaire transformatie.

47. **Matrixrepresentatie.** Op de basis van twee orthonormale toestanden ψ_1 en ψ_2 heeft de Hamiltoniaan van een zeker kwantummechanisch systeem de matrixgedaante

$$\mathcal{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Twee andere fysische grootheden A en B hebben de matrixgedaante

$$A = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{en} \qquad B = \lambda \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$$

met λ reëel.

(a) Bereken de eigentoestanden en de bijbehorende eigenwaarden van A en B.

Op het tijdstip $t = 0$ is de toestand van het systeem $\Psi = a(\psi_1 + \psi_2)$, met a een normeringsconstante.

(b) Bereken de tijdsafhankelijke toestand $\Psi(t)$.

(c) Bereken de tijdsafhankelijke verwachtingswaarden $\langle A \rangle$ en $\langle B \rangle$.

48. **Anisotrope harmonische oscillator.** Een anisotrope harmonische oscillator in drie dimensies wordt beschreven door de Hamiltoniaan ($\omega_1^2 \neq \omega_2^2$)

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \tfrac{1}{2}\mu\omega_1^2(x^2 + y^2) + \tfrac{1}{2}\mu\omega_2^2 z^2 .$$

(a) Geef de eigentoestanden van de Hamiltoniaan in termen van de eigentoestanden ψ_n van de eendimensionale harmonische oscillator. Geef tevens de energie-eigenwaarden en hun ontaarding.

(b) Ga na of eigentoestanden van $\mathcal{H}$ tevens eigentoestanden van $\mathbf{L}^2$ of van L_z kunnen zijn.

(c) Bespreek het resultaat in relatie tot de symmetrie van $\mathcal{H}$.

49. **Som van impulsmomenten.** We beschouwen een impulsmoment dat de som is van twee afzonderlijke impulsmomenten, zodat $\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$. We noteren als $|jm\rangle$ de impulsmoment-eigentoestanden van $\mathbf{J}^2$ en J_z bij gegeven kwantumgetallen j_1 en j_2. Deze toestanden zijn dus lineaire combinaties van de toestanden $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle$ bij vaste waarden van j_1 en j_2.

(a) Bewijs dat de toestand $|jm\rangle$ eigentoestand is van $\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$.[41]

(b) Bereken de bijbehorende eigenwaarde.

(c) Bereken de verwachtingswaarde van $\mathbf{J}^2$ in de toestand $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$.[42]

50. **Begrippen ⌑.** Licht kort en bondig toe de navolgende begrippen (d.w.z. geef essentiële ideeën in relatie tot de kwantummechanica en vermijd afleidingen; **In der Beschränkung zeigt sich der Meister bzw. die Meisterin.**):

(a) Ultravioletcatastrofe

(b) Foto-elektrisch effect

(c) Golffunctie

(d) Eigenfunctie

(e) Verwachtingswaarde

(f) Correspondentieprincipe

(g) Onzekerheidsrelatie

(h) Ontaarding

(i) Pariteit

(j) Clebsch-Gordan-coëfficiënten

51. **Spin-baankoppeling.** Een elektron in een atoom bevindt zich in een toestand met baanimpulsmoment $L = 1$.

(a) Geef de mogelijke waarden van het kwantumgetal voor het totale impulsmoment $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

(b) Geef de expliciete uitdrukking voor de toestanden $|jm_j\rangle$ bij de maximale waarde van j, in termen van de toestanden $|lsm_l m_s\rangle = |lm_l\rangle|sm_s\rangle$.[43]

(c) Geef nu de expliciete uitdrukking voor de andere toestanden $|jm_j\rangle$.

(d) Bereken de waarde van $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ voor de berekende toestanden.[44]

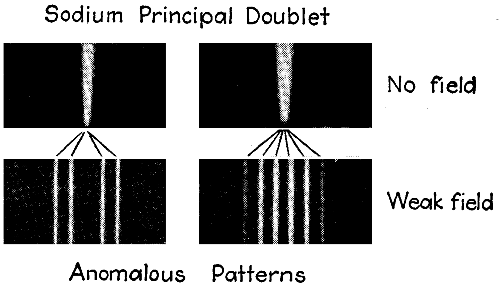
52. **Zeeman-effect van Na.** In 1896 ontdekte P. Zeeman [Philosophical Magazine **5**, 226 (1897)] dat de voor Na karakteristieke spectraallijnen D_1 en D_2 in het gele deel van het zichtbare spectrum verbreed worden wanneer een vlam met oplichtend Na tussen de polen van een sterke elektromagneet wordt geplaatst. Dit bevestigde de toen prille theorie van elektronen in materie, hetgeen H. A. Lorentz onmiddellijk uiteenzette. Latere

[41] Druk $\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$ uit in $\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2$ en $\mathbf{J}_2^2$.

[42] Druk $\mathbf{J}^2$ uit in J_z, $J_{1\pm}$ en $J_{2\pm}$.

[43] Ga uit van de toestand met $m_l = l$ en $m_s = s$, en pas herhaald J_- toe.

[44] Gebruik opgave 49(b).



Zeeman-effect van de D_1 en D_2 optische spectraallijnen van het Na-atoom, waargenomen loodrecht op het magnetische veld. [H. E. White, *Introduction to Atomic Spectra* (McGraw-Hill, 1934)].

experimenten lieten zien dat de spectraallijnen worden gesplitst in meerdere componenten met verschillende polarisatie. Deze splitsing, evenals de daaraan ten grondslag liggende opheffing van de ontaarding van atomaire toestanden door een magnetische veld, wordt nu het Zeeman-effect genoemd.

De elektronenwolk van het Na-atoom heeft in de grondtoestand de configuratie $(3\mathrm{s})\,{}^2\mathrm{S}_{1/2}$ met totaal impulsmoment $J=\frac{1}{2}$.[45] Voor het angulaire deel van de eigenfuncties van de energie kunnen dus $|JM\rangle$ met vaste $J=\frac{1}{2}$ en $M=\pm\frac{1}{2}$ gekozen worden. Deze twee toestanden zijn ontaard in afwezigheid van een magnetisch veld. Hun energie noemen we E_0.

(a) We beschouwen de Hamiltoniaan $\mathcal{H}$ in de matrixrepresentatie op basis van de eigenfuncties van de energie. Hoe ziet de submatrix van $\mathcal{H}$ behorende bij de tweevoudig ontaarde grondtoestand eruit?

We leggen nu een magnetisch veld gericht langs de z-as aan. Het magnetisch veld koppelt met het impulsmoment via de met de impulsmomenten geassocieerde magnetisch momenten. De bijdrage tot de Hamiltoniaan van een magnetische veld langs de z-as met sterkte B_z is[46]

$$\mathcal{H}' = g_J \mu_{\mathrm{B}} B_z (J_z/\hbar) \ ,$$

waarin J_z de component van het impulsmoment langs de z-as is; $\mu_{\mathrm{B}} = e\hbar/2m_{\mathrm{e}}$ is het Bohr-magneton; g_J is de Landé-g-factor,

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)} \ ,$$

[45] In de spectroscopische notatie wordt een atomair *niveau* aangeduid met ${}^{2S+1}\mathrm{L}_J$, waarin L = S, P, D, F, G, H, ... het baanimpulsmoment aangeeft. In volgorde, $L=0,1,2,3,4,5,\ldots$. De superscript ${}^{2S+1}$, de spinmultipliciteit van het niveau, wordt uitgesproken als 'singlet' ($S=0$), 'doublet' ($S=\frac{1}{2}$), 'triplet' ($S=1$), 'kwartet' ($S=\frac{3}{2}$), 'kwintet' ($S=2$), et cetera. Een atomaire *toestand* wordt mede bepaald door het kwantumgetal M_J, zodat een atomair niveau $2J+1$ atomaire toestanden omvat.

[46] Wij volgen de definitie van $\mathbf{J}$ zoals gekozen in het boek. Meestal echter kiest men in dit verband $\mathbf{J}\hbar$ als definitie van het impulsmoment, waarmee $\hbar$ uit de formule verdwijnt.

zodat $g_J = 2$ voor $(3\mathrm{s})\,{}^2\mathrm{S}_{1/2}$.[47]

(b) Stel de matrix van $\mathcal{H} + \mathcal{H}'$ op. Wat zijn de eigenwaarden van $\mathcal{H} + \mathcal{H}'$?

(c) Bereken op analoge wijze de eigenwaarden voor een veld langs de x-as. Bereken in dit geval ook de eigenvectoren.

(d) Bereken op de wijze van (a) en (b) ook de energieniveaus in een veld langs de z-as van de eerste optisch aangeslagen toestand $(3\mathrm{p})\,{}^2\mathrm{P}_{1/2}$ en de tweede optisch aangeslagen toestand $(3\mathrm{p})\,{}^2\mathrm{P}_{3/2}$ (deze liggen in energie niet ver uit elkaar). De totale impulsmomenten van deze toestanden zijn dus $J = \frac{1}{2}$ respectievelijk $J = \frac{3}{2}$.

De spectraallijnen D_1 en D_2 van Na corresponderen met de overgangen $(3\mathrm{p})\,{}^2\mathrm{P}_{1/2} \to (3\mathrm{s})\,{}^2\mathrm{S}_{1/2}$ respectievelijk $(3\mathrm{p})\,{}^2\mathrm{P}_{3/2} \to (3\mathrm{s})\,{}^2\mathrm{S}_{1/2}$. Hun golflengten in vacuüm zijn 589.76 respectievelijk 589.17 nm. Wat betreft het magnetische kwantumgetal voldoen de toegestane overgangen aan de selectieregel $\Delta M = 0$ (π-gepolariseerd licht) en $\Delta M = \pm 1$ (σ-gepolariseerd licht).

(e) Bereken en teken het spectrum als functie van de golflengte[48] zonder magnetisch veld en in een magnetisch veld van 1 T.[49]

53. **Elektron in magnetisch veld: spinprecessie ◘.** Een elektron, dat een spin $\mathbf{S}$ ($S = \frac{1}{2}$) en een magnetische moment $-g\mu_\mathrm{B}\mathbf{S}/\hbar$ met $g = 2.0023$ bezit, wordt geplaatst in een magnetisch veld $\mathbf{B}$ langs de z-as. Het elektron wordt dus beschreven door de Hamiltoniaan

$$\mathcal{H} = g\mu_\mathrm{B} B S_z/\hbar \ .$$

De spin $\mathbf{S}$ wordt, zoals gebruikelijk, gerepresenteerd door de Pauli-matrices

$$S_x = \tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \quad S_y = \tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \ , \quad S_z = \tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ .$$

(a) Laat zien dat S_x, S_y en S_z voldoen aan de commutatierelaties

$$[S_x, S_y] = \mathrm{i}\hbar S_z \ , \quad [S_y, S_z] = \mathrm{i}\hbar S_x \ , \quad [S_z, S_x] = \mathrm{i}\hbar S_y \ .$$

(b) Wat betekent het als operatoren niet commuteren?

(c) Wat zijn de eigenvectoren en de bijbehorende eigenwaarden van $\mathcal{H}$?

---

[47] De Landé-g-factor g_J van het niveau ${}^{2S+1}\mathrm{L}_J$ is de verhouding tussen het magnetische moment uitgedrukt in eenheden μ_B en het impulsmoment uitgedrukt in eenheden $\hbar$. Deze verhouding is onafhankelijk van M_J. De formule voor g_J kan worden afgeleid door in een kwantummechanische berekening de magnetisch momenten $\boldsymbol{\mu} = -(\mathbf{L}/\hbar)\mu_\mathrm{B}$ van de baan en $\boldsymbol{\mu} = -g_\mathrm{e}(\mathbf{S}/\hbar)\mu_\mathrm{B}$ van de spin vectorieel op te tellen en het resultaat to projecteren op het totale impulsmoment $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. In de afleiding wordt de g-waarde van de elektronspin op $g_\mathrm{e} = 2$ gesteld. De experimentele waarde is $g_\mathrm{e} = 2.002319304386(20)$, in overeenstemming met de relativistische Dirac-vergelijking voor spin $= \frac{1}{2}$ fermionen en kwantum-elektrodynamische correcties.

[48] Het is gebruik een spectrum te tekenen als een aantal verticale lijnen op een horizontale schaal van frequentie of golflengte. De hoogte van de lijnen geeft, indien bekend, de relatieve intensiteit weer.

[49] Bij 1 T is de Zeeman-splitsing relatief klein. In een zeer sterk magnetisch veld benadert of overtreft de magnetische splitsing de afstand tussen de D-lijnen en wordt het spectrum complexer (Paschen-Back-effect).

UIT DE WOORDENLIJST NEDERLANDSE TAAL

kwant, de (m.), kwan·ten.
kwan·ti·fi·ceer·baar, kwan·ti·fi·ceer·ba·re.
kwan·ti·fi·ce·ren, kwan·ti·fi·ceer·de, ge·kwan·ti·fi·ceerd.
kwan·ti·ta·tief, kwan·ti·ta·tie·ve.
kwan·ti·teit, de (v.), kwan·ti·tei·ten.
kwan·tum, het, kwan·ta.
kwan·tum·fy·si·ca, de (v.)
kwan·tum·kor·ting, de (v.), kwan·tum·kor·ting·en.
kwan·tum·me·cha·ni·ca, de (v.).
kwan·tum·me·cha·nisch, kwan·tum·me·cha·ni·sche.
kwan·tum·the·o·rie, de (v.).
·
quant, het, quan·ten.

(d) Bewijs dat in een willekeurige toestand de verwachtingswaarden van S_x en S_y voldoen aan

$$\mathrm{d}\langle S_x\rangle/\mathrm{d}t = -g\mu_\mathrm{B}B\langle S_y\rangle/\hbar\ , \qquad \mathrm{d}\langle S_y\rangle/\mathrm{d}t = +g\mu_\mathrm{B}B\langle S_x\rangle/\hbar\ ,$$

terwijl $\langle S_z\rangle$ behouden is.

(e) Laat zien dat dit correspondeert met precessiebeweging van $\langle \mathbf{S}\rangle$ om de z-as met hoekfrequentie $\omega = g\mu_\mathrm{B}B/\hbar$.

(f) Bereken de genormeerde eigenvectoren en bijbehorende eigenwaarden van S_x. Op tijdstip $t = 0$ bevindt de elektronspin zich in één van de eigentoestanden van S_x. Hoe evolueert deze toestand met de tijd?

(g) Vervolgens wordt op tijdstip t een meting verricht van S_z. Wat zijn de mogelijke uitkomsten en wat de waarschijnlijkheden van deze uitkomsten?

54. **Elektron in magnetisch veld: eigentoestanden ◘.** We beschrijven, zoals gebruikelijk, de spin $\mathbf{S}$ van een elektron door middel van de Pauli-matrices (zie opgave 53) op basis van de eigentoestanden $|M\rangle$ van $\mathbf{S}^2$ en S_z ($M = \pm\frac{1}{2}$). Het elektron wordt onderworpen aan een magnetisch veld ter grootte B_x langs de x-as. De Hamiltoniaan luidt derhalve

$$\mathcal{H} = g\mu_\mathrm{B}B_xS_x/\hbar\ .$$

(a) Laat zien dat

$$\mathcal{H}\,|{+\tfrac{1}{2}}\rangle = C\,|{-\tfrac{1}{2}}\rangle \qquad \text{en} \qquad \mathcal{H}\,|{-\tfrac{1}{2}}\rangle = C\,|{+\tfrac{1}{2}}\rangle\ ,$$

waarin C een constante voorstelt. Bepaal C. Gebruik de zojuist afgeleide relaties om de eigentoestanden en de bijbehorende eigenwaarden van de energie te vinden.

(b) Wanneer het elektron zich op tijdstip $t = 0$ in de toestand $|\psi\rangle = |{+\frac{1}{2}}\rangle$ bevindt, hoe ontwikkelt $|\psi\rangle$ zich dan met de tijd?

(c) Hoe groot zijn dan de kansen dat het elektron zich op een later tijdstip in de toestanden $|{+\frac{1}{2}}\rangle$ en $|{-\frac{1}{2}}\rangle$ bevindt?

(d) Zijn de beweringen "Indien het elektron zich op zeker tijdstip in een eigentoestand van de energie bevindt, dan is de verwachtingswaarde van een expliciet tijdsonafhankelijke fysische grootheid constant in de tijd" en "In welke toestand het elektron zich op zeker tijdstip ook bevindt, de verwachtingswaarde van de energie is constant in de tijd" waar of niet waar? Waarom?

(e) Bewijs dat ten gevolge van een storings-Hamiltoniaan $\mathcal{H}'$ de energie E_n van de eigentoestand $|\psi_n\rangle$ in eerste orde wijzigt met $E_n^{(1)} = \langle\psi_n|\mathcal{H}'|\psi_n\rangle$. Bereken hiermee vervolgens de verandering van de eigenenergieën van het elektron ten gevolge van een extra magnetisch veld B_y langs de y-as ($B_y \ll B_x$). Doe hetzelfde voor een extra magnetisch veld B_z langs de z-as ($B_z \ll B_x$).

(f) Bereken ook de wijzigingen in tweede orde, gebruik makend van de algemene uitdrukking $E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} |\langle\psi_k|\mathcal{H}'|\psi_n\rangle|^2/(E_n - E_k)$. In hoeverre wijkt de energie tot en met tweede orde af van het exacte resultaat?

55. **Twee-atomig molecuul: vibratie-rotatieniveaus ◘.**[50] Twee-atomige moleculen, zoals O_2, N_2 en CO, zijn voorbeelden van het Schrödinger-eigenwaardeprobleem met een centrale potentiaal, namelijk de potentiaal $V(r)$ tussen de twee atomen. $V(r)$ heeft een minimum bij de interatomaire evenwichtsafstand r_0. De twee atomen kunnen ten opzichte van elkaar vibreren. Daarenboven kan het molecuul als geheel roteren als een halter. Beide bewegingen zijn uiteraard gekwantiseerd. In onderstaande passen we stapsgewijze resultaten uit de kwantummechanica toe. Wat betreft de notatie, het impulsmoment van een twee-atomig molecuul wordt gebruikelijk aangeduid met $\mathbf{J}\hbar$, en de kwantumgetallen daarvan met J, M. We gebruiken bolcoördinaten (r, θ, φ).

(a) Toon allereerst aan dat voor een centrale potentiaal de eigenfuncties geschreven kunnen worden als

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{JM}(\theta,\varphi) \ ,$$

waarin $Y_{JM}(\theta,\varphi)$ de sferische harmonischen voorstellen. Maak hierbij gebruik van de operator voor de kinetische energie in bolcoördinaten

$$K = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\mathbf{J}^2}{\hbar^2 r^2}\right] \ ,$$

met μ de gereduceerde massa, en van het feit dat de functies $Y_{JM}(\theta,\varphi)$ eigenfuncties zijn van $\mathbf{J}^2$.

(b) We voeren in de radiale eigenfuncties $u(r) = rR(r)$. Laat zien dat $u(r)$ moet voldoen aan de Schrödinger-eigenwaardevergelijking

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)\right)u(r) = Eu(r) \ .$$

Wat is de betekenis van de term $J(J+1)\hbar^2/2\mu r^2$?

(c) We benaderen de potentiaal nu door de harmonische potentiaal $V(r) = \frac{1}{2}k(r-r_0)^2$, waarin $k = \mu\omega^2$ de krachtsconstante is. De resulterende eigenwaardevergelijking is niet analytisch oplosbaar, behalve voor $J = 0$, waarvoor het probleem van de interatomaire vibratie gereduceerd kan worden tot dat van een harmonische oscillatie rondom r_0.[51]

[50] Deze opgave is lang door de gegeven uitleg. Het rekenwerk is beperkt.

[51] De vergelijking onder (b) geldt strikt genomen voor $r \geq 0$ met als randvoorwaarde $u(0) = 0$. De amplitude van de vibratie is evenwel klein ten opzichte van r_0, zodat uitbreiding van het interval tot alle r slechts een geringe fout met zich meebrengt.

Geef voor dit geval de eigenwaarden E_v van de energie. Het vibratiekwantumgetal v wordt gedefinieerd analoog aan n van de harmonische oscillator. Geef ook de laagste drie eigenfuncties $u_v(r)$ in een schets, d.w.z. een kwalitatieve tekening die de essentiële punten weergeeft. Wat is de pariteit van deze functies? De laagste eigenwaarde is niet nul. Waarvan is dat een uiting?

(d) Ten einde ook de rotatie-energie te berekenen, vervangen we de term $J(J+1)\hbar^2/2\mu r^2$ door zijn Taylor-ontwikkeling rondom de evenwichtsafstand r_0

$$\frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} - \frac{J(J+1)\hbar^2}{\mu r_0^3}(r - r_0) + \cdots \; .$$

Beperken we ons tot de constante nulde-orde-term, dan is het probleem nog steeds analytisch oplosbaar. Laat zien dat de rotatie-energie bij de vibratie-eigenwaarden wordt opgeteld. Welke kwantumgetallen identificeren per saldo de eigentoestanden $\psi(r,\theta,\varphi)$ en welke kwantumgetallen zijn voldoende om de radiale eigenfuncties $u(r)$ te onderscheiden? Wat is de ontaardingsgraad van de eigentoestanden? Teken ook het energieschema. Bedenk hierbij dat $\hbar^2/2\mu r_0^2 \ll \hbar\omega$.[52]

(e) Toon aan dat in de benadering onder (d) de verwachtingswaarde $\langle r\rangle$ van de afstand tussen de atomen gelijk is aan r_0, onafhankelijk van de vibratie-rotatie-toestand.

(f) We berekenen de effecten van de tweede term in de Taylor-ontwikkeling door hem te beschouwen als eerste-orde-storings-Hamiltoniaan $\mathcal{H}^{(1)}$. Laat zien dat de eerste-orde-storingsenergie $E^{(1)}$ gelijk is aan nul.

(g) De tweede-orde-correctie op de energieën ten gevolge van $\mathcal{H}^{(1)}$ is niet nul, maar gelijk aan

$$E^{(2)} = -DJ^2(J+1)^2 \quad \text{met} \quad D = \hbar^4/2\mu^3\omega^2 r_0^6 \; .$$

De tweede-orde-energie $E^{(2)}$, die dezelfde is voor alle vibratietoestanden, is één van de bijdragen tot de energie ten gevolge van het feit dat een roterend molecuul enigszins is uitgerekt en daardoor langzamer roteert. Bereken $E^{(2)}$ met behulp van

$$E^{(2)} = \sum_{v'\neq v} \frac{|\langle\psi_{vJM}|\mathcal{H}^{(1)}|\psi_{v'JM}\rangle|^2}{E_v - E_{v'}} \; .$$

Gebruik hierbij dat voor de harmonische oscillator geldt

$$\langle u_n|(r-r_0)|u_{n'}\rangle = (\hbar/2\mu\omega)^{1/2}[(n+1)^{1/2}\delta_{n',n+1} + n^{1/2}\delta_{n',n-1}] \; .$$

56. **Inversie van het NH_3-molecuul ◘.** Het molecuul NH_3 heeft de vorm van een piramide met een driehoekig grondvlak ($x = 0$) van H-atomen en een N-atoom op een hoogte $x = a$ daarboven.

(a) Het N-atoom kan vibreren ten opzichte van het H_3-grondvlak in een bij benadering harmonische potentiaal $V(x) = \frac{1}{2}k(x-a)^2$. Teken de eigenenergie E_0 en de eigenfunctie

---

[52] De vibratiespectra in absorptie kunnen vervolgens worden berekend met de selectieregels $\Delta v = +1$, $\Delta J = +1$ (R-tak) en $\Delta v = +1$, $\Delta J = -1$ (P-tak), de vibratiespectra in emissie met het tegengestelde hiervan. Ook zuivere rotatiespectra zijn mogelijk. Deze voldoen aan $\Delta v = 0$, $\Delta J = \pm 1$.

$\psi_A(x)$ van de grondtoestand in relatie tot potentiaal $V(x)$, rekening houdend met het feit dat de amplitude van de vibratie kleiner is dan a.

(b) Het N-atoom kan zich met even veel recht beneden het H_3-grondvlak bevinden in de potentiaal $V(x) = \frac{1}{2}k(x+a)^2$, d.w.z. het NH_3-molecuul kan worden geïnverteerd. Voeg de eigenfunctie van de grondtoestand van het geïnverteerde molecuul, $\psi_B(x)$, toe aan de tekening onder (a). Indien we afzien van de hogere vibratietoestanden, die een veel grotere energie hebben, dan kent NH_3 dus twee eigentoestanden, $\psi_A(x)$ en $\psi_B(x)$, met bijbehorende tweevoudig ontaarde energie E_0. Stel de Hamiltoniaan in matrix-vorm op met ψ_A en ψ_B als basis.

(c) De toestanden ψ_A en ψ_B zijn door overlap zwak gekoppeld. Deze koppeling kan in rekening worden gebracht door aan de Hamiltoniaan een afdiagonaal, reëel te kiezen, energie-matrixelement $C = \langle\psi_A|C|\psi_B\rangle$ en zijn hermitisch geconjugeerde toe te voegen. Toon aan dat de eigenenergieën dan gelijk zijn aan $E_0 \pm C$ in plaats van E_0. Bereken ook de bijbehorende eigentoestanden ψ_+ en ψ_- uitgedrukt in ψ_A en ψ_B, en teken deze zoals onder (a) en (b).

(d) Laat zien dat ψ_+ en ψ_- even respectievelijk oneven pariteit hebben.

(e) Beredeneer tenslotte dat tussen ψ_+ en ψ_- een elektrische dipoolovergang mogelijk is.[53]

57. **Splitsing van energieniveau door een kubisch kristalveld.** De elektronenwolk van het Cu^{2+}-ion (elektronenconfiguratie $3d^9$) heeft in het grondniveau een totaal baanimpulsmoment $L = 2$. Het Cu^{2+}-ion kan dus beschreven worden met de $2L+1$ eigentoestanden[54]

$$|LM\rangle = R(r)Y_{L,M}(\theta,\varphi)\ . \qquad (M = -L, -L+1, \ldots, +L)$$

(a) Hoe ziet de Hamiltoniaan $\mathcal{H}$ van het Cu^{2+}-ion eruit in de matrixrepresentatie op basis van deze eigenfuncties?

In veel vaste stoffen bevindt het Cu^{2+}-ion zich in een elektrisch veld afkomstig van naburige negatief geladen ionen. Vaak heeft dit zogenaamde kristalveld in goede benadering kubische symmetrie, d.w.z. het is invariant voor symmetrie-operaties die een kubus in zichzelf overvoeren (rotaties om assen over 90°, om lichaamsdiagonalen over 120°, spiegelingen om vlakken, etc.). We denken het Cu^{2+}-ion in de oorsprong en plaatsen zes naburige ionen met effectieve lading Ze op afstanden $\pm a$ op de x-, y- en z-as. De kristalveldpotentiaal, d.w.z. de som van de Coulomb-potentialen afkomstig van de afzonderlijke

[53] De inversie-overgang van NH_3 werd door Townes en medewerkers gebruikt in de hen ontwikkelde MASER (Microwave Amplification through Stimulated Emission of Radiation). De optische LASER (Light Amplification through Stimulated Emission of Radiation) is vervolgens op het concept van de MASER gebaseerd.

[54] $|LM\rangle$ is opgebouwd uit producten van de golffuncties van de negen individuele 3d-elektronen. Omdat de elektronenwolk van Cu^{2+} opgevat kan worden als een gesloten schil ($3d^{10}$) minus één elektron, stelt $|LM\rangle$ desondanks de ladingsverdeling verdeling voor, zij het met tegengesteld teken. De spin van de elektronen ($S = \frac{1}{2}$) speelt in de berekening geen rol.

naburige ladingen, wordt in bolcoördinaten dan gegeven door[55]

$$V(\mathbf{r}) = \left(\frac{4\pi}{9}\right)^{1/2} Dq\left(\frac{7}{2}Y_{4,0}(\theta,\varphi) + \frac{(70)^{1/2}}{4}\left[Y_{4,4}(\theta,\varphi) + Y_{4,-4}(\theta,\varphi)\right]\right) ,$$

met Dq een constante afhankelijk van Z en a.[56] Deze potentiaal heeft inderdaad kubische symmetrie.

(b) Bepaal nu de eigenwaarden van de Hamiltoniaan $\mathcal{H} + V(\mathbf{r})$ inclusief de kristalveldpotentiaal.[57] De benodigde matrixelementen zijn

$$\langle 2,2|Y_{4,0}|2,2\rangle = \langle 2,-2|Y_{4,0}|2,-2\rangle = C ,$$

$$\langle 2,1|Y_{4,0}|2,1\rangle = \langle 2,-1|Y_{4,0}|2,-1\rangle = -4C ,$$

$$\langle 2,0|Y_{4,0}|2,0\rangle = 6C ,$$

$$\langle 2,2|Y_{4,4}|2,-2\rangle = \langle 2,-2|Y_{4,-4}|2,2\rangle = (70)^{1/2}C ,$$

met $C = 6/7(4\pi)^{1/2}$.[58] Alle andere matrixelementen $\langle 2,M'|Y_{4,M}|2,M''\rangle$ zijn nul.

58. **Harmonische oscillator: anharmonische storing.** Een eendimensionale harmonische oscillator ondervindt een anharmonische storing van de gedaante

$$\mathcal{H}^{(1)} = ax^3 + bx^4 .$$

Toon aan dat tot op eerste orde de energieniveaus verschoven zijn met

$$E_n^{(1)} = \tfrac{3}{4}b\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\left(2n^2 + 2n + 1\right) .$$

59. **Harmonische oscillator: lineaire storing ◘.** Een eendimensionale harmonische oscillator wordt beschreven door de Hamiltoniaan

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2 ,$$

waarin m de massa en ω de hoekfrequentie voorstelt. De eigenwaarden van de energie zijn $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$, met $n = 0,1,2,\dots$. De bijbehorende eigenfuncties zijn $\psi_n(x) = N_n \mathrm{e}^{-\xi^2/2}H_n(\xi)$, waarin $\xi = \alpha x$ en $N_n = (\alpha/\sqrt{\pi}\,2^n n!)^{1/2}$; $\alpha = (m\omega/\hbar)^{1/2}$. De functies $H_n(\xi)$ zijn de Hermite-polynomen, waarvoor geldt

$$\xi H_n(\xi) = \tfrac{1}{2}H_{n+1}(\xi) + nH_{n-1}(\xi) .$$

[55] De gegeven vorm is de eerste term in een ontwikkeling van $V(\mathbf{r})$ naar sferische harmonischen. Deze ontwikkeling is mogelijk wanneer $\Delta V(\mathbf{r}) = 0$, d.w.z. binnen het Cu^{2+}-ion bevinden zich geen ladingen afkomstig van naburige ionen. Voor 3d-ionen zoals Cu^{2+} leveren de volgende termen trouwens niets op omdat de matrixelementen nul zijn.

[56] $Dq = Ze^2\langle r^4\rangle/a^5$, waarin $\langle r^4\rangle$ de verwachtingswaarde van r^4 van de 3d-elektronen is. De opsplitsing van de energieniveaus ten gevolge van het kristalveld correspondeert in het algemeen met optische energiekwanta.

[57] Verlaging van de symmetrie kan ontaarding opheffen. In dit voorbeeld valt de representatie D_2 van de volledige rotatiegroep uiteen in de representaties Γ_3 en Γ_5 van de kubische puntgroep.

[58] De som van de diagonale matrixelementen is nul!

NOTATIE

Nu met tekstverwerkingsprogramma's de kwaliteit van professioneel drukwerk geëvenaard kan worden, is het nodig enige aandacht te besteden aan notatie. Notatie is fysisch zonder inhoud, maar voor het gemak van uniforme communicatie wordt men geacht zich te houden aan de internationaal geaccepteerde conventies. Deze zijn, althans in principe, vastgelegd in het rapport *Symbols, Units, Nomenclature and Fundamental Constants in Physics*, opgesteld onder auspiciën van de *International Union of Pure and Applied Physics (IUPAP)*. De meest elementaire regels zijn:

- Fysische grootheden worden cursief gezet: $F = ma$, $E = mc^2$;
- Afkortingen van eenheden romein (rechtop) en zonder punt. Ze worden gescheiden van de getalwaarde door een spatie: $m = 5\times 10^3$ kg, $g = 9.81 \pm 0.02$ m/s^2.
- Eenheden met een decimaal voorvoegsel worden behandeld als nieuwe eenheden: 1 cm^3 = 10^{-6} m^3, 1 μs^{-1} = 10^6 s^{-1}.
- Mathematische variabelen cursief, maar romein de standaard mathematische functies en operatoren: $f(x)$, $\sin\varphi$, $\cosh\varphi$, $\arcsin x$, $\exp(x)$, $\mathrm{Re}\, z$, $\mathrm{Im}\, z$, $\mathrm{grad}\, V$;
- Cijfers, haakjes, absolute-waardestrepen en dergelijke romein: $[j(j+1)]^{1/2}$;
- Indices die afkortingen zijn van een woord of naam romein: V_{max}, A_{op}, μ_{B}, k_{B};
- Vectoren in vette letters (cursief, maar in het gebruik veelal romein): $\mathbf{a}$, $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}$, $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$;
- Symbolen voor chemische elementen en kernen romein: H, ^{4}He, $\mathrm{N_2}$;
- Met a/bc wordt bedoeld $a/(bc)$ en niet $(a/b)\times c$. In goed drukwerk wordt in lopende tekst bij voorkeur de schuine breukstreep gebruikt behalve in op de regel staande breuken van kleine gehele getallen: $a/(b-c)$, $p^2/2m$, $\pi^{5/2}$, $(n+\frac{1}{2})h\nu$;
- De basis van de natuurlijke logaritme, de imaginaire eenheid, en de d's in afgeleiden en integralen worden romein gezet: $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi} = 1$, $\mathrm{d}x^n/\mathrm{d}x = nx^{n-1}$, $\int x\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2}x^2$;
- Een aantal gerenommeerde tijdschriften, waaronder *The Physical Review*, wijken van de laatste regel af en zetten e, i, en d cursief. Ook een woord of naam afgekort tot een enkele letter wordt wel cursief gedrukt: k_B.

(a) Maak een schets (d.w.z. een kwalitatieve tekening die de essentiële punten bevat) van $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$ en $\psi_2(x)$ als functie van x. Aan welke voorwaarden moeten de eigenfuncties voldoen? Wat is de betekenis van $|\psi_n(x)|^2$? Waarvan is de nulpuntsenergie $\frac{1}{2}\hbar\omega$ een uiting? Wat is pariteit?

(b) Laat zien dat voor de matrixelementen van x geldt

$$\langle\psi_{n'}|x|\psi_n\rangle = (\hbar/2m\omega)^{1/2}[(n+1)^{1/2}\delta_{n',n+1} + n^{1/2}\delta_{n',n-1}] \ .$$

(c) We leggen nu een storing aan gegeven door

$$\mathcal{H}^{(1)} = ax \ .$$

Een voorbeeld hiervan is een homogeen elektrisch veld werkend op een elektron. Toon met behulp van storingsrekening tot en met tweede orde aan dat de energie-eigenwaarde van alle eigentoestanden verlaagd wordt met $a^2/2m\omega^2$.

(d) De Schrödinger-vergelijking met de Hamiltoniaan $\mathcal{H} + \mathcal{H}^{(1)}$ kan ook exact opgelost worden. Doe dit en vergelijk het resultaat met het resultaat verkregen onder (c).[59]

[59] Verschuif de oorsprong van x over een goed gekozen afstand en gebruik de oplossing voor $a = 0$.

60. **H-atoom: effect van afmeting proton ◘.** De afmeting van het proton is niet nul. Het effect daarvan op de energieniveaus van het H-atoom kan berekend worden met eerste-orde-storingstheorie.

(a) Bewijs eerst dat de eerste-orde-correctie $E^{(1)}$ op de eigenenergie $E^{(0)}$ behorende bij de eigenfunctie ψ gegeven wordt door het matrixelement $\langle\psi|\mathcal{H}^{(1)}|\psi\rangle$, waarin $\mathcal{H}^{(1)}$ de Hamiltoniaan van de storing voorstelt.

Vat vervolgens het proton op als een uniform elektrisch geladen bolletje met een straal R. De storing op de Coulomb-potentiaal $V(r) = -e^2/4\pi\varepsilon_0 r$ is dan

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(1)}(r) &= -\frac{3e^2}{8\pi\varepsilon_0 R^3}(R^2 - \tfrac{1}{3}r^2) + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\ , \qquad &(r < R) \\ \mathcal{H}^{(1)}(r) &= 0\ . &(r \geq R) \end{aligned}$$

Uiteraard is R zeer veel kleiner dan de straal a_0 van de eerste Bohrse baan. Voor het H-atoom geldt

$$E^{(0)}_{100} = -R_\infty hc\ , \quad \psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{2}{a_0^{3/2}}\,\mathrm{e}^{-r/a_0}\ , \quad a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}\ , \quad R_\infty = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0 hc}\ ,$$

waarin de indices 100 refereren naar de 1s-grondtoestand en R_∞ de Rydberg-constante voorstelt.

(b) Leidt af de uitdrukking ($R \ll a_0$!)

$$E^{(1)}_{100} = \frac{4}{5}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2 R_\infty hc$$

voor de energieverschuiving van de 1s-grondtoestand in eerste orde.

(c) Bereken $E^{(1)}_{100}$ numeriek onder aanname dat $R = 10^{-15}$ m en vergelijk het resultaat de nulde-orde-energie $E^{(0)}_{100}$.

61. **H-atoom: relativistische correcties ◘.** De relativistische correcties op de energieniveaus van het H-atoom worden meestal berekend door de Hamiltoniaan

$$\mathcal{H} = (m_\mathrm{e}^2c^4 + p^2c^2)^{1/2} - m_\mathrm{e}c^2 + V_\mathrm{C}(r)\ ,$$

waarin m_e de rustmassa van het elektron en $V_\mathrm{C}(r) = -e^2/4\pi\varepsilon_0 r$ de centrale Coulomb-potentiaal voorstelt, te ontwikkelen naar $p^2/2m_\mathrm{e}$. Dit levert

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{H}^{(1)}\ , \\ \mathcal{H}^{(0)} &= p^2/2m_\mathrm{e} + V_\mathrm{C}(r)\ , \\ \mathcal{H}^{(1)} &= -\frac{1}{2m_\mathrm{e}c^2}\left(\frac{p^2}{2m_\mathrm{e}}\right)^2 = -\frac{1}{2m_\mathrm{e}c^2}\left(\mathcal{H}^{(0)} - V_\mathrm{C}\right)^2\ . \end{aligned}$$

---

[60] Maak bijvoorbeeld gebruik van Bohr's model voor het H-atoom.

[61] In een complete berekening moet ook de spin-baankoppeling in rekening worden gebracht.

Hierin is $\mathcal{H}^{(0)}$ de niet-relativistische Hamiltoniaan en $\mathcal{H}^{(1)}$ de relativistische correctie daarop.

(a) Toon aan dat $p/m_e c \ll 1$, d.w.z. de relativistische correcties zijn niet groot.[60]

(b) Toon aan dat in eerste orde de energie E_n van de toestand $|nlm\rangle$ (in de gebruikelijke notatie, waarbij $\langle nlm|nlm\rangle = 1$) verschoven is ten opzichte van de nulde-orde-energie $E_n^{(0)}$ met

$$E_{nl}^{(1)} = -\frac{1}{2m_e c^2}\left(\frac{8n}{2l+1} - 3\right)|E_n^{(0)}|^2 = -\frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{2}{2l+1} - \frac{3}{4n}\right)|E_n^{(0)}| \; ,$$

waarin $\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c$ de fijnstructuurconstante is. Maak bij de afleiding gebruik van de verwachtingswaarden

$$\langle r^{-1}\rangle = \frac{1}{n^2 a_0} \; , \qquad \langle r^{-2}\rangle = \frac{2}{(2l+1)n^3 a_0^2} \; ,$$

waarin $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2$ de straal van de eerste Bohrse baan is. Voorts geldt $E_n^{(0)} = -R_{\mathrm{H}}hc/n^2$.

(c) Hoe groot is de relativistische correctie in de grondtoestand ten opzicht van $E_0^{(0)}$?

(d) De relativistische correctie op de energie hangt af van het kwantumgetal l. De Balmer-lijnen van het H-atoom (overgangen naar $n = 2$ vanuit hoger gelegen n) vertonen als gevolg daarvan een fijnstructuur. Hoe groot is de fijnstructuur van de H_α-lijn ($n = 3 \to n = 2$)? Bereken bijvoorbeeld de afstand tussen de overgangen $(n = 3, l = 2) \to (n = 2, l = 1)$ en $(n = 3, l = 1) \to (n = 2, l = 0)$.[61] Vergelijk het resultaat met de energie van de overgang zonder relativistische correctie, $E_3^{(0)} - E_2^{(0)}$.

Gezet met Plain TeX.