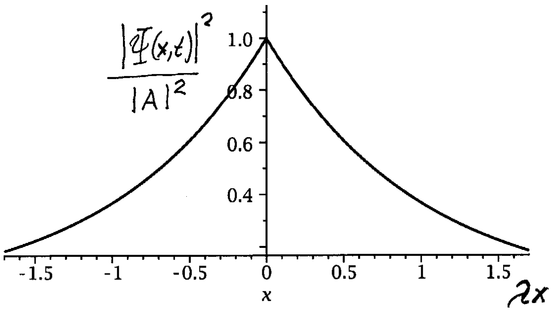
LØSNING ØVING 1

Løsning oppgave 1

a.



Vi merker oss at sannsynlighetstettheten, $|\Psi(x,t)|^2 = A^2 e^{-2\lambda|x|}$, er symmetrisk med hensyn på origo. For normeringsintegralet finner vi da

$$1 = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda|x|} dx = 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2\lambda x} dx = \frac{2A^2}{2\lambda}.$$

Vi må altså ha $A = \sqrt{\lambda}$. [Merk: Dersom du ønsker å regne ut den delen av integralet som går fra $x = -\infty$ til $x = 0$ så må du passe på å sette $|x| = -x$ i denne delen.]

b. Pga den nevnte symmetrien er forventningsverdien for posisjonen x gitt ved $\langle x \rangle = 0$. [1] Forventningsverdien av x^2 finner vi slik:

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi(x,t)|^2 dx = 2A^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\lambda x} dx = 2\lambda \frac{2!}{(2\lambda)^3} = \frac{1}{2\lambda^2}.$$

c. Standardavviket (her kalt usikkerheten) blir da

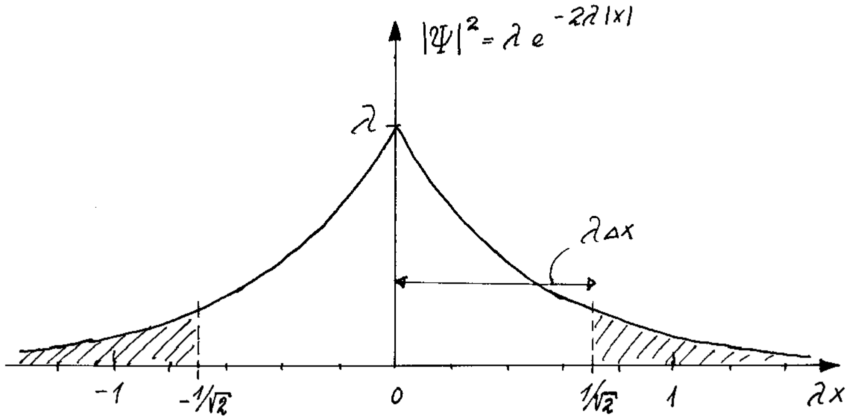
$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{1}{\lambda\sqrt{2}}.$$

Sannsynligheten for å finne partikkelen utenfor intervallet $(\langle x \rangle - \Delta x, \langle x \rangle + \Delta x)$ er

$$P_{|x|>\Delta x} = 2\int_{\Delta x}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 2\lambda \int_{\Delta x}^{\infty} e^{-2\lambda x} dx = e^{-\sqrt{2}} = 0.243.$$

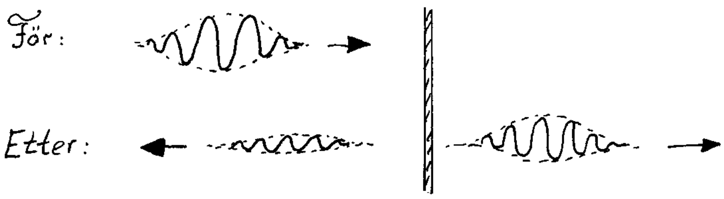
Bølgefunksjonen $\Psi(x,t)$ i denne oppgaven er faktisk en løsning av Schrödingerligningen, $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x))\Psi$, for et merkelig potensial $V(x)$. Men det skal vi (eventuelt) komme tilbake til. [Når ψ har en "knekk", får den deriverte et sprang og den andrederiverte vil da gå som en deltafunksjon; jf Appendix B i Hemmer. Det aktuelle potensialet må altså inneholde en deltafunksjon.]

[1] Dette er et poeng som du i Espen Askeladds ånd bør ta med deg i "sekken", og bruke neste gang du kommer ut for en sannsynlighetsfordeling som er symmetrisk med hensyn på et gitt punkt.



Etter litt trening er det en fordel om en kan utvikle et visst "snekker-skjønn" når det gjelder å *anslå* både forventningsverdier og usikkerheter.

Løsning oppgave 2 **Fotoner mot et vindu**



Her bør vi hente inspirasjon fra dobbeltspalt-forsøket: For det første gir Maxwells ligninger et bølgemønster og en intensitetsfordeling som brer seg over et stort vinkelområde bak de to spaltene. For det andre: Om vi sender bare ett foton mot spaltene, så blir ikke dette smurt utover skjermen i henhold til intensitetsfordelingen, men tvert imot observert i et punkt. Konklusjonen var at intensitetsfordelingen som følger fra Maxwell må oppfattes som en sannsynlighetsfordeling.

Tilsvarende blir fotonet som sendes mot vinduet *ikke* delt i to (slik bølgegruppen blir); det blir *enten* reflektert *eller* transmittert. Teorien kan ikke forutsi hvilket av disse utfallene vi får. Det teorien *kan* forutsi, er at *sannsynligheten* for refleksjon er 4%, mens sannsynligheten for transmisjon er 96 %. Dette kan etterprøves eksperimentelt ved å sende et stort antall fotoner mot vinduet (eller som vi sier, ved å bruke et *ensemble* av fotoner).

Løsning oppgave 3 **Grunntilstand og 1. eksiterte tilstand for harmonisk oscillator**

a. Siden $\psi_0(x)$ avhenger bare av x, kan vi erstatte $\partial/\partial x$ med d/dx. Vi regner først ut

$$\frac{d\psi_0}{dx} = C_0\, e^{-\beta x^2}(-2\beta x) \quad \text{og} \quad \frac{d^2\psi_0}{dx^2} = C_0\, e^{-\beta x^2}(4\beta^2 x^2 - 2\beta).$$

Ved innsetting finner vi da at

$$\widehat{H}\psi_0 \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_0'' + (\tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2)\psi_0$$

$$
\begin{aligned}
&= C_0\, e^{-\beta x^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(4\beta^2x^2-2\beta)+\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\right] \\
&= \left[x^2(\tfrac{1}{2}m\omega^2-2\hbar^2\beta^2/m)+(\hbar^2\beta/m)\right]\psi_0.
\end{aligned}
$$

Det er *to* kriterier som må være oppfylt for at ψ_0 skal være en egenfunksjon til $\widehat{H}$ (i matematisk forstand):

(i) Parentesen [ ] på høyresiden må være en konstant, og

(ii) Løsningen ψ_0 må ikke divergere, mer presist vil dette si at det må gå an å normere den.

Fra (i) følger det at β må oppfylle betingelsen

$$\beta^2=\frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2}\qquad\Longrightarrow\qquad \beta=\pm\frac{m\omega}{2\hbar}.$$

Her ser vi at $\beta=-m\omega/2\hbar$ gir en funksjon ψ_0 som går mot uendelig når $|x|\to\infty$. Fra (ii) følger det altså at bare $\beta=+m\omega/2\hbar$ gir en akseptabel løsning, dvs en egenfunksjon. For denne verdien av β har vi

$$\widehat{H}\psi_0=\frac{\hbar^2}{m}\,\frac{m\omega}{\hbar}\psi_0=\tfrac{1}{2}\hbar\omega\,\psi_0\equiv E_0\psi_0.$$

Konklusjonen er at $\psi_0(x)=C_0e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ er en egenfunksjon til Hamilton-operatoren $\widehat{H}$ for den harmoniske oscillatoren, med egenverdien

$$E_0=\tfrac{1}{2}\hbar\omega.$$

Siden Hamilton-operatoren $\widehat{H}$ er energioperatoren for denne harmoniske oscillatoren, kaller vi egenfunksjonen en *energi*egenfunksjon, og egenverdien en energiegenverdi. [Denne løsningen svarer i virkeligheten til (beskriver) *grunntilstanden* for den harmoniske oscillatoren, som er tilstanden med lavest mulig energi.]

b. Egenverdiligningen bestemmer ikke konstanten C_0. *Absoluttverdien* av C_0 fastlegges av normeringsbetingelsen, som gir

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0(x)|^2dx=|C_0|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\beta x^2}dx=\frac{|C_0|^2}{\sqrt{2\beta}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}dy,\qquad (y=x\sqrt{2\beta}),$$

hvor (Gauss-)integralet (som kjent?) er $\sqrt{\pi}$. [2] Vi har altså

$$|C_0|^2=\sqrt{\frac{2\beta}{\pi}}=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}.$$

[2] Gauss-integralet ovenfor er av typen

$$I_0(\alpha)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha x^2}dx=\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}dy=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$

Merk at vi fra dette kan beregne en hel klasse av Gauss-integraler vha et knep som kalles parametrisk derivasjon (se også Appendix B i boka):

$$I_2(\alpha)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\alpha x^2}dx=-\frac{d}{d\alpha}I_0(\alpha)=...;$$

$$I_{2n}(\alpha)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}x^{2n}e^{-\alpha x^2}dx=-\frac{d}{d\alpha}I_{2n-2}(\alpha)=\left(-\frac{d}{d\alpha}\right)^nI_0(\alpha).$$

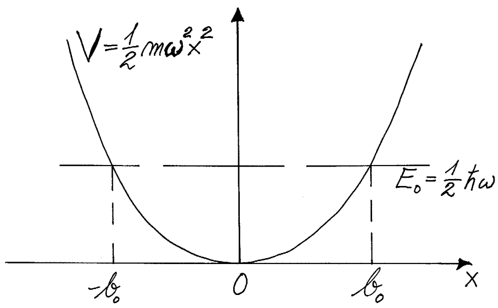
Ved å <u>velge</u> *fasen* til C_0 slik at C_0 blir reell og positiv, ender vi da opp med egenfunksjonen

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}.$$

NB! I normeringsintegralet er det **sannsynlighetstettheten** (absoluttkvadratet av bølgefunksjonen) som skal integreres. Integralet over ψ sjøl har ingen fysisk relevans.

De klassiske vendepunktene er de punktene hvor $V = E$ (slik at den kinetiske energien og dermed hastigheten er lik null). Med $E = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ skjer dette når

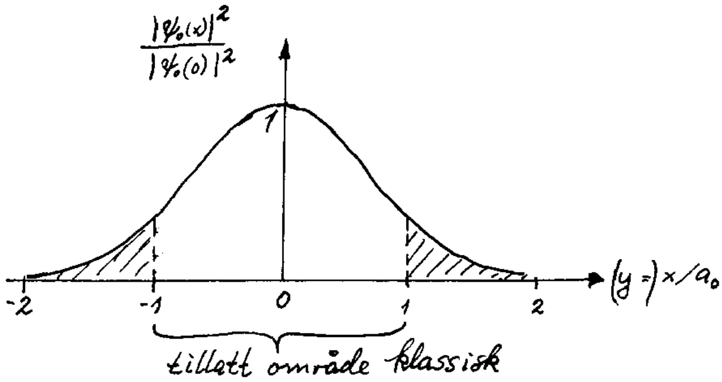
$$\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega, \quad \text{dvs for} \quad x = \pm\sqrt{\hbar/m\omega} \equiv \pm b_0.$$



Avstanden $b_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ er en naturlig lengdeskala når vi skal behandle den harmoniske oscillatoren kvantemekanisk. Legg merke til den måten massen m inngår på. Vi merker oss at

$$|\psi_0(x)/\psi_0(0)|^2 = e^{-(x/b_0)^2}.$$

Figuren nedenfor viser hvordan denne (Gauss-fordelte) relative sannsynligheten varierer sfa x/b_0. Sannsynligheten for å finne partikkelen i det *klassisk forbudte området* (hvor $V(x) > E$, dvs $K(x) = E - V(x) < 0$) er gitt ved forholdet mellom det skraverte arealet og arealet under hele kurven, og kan vel anslås til rundt 20%. [En numerisk beregning vha Maple ga 15.73%.]



<u>**c.**</u> Med

$$\frac{d\psi_1}{dx} = C_1 e^{-\beta x^2}(-2\beta x^2 + 1) \quad \text{og} \quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = C_1 e^{-\beta x^2}(-6\beta x + 4\beta^2 x^3)$$

finner vi fra egenverdiligningen $(\widehat{H}-E)\psi_1 = 0$:

$$0 = e^{-\beta x^2}\left[x^3(\tfrac{1}{2}m\omega^2 - 2\hbar^2\beta^2/m) + x(3\beta\hbar^2/m - E)\right].$$

På samme måte som i pkt. **a** gir dette

$$\beta = m\omega/2\hbar \quad \text{og} \quad E = \tfrac{3}{2}\hbar\omega.$$

Den resulterende egenfunksjonen, $\psi_1(x) = C_1 x\, \exp(-m\omega x^2/2\hbar)$, beskriver i realiteten første eksiterte tilstand for den harmoniske oscillatoren.

Merk at ψ_1 er antisymmetrisk (med hensyn på origo), mens ψ_0 is symmetrisk. Senere skal vi se at alle egenfunksjonene til $\widehat{H}$ for den harmoniske oscillatoren er enten symmetriske eller antisymmetriske. Det vil også vise seg at dette er en nødvendig konsekvens av symmetrien til potensialet $V(x)$.

Løsning oppgave 4 **Grunntilstanden i H-atomet**

a. Vi merker oss først at $\psi(\mathbf{r})$ ikke avhenger av vinklene θ og ϕ, bare av radien r. Med

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = Ce^{-r/a_0}\cdot\left(-\frac{1}{a_0}\right) \qquad \text{og} \qquad \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = Ce^{-r/a_0}\cdot\left(\frac{1}{a_0^2}\right)$$

finner vi da

$$\widehat{H}\psi = Ce^{-r/a_0}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{ra_0}\right) - \frac{\hbar^2}{m_e a_0\, r}\right] = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\,\psi.$$

ψ er altså en egenfunksjon til Hamilton-operatoren $\widehat{H}$ (energioperatoren for hydrogenatomet) med egenverdien

$$E = \underline{-\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)^2 = -\tfrac{1}{2}m_e c^2\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\right)^2 = \underline{-\tfrac{1}{2}\alpha^2\, m_e c^2}, \quad \text{q.e.d.}$$

Den numeriske verdien av disse to praktiske uttrykkene for energiegenverdien er -13.6 eV, som er identisk med den eksperimentelle energien til hydrogenatomet når det er i grunntilstanden.

b. Innsetting av $\Psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$ i Schrödingerligningen $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi$ gir

$$i\hbar\cdot\frac{-iE}{\hbar}\psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} = \widehat{H}\psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} = E\,\psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}.$$

Da venstre side er lik høyre side, ser vi at $\Psi(\mathbf{r},t)$ oppfyller Schrödingerligningen. Merk at sannsynlighetstettheten

$$|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2\,|e^{-iEt/\hbar}|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2$$

er tidsuavhengig. Dette er karakteristisk for alle såkalte stasjonære løsninger av Schrödingerligningen (på formen $\Psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$).

c. Vi sjekker om $C = (\pi a_0^3)^{-1/2}$ gir korrekt normering:

$$\begin{aligned}\int|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3r &= |C|^2\int e^{-2r/a_0}\,d^3r = \frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^\infty e^{-2r/a_0}\cdot 4\pi r^2 dr\\ &= \frac{4\pi}{\pi a_0^3}\,\frac{2!}{(2/a_0)^3} = 1, \quad \text{q.e.d.}\end{aligned}$$