Løsningsforslag
Matematisk fysikk, 28. mai 2001

Oppgave 1

a) Det er trykkfeil i oppgaven. Riktig uttrykk er

$$\int_0^\pi \sin^{2n}\theta\, d\theta = \frac{(2n)!\pi}{2^{2n}(n!)^2}.$$

Vi har

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\pi}\int_0^\pi \cos(x\sin\theta)\, d\theta &= \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n (x\sin\theta)^{2n}}{(2n)!}\, d\theta \\
&= \frac{1}{\pi}\sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!}\int_0^\pi \sin^{2n}\theta\, d\theta \\
&= \frac{1}{\pi}\sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)!}\frac{(2n)!\pi}{2^{2n}(n!)^2} \\
&= \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n}{(n!)^2}\left(\frac{x}{2}\right)^{2n} \\
&= J_0(x).
\end{aligned}$$

b) Her får vi

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty e^{-\alpha x} J_0(x)\, dx &= \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \int_0^\pi e^{-\alpha x}\cos(x\sin\theta)\, d\theta\, dx \\
&= \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \int_0^\infty e^{-\alpha x}\cos(x\sin\theta)\, dx\, d\theta \\
&= \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \Big|_0^\infty \frac{e^{-\alpha x}}{\alpha^2+\sin^2\theta}\big(-\alpha\cos(x\sin\theta)+\sin\theta\sin(x\sin\theta)\big)\, d\theta \\
&= \frac{\alpha}{\pi}\int_0^\pi \frac{d\theta}{\alpha^2+\sin^2\theta}.
\end{aligned}$$

Her har vi brukt formel (133), s. 144, i Rottmann.

Oppgave 2

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^\infty \Psi^* x \Psi\, dx = (2a/\pi)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^\infty x e^{-2a(x-c)^2}\, dx.$$

Med en ny integrasjonsvariable y definert ved $x = c + y/\sqrt{2a}$ fås

$$\langle x\rangle = \pi^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^\infty \left(c + \frac{y}{\sqrt{2a}}\right)\, e^{-y^2}\, dy.$$

Integralet $\int y e^{-y^2}\, dy = 0$ av symmetrigrunner, og $\int e^{-y^2}\, dy = \sqrt{\pi}$. Det gir

$$\langle x\rangle = \underline{\underline{c}}.$$

Da operatoren som svarer til p_x er $\widehat{p}_x = (\hbar/i)\partial/\partial x$ blir

$$\langle p_x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\ \Psi\ dx = (2a/\pi)^{\frac{1}{2}}\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} \left[-2a(x-c)+ib\right] e^{-2a(x-c)^2}\ dx.$$

Med samme integrasjonsvariabel y som ovenfor får vi

$$\langle p_x\rangle = \pi^{-\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\left[i\hbar y\sqrt{2a}+\hbar b\right] e^{-y^2}\ dy = \underline{\underline{\hbar b}}.$$

Oppgave 3

a) Vi får

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x+\frac{d}{dx}\right)\psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{(2^n n!\sqrt{\pi})^{1/2}}\left((xH_n+H_n')e^{-x^2/2} - xH_n e^{-x^2/2}\right)\\
&= \frac{1}{(2^{n+1}n!\sqrt{\pi})^{1/2}} 2nH_{n+1}e^{-x^2/2}\\
&= \sqrt{n}\psi_{n-1}(x).
\end{aligned}$$

Her har vi brukt relasjonen $H_n' = 2nH_{n+1}$.

b) Den genererende funksjonen gir

$$e^{-s^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(0)\frac{s^n}{n!}.$$

Taylor-rekken til eksponensialfunksjonen gir at venstresiden kan skrives som

$$e^{-s^2} = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m s^{2m}}{m!}.$$

ved å sammenligne de to uttrykkene finner vi

$$H_n(0) = \begin{cases} 0 & \text{for } n \text{ odde,}\\ \frac{(-1)^m(2m)!}{m!} & \text{for } n=2m. \end{cases}$$

Alternativt kan man bruke formelen $H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H_{n-1}(x)$ for $x=0$, dvs $H_{n+1}(0) = -H_{n-1}(0)$ samt induksjon til å vise resultatet.

c) Den tidsuavhengige Schrödingerlikningen er

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\,\psi = E\,\psi.$$

Direkte innsetting av den oppgitte produktformen for ψ gir med $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ og for $\vec{r}$ inni boksen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{n_x^2\pi^2}{L^2}\psi - \frac{n_y^2\pi^2}{L^2}\psi + \sin\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\ \frac{d^2\phi}{dz^2}\right] + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2\ \psi = E\psi.$$

Sinusfaktorene er felles for alle ledd og kan ikke være null fordi da blir $\psi = 0$. Vi kan derfor forkorte disse bort og står igjen med

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\phi + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2\ \phi = \varepsilon\phi, \tag{1}$$

med

$$\varepsilon = E - \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2).$$

Likningen (1) for ϕ er harmonisk-oscillator-likningen.

Grensebetingelsene i $x = 0$, $x = L$, $y = 0$ og $y = L$ er $\psi = 0$ fordi bølgefunksjonen er kontinuerlig og lik null utafor boksen. Dette er oppfylt når n_x og n_y er heltall. Av samme grunn må vi også ha grensebetingelsen

$$\phi(z = 0) = 0 \tag{2}$$

ved bunnen av boksen. Heltallene n_x og n_y kan ikke være null fordi da blir $\psi = 0$ overalt. Og negative heltall gir samme bølgefunksjoner som positive heltall, så vi står igjen med $n_i = 1, 2, 3\ldots$, ($i = x$ eller y).

d) Laveste verdi for E får vi for $n_x = n_y = 1$ og med laveste verdi for energiparameteren ε i oscillatorlikningen (1). Energiverdiene for en harmonisk oscillator er

$$\varepsilon = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

med $n = 0, 1, 2, \ldots$. Grensebetingelsen (2) oppfylles ikke av $\phi_0(z)$, men av $\phi_1(z)$ (fordi $H_0(0) \neq 0$ og $H_1(0) = 0$, som oppgitt under punkt b). Altså er for vårt problem $\varepsilon = \frac{3}{2}\hbar\omega$ den minste verdien for ε. Grunntilstanden i boksen har derfor energien

$$E(min) = \underline{\underline{\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2} + \frac{3}{2}\hbar\omega.}}$$

Oppgave 4

a) Med $y(x) = \phi(\sqrt{\lambda}\,x) = \phi(t)$ finner vi

$$y' = \sqrt{\lambda}\phi', \quad (xy')' = \sqrt{\lambda}(t\phi')'.$$

(OBS: Her er $y' = dy/dx$ og $\phi' = d\phi/dt$.) Derfor

$$0 = -\sqrt{\lambda}(t\phi')' + \sqrt{\lambda}\frac{p^2}{t}\phi = \lambda\frac{t}{\sqrt{\lambda}}\phi,$$

eller

$$t^2\phi'' + t\phi' + (t^2 - p^2)\phi = 0.$$

b) Bessel-ligningen har to lineært uavhengige løsninger, nemlig J_p og Y_p. Funksjonen Y_p er ubegrenset nær $x = 0$ og må forkastes. Dermed blir

$$y(x) = \phi(\sqrt{\lambda}\,x) = J_p(\sqrt{\lambda}\,x).$$

Kravet om at $y(1) = 0$ gjør at λ må oppfylle

$$J_p(\sqrt{\lambda}) = 0.$$

c) Vi skriver ligningen på selvadjungert form og får

$$-\frac{1}{x}(xy')' + \frac{p^2}{x^2}y = \lambda y$$

med vektfunksjon $r(x) = x$. Ortogonalitet av egenfunksjoner tilhørende forskjellige egenverdier for Hermiteske (spesielt selvadjungerte) operatorer gir resultatet.

<u>Oppgave 5</u>

a) Den tidsuavhengige Schrödingerlikningen er

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\,\psi = E\psi.$$

Med $V(x) = -\alpha\delta(x)$ integreres Schrödingerlikningen fra en negativ verdi $x = -\epsilon$ til en positiv verdi $+\epsilon$. Det gir

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\right] - \alpha\psi(0) = E\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi(x)\,dx.$$

La så $\epsilon \to 0$. Det siste integralet vil da forsvinne, og vi får

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'(0+) - \psi'(0-)\right] - \alpha\psi(0) = 0, \tag{3}$$

q.e.d.

b) For $x \neq 0$ er Schrödingerlikningen enkel:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi(x),$$

med generell løsning

$$\psi(x) = A\,e^{-\kappa x} + B\,e^{+\kappa x},$$

der

$$\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2}. \tag{4}$$

Skal bølgefunksjonen være normerbar må $\psi(x \to \pm\infty) = 0$. Det gir $B = 0$ for $x > 0$ og $A = 0$ for $x < 0$. Da bølgefunksjonen er kontinuerlig overalt blir den av formen

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}.$$

Innsatt i betingelsen (3) gir dette

$$\frac{\hbar^2}{2m}2A\kappa - A = 0, \text{ dvs } \kappa = \frac{m}{\hbar^2}.$$

Innsatt i (4) fås energien

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2 = \underline{\underline{-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}}}.$$

c) Det er trykkfeil i oppgaven. Riktig uttrykk for ψ_0 når $|x| \leq L$ er $\sqrt{3/2L^3}|L-x|$.

Ved innsetting av $\psi_0 = N|L-x|$ i (3) får vi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-2N) = \alpha N \cdot L,$$

dvs

$$\alpha = \underline{\underline{\frac{\hbar^2}{mL}}}.$$

Da $\psi_0'' = 0$ for $x \neq 0$ gir Schrödingerlikningen

$$E_0 = \underline{\underline{0}}.$$

Da $\psi_1(0) = 0$ gir (3) at ψ' er kontinuerlig i origo. Altså er problemet det samme som for partikkel i éndimensjonal boks av bredde $2L$, som har ψ_1 som første eksiterte tilstand $n = 2$, med energi oppgitt i vedlegget som

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(2L)^2}\, 2^2 = \underline{\underline{\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}}}.$$

d) Middelverdien av den kinetiske energi $T = p_x^2/2m$ er

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 \psi \, dx.$$

En delvis integrasjon (med $\psi(\pm\infty) = 0$) gir

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*}{dx}\frac{d\psi}{dx}\, dx = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \left|\frac{d\psi}{dx}\right|^2 \, dx,$$

som skulle vises.

For grunntilstanden ψ_0 er $|\psi'| = \sqrt{3/2L^3}$ for $|x| \leq L$, null ellers. Det gir

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{3}{2L^3} \cdot 2L = \underline{\underline{\frac{3\hbar^2}{2mL^2}}}.$$

Middelverdien av den potensielle energi er

$$\langle V \rangle = -\alpha \int \psi^* \delta(x) \psi \, dx = -\alpha|\psi(0)|^2 = -\alpha\frac{3}{2L} = -\frac{\hbar^2}{mL}\frac{3}{2L} = \underline{\underline{-\frac{3\hbar^2}{2mL^2}}}.$$

Har brukt verdien av α som vi fant i punkt c).

En alternativ utledning bruker at $T + V$ er lik totalenergien, og at vi for grunntilstanden fant $E = 0$ i punkt c). Det gir $\langle V \rangle = -\langle T \rangle$, samme resultat som ovenfor.