

Deeltentamen Moleculaire Quantummechanica, Hoofdstuk 1+2

3 maart 2009, 8:45-10:30 uur, HG 0.058, G. C. Groenenboom

Vraagstuk 1: Commutatoren

De impulsmoment operator heeft drie componenten

$$\vec{L} \equiv \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}.$$

Deze componenten voldoen aan de commutatierelatie

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z.$$

Een systeem bevindt zich in een eigentoestand $|\phi\rangle$ van de operator $\hat{L}_x$ met eigenwaarde 2:

$$\hat{L}_x|\phi\rangle = 2|\phi\rangle.$$

- 1a.** Bereken de verwachtingswaarde $\langle\phi|\hat{L}_z|\phi\rangle$. Aanwijzing: gebruik de commutatierelatie.

Vraagstuk 2: De multiplicatoren methode van Lagrange

Gegeven is een reële, reguliere, symmetrische $n \times n$ matrix $\mathbf{A}$ en een vector $\mathbf{b}$ in $\mathbf{R}^n$.

- 2a.** Gebruik de methode van Lagrange om een uitdrukking te vinden voor de vector $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$ waarvoor

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$$

minimaal is, onder de voorwaarde dat $\mathbf{b}^T \mathbf{x} - 1 = 0$.

Hint: $\frac{\partial}{\partial x_k} f(\mathbf{x}) = (\mathbf{A} \mathbf{x})_k$

Vraagstuk 3: De Cauchy-Schwarz ongelijkheid

Gegeven is een vectorruimte V waarop een inproduct is gedefinieerd. De Cauchy-Schwarz ongelijkheid voor twee willekeurige vectoren $x, y \in V$ is

$$|\langle x|y \rangle| \leq \|x\| \cdot \|y\|$$

- 3a.** Bewijs deze ongelijkheid voor een reële vectorruimte, waarin $\langle x|y \rangle = \langle y|x \rangle$. Aanwijzing: begin met $\|x + \lambda y\|^2 \geq 0$, voor iedere waarde van het reële getal λ . Bepaal nu de λ waarvoor $\|x + \lambda y\|^2$ minimaal is, en vul deze waarde in.
- 3b.** Bewijs nu de ongelijkheid voor een complexe vectorruimte waarvoor $\langle x|y \rangle = \langle y|x \rangle^*$. Aanwijzing: vervang λ door $\lambda + i\mu$, waarbij λ en μ reële getallen zijn en $i = \sqrt{-1}$.

Vraagstuk 4: Postulaten

Gegeven zijn een Hamiltoniaan $\hat{H}$ en bijbehorende eigenwaarden

$$E_1 < E_2 < E_3 < \dots$$

en een compleet set genormeerde eigenfuncties $|\phi_{i,j}\rangle$ met

$$\hat{H}|\phi_{i,j}\rangle = E_i|\phi_{i,j}\rangle, \quad i = 1, \dots, \infty, \quad j = 1, \dots, g_i.$$

- 4a.** Wat is de betekenis van g_i ?
- 4b.** Wat zijn de mogelijke waarden van het matrix element $\langle \phi_{1,2} | \phi_{2,2} \rangle$? Geef een toelichting.
- 4c.** Wat zijn de mogelijke waarden van het matrix element $\langle \phi_{2,1} | \phi_{2,2} \rangle$? Geef een toelichting.

Neem verder aan dat alle eigenfuncties orthonormaal zijn. Gegeven is de genormeerde golffunctie

$$|\Psi\rangle = c_{1,1}|\phi_{1,1}\rangle + c_{2,1}|\phi_{2,1}\rangle + c_{2,2}|\phi_{2,2}\rangle.$$

- 4d.** Wat is de verwachtingswaarde van de energie, uitgedrukt in eigenwaarden E_i en coëfficiënten $c_{i,j}$?
- 4e.** Wat zijn de mogelijke uitkomsten van de meting van de energie van dit systeem? Geef ook de bijbehorende kansen op de betreffende uitkomst.