

FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU.
Løsningsforslag til øving 6.

Oppgave 1: Partikkel i boks

a) Normering av Ψ :

$$1 = \int_0^L |\Psi(x, 0)|^2 dx.$$

De stasjonære løsningene er ortogonale. Derfor vil "kryssleddene" av typen

$$\int_0^L \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} dx$$

bli lik null og ikke bidra. Fra forelesningene, og fra oppgave 4 i øving 1, vet vi at de stasjonære løsningene er normert hver for seg med konstanten $\sqrt{2/L}$ foran sinusfunksjonen. Dermed må vi ha

$$\begin{aligned} 1 &= |A|^2 \int_0^L \left(\sin^2 \frac{\pi x}{L} + \sin^2 \frac{2\pi x}{L} \right) dx \\ &= |A|^2 \cdot \left(\frac{L}{2} + \frac{L}{2} \right) \\ \Rightarrow |A|^2 &= \frac{1}{L} \\ \Rightarrow |A| &= \frac{1}{\sqrt{L}} \end{aligned}$$

Her spiller det ingen rolle om vi velger den positive reelle løsningen $A = 1/\sqrt{L}$, den negative reelle løsningen $A = -1/\sqrt{L}$, eller en hvilken som helst kompleks løsning for A , bare absoluttverdien er riktig. Som regel velger vi da $A = 1/\sqrt{L}$.

b) De stasjonære løsningene har tidsavhengig faktor $\exp(-iE_n t/\hbar)$. Her er Ψ en sum av to stasjonære løsninger, med hhv $n = 1$ og $n = 2$, som betyr at

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(\sin \frac{\pi x}{L} e^{-iE_1 t/\hbar} + \sin \frac{2\pi x}{L} e^{-iE_2 t/\hbar} \right),$$

med $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$.

c) Da Ψ og den komplekskonjugerte Ψ^* begge er en sum av to ledd, vil produktet gi i alt en sum av fire ledd. To av disse blir uavhengige av t , siden Ψ og Ψ^* bidrar med samme tidsavhengige eksponent, men med motsatt fortegn. De to "kryssleddene" har den samme tidsuavhengige funksjonen, og tidsavhengig faktor med motsatt fortegn oppe i eksponenten, $\exp[\pm i(E_2 - E_1)t/\hbar]$. Fra Eulers formel vet vi at $\exp(i\alpha) + \exp(-i\alpha) = 2 \cos \alpha$. Dermed kan vi slå sammen de to kryssleddene til ett, som dermed får den tidsavhengige faktoren $2 \cos[(E_2 - E_1)t/\hbar] = 2 \cos(3\pi^2 \hbar t / 2mL^2)$. Alt i alt:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{L} \left[\sin^2 \frac{\pi x}{L} + \sin^2 \frac{2\pi x}{L} + 2 \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} \cos \frac{3\pi^2 \hbar t}{2mL^2} \right].$$

d) Vi trenger

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\pi}{L\sqrt{L}} \left(\cos \frac{\pi x}{L} e^{-iE_1 t/\hbar} + 2 \cos \frac{2\pi x}{L} e^{-iE_2 t/\hbar} \right).$$

Denne skal multipliseres med Ψ^* og konstanten $\hbar/mi$, og til slutt skal vi ta realdelen av det hele for å finne $j(x, t)$. Vi innser at her vil kun de to kryssleddene kunne gi bidrag. Hvorfor? Jo, ledd som har produkt av

samme tidsavhengige faktor men med motsatt fortegn i eksponenten, blir rent imaginære, pga den imaginære enheten $1/i$. Kryssleddene har en sinus fra Ψ^* og en cosinus fra $\partial\Psi/\partial x$. Alt i alt:

$$\begin{aligned} j(x, t) &= \frac{\pi\hbar}{mL^2} \operatorname{Re} \left(\frac{1}{i} \cos \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar} + \frac{2}{i} \cos \frac{2\pi x}{L} \sin \frac{\pi x}{L} e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \right) \\ &= \frac{\pi\hbar}{mL^2} \left(\cos \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} \sin \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} + 2 \cos \frac{2\pi x}{L} \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar} \right) \\ &= \frac{\pi\hbar}{mL^2} \sin \frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2} \left(\cos \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} - 2 \cos \frac{2\pi x}{L} \sin \frac{\pi x}{L} \right). \end{aligned}$$

Her har vi igjen brukt Eulers formel, $\exp(i\alpha) = \cos \alpha + i \sin \alpha$, at $\sin \alpha = -\sin(-\alpha)$, samt satt inn for E_1 og E_2 .

Innsetting av $x = L/2$ gir

$$j(L/2, t) = \frac{2\pi\hbar}{mL^2} \sin \frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2},$$

da $\cos(\pi/2) = \sin \pi = 0$ og $\cos \pi = -\sin(\pi/2) = -1$.

e) Kun det siste leddet i $\rho(x, t)$ er avhengig av t . Derivasjon av cosinus gir minus sinus, og kjerneregelen medfører at vi får en faktor $3\pi^2\hbar/2mL^2$. Dermed:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{3\pi^2\hbar}{mL^3} \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} \sin \frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2}.$$

Derivasjon av $j(x, t)$ mhp x gir i alt 4 ledd, siden det er 2 produkter av 2 funksjoner som skal deriveres. Derivasjon av sinusene, med bruk av kjerneregelen, resulterer i to ledd som kansellerer hverandre. Derivasjon av cosinusene gir "prefaktor" $-\pi/L$ i det første leddet og $+4\pi/L$ i det andre, og begge inneholder $\sin(\pi x/L) \sin(2\pi x/L)$. Dermed:

$$-\frac{\partial j}{\partial x} = -\frac{3\pi^2\hbar}{mL^3} \sin \frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2} \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L},$$

som er presis det samme vi fant for $\partial\rho/\partial t$!

Oppgave 2: Tunneleffekt

Uttrykket for transmisjonssannsynligheten T er:

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \kappa L} = \frac{1}{1 + (V_0^2/(4E(V_0 - E))) \sinh^2 \kappa L}.$$

Her er $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. Her er

$$\kappa = \sqrt{2 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot (0.30 - 0.15) \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} / 1.05 \cdot 10^{-34}} = 1.99 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1} = 0.199 \text{ \AA}^{-1},$$

slik at den dimensjonsløse faktoren κL blir 1.99 og 7.97 når L er hhv 10 Å og 40 Å. Faktoren $V_0^2/4E(V_0 - E)$ får her verdien 1, slik at

$$\begin{aligned} T(10 \text{ \AA}) &= \frac{1}{1 + \sinh^2 1.99} \simeq 0.072 \\ T(40 \text{ \AA}) &= \frac{1}{1 + \sinh^2 7.97} \simeq 4.8 \cdot 10^{-7} \end{aligned}$$

Vi ser at T avtar raskt (eksponentielt) med økende barrierebredde. (Hvis en ikke har funksjoner som $\sinh(x)$ og $\cosh(x)$ på kalkulatoren, kan en med god tilnærming sette $\sinh(x) \simeq \cosh(x) \simeq \exp(x)/2$ når x er en del større enn 1. Dette vil her gi $T = 0.070$ for den tynne barrieren, allerede en god tilnærming med $x = 1.99$, med andre ord.)

Oppgave 3: Grunntilstanden i hydrogenatomet

a) $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, som med $l = 0$ gir $L = 0$.

b) $E = E_1 = -13.6 \text{ eV}$.

c) Sannsynlighetstettheten $\rho_{100} = |\psi_{100}|^2$ har størst verdi i $r = 0$, dvs i origo, dvs der atomkjernen befinner seg.

Oppgave 4: $2p_z$ -tilstanden i hydrogenatomet

a) $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$, som med $l = 1$ gir $L = \sqrt{2}\hbar$. Og $L_z = m_l\hbar$, som med $m_l = 0$ gir $L_z = 0$. Det betyr at vektoren $\mathbf{L}$ ligger i xy -planet.

b) $E = E_2 = -13.6/4 \text{ eV} = -3.4 \text{ eV}$.

c) Siden $|\psi_{210}|^2$ er proporsjonal med $\cos^2\theta$, er det størst sannsynlighet for å finne elektronet i retningene gitt ved $\theta = 0$ og $\theta = \pi$, dvs på z -aksen.

d) Vi må finne ut hvilken verdi av r som gir maksimal verdi for $|R_{21}(r)|^2$. Det gjør vi som vanlig ved å sette den deriverte lik null. Det gir ligningen

$$(2\xi - \xi^2) \exp(-\xi) = 0,$$

der vi har innført $\xi = r/a_0$. Her er det to løsninger, men vi ser uten videre at $\xi = 0$, dvs $r = 0$, ikke gir et maksimumspunkt. Følgelig: Størst sannsynlighet for å finne elektronet i avstand $r = 2a_0$ fra kjernen. Kombinert med svaret i c): I $z = \pm 2a_0$.