# Løysingsframlegg øving 1

## Oppgåve 1

Middelverdien er

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \sum_{x\in\Omega_X} xP(x) \\ &= 0\frac{1}{2}+1\frac{1}{2} \\ &= \underline{\underline{\frac{1}{2}}}\,. \end{aligned} \tag{0.1}$$

Tilsvarande har vi

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \sum_{x\in\Omega_X} x^2P(x) \\ &= 0^2\frac{1}{2}+1^2\frac{1}{2} \\ &= \underline{\underline{\frac{1}{2}}}\,. \end{aligned} \tag{0.2}$$

Dette gjev variansen

$$\begin{aligned}\Delta x &= \sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{2}-\frac{1}{4}} \\ &= \underline{\underline{\frac{1}{2}}}\,. \end{aligned} \tag{0.3}$$

På same måte kan vi rekne ut $\langle x^3\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle x^3\rangle &= \sum_{x\in\Omega_X} x^3P(x) \\ &= 0^3\frac{1}{2}+1^3\frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{2}\,. \end{aligned} \tag{0.4}$$

Dette gjev det tredje momentet

$$\begin{aligned}\Gamma^3 &= \langle(x-\langle x\rangle)^3\rangle \\ &= \langle x^3\rangle-3\langle x\rangle\langle x^2\rangle+2\langle x\rangle^3 \\ &= 1\frac{1}{2}-3\frac{1}{4}+2\frac{1}{8} \\ &= \underline{\underline{0}}\,. \end{aligned} \tag{0.5}$$

## Oppgåve 2

a) Normeringsintegralet $I$ er

$$\begin{aligned} I &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda|x|} dx \\ &= 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2\lambda x} dx \\ &= \frac{2A^2}{2\lambda} \,, \end{aligned} \tag{0.6}$$

der vi i andre linje har brukt at $P(x) = |\Psi(x,t)|^2$ er symmetrisk om origo. Vi må difor ha

$$A = \underline{\underline{\sqrt{\lambda}}} \,. \tag{0.7}$$

b) Skisse av $P(x) = |\Psi(x)|^2$ er vist i figur 0.1.

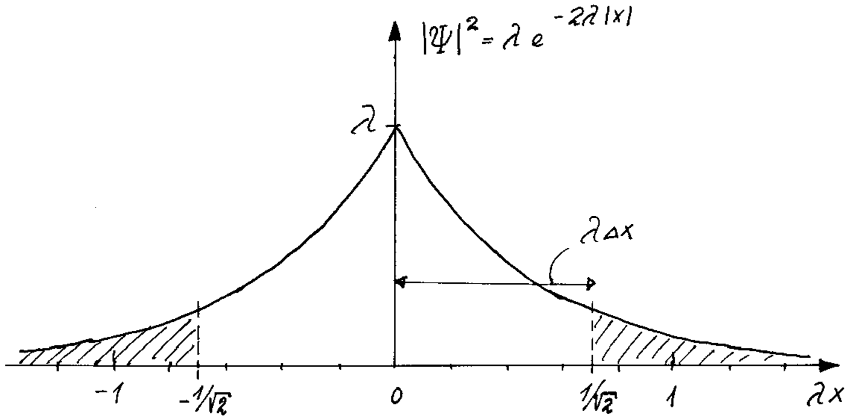



Figure 0.1: $P(x) = |\Psi(x)|^2$ som funksjon av $\lambda x$.

c) Sidan $P(x)$ er ein like funksjon vil integranden $xP(x)$ vere ein odde funksjon. Middelverdien $\langle x \rangle$ vil difor vere lik null,

$$\langle x \rangle = \underline{\underline{0}} \,. \tag{0.8}$$

Middelverdien til $x^2$ får ein på same måte:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 P(x) dx \\ &= 2\lambda \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\lambda x} dx \\ &= 2\lambda \frac{2!}{(2\lambda)^3} \\ &= \underline{\underline{\frac{1}{2\lambda^2}}} \,. \end{aligned} \tag{0.9}$$

d) Standardavviket eller usikkerheiten blir da

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\ &= \underline{\underline{\frac{1}{\lambda\sqrt{2}}}} \,. \end{aligned} \tag{0.10}$$

Konklusjonen er at usikkerheiten blir mindre desto større $\lambda$ er, altså at partikkelen er meir lokalisert desto større $\lambda$ er.

e) Sannsynligheiten for å finne partikkelen utafor intervallet $(\langle x \rangle - \Delta x, \langle x \rangle + \Delta x)$ er

$$P_{|x|>\Delta x} = 2\int_{\Delta x}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 2\lambda \int_{\Delta x}^{\infty} e^{-2\lambda x} dx = \underline{\underline{e^{-\sqrt{2}} = 0.243}} \,. \tag{0.11}$$

Merk at denne sannsynlegheiten er uavhengig av $\lambda$. Dette er illustrert i figur 0.2 **Merk:**

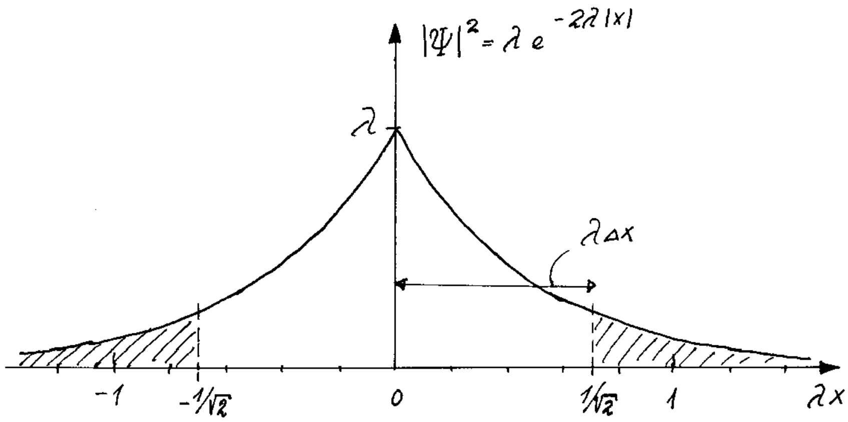



Figure 0.2: Plott av $|\Psi|^2$ med skravert område som viser sannsynlegheiten for å finne partikkelen i området $|x| > \Delta x$.

Bølgefunksjonen $\Psi(x,t)$ i denne oppgå er ei løysing av Schrödingerlikninga

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi \tag{0.12}$$

for eit deltafunksjonspotential $V(x) = \delta(x)$. Dette potensialet er singulært og resultatet er at $\psi$ får ein knekk. Dette kjem vi tilbake til.

Etter litt trening er det en fordel om en kan utvikle et visst "snekker-skjønn" når det gjelder å *anslå* både forventningsverdier og usikkerheter.

## Oppgåve 3

Vi reknar først ut dei deriverte av $\psi_0(x)$ og får

$$\frac{d\psi_0}{dx} = C_0\, e^{-\beta x^2}(-2\beta x) \quad \text{og} \quad \frac{d^2\psi_0}{dx^2} = C_0\, e^{-\beta x^2}(4\beta^2 x^2 - 2\beta) \,, \tag{0.13}$$

Ved innsetting finn vi da

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_0'' + \tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_0 &= C_0\, e^{-\beta x^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(4\beta^2x^2-2\beta)+\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\right] \\ &= \left[(\tfrac{1}{2}m\omega^2 - 2\hbar^2\beta^2/m)x^2 + (\hbar^2\beta/m)\right]\psi_0\ . \qquad (0.14)\end{aligned}$$

Det er *to* kriterie som må vere oppfylde for at $\psi_0$ skal vere ein eigenfunksjon til $\hat{H}$ i matematisk forstand:

(i) Parentesen [ ] på høgresida må vere ein konstant, og

(ii) Løysinga $\psi_0$ må ikkje divergere, det vil seie ein må kunne normere den.

Frå (i) følgjer det at $\beta$ må oppfylle

$$\beta^2 = \frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2} \qquad \Longrightarrow \qquad \beta = \pm\frac{m\omega}{2\hbar}.$$

Her ser vi at $\beta = -m\omega/2\hbar$ gjev ein funksjon $\psi_0$ som går mot uendeleg når $|x| \to \infty$. Frå (ii) følgjer det altså at berre den positive løysinga, $\underline{\underline{\beta = +\frac{m\omega}{2\hbar}}}$ gjev ei akseptabel løysing, dvs ein (normerbar) eigenfunksjon. For denne verdien av $\beta$ har vi

$$\hat{H}\psi_0 = \frac{\hbar^2}{m}\frac{m\omega}{\hbar}\psi_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega\,\psi_0 \equiv E_0\psi_0.$$

Konklusjonen er at $\psi_0(x) = C_0e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ er ein eigenfunksjon til Hamiltonoperatoren $\hat{h}$ for den harmoniske oscillatoren, med eigenverdien

$$E_0 = \underline{\underline{\tfrac{1}{2}\hbar\omega.}}$$

Sidan Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ er *energioperatoren* for denne harmoniske oscillatoren, kallar vi eigenfunksjonen ein *energieigenfunksjon*, og eigenverdien ein energieigenverdi. Vi skal seinare sjå at denne løysinga er bølgjefunksjonen for *grunntilstanden* for den harmoniske oscillatoren, det vil seie tilstanden med lågast mogleg energi.

b) Vi ser av utrekninga i a) at eigenverdilikninga ikkje kan brukast til å finne normeringskonstanten $C_0$. *Absoluttverdien* av $C_0$ kan finnast ved å rekne ut normeringsintegralet

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0(x)|^2dx = |C_0|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\beta x^2}dx = \frac{|C_0|^2}{\sqrt{2\beta}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}dy, \qquad (y = x\sqrt{2\beta}),$$

der Gauss-integralet er $\sqrt{\pi}$. [1] Vi har altså

$$|C_0|^2 = \sqrt{\frac{2\beta}{\pi}} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}.$$

[1] Gauss-integralet ovenfor er av typen

$$I_0(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha x^2}dx = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}dy = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$

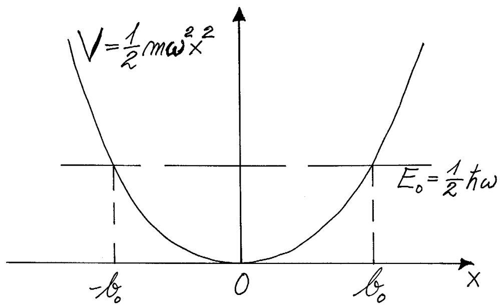
Ved å *velje fasen* til $C_0$ lik null blir $\underline{\underline{C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}}}$. Tilslutt får vi den normerte eigenfunksjonen

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar} \, . \tag{0.15}$$

NB! I normeringsintegralet er det **sannsynleghetstettheiten** (absoluttkvadratet av bølgjefunksjonen) som skal integrerast. Integralet over $\psi$ sjøl har ingen fysisk relevans.

Dei klassiske vendepunkta er dei punkta der $V = E$ (slik at den kinetiske energien og dermed hastigheten er lik null). Med $E = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ skjer dette når

$$\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega, \quad \text{dvs for} \quad x = \pm\sqrt{\hbar/m\omega} \equiv \pm b_0.$$




Avstanden $b_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ er ein naturlig lengdeskala når vi skal sjå på den harmoniske oscillatoren kvantemekanisk. Eller med andre ord, Kombinasjonen $b_0$ er den einaste ein kan lage frå dei tre konstantane $\hbar$, $m$ og $\omega$ som inngår i Schrödingerlikninga for oscillatoren. Vi merker oss at

$$|\psi_0(x)/\psi_0(0)|^2 = e^{-(x/b_0)^2}.$$

Figuren nedenfor viser hvordan denne (Gauss-fordelte) relative sannsynligheiten varierer som funksjon av $x/b_0$ [2]. Sannsynligheiten for å finne partikkelen i det *klassisk forbudte området* (der $V(x) > E$, dvs $K(x) = E - V(x) < 0$) er gjeve ved forholdet mellom det skraverte arealet og arealet under heile kurva. Dette arealet kan ein estimere til ca 20%. Ei numerisk utrekning vha Maple eller Mathematica gjev 15.73%.

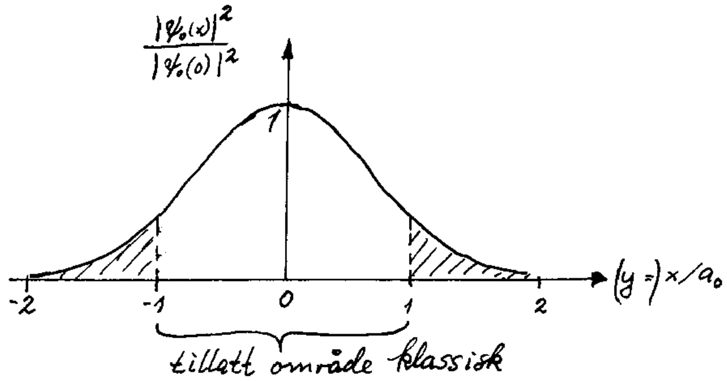
---

Merk at vi fra dette kan rekne ut ein hel klasse av Gauss-integral vha eit knep som kallast parametrisk derivasjon (sjå også Appendix B i boka):

$$I_2(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{d}{d\alpha} I_0(\alpha) = ...;$$

$$I_{2n}(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{d}{d\alpha} I_{2n-2}(\alpha) = \left(-\frac{d}{d\alpha}\right)^n I_0(\alpha).$$

[2] $a_0$ i figuren er lik $b_0$.




c) Vi gjentek utrekninga frå a) og får

$$\frac{d\psi_1}{dx} = C_1 e^{-\beta x^2}(-2\beta x^2 + 1) \quad \text{og} \quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = C_1 e^{-\beta x^2}(-6\beta x + 4\beta^2 x^3)\ . \tag{0.16}$$

Frå eigenverdilikninga $(\hat{H} - E)\psi_1 = 0$ : får vi da

$$0 = e^{-\beta x^2}\left[\left(\tfrac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2\hbar^2\beta^2}{m}\right)x^3 + \left(\frac{3\beta\hbar^2}{m} - E\right)x\right].$$

På same måte som i a) gjev dette

$$\beta = \underline{\underline{\frac{m\omega}{2\hbar}}} \quad \text{og} \quad E = \underline{\underline{\tfrac{3}{2}\hbar\omega}}\ . \tag{0.17}$$

Den resulterande eigenfunksjonen, $\psi_1(x) = C_1 x \exp(-m\omega x^2/2\hbar)$, er bølgjefunksjonen for første eksiterte tilstand for den harmoniske oscillatoren.

Merk at $\psi_1$ er antisymmetrisk med hensyn på origo, medans $\psi_0$ is symmetrisk. Seinare skal vi sjå at alle eigenfunksjonane til $\hat{H}$ for den harmoniske oscillatoren er enten symmetriske eller antisymmetriske. Dette er ein konsekvens av symmetrien til potensialet $V(x)$.

## Oppgåve 4

a) Vi merkar oss først at $\psi(\vec{r})$ ikkje er avhengig av vinklane $\theta$ og $\phi$, berre av radien $r$. Dei deriverte av $\psi$ med omsyn på $r$ er

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = Ce^{-r/a_0}\left(-\frac{1}{a_0}\right) \qquad \text{og} \qquad \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = Ce^{-r/a_0}\left(\frac{1}{a_0^2}\right)\ . \tag{0.18}$$

Dette gjev

$$\hat{H}\psi = Ce^{-r/a_0}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{ra_0}\right) - \frac{\hbar^2}{m_e a_0\, r}\right] = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\,\psi\ . \tag{0.19}$$

$\psi$ er altså ein eigenfunksjon til Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ for hydrogenatomet med eigenverdien

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)^2 = -\tfrac{1}{2}m_e c^2\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\right)^2 = \underline{\underline{-\tfrac{1}{2}\alpha^2\, m_e c^2}}\ . \tag{0.20}$$

Den numeriske verdien av desse to uttrykka for energieigenverdien er $-13.6$ eV, som er identisk med den eksperimentelle energien til hydrogenatomet i grunntilstanden.

b) Innsetting av $\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$ i Schrödingerlikninga $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$ gjev

$$i\hbar\frac{-iE}{\hbar}\psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar} = \widehat{H}\psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar} = E\,\psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}\ , \tag{0.21}$$

Då venstresida er lik høgresida, ser vi at $\Psi(\vec{r},t)$ oppfyller Schrödingerlikninga. Merk at sannsynleghetstettheiten

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2\,|e^{-iEt/\hbar}|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$$

er uavhengig av tida. Dette er karakteristisk for alle såkalla stasjonære løysingar av Schrödingerlikninga. Desse er på forma $\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$.

c) Normeringsintegralet blir

$$\begin{aligned}\int |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3r &= |C|^2 \int e^{-2r/a_0}\,d^3r \\ &= |C|^2 4\pi \int_0^\infty e^{-2r/a_0}\,r^2 dr \\ &= |C|^2 4\pi\,\frac{2}{(2/a_0)^3} \stackrel{!}{=} 1\ .\end{aligned} \tag{0.22}$$

Dersom vi veljer fasen til $C$ lik null får vi

$$C = \underline{\underline{(\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}}}}\,. \tag{0.23}$$

Den normerte bølgjefunksjonen for hydrogenatomet i grunntilstanden blir såleis

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}e^{-iEt/\hbar}\ . \tag{0.24}$$