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

Oppgave 1
En partikkel befinner seg i en uendelig dyp potensialbrønn mellom $x = 0$ og $x = L$. Inne i brønnen er potensialet $V = 0$. Partikkelen er ved tidspunktet $t = 0$ preparert i den normerte tilstanden

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{2}{3L}}\left(1 - \cos\frac{2\pi x}{L}\right).$$

Denne starttilstanden kan uttrykkes som en lineærkombinasjon av energiegentilstander $\psi_n(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(n\pi x/L)$, dvs

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x).$$

Hva er verdien av c_1? (Tips: F eks Eulers formel.)

A Null
B $2/\pi$
C $2/\sqrt{3}$
D $15/7\pi$
E $16/3\pi\sqrt{3}$

Oppgave 2
I forrige oppgave, hva er verdien av c_4? (Tips: Symmetribetraktninger.)

A Null
B $2/\pi$
C $2/\sqrt{3}$
D $15/7\pi$
E $16/3\pi\sqrt{3}$

Oppgave 3
En partikkel beskrives ved tidspunktet $t = 0$ med bølgefunksjonen

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\kappa}\exp(ikx - \kappa|x|).$$

Hva er forventningsverdien av partikkelens impuls?

A $\hbar k$
B $\hbar\kappa$
C $\hbar(k-\kappa)$
D $\hbar(\kappa-k)$
E Null

Oppgave 4

(Oppgavene 4 – 7:) Et elektron befinner seg i en endimensjonal uendelig dyp potensialbrønn som er plassert på intervallet $0 < x < L$, med bredde $L = 120$ Å og konstant potensial $V = 0$. Anta at elektronet foretar en overgang fra 2. eksiterte tilstand til grunntilstanden slik at det sendes ut et foton. Hva er fotonets bølgelengde?

A $20\,\mu$m B $30\,\mu$m C $40\,\mu$m D $50\,\mu$m E $60\,\mu$m

Oppgave 5

Anta nå at elektronet befinner seg i en tilstand som kan uttrykkes som en lineærkombinasjon av grunntilstanden og 2. eksiterte tilstand, nærmere bestemt

$$\Psi(x,t) = \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_1(x)e^{-iE_1 t/\hbar} + \frac{1}{2}\psi_3(x)e^{-iE_3 t/\hbar}.$$

Med hvor lang periode vil sannsynlighetstettheten $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ oscillere?

A 0.1 ps
B 0.2 ps
C 0.3 ps
D 0.4 ps
E 0.5 ps

Oppgave 6

Anta i neste omgang at et elektron i denne potensialbrønnen er preparert i en symmetrisk og normert starttilstand

$$\Psi(x,0) = \sqrt{30/L^5}\,x(L-x)$$

for $0 < x < L$ (og $\Psi = 0$ ellers, selvsagt). Hva er sannsynligheten for at en måling av elektronets energi gir resultatet E_3? (Tips: Delvis integrasjon.)

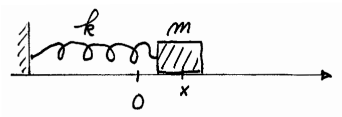
A Null
B $4.64 \cdot 10^{-6}$
C $3.55 \cdot 10^{-5}$
D $2.46 \cdot 10^{-4}$
E $1.37 \cdot 10^{-3}$

Oppgave 7

Med samme starttilstand som i forrige oppgave, hva er sannsynligheten for at en måling av elektronets energi gir resultatet E_4?

A Null
B $4.64 \cdot 10^{-6}$
C $3.55 \cdot 10^{-5}$
D $2.46 \cdot 10^{-4}$
E $1.37 \cdot 10^{-3}$

OPPGAVE 3 **Grunntilstand og 1. eksiterte tilstand for harmonisk oscillator**



Det fysiske systemet vi tenker på i denne oppgaven er en endimensjonal harmonisk oscillator: En partikkel med masse m, påvirket av kraften $F_x = -kx$. Dette svarer til et potensial (≡potensiell energi) $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, der $\omega = \sqrt{k/m}$ er vinkelfrekvensen for den klassiske harmoniske svingningen.
I den kvantemekaniske behandlingen av oscillatoren spør en først etter *egenfunksjonene* $\psi_n(x)$ til Hamilton-operatoren for oscillatoren,

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2,$$

dvs funksjoner som oppfyller egenverdiligningen $\widehat{H}\psi = E\psi$, der E er en konstant som vi tolker som en energi-egenverdi.

a. Hamilton-operatoren $\widehat{H}$ har én egenfunksjon på formen

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-\beta x^2}.$$

Bestem β og energiegenverdien E_0. [Hint: Begge disse størrelsene bestemmes ved innsetting i egenverdiligningen. Av de to løsningene for β gir bare den ene en bølgefunksjon som gir en fysisk akseptabel sannsynlighetstetthet. Hvorfor?]

b. Bestem konstanten C_0 slik at $\psi_0(x)$ er normert. [1] (Merk at du kan *velge fasen* til C_0 fritt, f.eks slik at C_0 blir reell og positiv.) Lag en rask skisse av sannsynlighetstettheten $|\psi_0(x)|^2$, og merk av de *klassiske vendepunktene* for partikkelen, dvs de punktene hvor $E = V$ for den aktuelle energien. Anslå ut fra skissen sannsynligheten for å finne partikkelen i det *klassisk forbudte området*, dvs der hvor $V(x) > E_0$.

c. Vi skal senere vise at egenfunksjonen $\psi_0(x)$ svarer til *grunntilstanden* (tilstanden med lavest mulig energi) for oscillatoren. Egenfunksjonen som svarer til den nest laveste energien viser seg å være

$$\psi_1(x) = C_1\, x\, e^{-\beta x^2}.$$

Finn den tilsvarende energiegenverdien E_1.

[1] Oppgitt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\pi/\alpha}$$

.

OPPGAVE 4 **Grunntilstanden i H-atomet**

a. Vis at den kulesymmetriske bølgefunksjonen

$$\psi(\mathbf{r}) = C\, e^{-r/a_0} \qquad \left(a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}\right)$$

er en egenfunksjon til Hamilton-operatoren

$$\widehat{H} = \widehat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\,\nabla^2 + \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0\, r}$$

for hydrogenatomet [dvs vis at $\widehat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$], og påvis at egenverdien E (energi-egenverdien) er som angitt i ligning (T1.26) i Tillegg 1. Laplace-operatoren i kulekoordinater er

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right).$$

b. Vis at når $\psi(\mathbf{r})$ er en energiegenfunksjon med energien E, slik vi fant ovenfor, så er

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

en løsning av den tidsavhengige Schrödingerligningen for H-atomet,

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi.$$

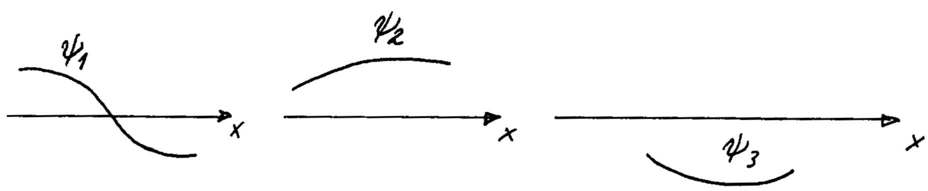
c. Vis at $C = (\pi a_0^3)^{-1/2}$ gir en normert bølgefunksjon.

OPPGAVE 5 **Krumningsegenskaper for endimensjonale energiegenfunksjoner**

En partikkel med masse m beveger seg i et endimensjonalt potensial $V(x)$. Partikkelen befinner seg i en tilstand som svarer til en reell løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen, $\widehat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, med energien E. Med $\widehat{H} = \widehat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ kan vi skrive denne energiegenverdiligningen (Schrödingers tidsuavhengige ligning) på formen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = [E - V(x)]\psi(x) \qquad \text{dvs.} \qquad \frac{d^2\psi/dx^2}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E].$$

(i) I *klassisk tillatte områder* (hvor $E > V(x)$) er altså krumningen $d^2\psi/dx^2$ negativ når ψ er positiv (og omvendt); i begge tilfeller er den *relative* krumningen ψ''/ψ negativ. Vi ser at dette betyr at ψ må *krumme mot aksen*. Eksempler:



(ii) I *klassisk forbudte områder* (hvor $E < V(x)$) har krumningen samme fortegn som ψ (positiv relativ krumning). ψ vil da *krumme bort fra aksen.* Eksempler:

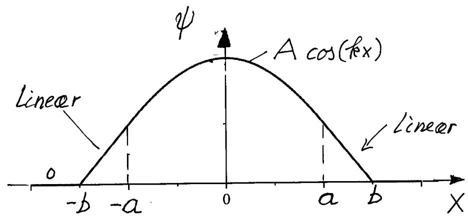
(iii) I et klassisk vendepunkt, hvor $V(x) - E$ skifter fortegn, ser vi av formelen ovenfor at den relative krumningen skifter fortegn. Er $V(x) = E$ over et endelig område (som kan forekomme for et potensial som er lokalt flatt), blir $\psi'' = 0$ i dette området. Da blir ψ selv en lineær funksjon, $\psi = Ax + B$, i dette området.
Vi skal etter hvert se at dette med krumning er et veldig nyttig redskap når en skal studere energi-egenfunksjoner.

a. Kontrollér at grunntilstanden for den harmoniske oscillatoren i OPPGAVE 3a, med potensialet $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$,

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

oppfører seg slik reglene ovenfor sier, bl.a at den relative krumningen skifter fortegn for de x-verdiene som svarer til de *klassiske* vendepunktene, som er der hvor $E_0 = V(x)$. (Energien E_0 for grunntilstanden er lik $\frac{1}{2}\hbar\omega$.)

b.



Figuren viser grunntilstanden for et endimensjonalt potensial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for} \quad |x| > b, \\ 0 & \text{for} \quad a < |x| < b, \\ V_0 & \text{for} \quad |x| < a. \end{cases}$$

Bruk det at ψ er lineær i områdene $a < |x| < b$ til å finne energien E for denne tilstanden. Hvilket fortegn har V_0. [Finn svarene på disse spørsmålene vha den tidsuavhengige Schrödingerligningen.]