Eksamen 14/12 – 1984.

Forslag til løsning.

Oppgave 1.

a) Uttrykket for middelverdien av en operator:

$$\underline{\underline{\langle F \rangle = \int \psi^* F \psi \, d\tau}}$$

Middere posisjon når den gitte $\psi(x)$ benyttes:

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha x e^{-2\alpha|x-c|} dx = \underline{\underline{c}}$$

Middere impuls $\left(p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)$:

$$\langle p \rangle = \int \psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i}\left(-\alpha \frac{x-c}{|x-c|} + ik\right)\psi \, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \alpha \left[\frac{\hbar}{i}\left(-\alpha \frac{u}{|u|}\right) + \hbar k\right] e^{-2\alpha|u|} du = \underline{\underline{\hbar k}}$$

b) En hermitesk operatør må oppfylle:

$$\underline{\underline{\int \psi_1^* F \psi_2 \, d\tau = \int \psi_2 F^* \psi_1^* \, d\tau}} \quad \left(\text{evt} \int \psi^* F \psi \, d\tau = \int \psi F^* \psi^* d\tau\right)$$

Dersom F representerer en fysisk størrelse må den være hermitesk fordi middelverdien $\langle F \rangle$ må være reell.

Anta $F\psi_n = f_n \psi$ og $F\psi_m = f_m \psi_m$ der $f_m \neq f_n$

Ved å benytte hermitisitet finnes da:

$$f_n \int \psi_m^* \psi_n \, d\tau = \int \psi_m^* F \psi_n \, d\tau = \int \psi_n F^* \psi_m^* \, d\tau = f_m \int \psi_m^* \psi_n \, d\tau$$

Følgelig må en ha ortogonalitet

$$\underline{\underline{\int \psi_m^* \psi_n \, d\tau = 0}} \quad (\text{når } m \neq n)$$

c) En har utviklingen:

$$g(\vec{r}) = \sum_n a_n \psi_n(\vec{r})$$

Dette kan multipliseres med $\psi_m^*(\vec{r})$ og integreres. Ved å benytte at forskjellige egenfunksjoner er ortogonale finnes dermed utviklingskoeffisientene

$$\int \psi_m^*(\vec{r})\, g(\vec{r})\, d\vec{r} = \sum_n a_n \int \psi_m^*(\vec{r})\, \psi_n(\vec{r})\, d\vec{r}$$

$$= \sum_n a_n \delta_{nm} = a_m \quad \text{(dersom } \psi_n(\vec{r}) \text{ er normert)}$$

$$\underline{\underline{a_m = \int \psi_m^*(\vec{r})\, g(\vec{r})\, d\tau}}$$

Oppgave 2.

a) Antatt bølgefunksjon $\psi_0 = N e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$.

Normering krever:

$$1 = \int \psi_0^* \psi_0\, dx = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = N^2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\underline{\underline{N = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}}} \qquad \left[\text{evt. } N = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{i\theta}\right]$$

Schrödingerlikning:

$$\underline{\underline{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2\right)\psi_0 = E\psi_0}}$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\alpha x \psi_0 \quad ; \quad \frac{d^2\psi_0}{dx^2} = (-\alpha + \alpha^2 x^2)\psi_0$$

Setter inn og finner:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\alpha - \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 x^2 + \frac{1}{2}Kx^2\right)\psi_0 = E\psi_0$$

Dette er løsning dersom:

$$\underline{\underline{\alpha = \sqrt{\frac{Km}{\hbar^2}}}} \quad \text{og} \quad E = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha = \underline{\underline{\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{K}{m}}}}$$

b) Bølgefunksjon:

$$\psi = \psi(x) = M e^{-\frac{1}{2}\tau x^2}$$

Normering som ovenfor krever

$$M = \left(\frac{\tau}{\pi}\right)^{1/4}$$

Rekkeutvikler ψ i egenfunksjoner:

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n = a_0 \psi_0 + \cdots$$

Bestemmer a_0:

$$a_0 = \int \psi_0^* \psi \, dx = \left(\frac{\alpha \tau}{\pi^2}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(\alpha+\tau)x^2} dx$$

$$= \frac{(\alpha \tau)^{1/4}}{\left(\frac{1}{2}(\alpha+\tau)\right)^{1/2}} = \left(\frac{4\alpha\tau}{(\alpha+\tau)^2}\right)^{1/4}$$

Sannsynligheten for å være i grunntilstanden:

$$p_0 = |a_0^2| = \underline{\underline{\frac{2\sqrt{\alpha\tau}}{\alpha+\tau}}} \qquad (p_0 = 1 \text{ når } \tau = \alpha$$

Oppgave 3

a) Har Hamiltonoperator $H = H_0 + \lambda V$

Løsningen til $H_0 |n\rangle = E_n^0 |n\rangle$ antas kjent.

Rekkeutvikler løsningen i parameteren λ:

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n'$$

$$|\psi\rangle = |n\rangle + \lambda |\psi_1\rangle$$

Sette inn i Schrödingerlikningen:

$$(H_0 + \lambda V)|\psi\rangle = E_n |\psi\rangle$$

$$(H_0 + \lambda V)(|n\rangle + \lambda|\psi_1\rangle + \cdots) = (E_n^0 + \lambda E_n' + \cdots)(|n\rangle + \lambda|\psi_1\rangle + \cdots)$$

Dette multipliseres ut og ordnes i potenser av λ:

$$H_0|n\rangle = E_n^0|n\rangle \quad \text{(automatisk oppfylt)}$$

$$H|\psi_1\rangle + V|n\rangle = E_n^0|\psi_1\rangle + E_n^1|n\rangle$$

$|\psi_1\rangle$ kan rekkeutvikles i egenfunksjonene til H_0:

$$|\psi_1\rangle = \sum_k a_k|k\rangle$$

Dette settes inn i likningen ovenfor. Denne multipliseres nå med $\langle\psi_n|$ (og integreres). Dermed finnes

$$\underline{\underline{E_n' = \langle n|V|n\rangle}}$$

siden $\langle n|k\rangle = \delta_{nk}$.

b) Med $\lambda V = Ae^{-\sigma x^2 + 2\gamma x}$ finnes følgende uttrykk for førsteordensperturbasjonen i energien til grunntilstanden:

$$\lambda E_0' = \langle 0|V|0\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}A\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} e^{-\sigma x^2 + 2\gamma x}\,dx$$

Gjør om til kvadrat i eksponenten:

$$\lambda E_0' = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}A\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\alpha+\sigma)\left(x - \frac{\gamma}{\alpha+\sigma}\right)^2 + \frac{\gamma^2}{\alpha+\sigma}}\,dx$$

$$= \underline{\underline{Ae^{\frac{\gamma^2}{\alpha+\sigma}}\sqrt{\frac{\alpha}{\alpha+\sigma}}}}$$