Examen Kwantummechanica

25 Januari 2013, namiddag

1 Mondeling (10 ptn)

Beschouw de twee laagst liggende energietoestanden van een ammoniak molecule (NH3).

- Geef twee verschillende basissen en de respectievelijke matrix representatie van de bijhorende totale Hamiltoniaan. Waarom mogen we ons beperken tot deze twee toestanden? Zijn deze basisvectoren eigentoestanden van de Hamiltoniaan? Bespreek fig. 4.9b (leg uit wat getoond wordt).
- Beschouw nu een NH3 molecule dat in een elektrisch veld E volgens de x-as geplaatst wordt en onderzoek de invloed van het elektrisch veld. Geef de matrix representatie van $\hat{H}$ en ga na of de basisvectoren eigenvectoren zijn.
- Behandel het probleem vervolgens met storingsrekening waarbij de storing bestaat uit de invloed van het elektrisch veld op de energietoestanden. Ga na of we ontaarde dan wel niet-ontaarde storingsrekening mogen toepassen. Bereken de energieniveaus en de eigentoestanden tot op eerste orde storingsrekenen en de bereken vervolgens de energieniveaus tot op tweede orde. Schets het energiediagramma.
- Vergelijk uw resultaten met de benaderde oplossing van het handboek.
- Geef de energie en golffunctie in de limiet van een sterk elektrisch veld en toon aan dat deze golffuncties eigenfuncties zijn van de algemene $\hat{H}$. Maak vervolgens gebruik van de resultaten uit storingsrekenen om de evolutie van de golffuncties als functie van het elektrisch veld te bespreken.
- De matrix representatie van de Hamiltoniaan die aanleiding geeft tot Rabi oscillaties bij een NH3 molecule in een elektrisch veld wordt gegeven in vergelijking 6.35. Geef de equivalente matrix representatie van de Hamiltoniaan die in een tijdsonafhankelijke basis aanleiding geeft tot Rabi oscillaties van een magnetisch moment in een magnetisch veld. Bespreek voor beide gevallen kort de gebruikte basisvectoren de verschillende matrix elementen en de karakteristieke frequenties ω_0 en ω_1.

2 Schriftelijk (10 ptn)

1. Beschouw een deeltje met massa m in aanwezigheid van de volgende één-dimensionale potentiaal:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , \ x < 0 \\ -V_0 \delta(x-a) & , \ x > 0 \end{cases}$$

met $V_0 > 0$. Wat is de voorwaarde op a opdat er een gebonden toestand zou aanwezig zijn?

- Maak een grafische voorstelling van de potentiaal.
- Schrijf de Schrödingervergelijking en de meest algemene golffunctie van een gebonden toestand neer en onderzoek de randvoorwaarden.
- Integreer de Schrödingervergelijking om randvoorwaarden rond de afgeleide van de golffunctie te bekomen. Maak hiervoor gebruik van volgende integralen en verduidelijk uw antwoord:

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \left.\frac{d\psi(x)_+}{dx}\right|_{x=+\epsilon} - \left.\frac{d\psi(x)_-}{dx}\right|_{x=-\epsilon}$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \delta(x)\psi(x) = \psi(0)$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \psi(x) = 0 \qquad \psi(x) \text{ even}$$

- Zoek aan de hand van een grafische voorstelling de voorwaarden van het golfgetal en bepaal hieruit de voorwaarde voor a.
- Maak een grafische voorstelling van de golffunctie.

(7 ptn)

2. De operatoren die de radiale component van de impuls $\vec{p}_r$ en de radiale coördinaat $\vec{r}$ associeren worden op volgende manier aangeduid: $\hat{P}_r$ en $\hat{R}$. Hun actie op een golffunctie wordt als volgt gegeven:

$$\hat{P}_r \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\psi(\vec{r}) \right)$$

$$\hat{R}\psi(\vec{r}) = r$$

Bereken de commutator van de twee operatoren en hun dispersies.
(3 ptn)