Kontinuasjonseksamen 13/8 - 1985. (1)

Kvantemekanikk I (oppg. 1, 2 og 3) og Innføring i Kvantemekanikk (oppg 1 og 2).

Forslag til løsning.

Oppgave 1.

Uttrykket for middelverdien av en operator:

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

Midlere posisjon:

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi \, dx = \frac{2}{L}\int_0^L x \sin^2(\pi x/L)\, dx = \frac{2}{L}\int_0^L x \, \frac{1}{2}[1 - \cos(2\pi x/L)]\, dx \underset{\text{delv. int.}}{=}$$

$$\frac{1}{L}\Big|_0^L \left[\frac{1}{2}x^2 - \frac{L}{2\pi} x \sin(2\pi x/L)\right] + \frac{1}{L}\int_0^L \frac{L}{2\pi}\sin(2\pi x/L)\, dx = \underline{\underline{\frac{1}{2}L}} \quad [\text{evt. } \langle x \rangle = \tfrac{1}{2}L \text{ p.g.a. symmet.}$$

Midlere impuls:

$$\langle p \rangle = \int \psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi \, dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin(\pi x/L)\frac{\hbar}{i}\left[\frac{\pi}{L}\cos(\pi x/L) + i\alpha \sin(\pi x/L)\right] dx$$

$$= \frac{2}{L}\int_0^L \hbar\alpha \sin^2(\pi x/L)\, dx = \underline{\underline{\hbar\alpha}}$$

En hermitesk operator 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 ⟨F⟩ 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

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

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

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

d) Rekkeutvikler ψ i egenfunksjoner

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

Bestemmer a_0:

$$a_0 = \int \psi_0^* \psi\, dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin^2(\pi x/L)\, e^{i\alpha x}\, dx =$$

$$\frac{2}{L}\left(-\frac{1}{4}\right)\int_0^L \left(e^{i2\pi x/L} + e^{-i2\pi x/L} - 2\right) e^{i\alpha x}\, dx =$$

$$-\frac{1}{2L}\left[\frac{e^{i(2\pi+\alpha L)}-1}{i\left(\alpha+\frac{2\pi}{L}\right)} + \frac{e^{i(-2\pi+\alpha L)}-1}{i\left(\alpha-\frac{2\pi}{L}\right)} - 2\,\frac{e^{i\alpha L}-1}{i\alpha}\right]$$

$$= \frac{e^{i\alpha L}-1}{2Li}\left[-\frac{1}{\alpha+\frac{2\pi}{L}} - \frac{1}{\alpha-\frac{2\pi}{L}} + \frac{2}{\alpha}\right] = \frac{e^{i\alpha L}-1}{i\alpha L\left[1-\left(\frac{\alpha L}{2\pi}\right)^2\right]}$$

$$= \underline{\frac{2\sin\left(\frac{1}{2}\alpha L\right)}{\alpha L\left[1-\left(\frac{\alpha L}{2\pi}\right)^2\right]}\, e^{i\frac{1}{2}\alpha L}}$$

Sannsynligheten for å være i grunntilstanden:

$$p_0 = |a_0^2| = a_0^* a_0 = \underline{\underline{\left\{\frac{2\sin\left(\frac{1}{2}\alpha L\right)}{\alpha L\left[1-\left(\frac{\alpha L}{2\pi}\right)^2\right]}\right\}^2}}$$

Oppgave 2. ③

a) Tidsuavhengig Schrödingerlikning
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi = E\psi$$

Normeringskonstanten er bestemt av
$$1=\int\psi^*\psi\,dx = N^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha x^2}dx = \frac{N^2}{\sqrt{\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-u^2}du = N^2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

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

Schrödingerlikning:
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi$$

Setter inn:
$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = -\alpha x\psi \quad ; \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = (\alpha^2x^2-\alpha)\psi$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\alpha^2x^2-\alpha)\psi+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi$$

Dette kan bare oppfylles dersom
$$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$$

Energien blir:
$$E=\frac{\hbar^2\alpha}{2m} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

b) Variasjonsmetoden vil alltid gi en energi som er større eller lik energien i grunntilstanden. Med $\gamma=\alpha$ i den gitte prøvefunksjonen vil variasjonsmetoden gi samme energi som 1. ordens perturbasjonsteori. Variasjon av γ vil kunne gi enda lavere energi. Derfor vil 1. ordens perturbasjonsteori gi høyest energi, og eksakt beregning vil gi lavest energi.

Første ordens perturbasjonsregning av energien i grunntilstand:

$$\lambda E_n^{(1)} = \lambda \langle n|V|n\rangle = \lambda \int \psi^* x^6 \psi \, dx =$$

$$\lambda \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{\infty}^{\infty} x^6 e^{-\alpha x^2} dx = \lambda \frac{1}{\alpha^3 \sqrt{\pi}} \int_{\infty}^{\infty} u^6 e^{-u^2} du = \underline{\frac{15}{8} \frac{\lambda}{\alpha^3}}$$

Adderer bidraget fra punkt a) og finner:

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{15}{8}\frac{\lambda}{\alpha^3} = \underline{\frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{15}{8}\lambda\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3}$$

Ved variasjonsmetoden kan en benytte resultatet fra punkt a) til å beregne $H\psi$ ved å bytte ut α med τ og så addere bidraget fra det perturberende leddet.

Med $\psi = e^{-\frac{1}{2}\tau x^2}$ finnes:

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \int \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\tau^2 x^2 - \tau) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda x^6\right]\psi \, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\tau^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\right)x^2 + \frac{\hbar^2}{2m}\tau + \lambda x^6\right] e^{-\tau x^2} dx =$$

$$\sqrt{\frac{\pi}{\tau}}\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\tau^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\right)\frac{1}{2\tau} + \frac{\hbar^2}{2m}\tau + \frac{15}{8}\lambda\frac{1}{\tau^3}\right] = \sqrt{\frac{\pi}{\tau}}\left[\frac{\hbar^2}{4m}\tau + \frac{1}{4}m\omega^2\frac{1}{\tau} + \frac{15}{8}\frac{\lambda}{\tau^3}\right]$$

Med $\langle\psi|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\pi}{\tau}}$ finnes så

$$E = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \underline{\frac{\hbar^2}{4m}\tau + \frac{1}{4}m\omega^2\frac{1}{\tau} + \frac{15}{8}\frac{\lambda}{\tau^3}}$$

Minimaliserer m.h.p. τ

$$\frac{\partial E}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{1}{4}m\omega^2\frac{1}{\tau^2} - \frac{45}{8}\frac{\lambda}{\tau^4} = 0$$

$$\tau^4 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\tau^2 - \frac{45}{2}\frac{\lambda m}{\hbar^2} = 0$$

$$\tau^2 = \frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2} \pm \sqrt{\left(\frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2}\right)^2 + \frac{45}{2}\frac{\lambda m}{\hbar^2}}$$

Bare + fortegn er akseptabel da − fortegn gir $\tau^2 < 0$ $(\lambda > 0)$.

Dvs.

$$\underline{\tau = \left(\frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2} + \sqrt{\frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2} + \frac{45}{2}\frac{\lambda m}{\hbar^2}}\right)^{1/2}}$$

som ved innsetting i uttrykket for E gir energien i grunntilstanden ved variasjonsmetoden