
NATUURKUNDE 6

Quantummechanica: Schrödinger-vergelijking

*Thus, the task is, not so much to see what no one has yet seen;
but to think what nobody has yet thought, about which everybody sees.*

Erwin Schrödinger (1887-1961)

Kernbegrippen

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + 2m \left(\frac{2\pi}{h} \right)^2 [E - V(x)] \psi(x) = 0$$

eigenfuncties

eigenwaarden

golffunctie

quantummechanica

Schrödinger – vergelijking

Inleiding

▼ Dualiteit

De ontdekking van energiequanta door Max Planck (1900) was het startpunt van een spectaculaire ontwikkeling van theorie en experiment in de natuurkunde. Resultaat van deze ontwikkeling zijn een aantal nieuwe principes van de natuurkunde die we nogmaals samenvatten:

- *quantisatie*: fysische grootheden zoals energie, impuls, draai-impuls, zijn gequantiseerd en kunnen slechts discrete waarden aannemen;

- *dualiteit van golf- en deeltjeskarakter*: een bundel electronen heeft naast een deeltjeskarakter (de massa van het electron kan in een massaspectrograaf bepaald worden) ook een golfkarakter (met electronen kan een afbeelding van zeer kleine voorwerpen gemaakt worden met behulp van een electronenmicroscop); anderzijds kan aan electromagnetische straling (gekaracteriseerd door golflengte of frequentie) ook een deeltjeskarakter (fotonen) toegekend worden.
- *de Broglie-relaties*: tussen de grootheden die het deeltjesgedrag (energie en impuls) en het golfgedrag (golflengte, frequentie) beschrijven, bestaan de volgende relaties:

$$\begin{aligned} E &= h f \\ p &= \frac{h}{\lambda} \end{aligned} \quad (1)$$

met $h = 6.625 \times 10^{-34}$ Js de constante van Planck;

- *Heisenberg-onzekerheidsrelatie*: bepaalde paren van fysische grootheden zoals plaats en impuls kunnen niet tegelijk scherp bepaald worden:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{2\pi} \quad (2)$$

▼ Quantummechanica

Experimentele gegevens, zoals het bestaan van atoomspectra, het foto-electrisch effect, diffractie van electronen, brachten natuurkundigen aan het begin van deze eeuw tot de overtuiging dat energie niet in willekeurig kleine hoeveelheden geëmitteerd of geabsorbeerd kan worden.

- Het begrip *quantummechanica* ontleent zijn naam aan deze energiequanten.

Deze fundamenteel nieuwe theorie werd in de periode 1925-27 ontwikkeld door Erwin Schrödinger (1887-1961), Werner Heisenberg (1901-1976) en Paul Dirac (1902-1984). De quantummechanica is van toepassing op atomaire processen, en wordt gekarakteriseerd door de constante van Planck $h = 6.6 \times 10^{-34}$ J s. Uitgedrukt in de eenheden Joule en seconde die we in het dagelijkse leven gebruiken is deze constante zeer klein. Maar voor het begrip van fundamentele fysische processen tussen atomen onderling en de wisselwerking van licht met atomen is de quantummechanica onmisbaar.

De golf-deeltje dualiteit die de grondslag vormt voor de quantummechanica heeft een aantal raadselachtige aspecten, zoals bijvoorbeeld de Heisenberg onzekerheidsrelaties en het gedrag van electronen in het twee-spleten-experiment. Tegelijk moet gezegd worden dat quantummechanica de meest accurate natuurkundige theorie is die op dit moment bestaat. Atoomspectra en andere atomaire eigenschappen kunnen met een zeer grote precisie berekend worden. De vergelijking die daarvoor opgelost moet worden is de *Schrödinger-vergelijking*, die we in dit hoofdstuk zullen introduceren. Ook zullen we aan de hand van een aantal voorbeelden uitleggen hoe het oplossen van deze vergelijking in zijn werk gaat.

Theorie

▼ Golf functie

Het bestaan van atoomspectra suggereert dat het atoom zich gedraagt als een trillende snaar die slechts in een aantal discrete toestanden kan worden aangeslagen. In het quantummechanica worden deeltjes daarom beschreven als golven. Dit golfgedrag beschrijven we met de *golffunctie* $\psi(x)$ die op iedere plaats x beschouwd kan worden als de amplitudo van de golf die met een deeltje is geassocieerd.

- Aan de golffunctie geeft men de betekenis dat $|\psi(x)|^2$ op iedere plaats x de waarschijnlijkheid geeft om een deeltje aan te treffen.

Beter gezegd, het product $|\psi(x)|^2 \Delta x$ geeft de kans om het deeltje in een interval Δx rond de plaats x aan te treffen; men noemt $|\psi(x)|^2$ de *kansdichtheid*. Aangezien de kans altijd één is om het deeltje ergens aan te treffen moet de golffunctie genormeerd zijn volgens:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (3)$$

De golffunctie is de centrale grootheid in de quantummechanica en de vergelijking waaraan deze grootheid voldoet heet de Schrödinger-vergelijking.

▼ Golfvergelijking

De golffunctie $\psi(x)$ beschrijft deeltjes als een golf. De afleiding van de vergelijking waaraan deze golffunctie moet voldoen is gebaseerd op de volgende veronderstelling:

- De meest algemene golffunctie is een superpositie van eenvoudige sinus en cosinus golven van de vorm:

$$\cos\left(2\pi \frac{x}{\lambda}\right), \sin\left(2\pi \frac{x}{\lambda}\right) \quad (4)$$

waarin λ de golflengte is.

Het is handig om afkorting

$$k := \frac{2\pi}{\lambda} \quad (5)$$

in te voeren. Men noemt k het *golfgetal*.

De vergelijking waaraan deze sinus- of cosinus-functies voldoen, vinden we door twee keer te differentiëren naar x . Dit geeft in het geval van de sinus-functie:

$$\frac{d^2 \sin(kx)}{dx^2} = -k^2 \sin(kx) \quad (6)$$

Vervangen we de sinus-functie door de cosinus-functie dan krijgen we hetzelfde. Dus algemeen geldt de vergelijking:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0 \quad (7)$$

- Deze vergelijking noemt men de *golfvergelijking*.

De golfvergelijking geeft een zeer algemene beschrijving van staande golven, zoals de trilling van een snaar in een muziekinstrument, of de toon van een orgelpijp.

▼ Schrödinger-vergelijking

In het geval van de quantummechanica beschrijven de staande golven deeltjes die een De Broglie golflengte hebben

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{ofwel} \quad k = 2\pi \frac{p}{h} \quad (8)$$

Invullen in de golfvergelijking (7) geeft:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 p^2 \psi(x) = 0 \quad (9)$$

Tenslotte weten we dat voor een conservatief systeem de componenten van de kracht afgeleid worden van een potentiële energieterm $V(x)$; bijvoorbeeld:

$$F_x = -\frac{dV(x)}{dx} \quad (10)$$

In dat geval wordt de totale energie van een deeltje de som van kinetische en potentiële energie:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (11)$$

Oplossen naar p geeft het belangrijke verband:

$$p^2 = 2m(E - V) \quad (12)$$

Dit gebruiken we nu nog in de golfvergelijking (9). Dan krijgen we uiteindelijk:

- de *Schrödinger-vergelijking* (voor tijdsafhankelijke processen):

$$-\frac{h^2}{8m\pi^2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (13)$$

Deze vergelijking is voor het eerst afgeleid door Erwin Schrödinger in 1926. Als de potentiaal bekend is kunnen we uit deze vergelijking in principe de golf functie bepalen.

Merk op:

- de Schrödinger-vergelijking bevat niet de kracht zoals de tweede wet van Newton, maar de potentiaal.
- de Schrödinger-vergelijking is een tweede-orde differentiaal-vergelijking. Voor een unieke oplossing moeten ook nog twee rand-condities worden gegeven.

▼ Eigenwaarden en eigenfuncties

De Schrödingervergelijking (voor tijdsafhankelijke processen) kunnen we symbolisch schrijven in de vorm:

$$H \psi(x) = E \psi(x) \quad (14)$$

met de "operator"

$$H = -\frac{h^2}{8m\pi^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (15)$$

In het algemeen zal de Schrödingervergelijking niet voor iedere waarde van E een oplossing hebben die ook aan de randcondities voldoet. Denk aan een snaar die slechts op een bepaalde manier kan trillen. Iedere waarde E_1, E_2, E_3, \dots , waarvoor de Schrödingervergelijking een oplossing heeft wordt een *eigenwaarde* genoemd en de bijbehorende golffuncties $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$, heten *eigenfuncties*.

▼ Potentiaal

De grootte in de Schrödinger-vergelijking die van probleem tot probleem verschillend is, is de potentiële energie $V(x)$. We geven enkele eenvoudige potentiaalfuncties als voorbeeld:

- *stapfunctie potentiaal*; dit is van toepassing op het probleem van een deeltje dat opgesloten zit tussen twee ondoordringbare wanden. Waar de wand begint wordt de potentiaal oneindig; zie het vraagstuk van een deeltje in een 1-dimensionale doos.
- *Coulomb potentiaal*

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (16)$$

die gebruikt wordt voor de beschrijving van het waterstof atoom. De wiskundige behandeling is echter te complex om dit probleem in het bestek van dit college te behandelen.

- *harmonische potentiaal*:

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 \quad (17)$$

De harmonische potentiaal is daarom zo belangrijk omdat beweging rond een evenwichtspositie voor kleine uitwijkingen door een harmonische potentiaal benaderd kan worden. De trillingen van twee-atomige moleculen, de trillingen van atomen in een vaste-stof rooster, de vibraties van een kernspin in een inwendig magnetisch veld, steeds keert de harmonische potentiaal in de beschrijving terug.

▼ Oplossing

Niet elke wiskundige oplossing van de Schrödinger-vergelijking is fysisch acceptabel. We stellen aan de golffunctie de volgende eisen:

- de golffunctie is continu.
- de golffunctie is differentieerbaar overal waar $V(x)$ eindig is.
- de golffunctie voldoet aan de normering:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (18)$$

vanwege de interpretatie als waarschijnlijkheidsdichtheid.

- de golffunctie gaat naar nul voor $x \rightarrow \infty$; anders zou de normeringsintegraal niet bestaan.

Verder onderzoek van de Schrödinger vergelijking laat zien dat het teken van $\partial^2 \psi / \partial x^2$ bepaald wordt door het teken van het product $[V(x) - E] \psi(x)$; immers, we kunnen schrijven:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = 2m \left(\frac{2\pi}{h} \right)^2 [V(x) - E] \psi(x) \quad (19)$$

Dit leidt tot

- oscillerend gedrag van $\psi(x)$ voor $E > V(x)$; in eenvoudige gevallen een sin of cos-functie.
- monotoon toenemend of afnemend gedrag voor $E < V(x)$; in eenvoudige gevallen een e-macht.

Zie verder de vraagstukken.

Testvragen

▽ 1. spectroscop

Wat meet men met een traliespectrometer?

- ☐ de spectraallijnen van atomen
- ☐ het spectrum van atomen
- ☐ de golflengte van straling
- ☐ de frequentie van licht

▽ 2. atoom

Een atoom is in de grondtoestand. Kan dit atoom licht uitzenden?

- ☐ nee, vanwege energiebehoud
- ☐ ja, vanwege de Heisenberg onzekerheids relatie
- ☐ niet zondermeer.

▽ 3. Newton

Is de quantumtheorie in strijd met de wetten van Newton ?

- ☐ ja, vanwege het onzekerheidsprincipe
- ☐ ja, vanwege het feit dat de kracht conservatief moet zijn.
- ☐ Nee, vanwege de kleine waarde van de constante van Planck

▽ 4. waarschijnlijkheid

De golf functie in het kwadraat $|\psi(x)|^2$ is evenredig met de waarschijnlijkheid om een deeltje aan te treffen ter plekke x . Voor $|\psi(x)|^2$ gelden een of meer van de volgende uitspraken:

- ☐ is positief definitief
- ☐ is onbegrensd tussen nul en oneindig
- ☐ kan identiek nul zijn.

▽ 5. energie

De aantrekkingskracht tussen electron en kern in het waterstof atoom is een gevolg van de Coulombwisselwerking $V(r)$ waarbij r de positie van het electron t.o.v. de kern aangeeft. Voor de energie van het electron geldt de volgende uitspraak:

- ☐ $E < V(r)$
- ☐ $E < 0$
- ☐ $E > V(r)$

▽ 6. Lamb verschuiving

Er is een zekere stralingsfrequentie in het spectrum van waterstof die wordt aangeduid als de Lamb-verschuiving. De theoretische waarde berekend met de quantummechanica is $1057,860 \pm 0,009$ megaHertz. De experimenteel bepaalde waarde is $1057,845 \pm 0,009$ megaHertz. Zijn deze twee waarden met elkaar in overeenstemming?

- ☐ ja, ze vallen binnen de foutengrens

☐ nee, ze vallen buiten de foutengrens

☐ marginaal

▼ 7. massa

Stel de massa van een atoom wordt heel nauwkeurig gemeten. Zou men een verschil meten tussen de massa van het atoom in de grondtoestand en in een aangeslagen toestand?

☐ ja, want er geldt $E = m c^2$

☐ nee, vanwege energiebehoud

☐ Alleen als er een foton wordt uitgezonden.

Mathematica

▼ Packages

Het volgende package heb je nodig:

```
<< VisualDSolve`
```

▼ Commando's

▼ TrigExpand

TrigExpand is analoog aan **PowerExpand** alleen dan met trigonometrische functies.

```
TrigExpand[Cos[α + β]]
```

$$\cos[\alpha] \cos[\beta] - \sin[\alpha] \sin[\beta]$$

▼ Evaluate

Met **Evaluate** vraag je *Mathematica* om een bepaalde uitdrukking te brekenen. Dat kan vooral nuttig zijn bij het plotten van bepaalde functies. Als in het volgende voorbeeld:

```
f[x_, n_] := Sin[n x]
```



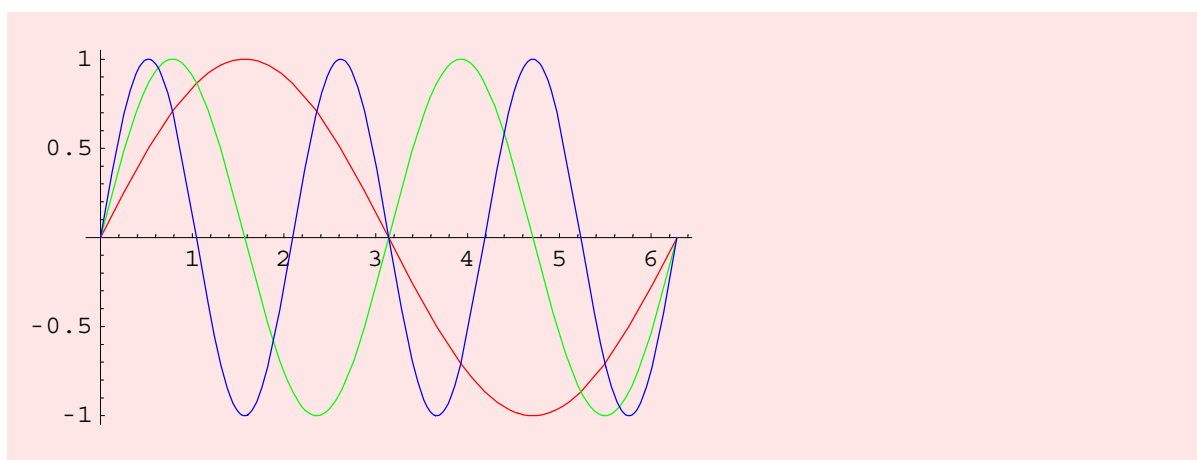
```
Plot[Table[f[x, n], {n, 3}], {x, 0, 2 π}, PlotStyle -> {Red, Green, Blue}];
```

```
Plot::plnr : Table[f[x, n], {n, 3}] is not a  
machine-size real number at x = 0.5328694051959509`.
```

```
General::stop : Further output of  
Plot::plnr will be suppressed during this calculation.
```

Dit werkt niet. Het commando **Table** moet eerst worden uitgewerkt:

```
Plot[Evaluate[Table[f[x, n], {n, 3}]],  
{x, 0, 2 π}, PlotStyle -> {Red, Green, Blue}];
```



Voorbeeld

▼ Deeltje in een harmonische potentiaal

Voor een deeltje dat zich in een stabiel evenwicht bevindt moet de potentiaalfunctie een minimum hebben. Potentiaalfuncties zijn in het algemeen continue functies hetgeen betekent dat een potentiaalfunctie met een minimum in het punt x_0 in dit minimum benaderd kan worden door een parabolische functie

$$V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2} \alpha (x - x_0)^2$$

De constante eerste term mag weggelaten worden. Kiezen we de oorsprong van het coördinatensysteem in het minimum van de potentiaalfunctie, dan geldt de volgende benadering:

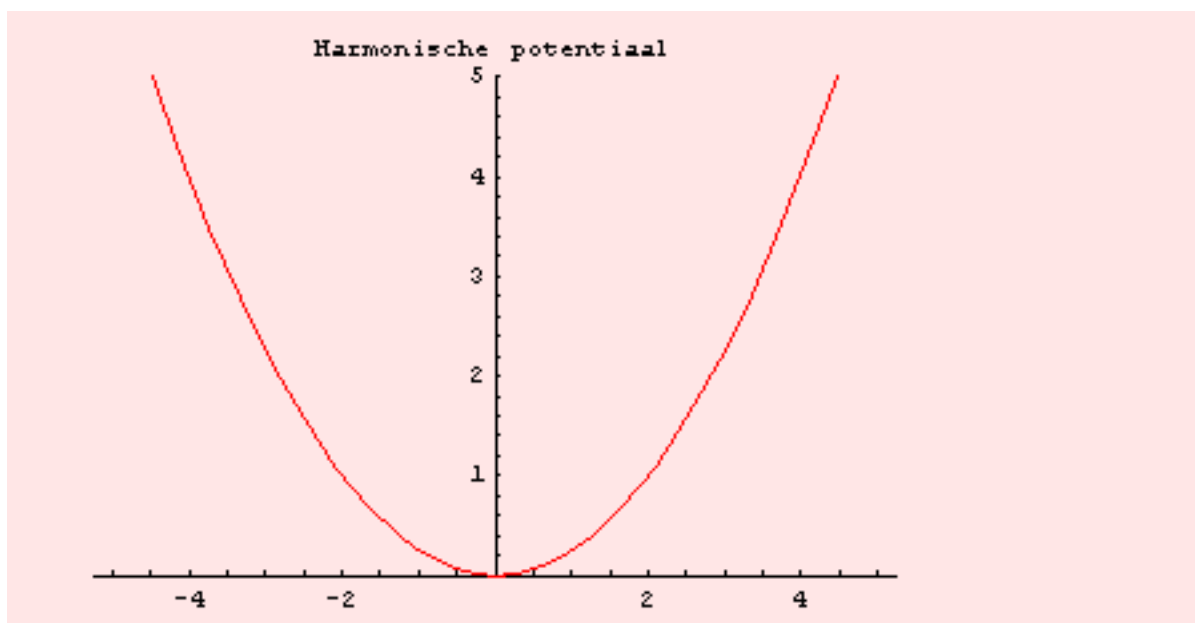
$$V(x) = \frac{1}{2} \alpha x^2$$

De studie van deze potentiaal is belangrijk omdat hieruit conclusies getrokken kunnen worden over vibraties van atomen en molecuulsystemen.

```
<< Graphics`Colors`
```

$$V = \frac{1}{2} \alpha x^2;$$

```
Plot[{V /. α -> 1/2}, {x, -5, 5}, PlotRange -> {0, 5},
  PlotLabel -> "Harmonische potentiaal", PlotStyle -> Red];
```



Voor de harmonische potentiaal heeft de Schrödingervergelijking de vorm:

$$-\frac{\hbar^2}{8m\pi^2} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \alpha x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

We weten uit hoofdstuk 2 dat in de klassieke mechanica de overeenkomstige vergelijking is:

$$m \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} x \right) = -\alpha x$$

met als oplossing een harmonische beweging met een karakteristieke frekwentie gegeven door:

$$2\pi f = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

Vermoed kan worden dat de quantummechanische oplossing voor de energie-eigenwaarden van de vorm is:

$$E_n = n h f, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Op een kleine correctie na (de nulpuntsenergie) is deze veronderstelling juist, zoals we hieronder zullen laten zien.

▽ Probeeroplossing

We bekijken de Schrödingervergelijking en onderzoeken de aard van de oplossingen allereerst voor zeer grote waarden van x . In dat geval zal E veel kleiner dan de potentiële energieterm zijn:

$$E \ll \frac{1}{2} \alpha x^2$$

We benaderen derhalve de Schrödingervergelijking door:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) = \beta^2 x^2 \psi(x)$$

met de afkorting

$$\beta^2 = \frac{\alpha m (2\pi)^2}{h^2}$$

Als we $1 \ll x$ nemen dan heeft deze vergelijking de oplossing :

$$\psi(x) = A e^{-\frac{1}{2} \beta x^2}$$

Deze oplossing voldoet aan alle eisen die aan een golf functie gesteld moeten worden, waarbij de normeringseis de constante A bepaalt.

▽ Grondtoestand

We onderzoeken nu of de golf functie zoals hierboven gevonden inderdaad voldoet aan de Schrödingervergelijking voor een harmonische potentiaal. Deze heeft de vorm:

$$\text{Schr} = -\frac{h^2 (\partial_{x,x} \psi[x])}{2 m (2\pi)^2} + \frac{1}{2} \alpha x^2 \psi[x] - E_{\text{tot}} \psi[x] == 0$$

$$\frac{1}{2} x^2 \alpha \psi[x] - E_{\text{tot}} \psi[x] - \frac{h^2 \psi''[x]}{8 m \pi^2} == 0$$

Voor de golf functie hebben we gevonden

$$\beta = \frac{2\pi}{h} \sqrt{\alpha m};$$

$$\psi[x_] := A e^{-\frac{1}{2} \beta x^2}$$

Uitwerken met het commando **Simplify**:

$$\text{Simplify}[\text{Schr}]$$

$$\frac{A e^{-\frac{\pi x^2 \sqrt{m \alpha}}{h}} \left(h \sqrt{m \alpha} - 4 m \pi E_{\text{tot}} \right)}{4 m \pi} == 0$$

De golf functie kan weggedeeld worden. Wat we overhouden is een vergelijking voor de energie die op te lossen is:

```
E_tot = E_tot /. Solve[%, E_tot][[1]]
```

$$\frac{h \sqrt{m \alpha}}{4 m \pi}$$

De frequentie van de harmonische oscillator (in klassieke mechanica) is

$$f == \frac{1}{2 \pi} \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

$$f == \frac{\sqrt{\frac{\alpha}{m}}}{2 \pi}$$

De oplossing kunnen we ook hierin uitdrukken

```
Solve[%, \alpha]
```

$$\{\{\alpha \rightarrow 4 f^2 m \pi^2\}\}$$

```
E_tot /. %[[1]]
```

$$\frac{h \sqrt{f^2 m^2}}{2 m}$$

De wortel werd niet genomen omdat *Mathematica* niet weet dat de variabelen slechts positieve waarden bezitten. Verdere vereenvoudiging is te forceren met het commando **PowerExpand**.

```
PowerExpand[%]
```

$$\frac{f h}{2}$$

▼ Nulpuntsenergie

De golffunctie die we hier bestudeerd hebben blijkt de meest eenvoudige oplossing te zijn van de Schrödingervergelijking voor de harmonische potentiaal. We noteren deze oplossing als:

$$\psi_0(x) = A_0 e^{-\frac{1}{2} \beta x^2}$$

Dit houdt tevens in dat dit de oplossing is met de laagste waarde van de energie-eigenwaarde:

$$E_0 = \frac{1}{2} h f$$

Deze laagste energie wordt de nulpuntsenergie genoemd. Het niet gelijk zijn aan nul van deze energie stemt overeen met de Heisenberg onzekerheidsrelaties.

▽ Eigenfuncties en eigenwaarden

Het is niet moeilijk aan te tonen dat er een verzameling van oplossingen is van de Schrödingervergelijking voor een harmonische potentiaal die we kunnen schrijven als

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\frac{1}{2}\beta x^2} H_n(\beta x)$$

het product van de een exponentiële functie en een polynoom van de graad n : $H_n(x)$. Deze functies zijn welbekend in de wiskunde en heten Hermite polynomen. De corresponderende eigenwaarden zijn

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h f, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Het quantumgetal n karakteriseert de verschillende energieniveaus. Dus de energieniveaus van de harmonische oscillator zijn veelvoudigen van hf , precies zoals Planck veronderstelde in 1900.

Zie verder vraagstuk 4.

Vraagstukken

Aanwijzingen voor het oplossen van vraagstukken..

Nothing beats thinking!

Voor het oplossen van natuurkundige vraagstukken bestaan geen vaste voorschriften. Toch is het verstandig een aantal regels te volgen:

Bezint eer gij begint:

Lees de vraagstelling zorgvuldig door. Probeer de natuurkunde van het probleem te begrijpen voordat je *Mathematica* erop los laat. Geef aan welke variabelen in het probleem gegeven zijn en welke gevraagd worden.

Probleemstelling:

Begin een uitwerking met een omschrijving van de probleemstelling in je eigen woorden en geef aan welke variabelen in het probleem gegeven zijn en welke gevraagd worden.

Teken figuur:

Teken voor jezelf een diagram om het probleem te verduidelijken.

Veronderstellingen:

Ga na wat de veronderstellingen zijn; wees niet bang zelf een veronderstelling te formuleren. Het is vaak mogelijk om een eerste schatting van de numerieke uitkomst te geven door vereenvoudigende veronderstellingen te maken.

Geef uitleg:

Geef in de uitwerking van een vraagstuk bij iedere stap steeds uitleg over wat je aan het doen bent en waarom. Je werk wordt daarop beoordeeld.

Dimensies:

Werk zoveel mogelijk met algebraïsche formules, met de numerieke constanten aangegeven door een symbool (h voor de constante van Planck, c voor de lichtsnelheid etc.). Dit heeft het voordeel dat de dimensies van de tussen-resultaten en het antwoord gecontroleerd kunnen worden.

Onderwerp alle belangrijke uitdrukkingen aan deze controle. Laat dit zien in de uitwerking.

Gebruik wat je weet:

Bekijk alle uitkomsten kritisch en vergelijk eventueel met een ander resultaat dat bekend is. Lijkt het antwoord plausibel? Schrijf je conclusie op.

Tenslotte, hou het ordelijk!

Bedenk dat je niet schrijft voor jezelf maar voor iemand anders.

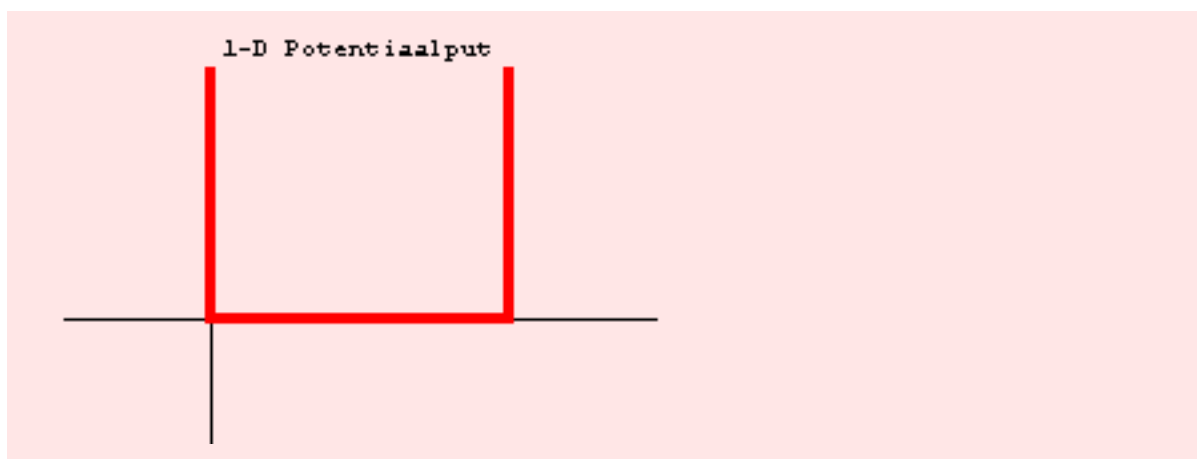
1. Deeltje in een 1-D doos [8 pu]

Met het begrip 1-dimensionale doos definiëren we een potentiaalfunctie die twee, voor een deeltje ondoordringbare, wanden bevat ter plaatse van $x = 0$ en $x = L$, zoals geschetst in de figuur. Als de potentiaal oneindig hoog is spreken we van een doos. De potentiaal is nul voor x tussen 0 en L , en is gelijk aan ∞ daarbuiten. De potentiaalfunctie V voor de 1-dimensionale doos is dus

$$V = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ \infty & L < x \end{cases}$$

De grafiek van de potentiaalfunctie ziet er als volgt uit:

```
potentiaalput = Graphics[{Thickness[0.02],
  RGBColor[1, 0, 0], Line[{0, 2}, {0, 0}, {2, 0}, {2, 2}]}];
Show[potentiaalput, PlotLabel -> "1-D Potentiaalput",
  Axes -> True, Ticks -> False, PlotRange -> {{-1, 3}, {-1, 2}}];
```



Deze situatie staat model voor zeer veel quantummechanische problemen waarbij een deeltje zich in een gebonden toestand bevindt. In het algemeen zal de Schrödingervergelijking voor gebonden systemen een discreet energiespectrum hebben. Hieronder wordt gevraagd dit spectrum te berekenen.

Bij het zoeken naar geschikte oplossingen van de Schrödingervergelijking kan allereerst geconcludeerd worden dat $\psi(x) = 0$ is buiten de doos omdat er geen kans is het deeltje daar aan te treffen. Binnen de doos is $V(x) = 0$ en luidt de Schrödingervergelijking:

$$-\frac{h^2}{8m\pi^2} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \psi(x)$$

- 1.1 Ga na dat deze tweede-orde differentiaalvergelijking voor $E > 0$ de volgende algemene oplossing heeft:

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

waarbij k voldoet aan

$$k^2 = \frac{2m(2\pi)^2 E}{h^2}$$

Is dit ook wat je verwacht op grond van de De-Broglie relatie?

Antwoord

- 1.2 Welke voorwaarden voor A en B volgen uit $\psi(0) = 0$ en $\psi(L) = 0$?

Antwoord

- 1.3 Omdat A niet nul mag zijn volgt uit $\psi(L) = 0$ ook een conditie voor k . Welke conditie?

Antwoord

- 1.4 Ga na dat de continuïteitseis voor $x = L$ uiteindelijk leidt tot de volgende sets van *eigenwaarden* en *eigenfuncties*:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

en

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Antwoord

- 1.5 Beredeneer dat de kinetische energie niet nul kan zijn, ook niet in de laagste energietoestand. Er is altijd sprake van een zogenaamde nulpuntsbeweging. Is dit een quantummechanisch effect?

Antwoord

- 1.6 Wat levert de normeringsconditie op voor A in het geval $\psi_1(x) = A \sin(\frac{\pi x}{L})$? Wat levert het algemene geval $\psi_n(x) = A \sin(\frac{n\pi x}{L})$, voor $n = 1, 2, 3, \dots$, op?

Antwoord

- 1.7 Neem $L = \pi$ en teken voor verschillende waarden van n de grafiek van bovenstaande golf functie voor $0 < x < L$. Teken ook de waarschijnlijkheidsdichtheden voor verschillende waarden van n .

Antwoord

Voldoet deze beschrijving van een deeltje in een 1-dimensionale doos aan de Heisenberg onzekerheidsrelaties? We zullen dit voor de grondtoestand met $n = 1$ verifiëren. De onzekerheid in de positie Δx is gelijk aan: $\Delta x = L$.

- 1.8 Bepaal m.b.v de formule voor de energie van de grondtoestand de impuls van het deeltje in de doos. Wat is de spreiding Δp in impuls? Is aan de onzekerheidsrelatie van Heisenberg voldaan?

Antwoord

2. Deeltje in een 1-D potentiaalput [8 pu]

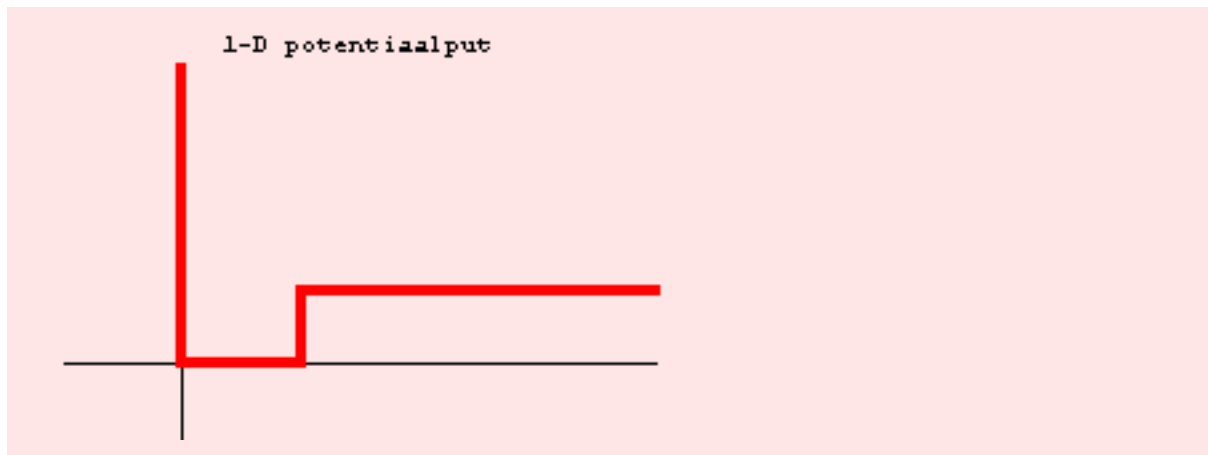
We beschouwen een potentiaalfunctie die een voor een deeltje ondoordringbare wand bevat ter plaatse van $x = 0$ en een eindig hoge wand ter plaatse van $x = L$, zoals geschetst in de figuur. De potentiaal is nul voor x tussen 0 en L , gelijk aan ∞ voor negatieve x , en is gelijk aan een constante, zeg U , voor x groter dan L . De potentiaalfunctie V is dus

$$V = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ U & L < x \end{cases}$$


```

potentiaalput = Graphics[{RGBColor[1, 0, 0],
  Thickness[0.02], Line[{{0, 4}, {0, 0}, {1, 0}, {1, 1}, {4, 1}}]};
Show[potentiaalput, Axes -> True, Ticks -> False,
  PlotLabel -> "1-D potentiaalput", PlotRange -> {{-1, 4}, {-1, 4}}];

```



We onderscheiden twee situaties:

- golf functies met energie E groter dan U
- golf functies met energie E tussen 0 en U , de zgn. gebonden toestanden.

We bekijken eerst de situatie van energie E groter dan U .

- 2.1 Leg uit dat de oplossing $\psi(x)$ van de Schrödingervergelijking kan worden weergegeven in de volgende 2 delen:

$$\psi(x) = A \sin(kx) \quad \text{voor } 0 \leq x \leq L$$

$$\psi(x) = B \sin(qx + \beta) \quad \text{voor } x > L$$

en geef uitdrukkingen voor k^2 , q^2 en voor k , q in termen van E en U .

Antwoord

- 2.2 Verlang dat golf functies en hun afgeleiden ter plaatse $x = L$ bij overgang van de ene regio naar de andere continu aansluiten. Welke vergelijking voor de faseverschuiving β in termen van alleen k , q en L kan dan afgeleid worden? Los deze vergelijking voor β (modulo π) op.

Antwoord

- 2.3 Toon aan dat de amplitude-verhouding geschreven kan worden als

$$\left(\frac{B}{A}\right)^2 = \left(\frac{k}{q}\right)^2 \cos^2(kL) + \sin^2(kL)$$

Antwoord

- 2.4 Ga na dat $\left(\frac{k}{q}\right)^2 = 1 + \frac{U}{E-U}$. Wat zegt deze formule over het gedrag van de golffunctie? Hoe gedraagt zich de verhouding $\frac{B}{A}$ voor grote energie of een niet-hoge wand?

Antwoord

- 2.5 Bekijk het geval $E = 2U$. Wat is nu de verhouding tussen de kwadraten van de twee golfgetallen k en q ? Wat is de verhouding tussen de kwadraten van de amplitudes A en B ?

Leg de faseverschuiving β vast.

Kies alle resterende onbepaalden nu gelijk aan 1 en teken de grafiek van de golffunctie. Ga na dat de grafiek de eerdere conclusies in dit onderdeel illustreert.

Antwoord

We bekijken nu het geval $E < U$.

- 2.6 Leg uit dat de oplossing $\psi(x)$ van de Schrödingervergelijking kan worden weergegeven in de volgende 2 delen:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \sin(kx) & \text{voor } 0 \leq x \leq L \\ \psi(x) &= B e^{-q x} & \text{voor } x \geq L \end{aligned}$$

en geef uitdrukkingen voor k^2 , q^2 en voor k , q in termen van E en U .

Antwoord

- 2.7 Verlang dat golffuncties en hun afgeleiden ter plaatse $x = L$ bij overgang van de ene regio naar de andere continu aansluiten. Leg uit dat dit niet voor iedere waarde van k mogelijk is.

Antwoord

- 2.8 Welke vergelijking voor de energie E in termen van alleen U , L , m en h kan afgeleid worden uit de continuïteitscondities van 2.7?

Antwoord

- 2.9 Neem aan dat het deeltje een electron is in een potentiaalput met waarden

$$U = 1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$L = 2.5 \cdot 10^{-9} \text{ m}$$

Probeer de energieniveaus E te vinden die voldoen aan de in het vorige onderdeel gevonden vergelijking.

Antwoord

3. Tunneleffect [8 pu]

In het vorige vraagstuk hebben we de vorm gevonden van de golffunctie voor het probleem van een deeltje in een potentiaalput. We zullen nu het probleem beschouwen van een deeltje opgesloten tussen twee potentiaal barrières. De functie die dit beschrijft is:

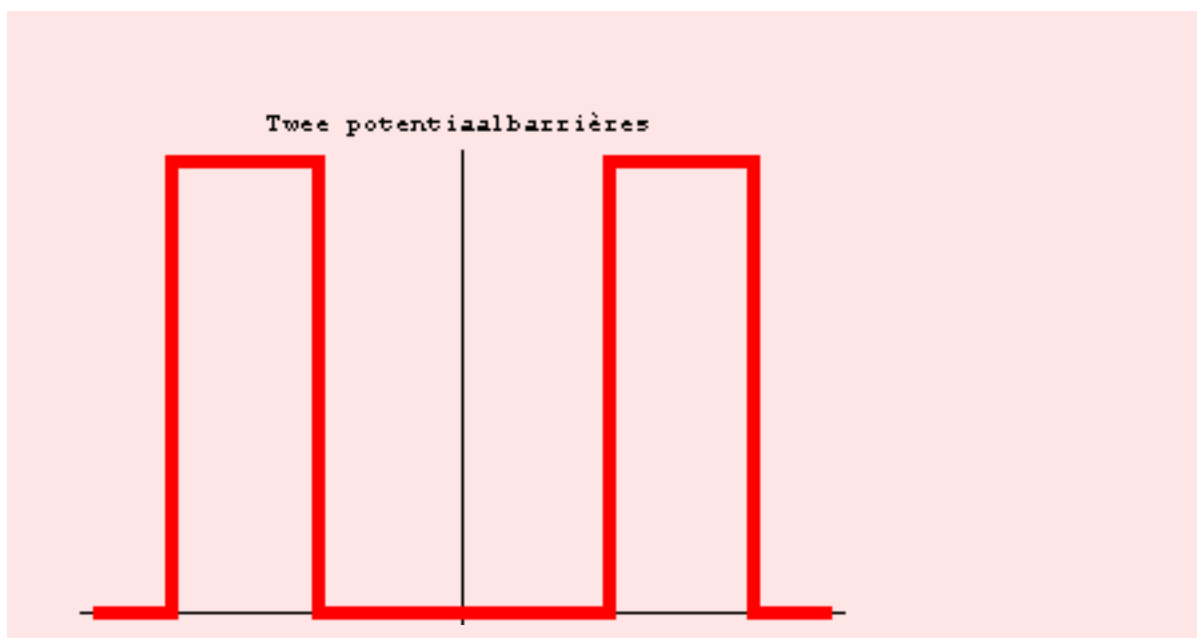
$$V = \begin{cases} 0 & x \leq -d - L \\ U & x < -L \\ 0 & x \leq L \\ U & x < d + L \\ 0 & \text{anders} \end{cases}$$

```
Remove["Global`*"]
<< Graphics`Graphics`
<< Graphics`Colors`
```

```

potentiaal = Graphics[{Thickness[0.02], RGBColor[1, 0, 0],
  Line[{{-10, 0}, {-8, 0}, {-8, 1}, {-4, 1},
    {-4, 0}, {4, 0}, {4, 1}, {8, 1}, {8, 0}, {10, 0}}]};
Show[potentiaal, Axes -> True, Ticks -> False,
  PlotLabel -> "Twee potentiaalbarrières"];

```



De hoogte van de potentiaalbarrières noemen we U en de breedte d . We nemen aan dat het deeltje zit opgesloten tussen de twee barrières. In de klassieke mechanica spreekt het vanzelf dat een deeltje met energie $0 < E < U$, nooit over de potentiaalbarrière kan klimmen. Dan zou immers de kinetische energie

$$K = U - V = \frac{h^2 k^2}{8\pi^2 m}$$

negatief moeten worden, hetgeen niet mogelijk is.

In de quantummechanica treedt echter een zeer belangrijk en nieuw verschijnsel op:

- er is een eindige waarschijnlijkheid dat een deeltje door een potentiaalbarrière weet te dringen en de andere kant bereikt. Dit verschijnsel heet *tunneling* met diverse belangrijke toepassingen.

Bijvoorbeeld met de **scanning tunneling microscoop** kan de atomaire structuur aan het oppervlak van een vaste stof zichtbaar gemaakt worden. Daartoe wordt een zeer fijne naald met positieve potentiaal boven het oppervlak gebracht. Electronen kunnen dan door de oppervlakte-potentiaal-barrière naar de naald tunnelen. Het tunneleffect speelt ook een rol bij het verval van radio-actieve kernen.

- 3.1 Laat zien dat de kinetische energie van een deeltje met $E < U$ in de barrière negatief moet worden. Wat betekent dit voor de snelheid?

Antwoord

- 3.2 Leg uit dat de oplossing $\psi(x)$ van de Schrödingervergelijking kan worden weergegeven in drie delen:

$$\begin{aligned} 1) \psi(x) &= A \cos(kx) && \text{voor } 0 < |x| < L \\ 2) \psi(x) &= B e^{-qx} && \text{voor } L < |x| < L+d \\ 3) \psi(x) &= C \cos(k(x-d)) && \text{voor } L+d < |x| \end{aligned}$$

Controleer dit door substitutie en geef uitdrukkingen k^2, q^2 en voor k, q in termen van E en U .

Antwoord

- 3.3 Schets eerst de functies 1), 2) en 3) in het plaatje voor de potentiaal. Bepaal vervolgens de verhouding B/A en dan C/A .

- NB. Op het internet adres: <http://phys.educ.ksu.edu/vqm/html/qtunneling.html>

staat een programma waarmee je diverse situaties kan modelleren.

Antwoord

- 3.4 Geef een uitdrukking voor de relatieve waarschijnlijkheid T om het deeltje aan de andere kant van de barrière te vinden. Dit is dus de kans dat het deeltje door de barrière tunnelt. Onderzoek het gedrag voor $d \rightarrow \infty$ en $E \rightarrow U$.

Antwoord

- 3.5 Neem aan dat het deeltje een electron is met $E = 2 \text{ eV}$, $U = 5 \text{ eV}$. Bepaal T voor:
- (i) een breedte $d = 1 \text{ nm}$ en
 - (ii) $d = 0,5 \text{ nm}$.
- Hoeveel groter wordt de waarschijnlijkheid als de breedte gehalveerd wordt?

Antwoord

- 3.6 Dit systeem is een eenvoudig model voor een radioactieve atoomkern die kan vervallen door uitzending van een electron (dit wordt beta-verval genoemd). Geef een uitdrukking voor de vervaltijd τ van deze kern.

Antwoord

- 3.7 Beredeneer op basis van dit model waarom de beta-vervaltijden τ die in de natuur voorkomen een extreem brede spreiding hebben (van minder dan een seconde tot duizenden jaren).

Antwoord

4. Harmonische oscillator [8 pu]

Voor de 1-dimensionale harmonische oscillator geldt de (tijdsafhankelijke) Schrödinger-vergelijking:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = E \psi(x)$$

Gegeven is dat de oplossingen (eigenfuncties) de vorm hebben:

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\frac{\beta^2 x^2}{2}} H_n(\beta x)$$

met

$$\beta = \sqrt{\frac{2\pi m \omega}{\hbar}}$$

en functies

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$$

die bekend staan als Hermite polynomen; N_n stelt een normeringsconstante voor.

Werk de volgende opdrachten uit voor $n = 0$, $n=1$, $n=2$ en $n=3$.

- 4.1 Bepaal de eerste vier Hermite-polynomen.

Antwoord

- 4.2 Controleer dat $\psi_n(x)$ een oplossing is van de Schrödingervergelijking en bepaal de bijbehorende energiewaarden.

Antwoord

- 4.3 Normeer $\psi_n(x)$ en maak grafieken van $\psi_n(x)$ en van de waarschijnlijkheidsdichtheid $\psi_n^2(x)$.

Aanwijzingen:

Neem de volgende optie in het **Integrate** commando op om aan te geven dat we β positief veronderstellen:

Assumptions $\rightarrow (\beta > 0)$

Neem $\beta = 1$ voor het tekenen van de grafieken.

Antwoord

- 4.4 Bepaal de ligging van de buigpunten van $\psi_n(x)$ en bepaal de waarde van $\frac{m\omega^2 x^2}{2}$ in de buitenste buigpunten. Interpreteer het resultaat.

Antwoord

Natuurconstanten

gravitatieconstante	$G = 6.670 \times 10^{-11} \text{ N m}^2 \text{ kg}^{-2}$
lichtsnelheid:	$c = 2.998 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
constante van Planck	$h / 2\pi = 1.0545 \times 10^{-34} \text{ J s}$
electronmassa:	$m_e = 9.1091 \times 10^{-31} \text{ kg}$
protonmassa:	$m_p = 1.6725 \times 10^{-27} \text{ kg}$
neutronmassa	$m_n = 1.6749 \times 10^{-27} \text{ kg}$

Literatuur

[YF] H.D. Young and R.A. Freedman, University Physics, Addison -Wesley 1996; Ch.42

[AF] M. Alonso and E.J. Finn, Physics, Addison-Wesley 1992; Ch.37