

Oppgave 1 Partikler i tre-dimensjonal boks

Vi ser på en partikkel med masse m innestengt i en tre-dimensjonal boks (også kalt uendelig tre-dimensjonal brønn) med sider av lengde (L_1, L_2, L_3) . Potensialet er null inne i boksen og uendelig utenfor.

Ved å bruke separasjon av variable i kartesiske koordinater finner man at egentilstandene til Hamiltonoperatoren er et produkt av tre egentilstander for en partikkel i en en-dimensjonal boks:

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_1 L_2 L_3}} \sin\left(\frac{\pi n_1}{L_1} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_2}{L_2} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_3}{L_3} z\right), \quad (1)$$

hvor $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$, med de tilhørende energiene

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[\left(\frac{n_1}{L_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{L_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{L_3}\right)^2 \right]. \quad (2)$$

- a) Finn partikkelens energi E_0 i grunntilstanden. Anta at dette dreier seg om et elektron med masse $m_e = 0.511 \text{ MeV}/c^2$, og at sidekantene på boksen er $L_1 = L_2 = L$ og $L_3 = L/2$, hvor $L = 2.0 \text{ nm}$. [2 poeng]

Svar: Energien i grunntilstanden (den laveste energien) er gitt ved $n_1 = n_2 = n_3 = 1$:

$$\begin{aligned} E_0 = E_{111} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e} \left[\left(\frac{1}{L}\right)^2 + \left(\frac{1}{L}\right)^2 + \left(\frac{1}{L/2}\right)^2 \right] \\ &= \frac{6\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} \\ &= \frac{3\hbar^2 c^2 \pi^2}{m_e c^2 L^2} \\ &= \frac{3 \cdot (197.3 \text{ nm eV})^2 \cdot \pi^2}{0.511 \text{ MeV} \cdot (2.0 \text{ nm})^2} \\ &= 0.56 \text{ eV}. \end{aligned} \quad (3)$$

- b) Finn partikkelens energi i det første eksiterte nivået uttrykt ved E_0 . Angi eksplisitt for hvilke kombinasjoner av kvantetallene (n_1, n_2, n_3) denne energien oppstår. Hva menes med at et energinivå er *degenerert* og hva er *degenerasjonsgraden* til det første eksiterte nivået? [4 poeng]

Svar: Det første eksiterte nivået er gitt ved $(2, 1, 1)$ og $(1, 2, 1)$. Disse kombinasjonene har samme energi fordi boksen har lik utstrekning i de tilhørende retningene, og lavere enn energien for $(1, 1, 2)$ fordi boksen har mindre utstrekning (høyere energi) i z -retningen enn de andre retningene. Energien til det første eksiterte nivået er da gitt ved

$$\begin{aligned} E_{211} = E_{121} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e} \left[\left(\frac{2}{L}\right)^2 + \left(\frac{1}{L}\right)^2 + \left(\frac{1}{L/2}\right)^2 \right] \\ &= \frac{9\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} = \frac{3}{2} E_0 \end{aligned} \quad (4)$$

Med degenerert energinivå mener vi at det finnes flere forskjellige tilstander som har samme energi. Da det finnes to tilstander med ulik (n_1, n_2, n_3) som gir første eksiterte energinivå for dette potensialet er degenerasjonsgraden to. Dersom vi også inkluderer spinn i denne betraktningen blir degenerasjonsgraden fire for spinn $-1/2$ partikler som elektroner. Begge svar gir full poenguttelling.

- c) Forklar kort hva Paulis eksklusjonsprinsipp sier og finn, uttrykt ved E_0 , den laveste energien som et system av seks elektroner kan ha i boksen vi har beskrevet over. Vi antar her at vi kan se bort fra Coulombvekselvirkninger mellom elektronene. [4 poeng]

Svar: Paulis eksklusjonsprinsipp sier at to identiske fermioner ikke kan befinne seg i samme tilstand. Mere presist formuleres det slik: den totale bølgefunksjonen for to (eller flere) identiske fermioner er antisymmetrisk under ombytte av to av partiklene:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (5)$$

Når vi putter seks elektroner i boksen vet vi at alle disse må ha forskjellige kvantetall på grunn av Paulis eksklusjonsprinsipp. Imidlertid så gir spin oss to alternativer for hvert elektron gjennom kvantetallet $m_s = \pm \frac{1}{2}$, slik at to og to av elektronene kan ha samme energikvantetall (n_1, n_2, n_3) . Den laveste totalenergien får vi dersom vi velger for de tre parene $(1, 1, 1)$, $(2, 1, 1)$ og $(1, 2, 1)$. Dette gir en totalenergi

$$E = 2E_{111} + 2E_{121} + 2E_{211} = 2E_0 + 2 \cdot 2 \cdot \frac{3}{2}E_0 = 8E_0. \quad (6)$$

- d) Vi antar nå at partiklene er identiske partikler med samme masse som elektronet, men at de er bosoner. Hva er da den laveste energien? Hva blir den laveste energien dersom vi antar at partiklene er fermioner med spinn $s = 3/2$? [3 poeng]

Svar: Med bosoner kan vi ha alle seks partiklene (boson-elektronene) i samme tilstand, den med lavest energi. Totalenergien blir da:

$$E = 6E_{111} = 6E_0. \quad (7)$$

Dersom vi ser på partikler med $s = 3/2$ så har vi fire muligheter for kvantetallet for z -komponenten til spinnet: $m_s = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. Dette betyr at fire partikler kan ha samme energikvantetall. Den laveste totalenergien får vi dersom vi plasserer fire partikler i tilstanden $(1, 1, 1)$ (med forskjellig spinn) og to i $(2, 1, 1)$ eller $(1, 2, 1)$. Dette gir en totalenergi på

$$E = 4E_{111} + 2E_{121} = 4E_0 + 2 \cdot \frac{3}{2}E_0 = 7E_0. \quad (8)$$

Oppgave 2 Harmonisk oscillator

En partikkel med masse m beveger seg i et endimensjonalt potensial $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ og prepareres ved tiden $t = 0$ i tilstanden

$$\Psi(x, 0) = f(x)e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}, \quad (9)$$

hvor $f(x)$ er symmetrisk med hensyn på $x = 0$ (origo).

- a) Hva slags betingelse kan du sette på $f(x)$ på grunn av normeringen av bølgefunksjonen? [2 poeng]

Svar: Normering av bølgefunksjonen krever at

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)^* e^{-\frac{i}{\hbar}p_0x} f(x) e^{\frac{i}{\hbar}p_0x} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = 1. \end{aligned} \quad (10)$$

$f(x)$ må altså være såkalt kvadratisk integrerbar (det holder å oppgi betingelsen på integralet).

- b) Vis at forventningsverdien for posisjonen x ved tiden $t = 0$ er $\langle x \rangle_0 = 0$. [3 poeng]

Svar: Forventningsverdien til posisjonen ved tiden $t = 0$ er gitt ved

$$\langle x \rangle_0 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, 0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x |f(x)|^2 dx. \quad (11)$$

Da $f(x)$ er symmetrisk er også $|f(x)|^2$ symmetrisk, mens $x|f(x)|^2$ er anti-symmetrisk fordi x er anti-symmetrisk. Dette betyr at integralet automatisk er null.

- c) Finn forventningsverdien for bevegelsesmengden ved $t = 0$, $\langle p \rangle_0$. *Hint:* Den deriverte av en symmetrisk funksjon har også en bestemt symmetriegenskap. [4 poeng]

Svar: Forventningsverdien til bevegelsesmengden er

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_0 &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0)^* \hat{p} \Psi(x, 0) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0)^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, 0) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)^* e^{-\frac{i}{\hbar}p_0x} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x) e^{\frac{i}{\hbar}p_0x} dx \\ &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} f(x)^* e^{-\frac{i}{\hbar}p_0x} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x} + f(x) \frac{i}{\hbar} p_0 \right) e^{\frac{i}{\hbar}p_0x} dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \left(f(x)^* \frac{\partial f(x)}{\partial x} + \frac{i}{\hbar} p_0 f(x)^* f(x) \right) dx \\
&= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} f(x)^* \frac{\partial f(x)}{\partial x} dx + p_0 \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx \\
&= p_0,
\end{aligned} \tag{12}$$

hvor vi har brukt at $f(x)^* \frac{\partial f(x)}{\partial x}$ er anti-symmetrisk.

Vi spesifiserer nå at funksjonen $f(x)$ er gitt ved

$$f(x) = \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}, \tag{13}$$

altså grunntilstanden til harmonisk oscillator-potensialet. En stor porasjon tolmodig algebra viser da at

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, 0) = \left(\frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} - \frac{2im\omega p_0 x}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} - \frac{p_0^2}{\hbar^2} \right) \Psi(x, 0), \tag{14}$$

som du kan anta i resten av oppgaven.

d) Er begynnelsestilstanden $\Psi(x, 0)$ en energiegentilstand? [3 poeng]

Svar: Nei. For at det skal være tilfelle må $\hat{H}\Psi(x, 0) = E\Psi(x, 0)$, hvor \hat{H} er Hamiltonoperatoren og E en konstant (energien). Vi kan skrive Hamiltonoperatoren for harmonisk oscillator som

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \tag{15}$$

som fra (14) gir

$$\begin{aligned}
\hat{H}\Psi(x, 0) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} - \frac{2im\omega p_0 x}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} - \frac{p_0^2}{\hbar^2} \right) \Psi(x, 0) \\
&\quad + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \Psi(x, 0) \\
&= \left(i\omega p_0 x + \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{p_0^2}{2m} \right) \Psi(x, 0).
\end{aligned} \tag{16}$$

Dette er ikke en egenverdiligning da vi har en avhengighet av posisjonen x i det som skulle være egenverdien.

e) Vis at forventningsverdien for energien ved $t = 0$ er $\langle E \rangle_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{p_0^2}{2m}$. [4 poeng]

Svar: Vi har at

$$\hat{H}\Psi(x, 0) = \left(i\omega p_0 x + \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{p_0^2}{2m} \right) \Psi(x, 0). \tag{17}$$

Satt inn i definisjonen for $\langle E \rangle_0$ gir dette

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle_0 &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0)^* \hat{H} \Psi(x, 0) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)^* e^{-\frac{i}{\hbar} p_0 x} \left(i\omega x p_0 + \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{p_0^2}{2m} \right) f(x) e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 \left(i\omega x p_0 + \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{p_0^2}{2m} \right) dx \\
 &= i\omega p_0 \int_{-\infty}^{\infty} x |f(x)|^2 dx + \left(\frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{p_0^2}{2m} \right) \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx \\
 &= \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{p_0^2}{2m}, \tag{18}
 \end{aligned}$$

hvor vi har brukt normeringen og symmetriegenskapene til $f(x)$.

- f) Vis ved hjelp av den tidsavhengige Schrödingerligningen at forventningsverdien for energien er tidsuavhengig, altså at $\frac{d}{dt} \langle E \rangle = 0$, slik at svaret i forrige oppgave gjelder for alle tider. [3 poeng]

Svar: Vi begynner med en omskrivning av Schrödingerligningen

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi(x, t), \tag{19}$$

som har en komplekskonjugert versjon

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)^* = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi(x, t)^*. \tag{20}$$

Fordi \hat{H} er uavhengig av tiden så er $\frac{\partial}{\partial t} \hat{H} = 0$ og vi får

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle E \rangle &\equiv \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t)^* \hat{H} \Psi(x, t) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\frac{d}{dt} \Psi(x, t)^* \right) \hat{H} \Psi(x, t) + \Psi(x, t)^* \hat{H} \frac{d}{dt} \Psi(x, t) \right] dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi(x, t)^* \hat{H} \Psi(x, t) - \frac{i}{\hbar} \Psi(x, t)^* \hat{H} \hat{H} \Psi(x, t) \right] dx \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\hat{H} \Psi(x, t)^* \hat{H} \Psi(x, t) - \Psi(x, t)^* \hat{H} \hat{H} \Psi(x, t) \right] dx \\
 &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\hat{H} \Psi(x, t)^* \hat{H} \Psi(x, t) - \hat{H} \Psi(x, t)^* \hat{H} \Psi(x, t) \right] dx \\
 &= 0. \tag{21}
 \end{aligned}$$

I den nest siste likheten har vi brukt at \hat{H} er en Hermitisk operator. Dette illustreres kanskje klarere om vi skriver integralene med Dirac-notasjon:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle E \rangle &= \frac{i}{\hbar} \left[\langle \hat{H}\Psi(x,t) | \hat{H}\Psi(x,t) \rangle - \langle \Psi(x,t) | \hat{H}\hat{H}\Psi(x,t) \rangle \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[\langle \hat{H}\Psi(x,t) | \hat{H}\Psi(x,t) \rangle - \langle \hat{H}\Psi(x,t) | \hat{H}\Psi(x,t) \rangle \right] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Det finnes alternative utledninger som også vil gi full uttelling. Så lenge vi har en tidsuavhengig Hamiltonfunksjon vil forventningsverdien for energien være tidsuavhengig (vi har konservering av energi). Det er imidlertid viktig å påpeke at bølgefunksjonen ikke er separabel, og at dette ikke kan brukes for å vise at $\frac{d}{dt}\langle E \rangle = 0$.

- g) Finn sannsynligheten for at du i en måling av energien til $\Psi(x,t)$ måler akkurat energien for grunntilstanden til den harmoniske oscillator. *Hint:* Du kan få bruk for integralet

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a} \quad \text{hvis } \mathcal{R}e(a) > 0. \quad (23)$$

[4 poeng]

Svar: Grunntilstanden har vi her kalt $f(x)$. Sannsynligheten for å måle den tilhørende energien E_0 er gitt ved $P_0 = |c_0|^2$ hvor c_0 er den første koeffisienten i ekspansjonen

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (24)$$

hvor $\psi_n(x)$ er alle de stasjonære tilstandene til den harmoniske oscillator. Koeffisientene c_n kan vi finne ved Fouriers triks

$$c_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x,0) dx, \quad (25)$$

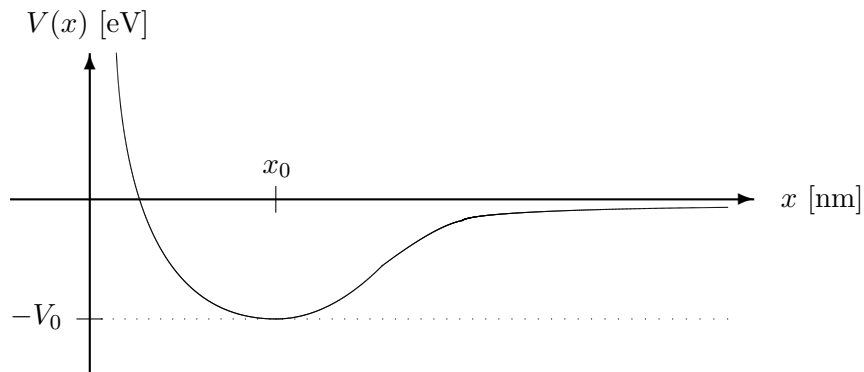
som gir

$$\begin{aligned} c_0 &= \langle \psi_0 | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \Psi(x,0) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2 + \frac{i}{\hbar}p_0x} dx \\
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} e^{-\frac{p_0^2}{\hbar^2} \frac{\hbar}{4m\omega}} \\
&= e^{-\frac{p_0^2}{4m\hbar\omega}}.
\end{aligned} \tag{26}$$

Sannsynligheten er da $P_0 = e^{-\frac{p_0^2}{2m\hbar\omega}}$.

- h) Et diatomisk molekyl har et potensiale sett fra det ene atomets side som vist i figur 1. Når, og hvorfor, er en harmonisk oscillator en god tilnærming til dette potensialet? [2 poeng]



Figur 1: Skisse av potensiale for et diatomisk molekyl.

Svar: Nær potensialets minimum ved $x = x_0$ så kan det skrives som en Taylorutvikling

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \tag{27}$$

I minimumspunktet er $V'(x_0) = 0$, og dersom vi kan ignorere ledd av høyere orden, altså når $x - x_0$ er liten eller $V'''(x_0)$ og høyere deriverte er små (altså så lenge formen er som en parabel om x_0), så kan vi skrive dette som et reskalert potensial:

$$V_{eff}(\rho) = V(x) - V(x_0) \simeq \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 = \frac{1}{2}k\rho^2 \tag{28}$$

hvor $\rho = x - x_0$ og hvor $k = V''(x_0)$ er den effektive fjærkonstanten i et harmonisk oscillatorpotensiale.

- i) Anta at det ene atomet starter i tilstanden $\Psi(\rho, 0)$ gitt ved (9) og (13), hvor $\rho = x - x_0$. Hva kan du si dersom $p_0 \gg \sqrt{2mV_0}$? [2 poeng]

Svar: For å være i en bundet tilstand må totalenergien til atomet være negativ. $p_0 \gg \sqrt{2mV_0}$ gir $p_0^2/2m - V_0 \gg 0$, som betyr at forventningsverdien til energien til dette atomet er mye større enn 0. Dette ser vi fra resultatet for forventningsverdien til energien for et harmonisk oscillatorpotensiale (18), når vi bruker det effektive potensialet (28), slik at

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{p_0^2}{2m} - V_0. \quad (29)$$

Dette betyr at det etter en tid er stor sannsynlighet for å finne atomet langt vekk fra sin partner i molekylet (bindingen til molekylet bryter sammen), og vår beskrivelse av molekylet som en bundet tilstand med et harmonisk oscillatorpotensiale bryter sammen.