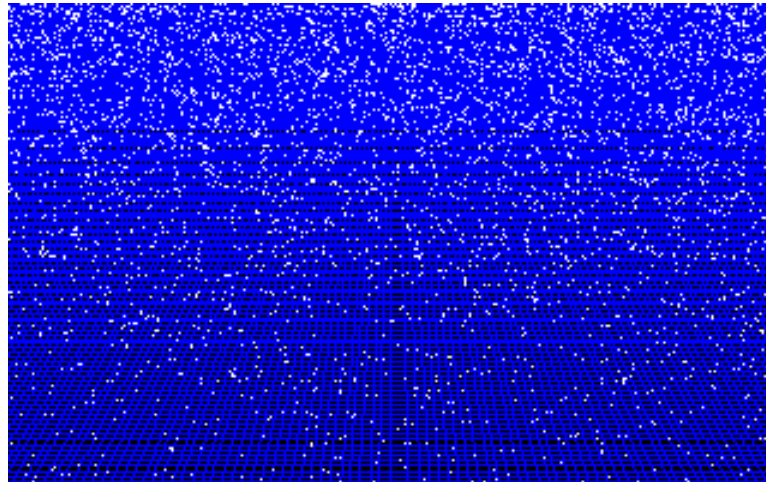


Kwantummechanica

HOVO cursus



Jo van den Brand

Lecture 4: 13 oktober 2016

Overzicht

- **Algemene informatie**
 - Jo van den Brand
 - Email: jo@nikhef.nl
 - 0620 539 484 / 020 592 2015
 - Nikhef, room: N3.47
- **Colleges**
 - Course information: www.nikhef.nl/~jo/kwantum
- **Boeken**
 - Dictaat
- **Zelfstudie**
 - Wiskunde: vectoren, complexe getallen, lineaire algebra
- **Response gedurende het college**

Week 4

- **Les 4: Het waterstofatoom**
 - Wiskundige inleiding
 - SV in drie dimensies
 - Centrale vierkante sferische potentiaal
 - Verstrooiing aan een gelokaliseerde potentiaal
 - Deeltje in de Coulomb-potentiaal
- **Opgaven: zie website**

Wiskundige inleiding

We gaan nu in drie dimensies werken en kiezen geschikte coördinaten

Het verband tussen Cartesische en sferische coördinaten is

$$x = r \sin \theta \cos \phi,$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi,$$

$$z = r \cos \theta.$$

Ook geldt

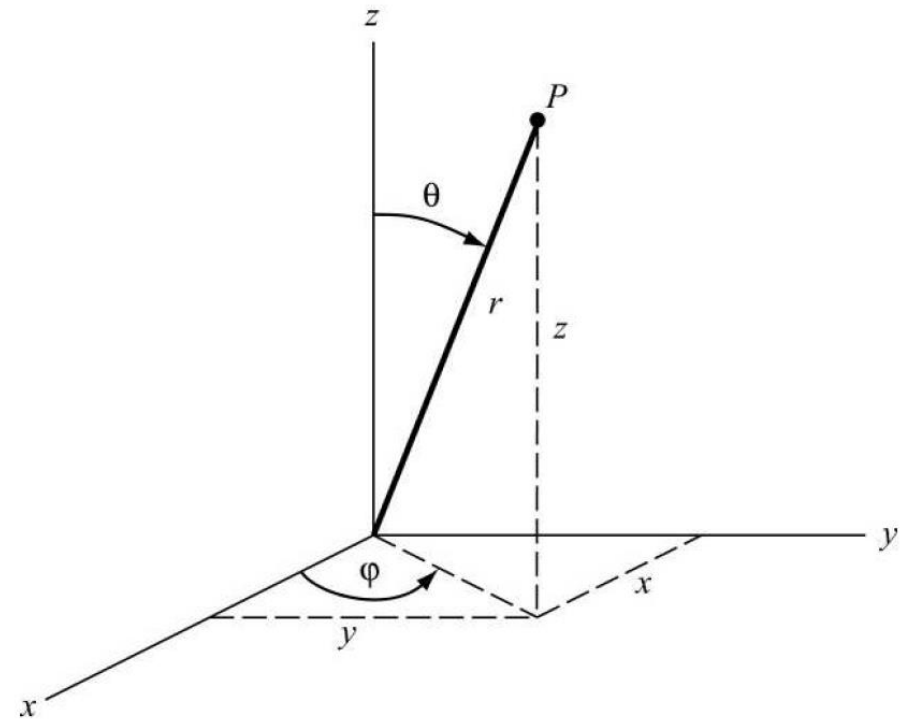
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

De tijdsafhankelijke SV in drie dimensies

$$\mathbf{H}\psi = E\psi \quad \longrightarrow \quad \mathbf{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

De eerste term correspondeert met kinetische energie

$$\mathbf{E}_{\text{kin}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad \text{met} \quad \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\hbar}{i}\nabla$$



Transformatie van coördinaten

We kiezen nu de meer geschikte sferische coördinaten

We maken gebruik van de volgende relaties (geschreven in matrixvorm)

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \\ r \cos \theta \cos \phi & r \cos \theta \sin \phi & -r \sin \theta \\ -r \sin \theta \sin \phi & r \sin \theta \cos \phi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$$

We kunnen deze vergelijking inverteren, en vinden

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \frac{\cos \theta \cos \phi}{r} & -\frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \\ \sin \theta \sin \phi & \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} & -\frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \\ \cos \theta & -\frac{\sin \theta}{r} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \phi} \end{pmatrix}$$

Voor de Laplace operator vinden we dan

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \longrightarrow \quad \Delta = \Delta_r + \Delta_\theta + \Delta_\phi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

Toelichting

We laten nu in detail zien hoe we aan de eerste term komen

We hebben $\Delta = \Delta_r + \Delta_\theta + \Delta_\phi = \boxed{\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

Voor de eerste afgeleiden vinden we met de kettingregel

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{x}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

Voor de tweede afgeleide geldt dan

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{\partial x}{\partial x} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + x \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$$

We kunnen dit schrijven als $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{x^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$

Zo vinden we ook $\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{y^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$ en $\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{z^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$

Optellen geeft $\Delta_r \psi(r) = \frac{3}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \boxed{\frac{3}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)}$

Idem voor Δ_θ en Δ_ϕ

SV in drie dimensies

We gaan de SV oplossen met scheiden van variabelen

We starten met de tijdonafhankelijke SV

$$\mathbf{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

We proberen de oplossing $\psi(r, \theta, \phi) = \chi(r)g(\theta)h(\phi)$

$$\longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \chi g h}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \chi g h}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \chi g h}{\partial \theta} \right) \right] + V(r)\chi g h = E\chi g h$$

$$\longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{g h}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\chi}{dr} \right) + \frac{\chi g}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2 h}{d\phi^2} + \frac{\chi h}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dg}{d\theta} \right) \right] + V(r)\chi g h = E\chi g h$$

We vermenigvuldigen met $-2mr^2 \sin^2 \theta / \chi g h \hbar^2$

$$\longrightarrow \frac{1}{h} \frac{d^2 h}{d\phi^2} = \frac{-\sin^2 \theta}{\chi} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\chi}{dr} \right) - \frac{\sin \theta}{g} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dg}{d\theta} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} r^2 \sin^2 \theta [E - V(r)]$$

De linkerkant hangt niet af van r en θ , en de rechterkant niet van ϕ

Beide kanten dienen dus gelijk te zijn aan een constante, en we kiezen die als $-m^2$

$$\longrightarrow \frac{d^2 h}{d\phi^2} = -m^2 h \quad \text{en} \quad -\frac{1}{\chi} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\chi}{dr} \right) - \frac{1}{g \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dg}{d\theta} \right) - \frac{2m}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] = -\frac{m^2}{\sin^2 \theta}$$

Hoekvergelijkingen voor θ en ϕ

We beginnen met het oplossen van de hoekvergelijkingen voor ϕ

De vergelijking voor hoek ϕ luidt $\frac{d^2 h}{d\phi^2} = -m^2 h$

Met als oplossing $h(\phi) = e^{im\phi}$

We eisen dat de oplossing eenduidig dient te zijn, bijvoorbeeld voor $\phi = 0$ en $\phi = 2\pi$

$$\longrightarrow e^{im0} = e^{im2\pi} \longrightarrow 1 = \cos m2\pi + i \sin m2\pi$$

$$\longrightarrow |m| = 0, 1, 2, 3, \dots$$

De ruimtelijke richting is gekwantiseerd!

In de klassieke fysica zouden we de hoekafhankelijkheid als sin- en cosfuncties opschrijven, omdat de hoekenfuncties reëel dienen te zijn. In de kwantummechanica bestaat een dergelijke beperking niet

We noemen m het *magnetisch kwantumgetal*

Hoekvergelijkingen voor θ en ϕ

We beschouwen vervolgens de hoekvergelijking voor θ

Voor hoek θ geldt
$$\frac{1}{\chi} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\chi}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 [E - V(r)] = \frac{m^2}{\sin^2 \theta} - \frac{1}{g \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dg}{d\theta} \right)$$

We hebben variabelen r en θ gescheiden, en kiezen als scheidingsconstante $l(l + 1)$

Dat levert
$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dg}{d\theta} \right) + \frac{m^2 g}{\sin^2 \theta} = l(l + 1)g$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\chi}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r)] \chi = l(l + 1) \frac{\chi}{r^2}$$

Als we de differentiaalvergelijking voor de afhankelijkheid van θ

oplossen, dan vinden we dat eindige oplossingen mits $l = |m|, |m| + 1, |m| + 2, |m| + 3, \dots$

Voor de oplossingen geldt $g(\theta) = g_{lm}(\theta) = N_l^m P_l^{|m|}(\cos \theta)$

We herkennen in de functies $P_l^{|m|}(\cos \theta)$ de Legendrefuncties die polynomen zijn in $\cos \theta$ en waarvan de vorm afhangt van de waarde van het kwantumgetal l en de absolute waarde van het kwantumgetal m

Sferisch harmonische functies $Y_l^m(\theta, \phi)$

De Legendrefuncties komen veel in de natuurkunde voor, met name als het hoekgedrag sferisch symmetrisch is

Geassocieerde Legendre polynomen $P_l^{|m|}(\mu) = \frac{1}{2^l l!} (1 - \mu^2)^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{d\mu^{l+|m|}} [(\mu^2 - 1)^l]$

Normalisaties $N_l^m = (-1)^{(m+|m|)/2} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2}$

Complete hoekafhankelijkheid van een centrale potentiaal $Y_l^m(\theta, \phi) = N_l^m P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$

Dit zijn de sferisch harmonische functies $Y_l^m(\theta, \phi)$ en ze zijn orthogonaal

Dit exacte vorm van de potentiaal is niet relevant!

We vinden $Y_0^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}},$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1).$$

Er geldt $\psi(r, \theta, \phi) = \chi(r)g(\theta)h(\phi) = \chi_l(r)Y_l^m(\theta, \phi)$

De radiële oplossing

De radiële oplossing volgt uit de radiële vergelijking en die heeft een centrifugale term

Radiële vergelijking
$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\chi}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \chi = l(l+1)\chi$$

Kies $u(r) \equiv r\chi(r)$  $\chi = u/r$, $d\chi/dr = [r(du/dr) - u]/r^2$, $(d/dr)[r^2(d\chi/dr)] = rd^2u/dr^2$

Dan vinden we de radiële vergelijking
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu$$

Het is een 1-dimensionale SV met effectieve potentiaal
$$V_{\text{eff}} = V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

De *centrifugale term* $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$ probeert deeltjes naar buiten te drukken

Verder dient nog te gelden dat
$$\int_0^\infty |u|^2 dr = 1$$

De volledige golffunctie is
$$\psi_l^m(r, \theta, \phi) = r^{-1} u_l(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

De golffunctie moet verder begrensd zijn

Als we verder willen komen, dan hebben we nu een uitdrukking voor de potentiaal nodig

Centrale vierkante sferische potentiaal put

We sluiten een deeltje op in een drie-dimensionale put met oneindig hoge potentiaal

Er geldt $V(r) = \begin{cases} 0, r < a, \\ \infty, r > a \end{cases}$

De golffunctie is dan nul buiten de put, terwijl de golffunctie binnen de put gegeven wordt door de radiële vergelijking

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] u \quad \text{met} \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Voor $l = 0$ vinden we dan $\frac{d^2 u}{dr^2} = -k^2 u \quad \longrightarrow \quad u(r) = A \sin kr + B \cos kr$

Voor de radiële golffunctie geldt dan $\chi(r) = u(r)/r$

We dienen $B = 0$ te kiezen, want $\lim_{r \rightarrow 0} \cos kr / r = \infty$

De randvoorwaarde vereist $\sin ka = 0$ en dus $ka = n\pi$ met $n = 1, 2, 3, \dots$

We vinden dan

$$E_{n0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Centrale vierkante sferische potentiaal put

De toestanden voor $l = 0$

We vinden voor de energie $E_{n0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$, ($n = 1, 2, 3, \dots$)

Dit hadden we al eerder gevonden (in hoofdstukken 2 en 3)

Voor $l = 0$ vinden we als golffunctie dus $\psi_{n00} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{\sin(n\pi r/a)}{r}$

We hebben de normering gebruikt om dit te vinden

We gebruiken 3 kwantumgetallen (hoofd kwantumgetal, baan kwantumgetal en magnetisch kwantumgetal) om de toestanden te labelen: n , l en m

De golffunctie wordt dan geschreven als $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$

De energie E_{nl} hangt enkel van n en l af

Centrale vierkante sferische potentiaal put

De algemene oplossingen

We algemene oplossing is $u(r) = A r j_l(kr) + B r n_l(kr)$

Definitie $j_l(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$

sferische Besselfunctie
sferische Neumannfunctiess

$$n_l(\rho) = (-1)^l \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho)$$

We vinden bijvoorbeeld

$$j_0 = \frac{\sin x}{x},$$

$$n_0 = -\frac{\cos x}{x},$$

$$j_1 = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x},$$

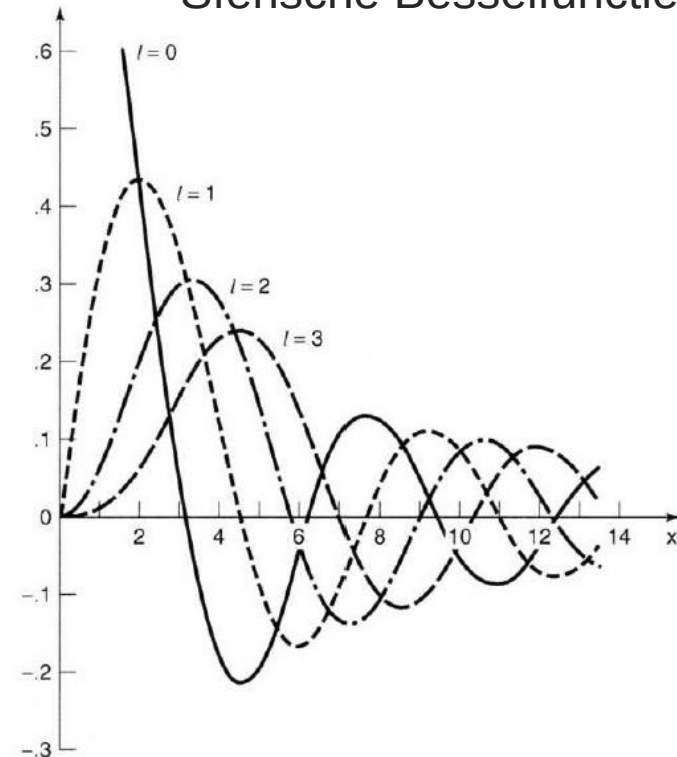
$$n_1 = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x},$$

$$j_2 = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \sin x - \frac{3}{x^2} \cos x, \quad n_2 = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \cos x - \frac{3}{x^2} \sin x$$

Voor kleine x geldt $\sin x \approx x$ en $\cos x \approx 1$

Dus geldt $\chi(r) = A j_l(kr)$

Sferische Besselfunctie $j_l(x)$



Centrale vierkante sferische potentiaal put

De algemene oplossingen

We algemene oplossing is $\chi(r) = A j_l(kr)$

Randvoorwaarde $\chi(a) = 0$  Kies k zo, dat $j_l(ka) = 0$

De Besselfunctie heeft echter oneindig veel nulpunten

We noemen β_{nl} het n^{de} -nulpunt van de l -de sferische Besselfunctie

Dan geldt $k = \frac{1}{a} \beta_{nl}$

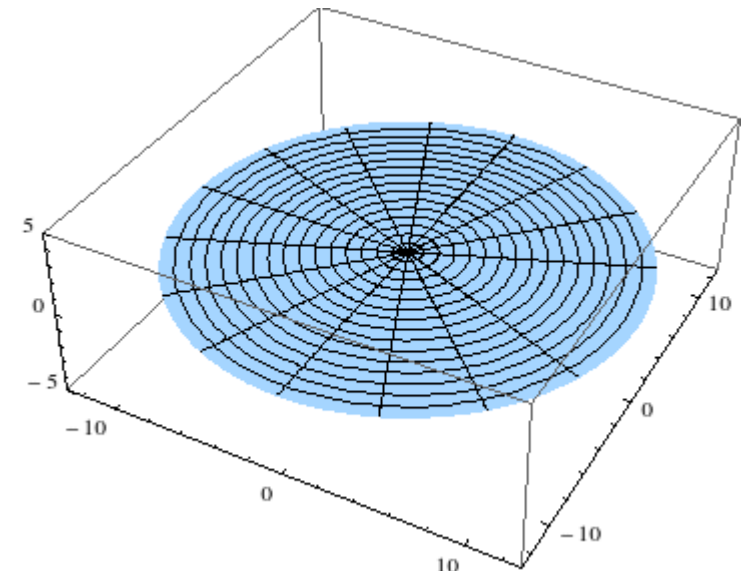
Energietoestanden $E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{nl}^2$

Golffuncties $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl} j_l(\beta_{nl} r/a) Y_l^m(\theta, \phi)$

We kunnen A_{nl} uit de normering halen

Elk energieniveau is $(2l + 1)$ keerontaard

Dat zijn de mogelijke waarden voor m



$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - \alpha^2) y = 0$$

Deeltje in de Coulombpotential

Het waterstofatoom bestaat uit een elektron dat beweegt in de Coulombpotential van het veel zwaardere proton

Coulombpotential $V = V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$

We kiezen de oorsprong als de positie van het proton

De golf functie schrijven we als $\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \phi) = \chi_l(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi)$

De radiële golf functie $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = E u$

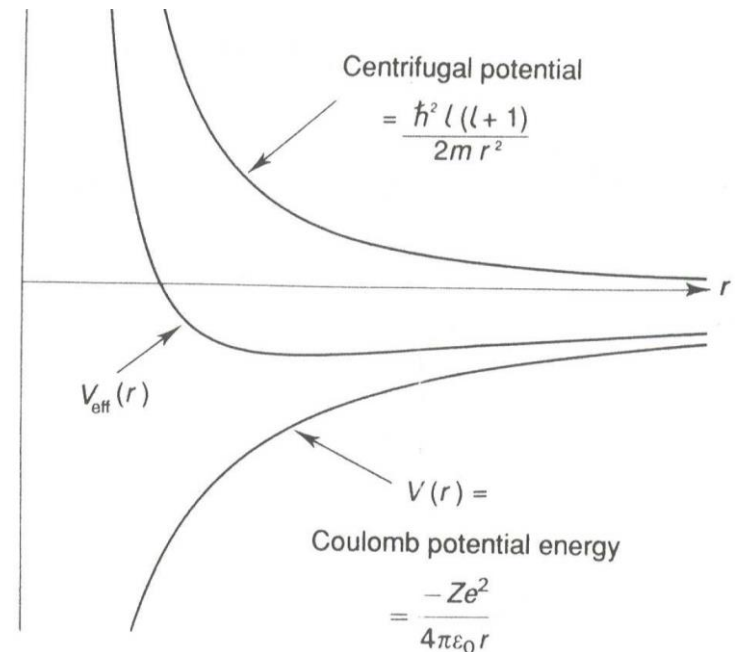
Met $u = r\chi$

Coulombterm is aantrekkend

Centrifugale term is altijd afstotend

We gaan de radiële vergelijking nu oplossen

Een belangrijk voorbeeld in de kwantummechanica



Elektron in het waterstofatoom

Oplossen van de radiële vergelijking van een deeltje in de Coulomppotentiaal

We hadden
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu$$

De energie is negatief en definieer nu variabele $\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$


$$\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 u}{dr^2} = \left[1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa} \frac{1}{\kappa r} + \frac{l(l+1)}{(\kappa r)^2} \right] u$$

Definieer vervolgens $\rho \equiv \kappa r$ en $\rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}$


$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u$$

We verwachten oplossingen die gedempt zijn voor $\rho \rightarrow \infty$

In die limiet geldt $\frac{d^2 u}{d\rho^2} = u$ Met algemene oplossing $u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho}$

De laatste term blaast op voor $\rho \rightarrow \infty$ en dus geldt $B = 0$ voor grote ρ

Elektron in het waterstofatoom

Oplossen van de radiële vergelijking van een deeltje in de Coulompotentiaal

In de limiet $\rho \rightarrow 0$ domineert de centrifugale term, en dan $\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u$

Dit heeft als algemene oplossing $u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l}$

De laatste term blaast op voor $\rho \rightarrow 0$ en dus geldt $D = 0$ voor grote

We scheiden dit asymptotisch gedrag af door een nieuwe functie $v(\rho)$ te definiëren

Met $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho)$

$$\longrightarrow \frac{du}{d\rho} = \rho^l e^{-\rho} \left[(l+1 - \rho)v + \rho \frac{dv}{d\rho} \right]$$

$$\longrightarrow \frac{d^2 u}{d\rho^2} = \rho^l e^{-\rho} \left\{ \left[-2l - 2 + \rho + \frac{l(l+1)}{\rho} \right] v + 2(l+1 - \rho) \frac{dv}{d\rho} + \rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} \right\}$$

Hiermee vinden we voor de radiële vergelijking

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(l+1 - \rho) \frac{dv}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)] v = 0$$

Elektron in het waterstofatoom

Oplossen van de radiële vergelijking van een deeltje in de Coulompotentiaal

We hebben
$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)] v = 0$$

We schrijven de oplossing als een machtreeks
$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j$$

We dienen de coëfficiënten $a_0, a_1, \dots$ te bepalen

We hebben
$$\frac{dv}{d\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \rho^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) a_{j+1} \rho^j$$

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) a_{j+1} \rho^{j-1}$$

Invullen in de radiële vergelijking levert

$$\sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) a_{j+1} \rho^j + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) a_{j+1} \rho^j - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j = 0$$


$$j(j+1) a_{j+1} + 2(l+1)(j+1) a_{j+1} - 2j a_j + [\rho_0 - 2(l+1)] a_j = 0$$

We vinden de recursierelatie
$$a_{j+1} = \left\{ \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \right\} a_j$$

Elektron in het waterstofatoom

Oplossen van de radiële vergelijking van een deeltje in de Coulompotentiaal

We hebben
$$a_{j+1} = \left\{ \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \right\} a_j$$

We beginnen met $a_0 = A$ en vinden dan a_1 . Vervolgens bepalen we a_2 etc,

Op die manier bepalen we
$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j$$

Grote waarden van j corresponderen met grote ρ waar hogere machten domineren

In dit gebied geldt
$$a_{j+1} \approx \frac{2j}{j(j+1)} a_j = \frac{2}{j+1} a_j, \Rightarrow a_j \approx \frac{2^j}{j!} A$$

Neem even aan dat dit de exacte oplossing is

$$\begin{array}{ll} \longrightarrow v(\rho) = A \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!} \rho^j = A e^{2\rho} & \longrightarrow u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \\ & \longrightarrow u(\rho) = A \rho^{l+1} e^{\rho} \end{array}$$

We golffunctie blaast op bij grote ρ en dat wilden we nou net vermijden!

De uitweg uit dit dilemma is dat de machtreeks moet afbreken

Er bestaan een $j_{\max}$ waarvoor $a_{j_{\max}} = 0$

Elektron in het waterstofatoom

Oplossen van de radiële vergelijking van een deeltje in de Coulomppotentiaal

Recursieformule $a_{j+1} = \left\{ \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \right\} a_j$

Voldoet aan $2(j_{\max} + l + 1) - \rho_0 = 0$

We definiëren het hoofdkwantumgetal $n \equiv j_{\max} + l + 1 \quad \longrightarrow \quad \rho_0 = 2n$

We hadden $\rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa}$
En ook $\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$ $\left. \vphantom{\begin{matrix} \rho_0 \\ \kappa \end{matrix}} \right\} E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{me^4}{8\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2\rho_0^2}$

Energie-eigenwaarden worden gegeven door

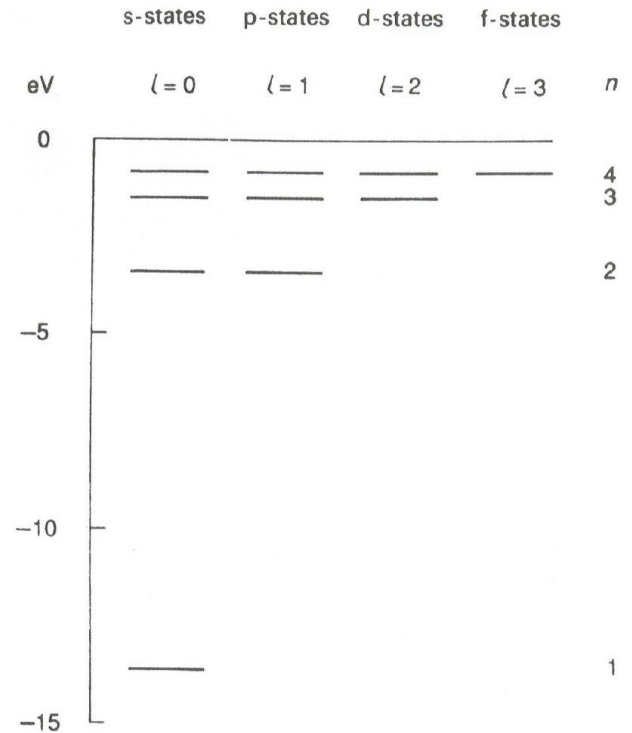
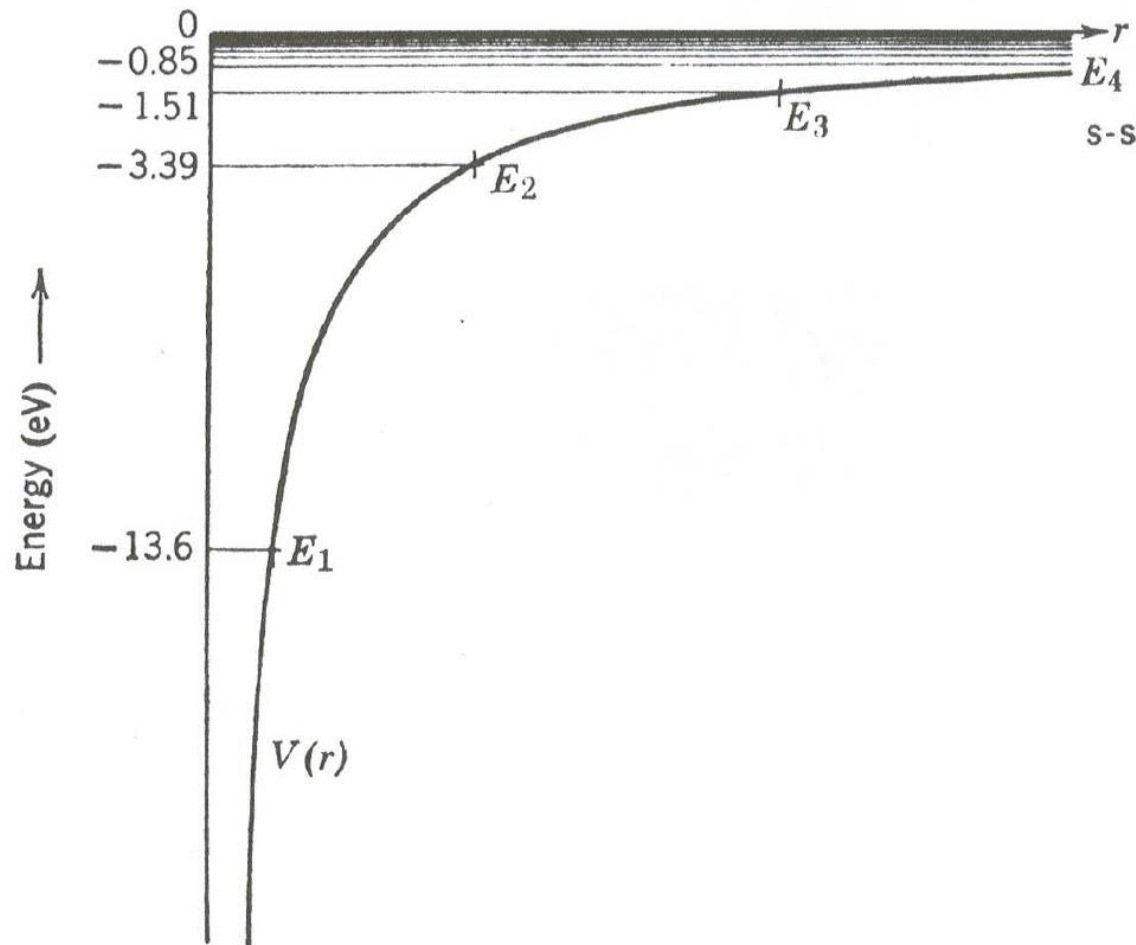
$$E_n = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Dit is de vergelijking van Bohr

Elektron in het waterstofatoom

Oplossen van de radiële vergelijking van een deeltje in de Coulompotentiaal

Energieniveaus



Ontaarding voor niveau n :

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

$$m: 2l+1$$

Totaal n^2

Elektron in het waterstofatoom

We kijken nu naar de golffuncties van het elektron in het waterstofatoom

We vinden $\kappa = \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \right) \frac{1}{n} = \frac{1}{an} \quad \longrightarrow \quad a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$

Dus geldt $\rho = \frac{r}{an}$

De golffuncties $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = \chi_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)$

met $\left. \begin{array}{l} u(r) = r\chi(r) \\ u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho) \end{array} \right\} \chi_{nl}(r) = \frac{1}{r}\rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho)$

Met $v(\rho)$ een polynoom van de orde $j_{\max} = n - l - 1$ in ρ $v(\rho) = \sum_{j=0}^{j_{\max}} a_j \rho^j$

De coëfficiënten volgen uit $a_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)} a_j$

Voor de *grondtoestand* geldt $n = 1 \quad \longrightarrow \quad E_1 = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] = -13,6 \text{ eV}$

Met golffunctie $\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta, \phi)$ met $R_{10}(r) = \frac{a_0}{a}e^{-r/a}$

Elektron in het waterstofatoom

We kijken nu naar de golffuncties van het elektron in het waterstofatoom

Voor niveau $n = 1$ vinden we $\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta, \phi)$ met $R_{10}(r) = \frac{a_0}{a}e^{-r/a}$

Normeren $\int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr = \frac{|a_0|^2}{a^2} \int_0^\infty e^{-2r/a} r^2 dr = |a_0|^2 \frac{a}{4} \doteq 1$

Verder $Y_0^0 = 1/\sqrt{4}$  $a_0 = 2\sqrt{a}$ $\left. \vphantom{\int_0^\infty} \right\} \psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$

De eerste *aangeslagen* toestand is $n = 2$ met $E_2 = \frac{-13,6 \text{ eV}}{4} = -3,4 \text{ eV}$

We vinden $\chi_{20}(r) = \frac{a_0}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$ en $\chi_{21}(r) = \frac{a_0}{4a^2} r e^{-r/2a}$

De toestanden zijn ontaard, en de constante is uit de normering te halen

Elektron in het waterstofatoom

We kijken nu naar de golffuncties van het elektron in het waterstofatoom

Golffuncties $n = 1$ $l = 0$ $\chi_{10} = 2a^{-3/2}e^{-r/a},$

$$n = 2 \quad l = 0 \quad \chi_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}a^{-3/a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}},$$

$$n = 2 \quad l = 1 \quad \chi_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}a^{-3/2} \frac{r}{a} e^{-\frac{r}{2a}},$$

$$n = 3 \quad l = 0 \quad \chi_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}a^{-3/2} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a} + \frac{2}{27} \left(\frac{r}{a}\right)^2\right) e^{-\frac{r}{3a}}$$

$$n = 3 \quad l = 1 \quad \chi_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{3a}},$$

$$n = 3 \quad l = 2 \quad \chi_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a}},$$

...

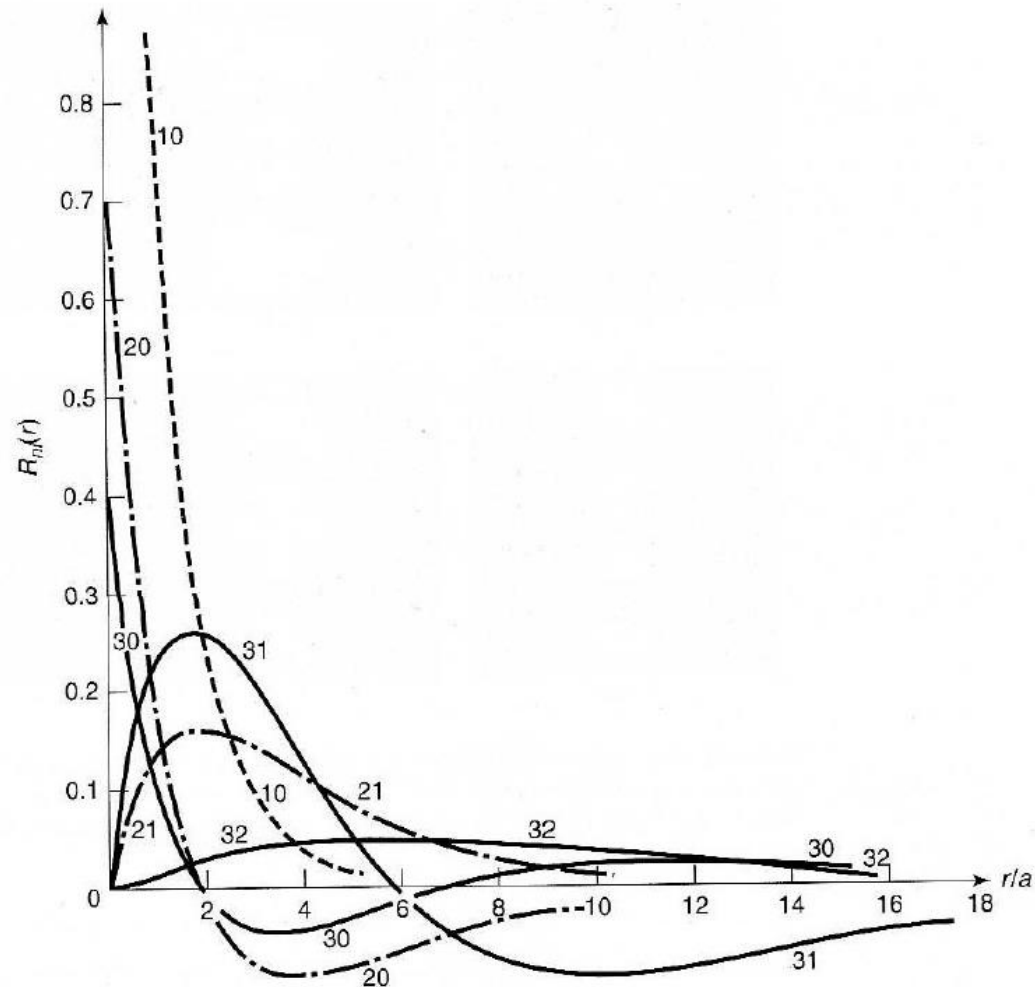
Met Laguerre polynomen vinden we

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na}\right) Y_l^m(\theta, \phi)$$

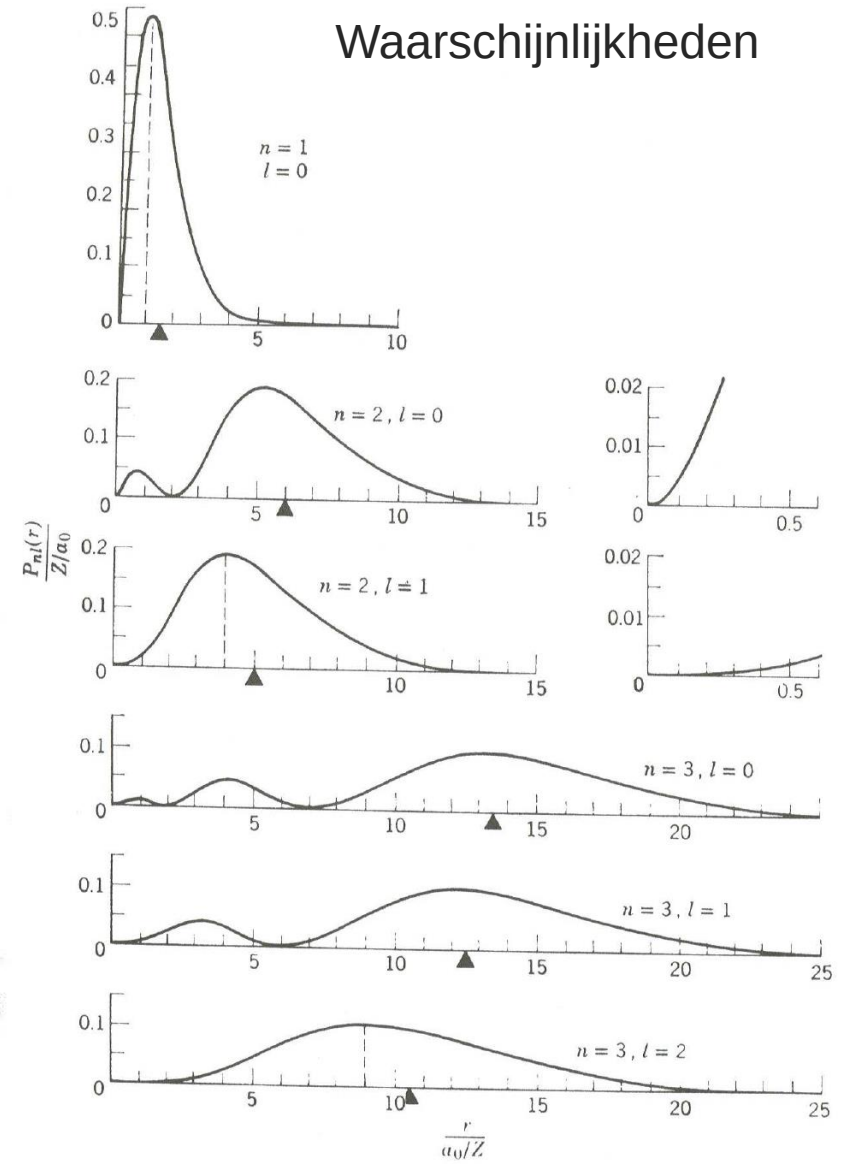
Elektron in het waterstofatoom

We kijken nu naar de golffuncties van het elektron in het waterstofatoom

Golffuncties



Waarschijnlijkheden

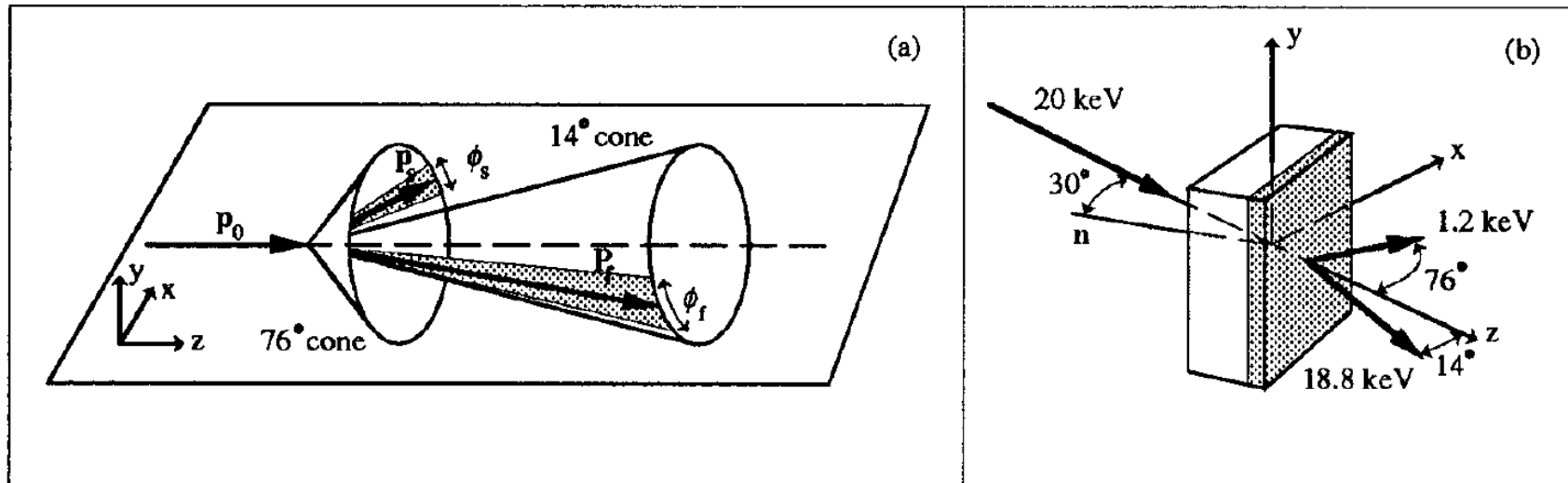


Elektron in het waterstofatoom

Metingen van de waarschijnlijkheidsverdeling in waterstof

Elektronenverstrooiing

Men werkt in momentum space en gebruikt PWIA

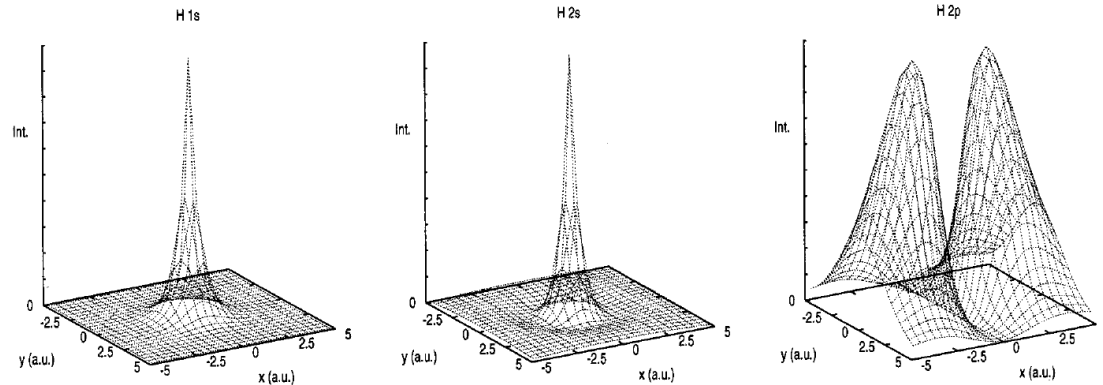


Elektron in het waterstofatoom

Metingen van de waarschijnlijkheidsverdeling in waterstof

Coordinate space en momentum space zijn elkaars Fourier transform

Coordinate Space



Momentum Space

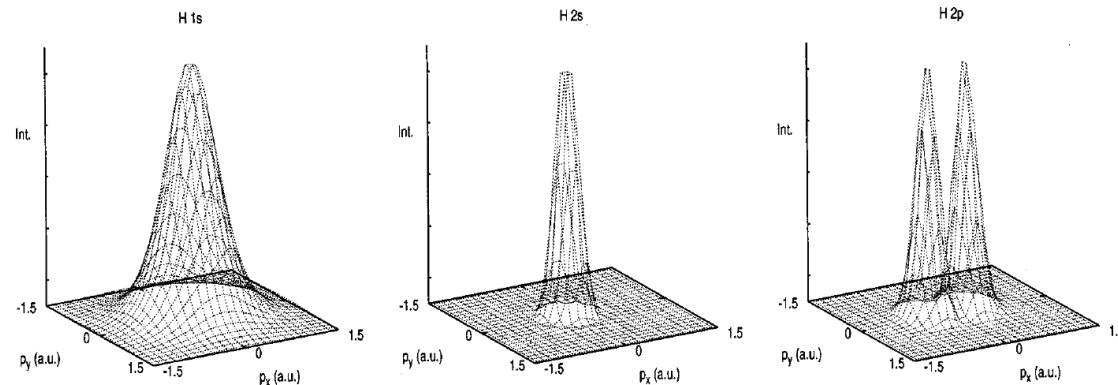
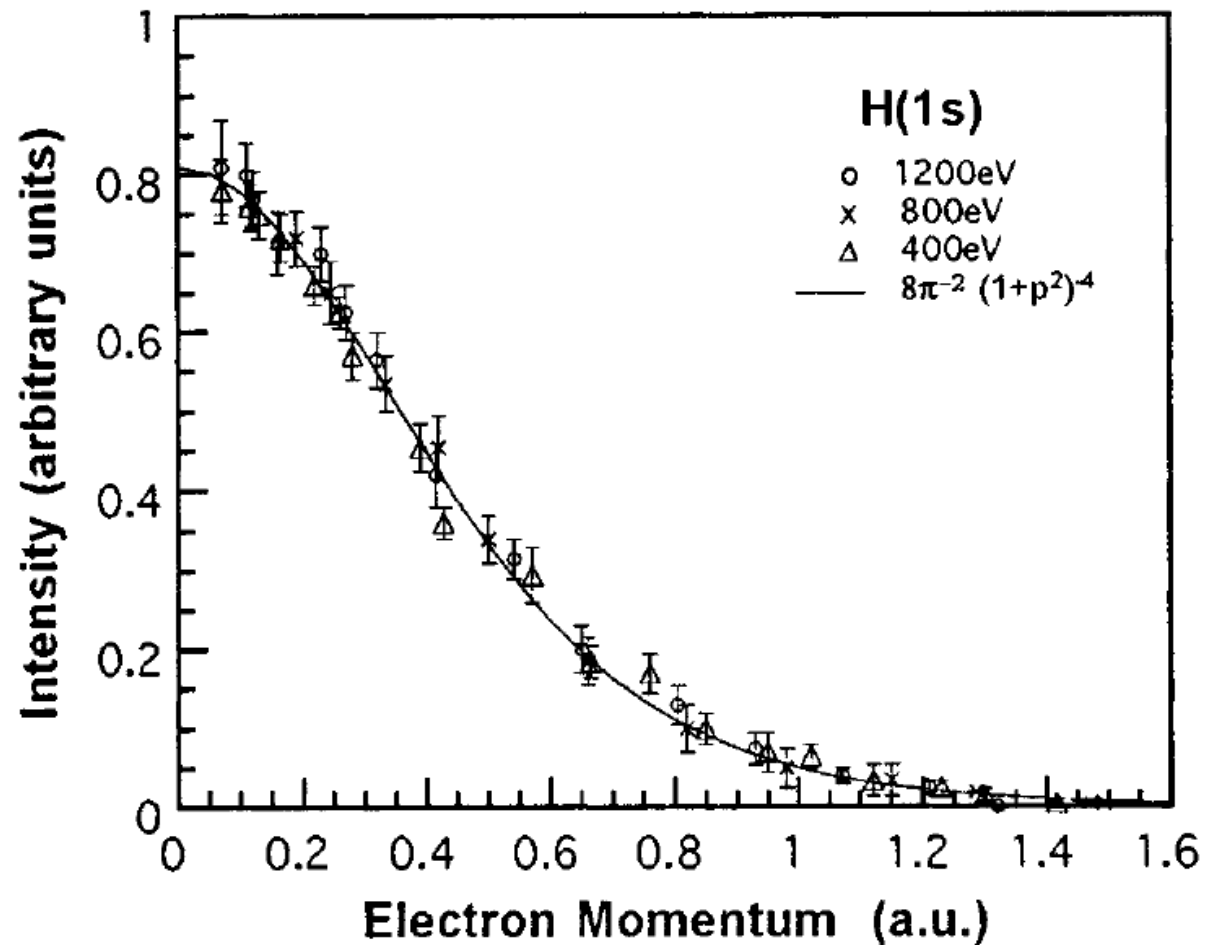


fig. 2. Three-dimensional plots of the probability density $|\psi(x, y, 0)|^2$ in coordinate space and the probability density $|\phi(p_x, p_y, 0)|^2$ in momentum space are shown for the 1s, 2s, and 2p_y orbitals of the hydrogen atom. Note that in momentum and coordinate space the orbitals have the same symmetry. Also note that the more extended the orbital is in coordinate space, the more confined in momentum space. The node for the 2s orbital results in a density minimum which is visible as a circle centered at the origin in both the coordinate- and momentum-space pictures.

Elektron in het waterstofatoom

Metingen van de waarschijnlijkheidsverdeling in waterstof

Meetgegevens: de curve is een oplossing van de SV



Harmonische oscillator

Harmonische oscillator

- Systeem wordt verplaatst uit evenwicht

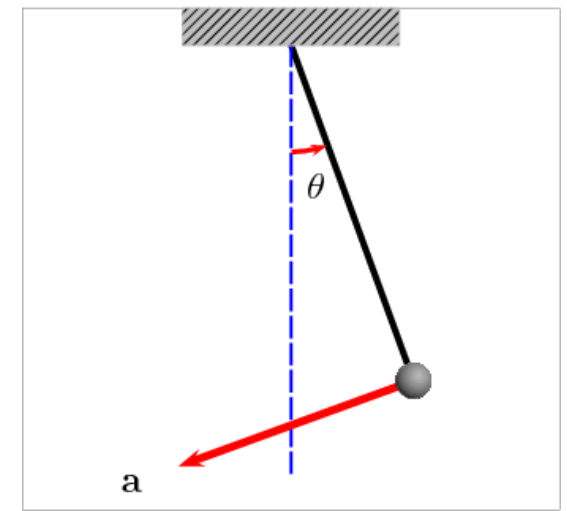
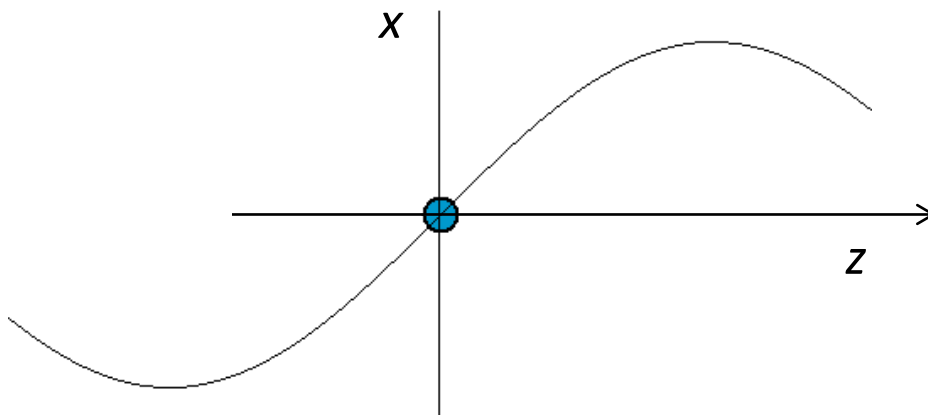
- Toenemende tegenwerkende kracht

$$F = ma = m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx$$

- Harmonische oscillaties rond evenwichtspunt $x(t) = A \cos(\omega t + \varphi)$

- Frequency $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu$

- Potentiële energie $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$



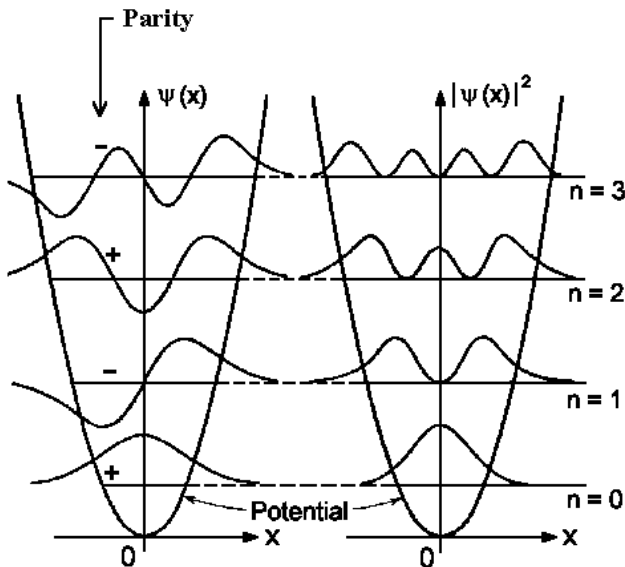
Quantum harmonische oscillator

- Hamiltoniaan $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \Rightarrow k = m\omega^2$ $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$

- Schrödingervergelijking $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

- Golffuncties $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$

- Energieën $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$



$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

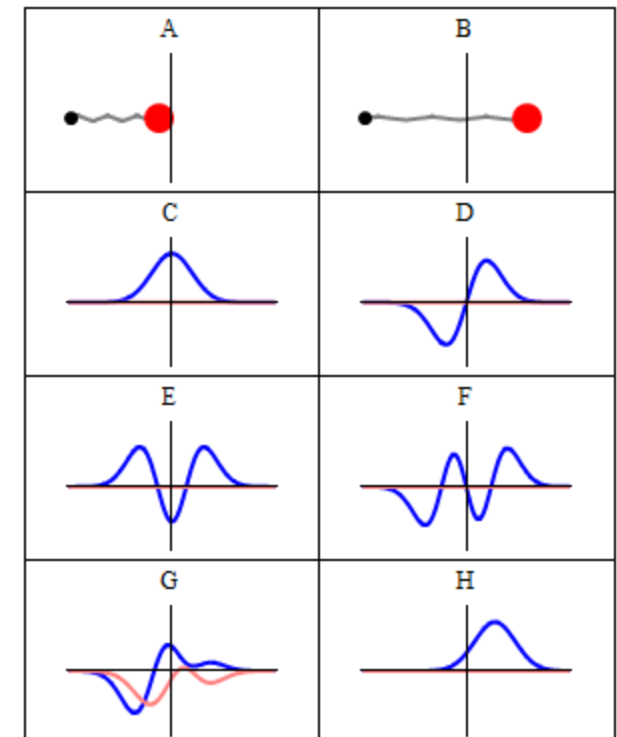
$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$

$$H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$$

$$H_7(x) = 128x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x$$



Huiswerk: opgave 3.5.1

Opgave 5: Harmonische oscillator

De golf functie $\Psi(x, t)$ voor de laagste energietoestand van een eenvoudige harmonische oscillator, bestaande uit een deeltje met massa m waarop een lineaire herstelkracht met krachtconstante C werkt, kan worden geschreven als $\Psi(x, t) = Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}$, waarbij de reële constante A elke waarde kan aannemen.

1. Verifieer dat deze uitdrukking een oplossing is van de schrödingervergelijking voor de betreffende potentiaal ($V(x, t) = V(x) = Cx^2/2$).

Oplossing: We onderzoeken of de vergelijking een oplossing is, door hem in te vullen in de Schrödingervergelijking en te controleren of hij hieraan voldoet. De Schrödingervergelijking luidt

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}. \quad (15)$$

Allereerst bepalen we de relevante partiële afgeleiden.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} &= -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x \Psi(x, t), \\ \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} \Psi(x, t) + \frac{Cmx^2}{\hbar^2} \Psi(x, t), \\ \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{C}{m}} \Psi(x, t). \end{aligned}$$

Huiswerk: opgave 3.5.2

Invullen in de Schrödingervergelijking levert

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}\Psi(x,t) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{Cmx^2}{\hbar^2}\Psi(x,t) + \frac{Cx^2}{2}\Psi(x,t) = -i\hbar\frac{i}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi(x,t). \quad (17)$$

We kunnen nu overal $\Psi(x,t)$ wegstrepen. We vinden dan

$$\underline{+\frac{\hbar}{2m}\sqrt{Cm} - \frac{Cx^2}{2} + \frac{Cx^2}{2} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}} \quad (18)$$

en het is duidelijk dat de vergelijking inderdaad een oplossing van de Schrödingervergelijking is.

Huiswerk: opgave 3.5.2

Invullen in de Schrödingervergelijking levert

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}\Psi(x,t) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{Cmx^2}{\hbar^2}\Psi(x,t) + \frac{Cx^2}{2}\Psi(x,t) = -i\hbar\frac{i}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi(x,t). \quad (17)$$

We kunnen nu overal $\Psi(x,t)$ wegstrepen. We vinden dan

$$\underline{+\frac{\hbar}{2m}\sqrt{Cm} - \frac{Cx^2}{2} + \frac{Cx^2}{2} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}} \quad (18)$$

en het is duidelijk dat de vergelijking inderdaad een oplossing van de Schrödingervergelijking is.

2. Bewijs dat $\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$ reëel is, en enkel positief of nul kan zijn.

Oplossing: Hiertoe schrijven we de golf functie als

$$\Psi(x,t) = a(x,t) + ib(x,t), \quad (19)$$

met $a(x,t)$ het reële deel en $b(x,t)$ het imaginaire deel van de golf functie. Voor de complex geconjugeerde golf functie geldt dan

$$\Psi^*(x,t) = a(x,t) - ib(x,t), \quad (20)$$

Het product $\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$ kan geschreven worden als

$$\Psi(x,t)^*\Psi(x,t) = (a(x,t) - ib(x,t))(a(x,t) + ib(x,t)) = a^2(x,t) + b^2(x,t) \geq 0. \quad (21)$$

Huiswerk: opgave 3.5.3

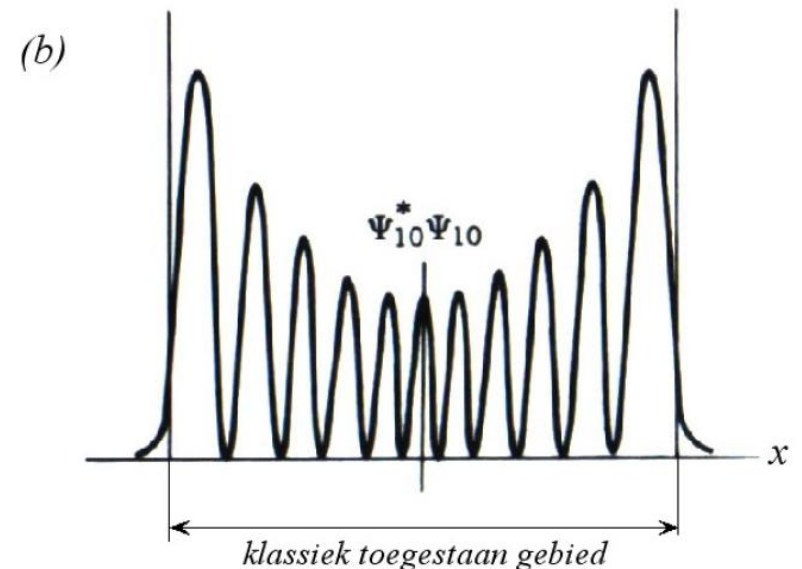
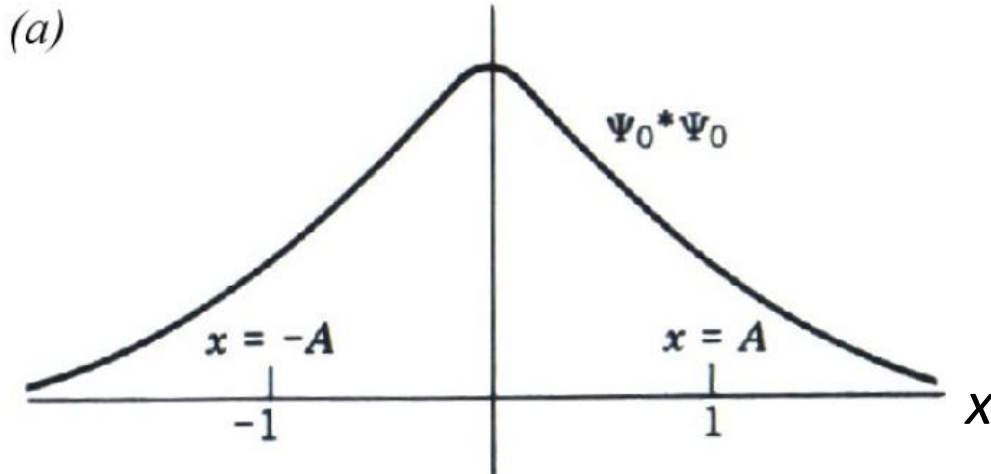
3. Bereken de waarschijnlijkheidsdichtheid voor de eenvoudige harmonische oscillator in de laagste energietoestand met behulp van de gegeven golffunctie.

Oplossing: De waarschijnlijkheidsdichtheid wordt gegeven door de uitdrukking $\Psi(x, t)^* \Psi(x, t)$ en indien we de gegeven golffunctie gebruiken, vinden we

$$\Psi(x, t)^* \Psi(x, t) = \left(A e^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2} e^{+(i/2)\sqrt{C/mt}} \right) \left(A e^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2} e^{-(i/2)\sqrt{C/mt}} \right). \quad (22)$$

De complexe exponenten (het fasedeel) vallen weg en we houden over

$$\Psi(x, t)^* \Psi(x, t) = A^2 e^{-ax^2} \quad \text{met} \quad a = \frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}. \quad (23)$$



4. Evalueer de voorspellingen van de klassieke fysica voor de waarschijnlijkheidsdichtheid van een eenvoudige harmonische oscillator in de opgave en vergelijk het resultaat met dat gevonden in de vorige deelopgave.

Oplossing: In de klassieke fysica hebben we te maken met een deeltje, dat zich als het ware in een paraboolvormige kom bevindt. Klassiek komt de laagste energietoestand overeen met de situatie dat het deeltje zich in rust op positie $x = 0$ bevindt. Uiteraard is dat in strijd met de onzekerheidsrelatie en vinden we in de quantummechanica derhalve een nulpuntsenergie. We zullen in het volgende de situatie met klassieke fysica beschrijven.

Het klassieke deeltje is onderhevig aan een kracht die evenredig is met de verplaatsing van de evenwichttoestand en gericht is naar $x = 0$. De oscillator heeft een potentiële energie,

$$V(x) = \frac{C}{2}x^2, \quad (24)$$

zodat het deeltje een kracht

$$F = -\frac{dV}{dx} = -Cx \quad (25)$$

ervaart, met C de zogenaamde veerconstante. Door gebruik te maken van de tweede wet van Newton, vinden we de differentiaalvergelijking

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -Cx. \quad (26)$$

Deze vergelijking heeft als oplossing (controleer dat maar door invullen)

$$x(t) = A \cos(\omega_0 t + \phi), \quad (27)$$

waarbij A de amplitude, ϕ de fasehoek en $\omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}}$ de hoekfrequentie zijn. We kunnen de snelheid van het klassieke deeltje vinden door de afgeleide te nemen en dat levert

$$v(t) = \frac{dx}{dt} = -\omega_0 A \sin(\omega_0 t + \phi). \quad (28)$$

De uitdrukkingen voor x en v komen voor in de formule voor de totale energie en produceren een bewegingsconstante.

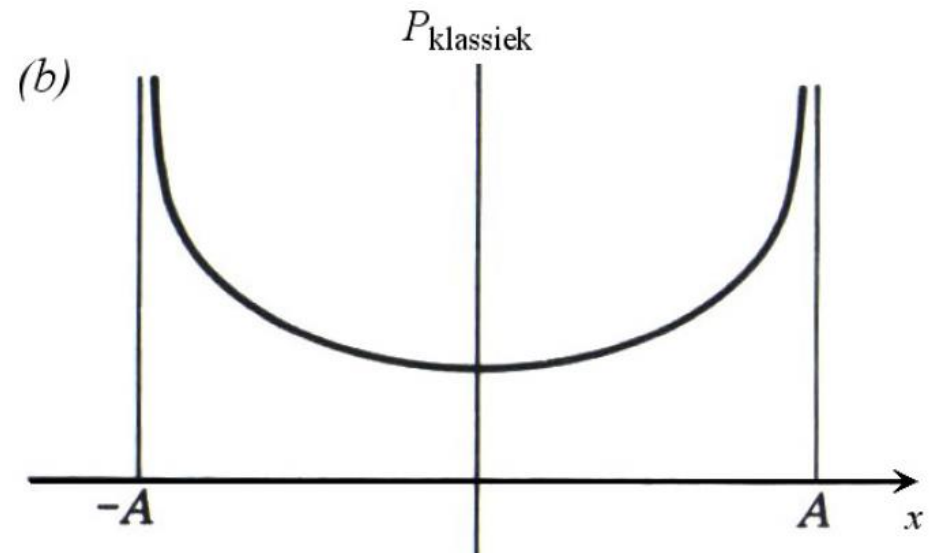
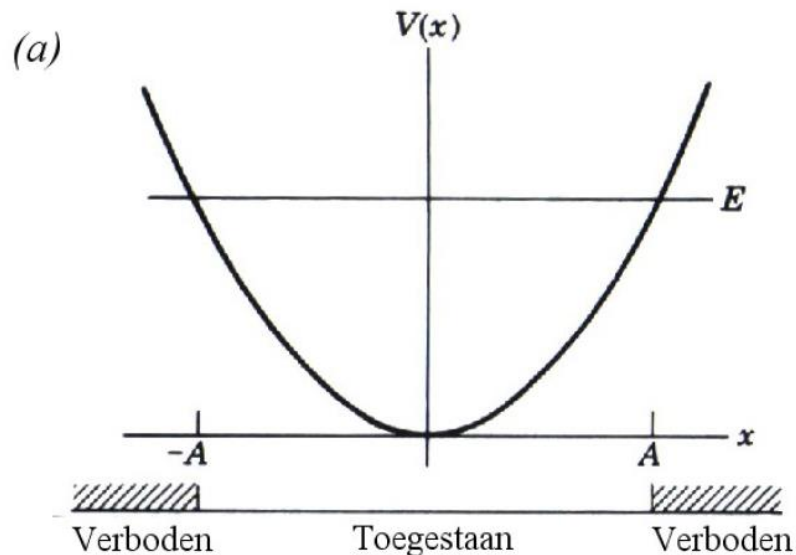
$$\begin{aligned}
 E &= K + V = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}Cx^2 \\
 &= \frac{m}{2}\omega_0^2 A^2 \sin^2(\omega_0 t + \phi) + \frac{C}{2}A^2 \cos^2(\omega_0 t + \phi) \\
 &= \frac{C}{2}A^2.
 \end{aligned} \tag{29}$$

Dit resultaat kan geherscht worden, zodat we v als functie van x krijgen,

$$v = \sqrt{\frac{2}{m} \left(E - \frac{C}{2}x^2 \right)} = \sqrt{\frac{C}{m} (A^2 - x^2)}.$$

$P_{\text{klassiek}}(x)dx = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}$

Het is duidelijk dat x^2 niet groter kan zijn dan A^2 , anders kan v niet de fysische snelheid van het klassieke deeltje voorstellen.



De uitdrukkingen voor x en v komen voor in de formule voor de totale energie en produceren een bewegingsconstante.

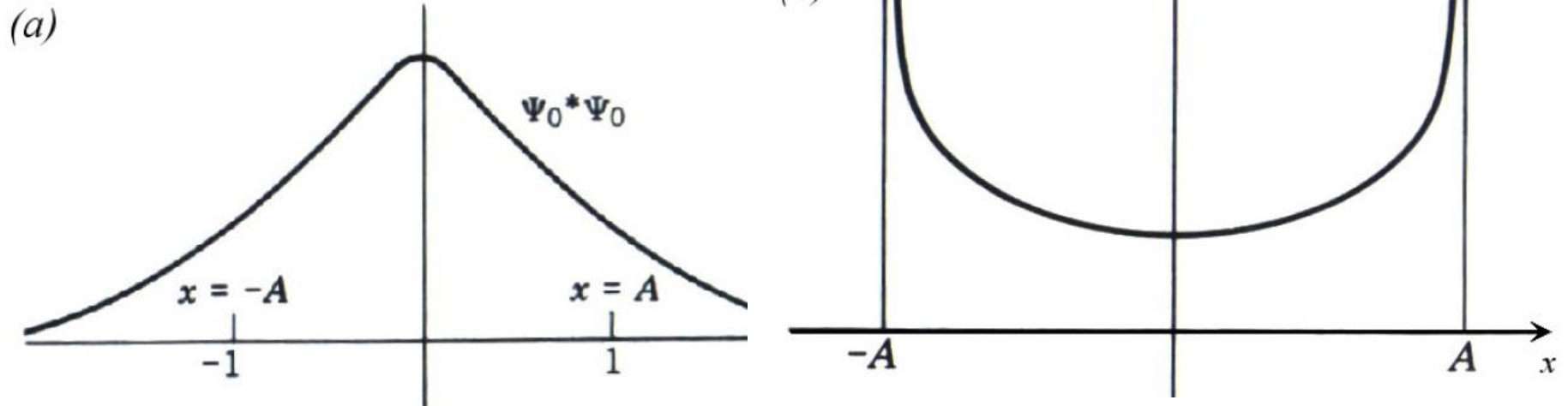
$$\begin{aligned}
 E &= K + V = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}Cx^2 \\
 &= \frac{m}{2}\omega_0^2 A^2 \sin^2(\omega_0 t + \phi) + \frac{C}{2}A^2 \cos^2(\omega_0 t + \phi) \\
 &= \frac{C}{2}A^2.
 \end{aligned} \tag{29}$$

Dit resultaat kan geherscht worden, zodat we v als functie van x krijgen,

$$v = \sqrt{\frac{2}{m} \left(E - \frac{C}{2}x^2 \right)} = \sqrt{\frac{C}{m} (A^2 - x^2)}.$$

$P_{\text{klassiek}}(x)dx = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}$

Het is duidelijk dat x^2 niet groter kan zijn dan A^2 , anders kan v niet de fysische snelheid van het klassieke deeltje voorstellen.



De uitdrukkingen voor x en v komen voor in de formule voor de totale energie en produceren een bewegingsconstante.

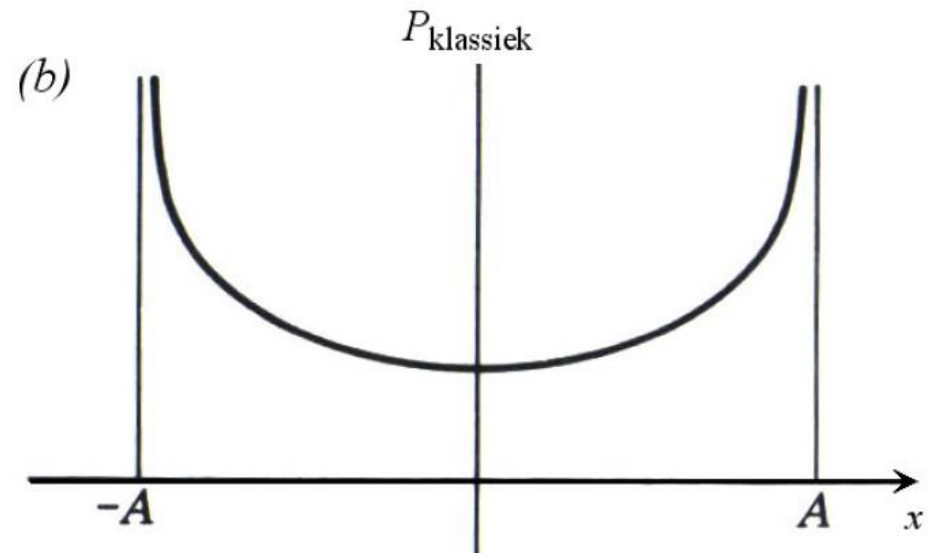
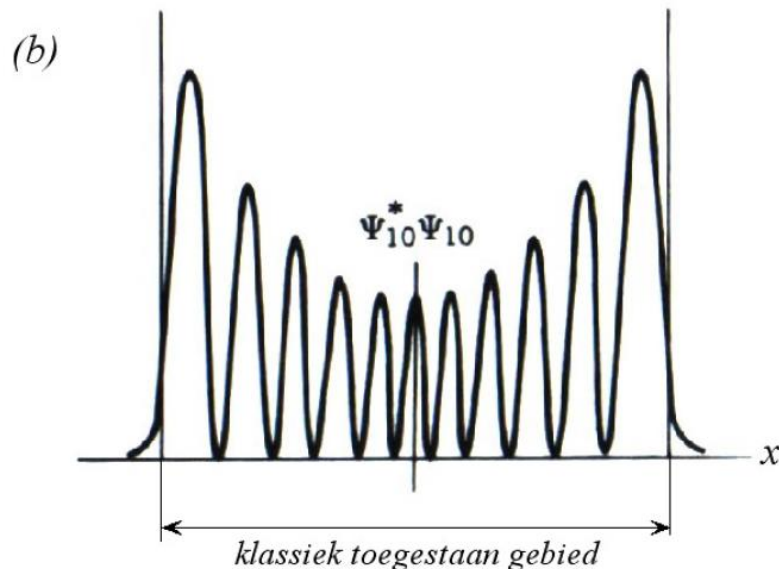
$$\begin{aligned}
 E &= K + V = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}Cx^2 \\
 &= \frac{m}{2}\omega_0^2 A^2 \sin^2(\omega_0 t + \phi) + \frac{C}{2}A^2 \cos^2(\omega_0 t + \phi) \\
 &= \frac{C}{2}A^2.
 \end{aligned} \tag{29}$$

Dit resultaat kan geherscht worden, zodat we v als functie van x krijgen,

$$v = \sqrt{\frac{2}{m} \left(E - \frac{C}{2}x^2 \right)} = \sqrt{\frac{C}{m} (A^2 - x^2)}.$$

$P_{\text{klassiek}}(x)dx = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}$

Het is duidelijk dat x^2 niet groter kan zijn dan A^2 , anders kan v niet de fysische snelheid van het klassieke deeltje voorstellen.



5. Normeer de golffunctie door de waarde van de willekeurige constante A te bepalen, zodanig dat de totale waarschijnlijkheid het deeltje ergens aan te treffen gelijk wordt aan 1.

Oplossing: We normeren de golffunctie door de totale waarschijnlijkheid op 1 te stellen,

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1. \quad (33)$$

De waarschijnlijkheidsdichtheid is uitgerekend in opgave 5.3 en we vinden

$$\Psi(x, t)^* \Psi(x, t) = A^2 e^{-ax^2} \quad \text{met} \quad a = \frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} \quad A^2 = \sqrt{\frac{a}{\pi}} = \sqrt[4]{\frac{Cm}{\hbar^2 \pi^2}}$$

5. Normeer de golffunctie door de waarde van de willekeurige constante A te bepalen, zodanig dat de totale waarschijnlijkheid het deeltje ergens aan te treffen gelijk wordt aan 1.

Oplossing: We normeren de golffunctie door de totale waarschijnlijkheid op 1 te stellen,

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1. \quad (33)$$

De waarschijnlijkheidsdichtheid is uitgerekend in opgave 5.3 en we vinden

$$\Psi(x, t)^* \Psi(x, t) = A^2 e^{-ax^2} \quad \text{met} \quad a = \frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} \quad \boxed{A^2 = \sqrt{\frac{a}{\pi}} = \sqrt[4]{\frac{Cm}{\hbar^2 \pi^2}}}$$

6. Bepaal de verwachtingswaarde $\langle x \rangle$ voor een deeltje in de laagste energietoestand van een harmonische oscillator door gebruik te maken van de golffunctie en waarschijnlijkheidsdichtheid berekend in de vorige opgaven.

Oplossing: De verwachtingswaarde $\langle x \rangle$ volgt uit

$$\langle x \rangle = \langle \Psi | x | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx. \quad (45)$$

We zien direct dat het tijdafhankelijke deel wegvalt en schrijven met behulp van vergelijking (23)

$$\langle x \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-ax^2} dx. \quad (46)$$

Het resultaat van deze integraal is gelijk aan nul, want we integreren over het product van een oneven (x) en een even (e^{-ax^2}) functie. Derhalve is $\langle x \rangle = 0$.

Huiswerk: opgave 3.5.7

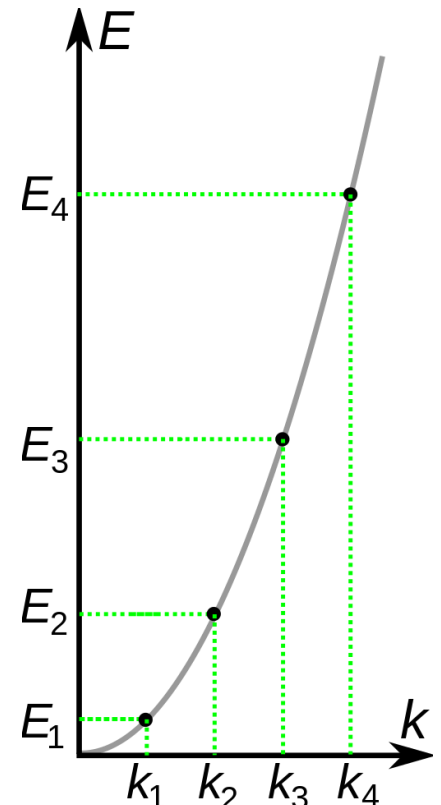
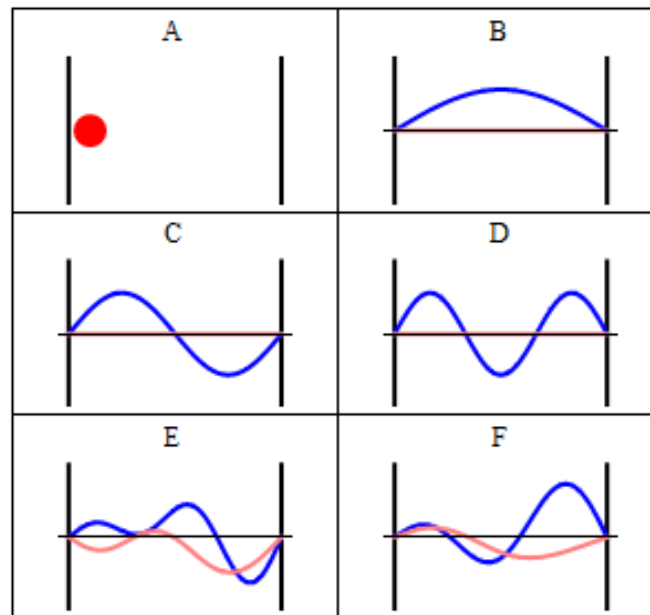
7. Beschouw een deeltje met mass m dat zich vrij kan bewegen langs de x -as tussen posities $x = -a/2$ en $x = +a/2$, maar waarbij het strikt verboden is dat het deeltje zich buiten dit interval bevindt. De golffunctie van het deeltje kan geschreven worden als $\Psi(x, t) = A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar}$ binnen het interval en is gelijk aan nul erbuiten. Bepaal de energie van de laagste energietoestand.

$$\left. \begin{array}{l} E = T = \frac{p^2}{2m} \\ p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hn}{2L} \end{array} \right\} E_n = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}, \quad \text{voor } n = 1, 2, 3, \dots$$

Voor $n = 1$ vinden we

$$\Psi(x, t) = A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar}$$

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$



Huiswerk: opgave 3.5.8

De verwachtingswaarde van x wordt gegeven door de integraal

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \frac{2}{a} x \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = 0 \quad A^2 = \frac{2}{a}$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \frac{2}{a} \frac{\hbar}{i} \left(-\frac{\pi}{a} \right) \cos \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi x}{a} dx = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \frac{2}{a} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{2}{a} \frac{a^3}{\pi^3} \left(\frac{\pi^3}{24} - \frac{\pi}{4} \right) = \frac{a^2}{12\pi^2} (\pi^2 - 6)$$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi dx \\ &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \Psi^* \left(2mi\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi dx = 2mE_1 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \Psi^* \Psi dx = 2mE_1 \end{aligned}$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{a^2}{\pi^2} \frac{\pi^2 - 6}{12}$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = 2mE_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2}$$

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} \hbar \approx 0.57 \hbar$$