TFY4215 Innføring i kvantefysikk. Institutt for fysikk, NTNU.
Løsningsforslag til Øving 3.

Oppgave 1

$$c_1 = \int_0^L \psi_1(x)\Psi(x,0)dx = \frac{2}{\sqrt{3L}}\int_0^L \sin(\pi x/L)(1-\cos(2\pi x/L))dx.$$

Skriver om produktet av sinus og cosinus ved hjelp av Eulers formel:

$$\sin(\pi x/L)\cos(2\pi x/L) = (1/2i)(e^{i\pi x/L} - e^{-i\pi x/L})\cdot(1/2)(e^{2i\pi x/L} - e^{-2i\pi x/L}).$$

Ganger ut og ser at dette er det samme som

$$(1/2)(\sin(3\pi x/L) - \sin(\pi x/L)).$$

Da har vi bare standard-integraler, og resultatet blir

$$c_1 = \frac{16}{3\pi\sqrt{3}}.$$

Riktig svar: E.

Oppgave 2

Siden $\Psi(x,0)$ er symmetrisk i boksen, og ψ_n med n partall er antisymmetriske, er $c_2 = c_4 = \ldots = 0$. Riktig svar: A.

Oppgave 3

Vi har

$$\begin{aligned}\hat{p}\Psi(x,0) &= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|+ikx}\\ &= \frac{\hbar\sqrt{\kappa}}{i}(\mp\kappa + ik)e^{\mp\kappa x+ikx}\end{aligned}$$

der øvre fortegn gjelder for $x > 0$ og nedre fortegn for $x < 0$. Videre er

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,0)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,0)\,dx.$$

Når vi her deler opp integralet over hhv negative og positive verdier av x, ender vi (som ventet?) opp med $\hbar k$. Riktig svar: A.

Oppgave 4

$\lambda = hc/(E_3 - E_1)$, som med $E_1 = \pi^2\hbar^2/2mL^2$ og $E_3 = 9\pi^2\hbar^2/2mL^2$ gir $\lambda = hcmL^2/4\pi^2\hbar^2 \simeq 60\,\mu$m. Riktig svar: E.

Oppgave 5

Absoluttkvadratet av $\Psi(x,t)$ blir på formen $f(x) + g(x)\cos\left(\frac{(E_3-E_1)t}{\hbar}\right)$, som oscillerer med periode $T = 2\pi\hbar/(E_3 - E_1) = mL^2/h \simeq 0.2$ ps. Riktig svar: B.

Oppgave 6

Sannsynligheten for å måle E_3 er $|c_3|^2$, der

$$c_3 = \int_0^L \psi_3^*(x)\Psi(x,0)dx = 8\sqrt{15}/(3\pi)^3,$$

der integralene løses ved hjelp av delvis integrasjon. Dermed er $|c_3|^2 = 1.37\cdot 10^{-3}$. Riktig svar: E.

Oppgave 7

Siden $\psi_4(x)$ er antisymmetrisk og $\Psi(x,0)$ er symmetrisk (om $L/2$), blir $c_4 = 0$. Riktig svar: A.

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

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

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 $\psi_0(x) = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ 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 <u>energi</u>operatoren 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

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

hvor (Gauss-)integralet (som kjent?) er $\sqrt{\pi}$. [1] Vi har altså

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

[1] Gauss-integralet ovenfor er av typen

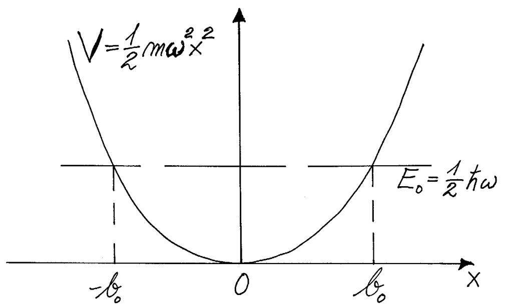
$$I_0(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$

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

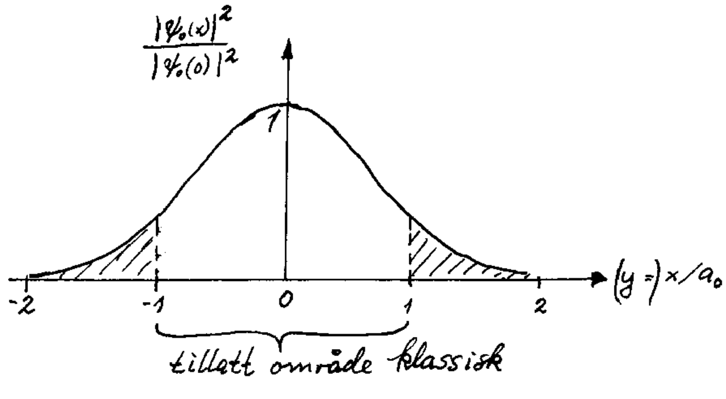
$$\tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega, \quad \text{dvs for} \quad x = \pm\sqrt{\hbar/m\omega} \equiv \pm b_0.$$



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%.]



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):

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

$$I_{2n}(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{d}{d\alpha} I_{2n-2}(\alpha) = \left(-\frac{d}{d\alpha}\right)^n I_0(\alpha).$$

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

Løsning OPPGAVE 5 **Krumningsegenskaper for endimensjonale energiegenfunksjoner**

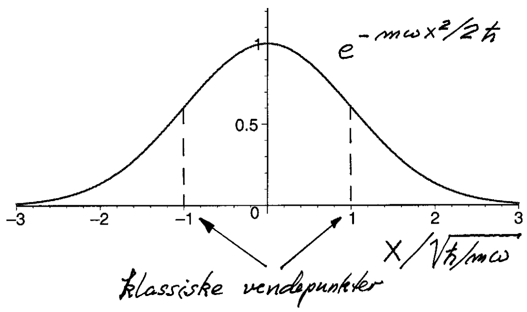
a. For oscillator-grunntilstanden i oppgave 3b har vi som et eksempel

$$\psi_0 = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \qquad \psi_0' = \psi_0(-\frac{m\omega}{\hbar}x), \qquad \psi_0'' = \psi_0(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 - \frac{m\omega}{\hbar}),$$

slik at den relative krumningen er

$$\frac{\psi_0''}{\psi_0} = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}(x^2 - \frac{\hbar}{m\omega}).$$

Her ser vi at
(i) ψ_0''/ψ_0 ganske riktig er negativ for $-\sqrt{\hbar/m\omega} < x < \sqrt{\hbar/m\omega}$, dvs mellom de klassiske vendepunktene ($\pm a_0$) som vi fant i oppgave 3, altså i det klassisk tillatte området, hvor $E > V(x)$. I dette området krummer altså ψ_0 mot aksen.
(ii) Utenfor dette området ser vi på tilsvarende måte at ψ_0 krummer bort fra aksen.
(iii) For $x = \pm\sqrt{\hbar/m\omega}$ er $\psi_0'' = 0$, og vi kan konstatere at den relative krumningen skifter fortegn i hvert av de klassiske vendepunktene:



b. I områdene $a < |x| < b$ er $V = 0$ og $\psi'' = 0$. Den tidsuavhengige Schrödingerligningen gir da

$$E = \frac{\widehat{H}\psi}{\psi} = \frac{(-\hbar^2/2m)\psi'' + V\psi}{\psi} = 0.$$

Energien til denne tilstanden er altså lik null. For $|x| < a$ følger det da fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V_0\psi = 0, \qquad \Longrightarrow \qquad V_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''}{\psi}.$$

Diagrammet viser at den relative krumningen er negativ i dette området (krumning mot aksen). Potensialverdien V_0 i dette området må derfor være negativ, slik at området er klassisk tillatt.