

TFY4215 Innføring i kvantefysikk. Institutt for fysikk, NTNU.
Løsningsforslag til Øving 8.

Oppgave 1

Her er $l = 1$, slik at $L = \sqrt{1 \cdot 2\hbar}$. Riktig svar: D.

Oppgave 2

Bare en komponent av dreieimpulsen kan være skarp om gangen. Riktig svar: B.

Oppgave 3

Forventningsverdien til L_x er

$$\langle L_x \rangle = \int Y_{10}^* \hat{L}_x Y_{10} d\Omega,$$

med romvinklelement $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$. Siden $\hat{L}_x Y_{10}$ er rent imaginær og Y_{10}^* er reell, blir dette integralet imaginært, med mindre det blir lik null. Da må det bli lik null, siden $\langle L_x \rangle$ må være reell. Innsetting gir en integrand proporsjonal med $\cos\theta \sin^2\theta \sin\phi$, slik at både integralet over θ og integralet over ϕ her blir null. Riktig svar: A.

Oppgave 4

Her er $l = 1$, slik at $L = \sqrt{1 \cdot 2\hbar}$. Riktig svar: D.

Oppgave 5

Denne lineærkombinasjonen er egenfunksjon til \hat{L}_x , med egenverdi 0. Riktig svar: A.

Oppgave 6

Med skarp L_x er L_z (og L_y) uskarp(e). Riktig svar: B.

Oppgave 7

Partikkelen befinner seg i en egentilstand til \hat{L}_x , uttrykt som en lineærkombinasjon av Y_{11} og Y_{1-1} , dvs med $m_l = \pm 1$, slik at mulige måleresultater ved en måling av L_z er $\pm\hbar$. Når L_x er skarpt definert, her med verdi 0, er det ingenting spesielt med z -aksen, sammenlignet med y -aksen. Da må det også være slik at en måling av L_y bare kan gi som resultat $\pm\hbar$. Riktig svar: C.

Oppgave 8

Vi har

$$(x^2 - y^2)/r^2 = \sin^2\theta (\cos^2\phi - \sin^2\phi) = \sin^2\theta \cos 2\phi,$$

som tilsvarende $Y_{22} + Y_{2-2}$. Riktig svar: C.

Oppgave 9

Vi har

$$xy/r^2 = \sin^2\theta \cos\phi \sin\phi = \sin^2\theta \cdot \frac{1}{2} \sin 2\phi,$$

som tilsvarende $Y_{22} - Y_{2-2}$. Riktig svar: D.

Oppgave 10

Vi har $zx/r^2 = \cos\theta \sin\theta \cos\phi$, som tilsvarende $Y_{21} - Y_{2-1}$. Riktig svar: B.

Oppgave 11

Til venstre for potensialspranget er kinetisk energi lik total energi, dvs $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Til høyre for potensialspranget er kinetisk energi $E - V_0 = \hbar^2 q^2 / 2m$. Dermed er refleksjonssannsynligheten

$$R = \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^2},$$

som med $R = 0.1$ gir $E/V_0 \simeq 1.37$. Riktig svar: B.

Oppgave 12

$N = n_x + n_y$ med mulige kombinasjoner $(n_x, n_y) = (0, N), (1, N - 1), \dots, (N, 0)$, dvs $N + 1$ mulige kombinasjoner. Riktig svar: D.

Oppgave 13

Vi finner egenfunksjonene $\psi_{n_x}(x)$ og dermed $\psi_{n_y}(y)$ i formelvedlegget. Siden $x = r \cos \phi$ i polarkoordinater, blir $\psi_{10} = R(r) \cos \phi$. Med bevegelse i xy -planet har dreieimpulsen bare en z -komponent, slik at

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2},$$

som gir

$$\hat{L}^2 \psi_{10} = \hbar^2 \psi_{10},$$

dvs $L^2 = \hbar^2$. Riktig svar: C.

Oppgave 14

Operatoren \hat{L}_z inneholder en gangs derivasjon mhp ϕ . Dermed er ψ_{10} ikke egenfunksjon til \hat{L}_z , dvs L_z er uskarp. Riktig svar: B.

Oppgave 15

Med $x = r \cos \phi$ og $y = r \sin \phi$ blir $\psi_{11} = f(r) \sin \phi \cos \phi = \frac{1}{2} f(r) \sin 2\phi$. Da har vi

$$\langle L_z \rangle = \int \psi_{11}^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \psi_{11} d^2 r \sim \int_0^{2\pi} \sin 2\phi \cos 2\phi d\phi = 0.$$

Riktig svar: A.

Oppgave 16

Egenfunksjoner til \hat{L}_z er $\exp(im\phi)$, med heltallig m . For å oppnå $L_z = \hbar$, må vi ha $m = 1$. Siden $\psi_{10} \sim \cos \phi$ og $\psi_{01} \sim \sin \phi$, må vi velge $\psi_{10} + i\psi_{01}$. Riktig svar: C.

Oppgave 17

To partikler i ψ_{00} , hver med energi $\hbar\omega$, og 3 partikler i ψ_{10} og ψ_{01} , hver med energi $2\hbar\omega$. Total energi $8\hbar\omega$. Riktig svar: D.

Oppgave 18

$$\begin{aligned} Y_{30} &\sim P_3(x) \\ &\sim \frac{d^3}{dx^3} (x^6 - 3x^4 + 3x^2 - 1) \\ &= 6 \cdot 5 \cdot 4x^3 - 3 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2x \\ &\sim 5x^3 - 3x \end{aligned}$$

Riktig svar: A.

Løsning OPPGAVE 16 Krumning og stykkevis konstante potensialer

a. I et område hvor V er konstant (lik V_1), og $E - V_1$ er positiv (slik at området er klassisk tillatt), har vi

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E)\psi \equiv -k^2\psi, \quad k \equiv \sqrt{2m(E - V_1)/\hbar^2}.$$

Denne har to uavhengige løsninger, $\cos kx$ og $\sin kx$ [alternativt $\exp(\pm ikx)$], og den generelle løsningen kan skrives på formen

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \cos kx + B \sin kx \\ &= \sqrt{A^2 + B^2} \left(\frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}} \cos kx + \frac{B}{\sqrt{A^2 + B^2}} \sin kx \right) \\ &\equiv A' (\cos \alpha \cos kx + \sin \alpha \sin kx), \quad \left(A' \equiv \sqrt{A^2 + B^2}, \quad \cos \alpha \equiv \frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}}, \quad \text{osv.} \right), \\ &= A' \cos(kx - \alpha), \end{aligned}$$

dersom vi velger å arbeide med reelle koeffisienter. Som vi har sett for den endimensjonale boksen, krummer den sinusformede løsningen "raskere" jo større bølgetallet k er, dvs jo større $K = E - V_1$ er. For den sinusformede løsningen kan vi altså bruke bølgetallet som et mål for hvor "raskt" løsningen krummer.

Kommentar: Ut fra dette kan vi også danne oss et begrep om hvor raskt ψ krummer i klassisk tillatte områder hvor $V(x)$ ikke er konstant, ved å skrive

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi \equiv -[k(x)]^2\psi,$$

der

$$k(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]/\hbar^2}, \quad (E > V(x))$$

ikke er et bølgetall i egentlig forstand, men likevel gir et begrep om hvor tett nullpunktene ligger. Se f.eks ψ_5 side 57 i boka. Se også figuren side 58 [som viser kvadratet $(\psi_{20})^2$ av den 20. eksiterte tilstanden for den harmoniske oscillatoren.

b. For et klassisk forbudt område hvor $V(x)$ er konstant og større enn E , kan vi skrive den tidsuavhengige Schrödingerligningen på formen

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\psi \equiv \kappa^2\psi, \quad \kappa \equiv \sqrt{2m(V - E)/\hbar^2}.$$

Denne har to uavhengige løsninger, $e^{\kappa x}$ og $e^{-\kappa x}$, slik at den generelle løsningen blir av eksponensiell type,

$$\psi(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}.$$

Denne krummer utover fra aksen, raskere jo større κ er, dvs jo større $V - E$ er, eller om vi vil: jo mer "klassisk forbudt" dette området er.

Siden potensialet er uendelig for $x \geq x_2$, skal bølgefunksjonen være lik null i dette området. For å gi en kontinuerlig egenfunksjon må da løsningen for området $x_1 < x < x_2$ oppfylle kravet

$$\psi(x_2) = C'' e^{-\kappa(x-x_2)} + D'' e^{\kappa(x-x_2)} \Big|_{x=x_2} = C'' + D'' = 0.$$

I dette området har vi da

$$\psi(x) = D''(e^{\kappa(x-x_2)} - e^{-\kappa(x-x_2)}) = 2D'' \sinh[\kappa(x - x_2)], \quad \text{q.e.d.}$$

Enda enklere er det å merke seg at løsningen må være en lineærkombinasjon av de to uavhengige løsningene $\sinh[\kappa(x - x_2)]$ og $\cosh[\kappa(x - x_2)]$, hvorav den siste må forkastes pga kontinuitetskravet.

c. (i) Dersom energieigenverdien E ligger lavere enn potensialverdien V_3 i området $-\infty < x < x_3$, må egenfunksjonen i dette området oppfylle

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V_3 - E]\psi \equiv \kappa_3^2\psi, \quad \text{med } \kappa_3 \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_3 - E)}.$$

Den generelle løsningen i dette området er da

$$\psi = Ce^{\kappa_3 x} + C'e^{-\kappa_3 x}.$$

Her må C' settes lik null, fordi en egenfunksjon ikke får lov å gå mot uendelig (divergere), hvilket $\exp(-\kappa_3 x)$ gjør i grensen $x \rightarrow -\infty$. Egenfunksjonen har altså i dette tilfellet formen

$$\psi = Ce^{\kappa_3 x} \quad \text{for } x < x_3.$$

Denne går eksponentielt mot null ute til venstre, er følgelig kvadratisk integrerbar, og beskriver dermed en lokalisert og **bunden** tilstand.

(ii) Er energieigenverdien *større* enn V_3 i det samme området, blir løsningen for $x < x_3$ med et tilsvarende resonnement

$$\psi = A \sin k_3 x + B \cos k_3 x, \quad \text{med } k_3 \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_3)}.$$

Normeringsintegralet

$$\int_{-\infty}^{x_2} [\psi(x)]^2 dx$$

vil da divergere, og egenfunksjonen er ikke-lokalisert og beskriver følgelig en **ubunden** tilstand.

(iii) Dersom det klaffer slik at energieigenverdien er akkurat lik V_3 , har vi at $\psi'' = 0$ for $x < x_3$. Den generelle løsningen av denne er

$$\psi = Ax + B.$$

Her må vi sette $A = 0$ for å hindre at ψ divergerer i grensen $x \rightarrow -\infty$. Følgelig er $\psi = B$ hele veien for $x < x_3$. Her kan vi som nevnt anta at $B \neq 0$. Denne energieigenfunksjonen er følgelig ikke kvadratisk integrerbar, og beskriver altså en ubunden tilstand.

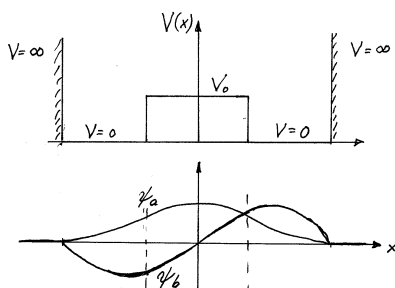
d. Da $E_1 < V_0$, har den tidsuavhengige Schrödingerligningen i barriereområdet formen

$$\psi_1'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - E_1]\psi_1 \equiv \kappa_1^2\psi_1, \quad \text{med } \kappa_1 \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - 0.67V_0)}.$$

Denne har de to uavhengige løsningene $\exp(\pm\kappa_1 x)$ (alternativt $\cosh(\kappa_1 x)$ og $\sinh(\kappa_1 x)$). En symmetrisk kombinasjon av $\exp(\kappa_1 x)$ og $\exp(-\kappa_1 x)$ har formen

$$\psi_1 = \frac{1}{2}C_1(e^{\kappa_1 x} + e^{-\kappa_1 x}) = C_1 \cosh(\kappa_1 x).$$

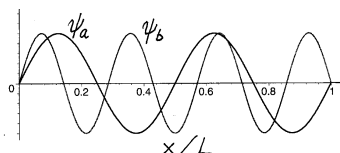
e.



ψ_b forestiller en energiegenfunksjon. I barriere-området ser vi at den krummer mot akse. Energien E må da være høyere enn barriere-høyden V_0 . Vi ser også at krumningen er svak i dette området (forholdsvis lite bølgetall). Derfor må $E - V_0$ være forholdsvis liten, dvs E er bare litt høyere enn V_0 . I de to brønnene på begge sider av barrieren er bølgetallet større, og krumningen tilsvarende raskere. Vi merker oss ellers at løsningen er antisymmetrisk, med ett nullpunkt. Følgelig har vi å gjøre med første eksiterte tilstand. (Grunntilstanden er symmetrisk, uten nullpunkter.)

Den andre funksjonen, ψ_a , krummer som vi ser utover fra akse nær de harde veggene, som er klassisk tillatte områder (hvor krumningen skal være *mot* akse). Så dette er ingen energiegenfunksjon.

f.



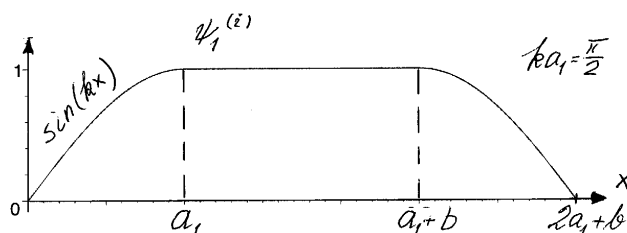
Fra de oppgitte kurvene ser vi at $\lambda_a = L/2$, mens $\lambda_b = 2L/7$. Bølgetallene er altså

$$k_a = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{4\pi}{L} \quad \text{og} \quad k_b = \frac{7\pi}{L}.$$

Fra sammenhengen $E - V_0 = \hbar^2 k^2 / 2m$ har vi da at

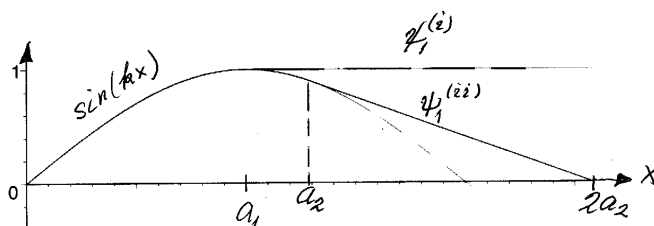
$$E_a - V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \cdot 16 \quad \text{og} \quad E_b - V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \cdot 49.$$

g. (i) I barriereområdet, hvor $E_1 = V(x) = V_0$, skal $\psi_1^{(i)}$ være både lineær og symmetrisk, dvs lik en konstant C (som vi godt kan sette lik 1, dersom vi ikke bryr oss om normeringen). For $0 < x < a_1$ skal bølgefunksjonen være sinusformet, med et nullpunkt for $x = 0$ og med en kontinuerlig derivert for $x = a_1$. I dette området skal vi altså ha en kvart periode av sinusen, slik at vi må ha $ka_1 = \pi/2$, der k er bølgetallet.



$$\frac{1}{2}\pi = ka_1 = a_1 \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_1} = a_1 \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \quad \Rightarrow \quad a_1 = \frac{\hbar\pi}{\sqrt{8mV_0}}.$$

(ii) Her skal $\psi_1^{(ii)}$ være lineær for $a_2 < x < 2a_2$, og denne rette linjen skal "tangere" sinuskurven for $x = a_2$.



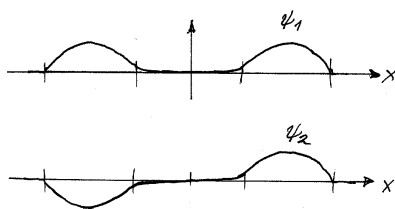
Da er det vel åpenbart at sinusdelen av kurven utgjør noe mer enn en kvart periode, slik at $a_2 > a_1$. [Vi kan bestemme a_2 ved å sette $\psi_1 = \sin kx$ for $0 < x < a_2$. I dette området er da $\psi_1'/\psi_1 = k \cot kx$. For $a_2 < x < 2a_2$ kan vi sette $\psi_1 = A(x - 2a_2)$, og har da i dette området at $\psi_1'/\psi_1 = 1/(x - 2a_2)$. Kravet om kontinuitet av ψ_1'/ψ_1 gir da betingelsen

$$k \cot ka_2 = -1/a_2, \quad \text{dvs} \quad ka_2 \cot ka_2 = -1 \quad (\pi/2 < ka_2 < \pi).$$

Ved å prøve deg fram med kalkulatoren vil du finne at løsningen av denne transcendente ligningen er $ka_2 \approx 2.03$, slik at $a_2/a_1 \approx 2.03/(\frac{1}{2}\pi) \approx 1.29$.]

Løsning OPPGAVE 17 Endimensjonal dobbelt-brønn

a.

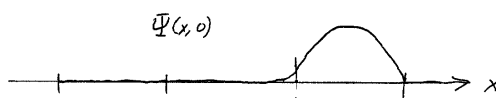


Vi merker oss at både ψ_1 og ψ_2 krummer bort fra akse i barriere-området; både E_1 og E_2 er da mindre enn barriere-høyden V_0 . I de tillatte områdene ser vi at både ψ_1 og ψ_2 er sinusformede, med tilnærmet like bølgetall. Dette betyr at $E_2 \approx E_1$. Fordi både ψ_1 og ψ_2 har små verdier i barriere-området, bidrar dette området lite til begge normeringsintegralene. I og med at de to funksjonene er henholdsvis symmetrisk og antisymmetrisk, må de da ha tilnærmet like stor sannsynlighetstetthet i de tillatte områdene. Herav skjønner vi at $\psi_2(x) \approx \psi_1(x)$ i høyre brønn, og $\psi_2(x) \approx -\psi_1(x)$ i venstre brønn.

I barriereområdet i midten må ψ_1 være en symmetrisk lineærkombinasjon av $e^{\kappa_1 x}$ og $e^{-\kappa_1 x}$, der $\kappa_1 = \sqrt{2m(V_0 - E_1)/\hbar^2}$, dvs den må gå som $A \cosh[\kappa_1 x]$. Første eksiterte tilstand ψ_2 skal tilsvarende være en antisymmetrisk lineærkombinasjon av $e^{\kappa_2 x}$ og $e^{-\kappa_2 x}$, der $\kappa_2 = \sqrt{2m(V_0 - E_2)/\hbar^2}$, dvs den må gå som $B \sinh[\kappa_2 x]$.

b. For $t = 0$ har vi da

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) + \psi_2(x)] \approx \begin{cases} \sqrt{2}\psi_1(x) & \text{i høyre brønn} \\ 0 & \text{i venstre brønn.} \end{cases}$$



Dette betyr selvsagt at sannsynligheten for å finne partikkelen i høyre brønn ved $t = 0$ er tilnærmet lik 1.

For $t = T/2 = \pi\hbar/(E_2 - E_1)$ er

$$e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} = e^{-i\pi} = -1,$$

slik at

$$\Psi(x, T/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} [\psi_1(x) - \psi_2(x)],$$

der

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) - \psi_2(x)] \approx \begin{cases} 0 & \text{i høyre brønn} \\ \sqrt{2}\psi_1(x) & \text{i venstre brønn.} \end{cases}$$

Her er partikkelen like sikkert havnet i venstre brønn. Sannsynligheten oscillerer altså fram og tilbake mellom de to brønnene, med perioden $T = 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$, analogt med den oscillerende sannsynligheten vi så i OPPGAVE 13.

Det nye her er at partikkelen tydeligvis er i stand til å forsere den klassisk forbudte barrieren. Dette er et eksempel på den såkalte tunnel-effekten. Dette er en ren kvantemekanisk effekt, for klassisk ville en partikkel være dømt til å oppholde seg i én av de klassisk tillatte brønnene.

Det kan vises at energidifferansen $E_2 - E_1$ blir mindre jo høyere vi gjør barrieren. Tiden $T/2 = \pi\hbar/(E_2 - E_1)$ som partikkelen "bruker på å komme gjennom barrieren" vil altså øke jo høyere V_0 er.

c. Begynnelsestilstanden i denne problemstillingen kan vi tenke oss er preparert ved at partikkelen er plassert i høyre brønn ved $t = 0$. Ser vi nøyer på tidsforløpet mellom f.eks $t = 0$ og $t = T/2$, finner vi at bølgefunksjonen (og dermed sannsynligheten) "lekker" langsomt over fra den ene brønnen til den andre. Ved $t = T/4$ er f.eks sannsynligheten likt fordelt mellom de to brønnene, som forklart i oppgaveteksten. Dette betyr selvsagt ikke at partikkelen "deler seg". Går vi inn og undersøker hvor partikkelen er ved et gitt tidspunkt t , vil vi finne at den er enten til høyre eller til venstre. (I prinsippet er det til og med en liten sannsynlighet for å finne den i det forbudte området.) Det kan kanskje være lurt å tenke på at bølgefunksjonen beskriver oppførselen til et *ensemble* av slike systemer. Ved $t = T/2$ har alle partiklene flyttet seg til venstre brønn. Ved $t = T/4$ er omtrent halvparten til høyre og halvparten til venstre. Følger vi ett enkelt medlem av ensemblet, kan ikke kvantemekanikken forutsi når partikkelen passerer barrieren. Et halvklassisk bilde av denne prosessen er at hver partikkel fyker fram og tilbake mellom den harde veggen og barrieren, med en impuls $p = \pm\hbar k$. For hver gang den treffer barrieren er det en viss (liten) sannsynlighet for at den passerer. Denne transmisjons-sannsynligheten er mindre jo høyere barrieren er.

Løsning OPPGAVE 18 Modifisert boks

a. For $a = L/2$, dvs mens vi har det opprinnelige boks-potensialet, er

$$\psi_1'' = -\frac{2mE_1}{\hbar^2}\psi_1 \equiv -k_1^2\psi_1,$$

og løsningen er som vi husker en halvbølge(-sinus) med noder i $x = 0$ og $x = L$, slik at $k_1L = \pi$. Grunntilstanden har da energien

$$E_1(a = L/2) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}.$$

For $a = 0$, dvs med potensialet $V(x) = -V_0 = -(4\hbar)^2/(2mL^2)$ for $0 < x < L$, har vi at

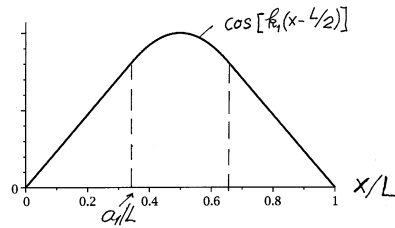
$$\psi_1'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E_1]\psi_1 = -\frac{2m}{\hbar^2}[V_0 + E_1]\psi_1 \equiv -k_1^2\psi_1.$$

Egenfunksjonen ψ_1 og bølgetallet k_1 blir akkurat som ovenfor, men energien blir nå

$$E_1(a = 0) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - V_0 = (\pi^2 - 16)\frac{\hbar^2}{2mL^2};$$

energien er nå (selvsagt) senket med beløpet V_0 , og er negativ.

b. For det tilfellet at $E_1 = 0$ ser vi at $V(x) = E_1$ i områdene som “ikke er gravd ut”, altså for $0 < x < a$ og $L - a < x < L$. Grunntilstanden ψ_1 må da være lineær i disse områdene, mens den krummer mot akse for $a < x < L - a$ (hvor $E_1 - V(x) = V_0$, slik at dette er et klassisk tillatt område). I “overgangene” husker vi at løsningen skal være glatt (dvs at ψ_1 og ψ_1' og dermed også ψ_1'/ψ_1 er kontinuerlige). Prinsippskissen blir da



der kurven har kosinusform i midten og er lineær på begge sidene.

c. Da E_1 alltid må ligge høyere enn bunnen av potensialet, dvs $E_1 > -V_0$ (slik at $-V_0 - E_1 < 0$), har vi at

$$\psi_1'' = \frac{2m}{\hbar^2}[-V_0 - E_1]\psi_1 \equiv -k_1^2\psi_1 \quad \text{for } a < x < L - a.$$

I dette området er altså ψ_1 alltid sinusformet. Da den dessuten skal være symmetrisk (med hensyn på midten av boksen), må vi ha

$$\psi_1 = A \cos[k_1(x - L/2)] \quad \text{for } a < x < L - a.$$

For tilfellet $E_1 = 0$ ser vi at bølgetallet er

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0} = \frac{4}{L}$$

(slik at $k_1L = 4$). Det som bestemmer a_1 og dermed a_1/L for dette tilfellet er kontinuiteten av ψ_1 og ψ_1' , og dermed av ψ_1'/ψ_1 , i punktet $x = a_1$ (eventuelt i $x = L - a_1$). For $0 < x < a$ er løsningen som vi har sett lineær,

$$\psi_1 = Bx \quad \implies \quad \left. \frac{\psi_1'}{\psi_1} \right|_{x=a_1^-} = \frac{1}{a}.$$

For $a < x < L - a$ har vi tilsvarende

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = -k_1 \tan[k_1(x - L/2)] \quad \implies \quad \left. \frac{\psi_1'}{\psi_1} \right|_{x=a_1^+} = -k_1 \tan[k_1L(a_1/L - \frac{1}{2})].$$

Kontinuiteten gir altså

$$\frac{1}{a} = -k_1 \tan[k_1L(a_1/L - \frac{1}{2})] \quad \text{eller} \quad k_1L \frac{a_1}{L} \tan[k_1L(\frac{1}{2} - a_1/L)] = 1, \quad \text{q.e.d.,}$$

eller, med $k_1L = 4$,

$$4 \frac{a_1}{L} \tan[2 - 4a_1/L] = 1.$$

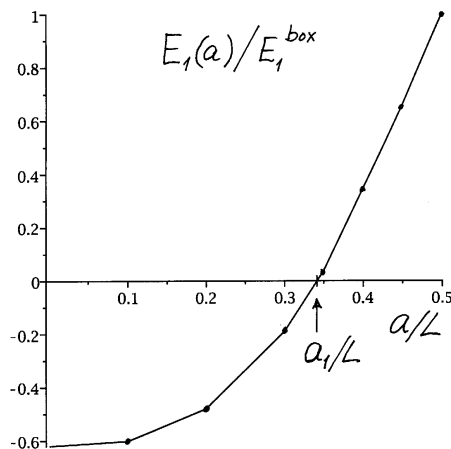
Noen forsøk med kalkulatoren gir

$$\frac{a_1}{L} \approx 0.342.$$

[Figuren ovenfor viser den nøyaktige egenfunksjonen for dette tilfellet.]

Kommentar: Det kan være av interesse å se på grunntilstandsenergien E_1 som funksjon av a . Figuren

nedenfor er basert på beregning for et utvalg av a -verdier. Ved disse beregningene må en skille mellom tilfellet $a < a_1$, som gir negativ energi E_1 og dermed en løsning på formen $B \sinh(\kappa_1 x)$ for $0 < x < a$, og tilfellet $a_1 < a < L/2$, som gir en løsning på formen $B \sin(q_1 x)$ i det samme området.



Løsning OPPGAVE 19 3-dimensjonal isotrop harmonisk oscillator

a. Med $z = r \cos \theta$ har vi at

$$\psi_{001} = C_0^2 C_1 e^{-m\omega r^2/2\hbar} \cdot r \cos \theta,$$

som er uavhengig av asimutvinkelen ϕ , dvs rotasjonssymmetrisk mhp z -aksen. Faktoren $z = r \cos \theta$ innebærer samtidig at ψ_{001} er antisymmetrisk mhp xy -planet. I dette planet er bølgefunksjonen lik null. Derfor kaller vi dette et **nodeplan** for denne orbitalen.

Sannsynlighetstettheten for denne orbitalen kan skrives på formen(e)

$$\psi_{001}^2 = (C_0^2 C_1)^2 \cdot r^2 e^{-m\omega r^2/\hbar} \cdot \cos^2 \theta = (C_0^2 C_1)^2 \cdot e^{-m\omega(x^2+y^2)} \cdot z^2 e^{-m\omega z^2/\hbar}.$$

(i) For fastholdt r ser vi av det første uttrykket at sannsynlighetstettheten er maksimal for θ lik null og π , dvs henholdsvis for $z = r$ og $z = -r$. Da skjønner vi at ψ^2 ikke kan være maksimal *utenfor* z -aksen. Verdien av r i de to maksimalpunktene finner vi ved å derivere:

$$0 = \frac{d}{dr} (e^{-m\omega r^2/\hbar} r^2) = \dots = e^{-m\omega r^2/\hbar} \cdot 2r(1 - r^2 m\omega/\hbar) \implies r = \sqrt{\hbar/m\omega}.$$

Sannsynlighetstettheten for denne orbitalen er altså maksimal i to punkter på z -aksen, med $z = \pm\sqrt{\hbar/m\omega}$. (Den deriverte er lik null for $r = 0$ også, men i origo er jo sannsynlighetstettheten minimal, må vi si.)¹

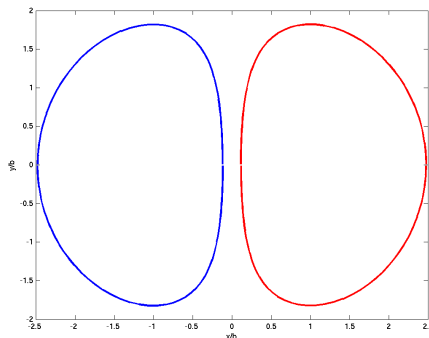
Dersom vi "roterer" funksjonen ψ_{001} 90° rundt y -aksen, fås funksjonen ψ_{100} , osv. De tre egenfunksjonene har altså samme form, bare rotert 90 grader i forhold til hverandre, og det samme gjelder for sannsynlighetstetthetene. (Denne egenskapen henger selvsagt sammen med kulesymmetrien til det isotrope oscillator-potensialet.)

¹(ii) Vi kommer selvsagt fram til akkurat samme konklusjon ved å notere oss at sannsynlighetstettheten kan skrives på formen

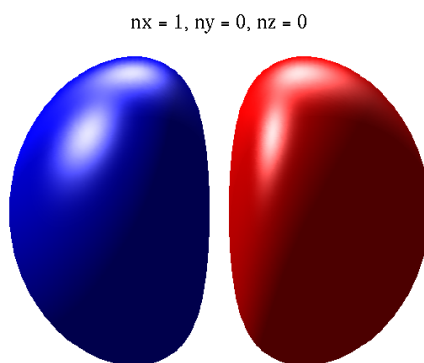
$$|\psi_{001}|^2 \propto e^{-m\omega x^2/\hbar} e^{-m\omega y^2/\hbar} z^2 e^{-m\omega z^2/\hbar}.$$

De to første Gaussfaktorene er maksimale for $x = 0$ og $y = 0$, dvs på z -aksen. Den z -avhengige faktoren er maksimal for $z = \pm\sqrt{\hbar/m\omega}$.

b. Figuren forestiller “kotecurver” for tilstanden ψ_{100} , som er rotasjonssymmetrisk mhp x -aksen, men ellers har samme form som for de andre to tilstandene. Siden ψ_{100} er proporsjonal med x , blir bildet i venstre halvplan et speilbilde av høyresiden, bare med motsatt fortegn på ψ .



Antisymmetrien mhp yz -planet innebærer at dette er et nodeplan for denne tilstanden, hvor $\psi_{100} = 0$. Fra beregningen i pkt. **a** skjønner vi at “lengde-enheten” brukt i figuren er $b = \sqrt{\hbar/m\omega}$. [Langs “kotecurven” til høyre i figuren er ψ 19 % av max; til venstre er ψ motsatt like stor.]



Figuren over viser et 3D-plot av overflaten som svarer til rotasjon av kurvene i forrige figur. Merk at flatene som forsøkes vist i denne figuren er hva vi kan kalle “lik-sannsynlighets-flater” (analogt med ekvipotensialflater i elektrostatikken). Selve bølgefunksjonen er positiv (og konstant) på flaten til høyre, og motsatt like stor (og konstant) på flaten til venstre.

c. Pariteten til den endimensjonale oscillatorløsningen $\psi_n(x)$ er $(-1)^n$. Pariteten til de tredimensjonale løsningene blir da

$$(-1)^{n_x+n_y+n_z} = (-1)^N$$

(siden både x , y og z skifter fortegn under paritetsoperasjonen). For første eksiterte nivå, $N = 1$, har altså alle de tre løsningene negativ paritet. Det samme har vinkelfunksjonene Y_{lm} , noe som lett kan kontrolleres. (Pariteten til Y_{lm} er generelt $(-1)^l$.)

d. Som nevnt side 3 i Tillegg 5 og i oppgaveteksten, går det her an å finne energieigenfunksjoner som samtidig er egenfunksjoner til dreieimpulsoperatorene $\hat{\mathbf{L}}^2$ og \hat{L}_z . Dette betyr at det i prinsippet er mulig å lage seg lineærkombinasjoner av de tre egenfunksjonene (100), (010) og (001) for første eksiterte nivå som blir simultane egenfunksjoner til \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$ og \hat{L}_z . Disse lineærkombinasjonene er lette å finne: Da $z = r \cos \theta = r \sqrt{4\pi/3} Y_{10}$, kan (001) skrives på formen

$$(001) = C_0^2 C_1 r e^{-m\omega r^2/2\hbar} \cdot \sqrt{4\pi/3} Y_{10} \equiv R(r) Y_{10}(\theta, \phi).$$

(001) er altså en slik simultan egenfunksjon, med $m = 0$ (dvs $L_z = 0$) og $l = 1$, (dvs $\mathbf{L}^2 = 2\hbar^2$). Da

$$x \pm iy = r \sin \theta (\cos \phi \pm i \sin \phi) = r \sin \theta e^{\pm i\phi} = \mp r \sqrt{8\pi/3} Y_{1\pm 1},$$

følger det videre at

$$\mp \frac{1}{\sqrt{2}} [(100) \pm i(010)] = C_0^2 C_1 r e^{-m\omega r^2/2\hbar} \cdot \sqrt{4\pi/3} Y_{1\pm 1} \equiv R(r) Y_{1\pm 1}(\theta, \phi).$$

Moral så langt er bl.a: (i) For et degenerert nivå er energieigenfunksjonene ikke unike; vi kan lineærkombinere i vilden sky! (ii) Dersom én av energieigenfunksjonene for et bestemt nivå kan skrives som $R(r) Y_{lm}$ (med $l = 1$ og $m = 0$ i det aktuelle tilfellet), vil det eksistere slike funksjoner for alle m -verdiene for den aktuelle l -verdien ($m = 0, \pm 1$ i dette eksemplet), med samme radialfunksjon $R(r)$. (Den underliggende grunnen er at radialligningen er uavhengig av m -kvantetallet; se avsn 5.4 i Tillegg 5.)

e. For $N = n_x + n_y + n_z = 2$ ($E = \frac{7}{2}\hbar\omega$) kan vi ha

$$(n_x n_y n_z) = (200), (020), (002), (110), (101), (011),$$

altså seks forskjellige energieigenfunksjoner, slik det også følger fra formelen

$$g_N = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$$

for degenerasjonsgraden (se boka). Pariteten er +1 for alle disse seks energieigenfunksjonene.

Lineærkombinasjonen $[(200) + (020) + (002)]/\sqrt{3}$ går som

$$e^{-m\omega r^2/2\hbar} [4x^2 - \frac{2\hbar}{m\omega} + 4y^2 - \frac{2\hbar}{m\omega} + 4z^2 - \frac{2\hbar}{m\omega}] = e^{-m\omega r^2/2\hbar} [4r^2 - \frac{6\hbar}{m\omega}],$$

og er altså en funksjon bare av r , dvs kulesymmetrisk. Da $\hat{\mathbf{L}}^2$ bare inneholder derivasjoner mhp vinklene, følger det at denne lineærkombinasjonen er en egenfunksjon til $\hat{\mathbf{L}}^2$ med egenverdi lik null, altså en såkalt s -bølge (med $l = 0$). Formelt kan vi skrive denne lineærkombinasjonen på formen $R_{N=1, l=0}(r) Y_{00}$. (Husk at $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$ er vinkeluavhengig.)

f. Vi merker oss at lineærkombinasjonen ovenfor har paritet +1, i likhet med Y_{00} . Av de seks opprinnelige energieigenfunksjonene kan vi totalt danne seks uavhengige lineærkombinasjoner, altså fem andre, uavhengige lineærkombinasjoner i tillegg til den vi nettopp har sett på. Alle disse har positiv paritet, i likhet med vikefunksjonene Y_{00} og Y_{2m} , for $m = 2, 1, 0, -1, -2$. Da er det vel lett å gjette seg til at det i tillegg til lineærkombinasjonen ovenfor eksisterer fem andre lineærkombinasjoner av de opprinnelige egenfunksjonene, av typen

$$R_{N=2, l=2}(r) Y_{2m}(\theta, \phi), \quad m = -2, -1, 0, 1, 2.$$

Kommentar 1: Som et eksempel kan du legge merke til at

$$Y_{21}(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta (\cos \phi + i \sin \phi)$$

er proporsjonal med $(xz + iyz)/r^2$. Da skjønner du kanskje at $(101) + i(011)$ er proporsjonal med Y_{21} .

Kommentar 2: Generelt har vi for en gitt l -verdi $2l + 1$ mulige m -verdier:

l	0	1	2	3	4	5	osv
$\#m$	1	3	5	7	9	11	
paritet	+	-	+	-	+	-	

For 3. eksiterte nivå ($N = 3$, paritet $-$) har vi $g_3 = \frac{1}{2} \cdot 4 \cdot 5 = 10$ tilstander $[(300), (030)$ osv]. Da er det vel klart fra tabellen ovenfor at disse kan lineærkombineres til en “triplett”, $R_{N=3,l=1}(r)Y_{1m}(\theta, \phi)$ for $l = 1$ og en “septuplett”, $R_{N=3,l=3}(r)Y_{3m}(\theta, \phi)$ for $l = 3$.

For $N = 4$ (paritet $+$) har vi $g_4 = \frac{1}{2} \cdot 5 \cdot 6 = 15$ tilstander. I tabellen kan du legge merke til at antall tilstander for $l = 0, 2$ og 4 til sammen er $1 + 5 + 9 = 15$.