Oppgave 1 Hydrogenatom for kjemikere

I denne oppgaven skal vi se på hydrogenatomet. Vrien i år er at vi skal skrive løsningen av Schrødingerligningen på en måte som kjemikere liker bedre. Vi ser bort fra spinn i denne oppgaven.

Løsningen av den tidsuavhengige Schrødingerligningen for hydrogenatomet er som kjent

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi), \tag{1}$$

hvor $R_{nl}(r)$ er løsningene av den tilhørende radialligningen og $Y_l^m(\theta,\phi)$ er de sfæriske harmoniske. Her bruker vi sfæriske koordinater

$$x = r\sin\theta\cos\phi, \tag{2}$$
$$y = r\sin\theta\sin\phi, \tag{3}$$
$$z = r\cos\theta. \tag{4}$$

Vi gir de eksplisitte uttrykkene for de enkleste av disse funksjonene i Tabell 1.

$R_{nl}(r)$	$Y_l^m(\theta,\phi)$
$R_{10}(r) = Ae^{-r/a}$	$Y_0^0(\theta,\phi) = B$
$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{8}}A\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-r/2a}$	$Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{3}B\cos\theta$
$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}}A\frac{r}{2a}e^{-r/2a}$	$Y_1^{\pm1}(\theta,\phi) = \mp\sqrt{\frac{3}{2}}B\sin\theta e^{\pm i\phi}$

Tabell 1: Oversikt over de enkleste radialfunksjonene for hydrogenatomet, R_{nl}, samt de sfæriske harmoniske, Y_l^m. A og B er to normeringskonstanter og a er Bohrradien.

Vi begynner med litt generelle spørsmål.

a) Hva slags verdier kan kvantetallene n, l og m ta for hydrogenatomet? [3 poeng]

Svar: Kvantetallene kan ta følgende verdier:

$$n = 1,2,3,\ldots \tag{5}$$
$$l = 0,1,\ldots,n-1 \tag{6}$$
$$m = -l,-l+1,\ldots,l-1,l. \tag{7}$$

b) Gi normeringsbetingelsen for bølgeunksjonen ψ_{nlm}. Vi antar separat normering av R og Y. Vis at normeringsbetingelsen for R er gitt ved

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2\,dr = 1. \tag{8}$$

[4 poeng]

Svar: Normeringsbetingelsen for ψ_{nlm} er:

$$\int |\psi_{nlm}(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1, \tag{9}$$

eller i sfæriske koordinater

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} |\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)|^2 r^2 \sin\theta \, drd\theta d\phi = 1. \tag{10}$$

Vi setter inn løsningen $\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ og får

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} |\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)|^2 r^2 \sin\theta \, drd\theta d\phi \\
= & \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} |R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)|^2 r^2 \sin\theta \, drd\theta d\phi \\
= & \int_0^{\infty} |R_{nl}(r)|^2 r^2 \, dr \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 \sin\theta \, d\theta d\phi.
\end{aligned} \tag{11}$$

Dersom Y er separat normert er

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 \sin\theta \, d\theta d\phi = 1, \tag{12}$$

slik at

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 \, dr = 1. \tag{13}$$

c) Hva er enheten til $R(r)$? Gi en begrunnelse. [4 poeng]

Svar: Fordi den infinitesimale lengden dr i normeringsintegralet for R har enhet lengde (m) må selve integranden ha enhet m^{-1}. r^2 har enhet m^2, slik at $R^2(r)$ må ha enhet m^{-3}. Dette betyr at $R(r)$ har enhet $m^{-3/2}$.

d) Finn normeringskonstantene A og B. *Hint:* Du kan få bruk for følgende integral

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-\lambda x} \, dx = n! \, \lambda^{-(n+1)}. \tag{14}$$

[4 poeng]

Svar: Vi bruker normeringsintegralene for å finne A og B.

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} |R_{10}(r)|^2 r^2 \, dr &= \int_0^{\infty} |Ae^{-r/a}|^2 r^2 \, dr \\
&= |A|^2 \int_0^{\infty} e^{-2r/a} r^2 \, dr \\
&= |A|^2 \cdot 2! \left(\frac{2}{a}\right)^{-(2+1)} \\
&= |A|^2 \frac{a^3}{4},
\end{aligned} \tag{15}$$

som gir $A = 2/\sqrt{a^3}$. Som en kontroll så kan vi se at dette stemmer med svaret i forrige oppgave da Bohrradiusen har dimensjon lengde.

Vi finner B på samme måte:

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y_0^0(\theta,\phi)|^2 \sin\theta \, d\theta d\phi &= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |B|^2 \sin\theta \, d\theta d\phi \\
&= 2\pi|B|^2 \int_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \\
&= 2\pi|B|^2[-\cos\theta]_0^{\pi} \\
&= 4\pi|B|^2. \qquad (16)
\end{aligned}$$

Dette gir $B = 1/\sqrt{4\pi}$.

e) Forklar hva vi mener med degenerasjon. Bestem degenerasjonsgraden til hydrogen som funksjon av n. *Hint:* Fra kombinatorikken har vi at (se for eksempel Rottmann)

$$\sum_{l=1}^{n} l = \frac{n(n+1)}{2}. \qquad (17)$$

[6 poeng]

Svar: Degenerasjon opptrer når vi har mer enn en tilstand, med forskjellig kvantetall, som har samme energi. Degenerasjonsgraden d er antall slike tilstander. For hydrogenatomet er energien bestemt av hovedkvantetallet n, vi må altså telle alle tilstander som har samme n. For hver n har vi n forskjellige verdier for l fra 0 til $n-1$. For hver av disse har vi $2l+1$ valg for m, vi må alstå summere $2l+1$ for alle mulige l:

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2\sum_{l=0}^{n-1} l + \sum_{l=0}^{n-1} 1 = 2\frac{(n-1)n}{2} + n = n^2, \qquad (18)$$

hvor vi har brukt hintet i oppgaven og at $l = 0$ ikke bidrar til den første summen.

Vi definerer så en ny type funksjon $X_{lm}(\theta,\phi)$ som er lineærkombinasjoner av de sfæriske harmoniske:

$$X_{lm} = \begin{cases} \frac{i}{\sqrt{2}}[Y_l^m - (-1)^m Y_l^{-m}] & \text{hvis } m < 0 \\ Y_l^0 & \text{hvis } m = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[Y_l^{-m} + (-1)^m Y_l^m] & \text{hvis } m > 0 \end{cases}. \qquad (19)$$

f) Vis at

$$X_{11}(\theta,\phi) = \sqrt{3}B\sin\theta\cos\phi \quad \text{og} \quad X_{1,-1}(\theta,\phi) = \sqrt{3}B\sin\theta\sin\phi. \tag{20}$$

[4 poeng]

Svar: Vi bruker at $e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi$.

$$\begin{aligned}
X_{11} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[Y_1^{-1} - Y_1^1] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{3}{2}}B\sin\theta e^{-i\phi} - \sqrt{\frac{3}{2}}B\sin\theta e^{i\phi}\right] \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{3}B\sin\theta\left[e^{-i\phi} + e^{i\phi}\right] \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{3}B\sin\theta[\cos\phi - i\sin\phi + \cos\phi + i\sin\phi] \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{3}B\sin\theta\cdot 2\cos\phi \\
&= \sqrt{3}B\sin\theta\cos\phi. \qquad (21)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
X_{1,-1} &= \frac{i}{\sqrt{2}}[Y_1^{-1} - (-1)^{-1}Y_1^1] \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}[Y_1^{-1} + Y_1^1] \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{3}{2}}B\sin\theta e^{-i\phi} - \sqrt{\frac{3}{2}}B\sin\theta e^{i\phi}\right] \\
&= \frac{i}{2}\sqrt{3}B\sin\theta\left[e^{-i\phi} - e^{i\phi}\right] \\
&= \frac{i}{2}\sqrt{3}B\sin\theta[\cos\phi - i\sin\phi - \cos\phi - i\sin\phi] \\
&= \frac{i}{2}\sqrt{3}B\sin\theta[-2i\sin\phi] \\
&= \sqrt{3}B\sin\theta\sin\phi. \qquad (22)
\end{aligned}$$

g) Forklar hvorfor $R_{21}X_{11}$, $R_{21}X_{10}$ og $R_{21}X_{1,-1}$ er egentilstander til Hamiltonoperatoren til hydrogenatomet. [3 poeng]

Svar: Fordi alle disse tilstandende kan skrives som en sum av tilstander av typen ψ_{nlm} med samme egenverdi for energi. For eksempel er

$$R_{21}X_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}R_{21}[Y_1^{-1} - Y_1^1] = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{21,-1} - \psi_{211}), \tag{23}$$

og $\psi_{21,-1}$ og ψ_{211} er egentilstander med energien E_2 (de er løsninger av TUSL), slik at summene av disse også må være en egentilstand med egenverdi E_2.

h) Hva slags verdier for (kvadratet av) angulærmomentet, L^2, kan du få dersom du måler et hydrogenatom i tilstanden $R_{21}X_{11}$? [3 poeng]

Svar: Du kan bare få egenverdier for $\hat{L}^2$ dersom du måler L^2. Siden $\hat{L}^2\psi_{nlm} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm}$ er egenverdiene til $R_{21}X_{11}$ gitt som

$$\hat{L}^2 R_{21}X_{11} = \hat{L}^2\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{21,-1} - \psi_{211}) = \hbar^2 \cdot 1(1+1)R_{21}X_{11} = 2\hbar^2 R_{21}X_{11}. \tag{24}$$

Altså vil du alltid få $2\hbar^2$ dersom du måler L^2 for et hydrogenatom i tilstanden $R_{21}X_{11}$. Det er selvfølgelig ikke nødvendig å regne her, bare å konkludere at begge de to egentilstandene som $R_{21}X_{11}$ består av har samme egenverdi, $2\hbar^2$, for $\hat{L}^2$.

i) Er $R_{21}X_{11}$ en egentilstand til $\hat{L}_z$? Hva med $\hat{L}_x$? Begrunn svaret. [4 poeng]

Svar: Nei, $R_{21}X_{11}$ er en lineærkombinasjon av to tilstander som har forskjellig egenverdi for $\hat{L}_z$ og kan derfor ikke være en egentilstand til $\hat{L}_z$:

$$\hat{L}_z R_{21}X_{11} = \hat{L}_z\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{21,-1} - \psi_{211}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\hbar\psi_{21,-1} - \hbar\psi_{211}) \neq kR_{21}X_{11}. \tag{25}$$

Siden

$$X_{11}(\theta,\phi) = \sqrt{3}B\sin\theta\cos\phi = \sqrt{3}B\frac{x}{r} \tag{26}$$

og

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar y\frac{\partial}{\partial z} + i\hbar z\frac{\partial}{\partial y} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \tag{27}$$

er

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x R_{21}X_{11} &= \hat{L}_x\frac{1}{\sqrt{24}}A\frac{r}{2a}e^{-r/2a}\sqrt{3}B\frac{x}{r} \\
&= \hat{L}_x\frac{AB}{\sqrt{24}a}e^{-r/2a}x \\
&= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\frac{AB}{\sqrt{24}a}e^{-r/2a}x \\
&= -i\hbar\left(y\frac{-2z}{2ar} - z\frac{-2y}{2ar}\right)\frac{AB}{\sqrt{24}a}e^{-r/2a}x \\
&= i\hbar\left(y\frac{z}{ar} - z\frac{y}{ar}\right)\frac{AB}{\sqrt{24}a}e^{-r/2a}x \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{28}$$

Altså er $R_{21}X_{11}$ en egentilstand til $\hat{L}_x$ med egenverdi 0.

j) Hva er sannsynligheten for at du måler verdien $-\hbar$ for z-komponenten til angulærmomentet til et hydrogenatom som er preparert i tilstanden $\Psi(\vec{r}, 0) = R_{21}(r)X_{11}(\theta, \phi)$? [2 poeng]

Svar: Fordi $R_{21}X_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{21,-1} - \psi_{21,-1})$ og $\psi_{21,-1}$ har egenverdien $-\hbar$ for $\hat{L}_z$ er sannsynligheten gitt ved absoluttverdikvadratet av koeffisienten til $\psi_{21,-1}$, $c_{21,-1} = -1/\sqrt{2}$. Altså er sannsynligheten $|c_{21,-1}|^2 = 1/2$.

k) De sfæriske harmoniske kan skrives som

$$Y_l^m(\theta, \phi) = N_l^m P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}, \tag{29}$$

hvor N_l^m er normeringskonstanter, og hvor $P_l^m(x)$ er de assosierte Legendrepolynomene som er reelle funksjoner av x. Vi har også at $N_l^m = N_l^{-m}$ og $P_l^m = (-1)^m P_l^{-m}$. Bruk dette til å vise at dersom man skriver løsningene for hydrogenatomet på formen $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)X_{lm}(\theta, \phi)$, så er bølgefunksjonen alltid en reell funksjon. [5 poeng]

Svar: Fordi radialdelen av bølgenfunksjonen til hydrogenatomet alltid kan skrives som en reell funksjon, fordi normeringskonstanten N_l^m alltid kan velges reell, og fordi de assosierte Legendrepolynomene er relle funksjoner så stammer den eneste mulige imaginære komponenten i $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)X_{lm}(\theta, \phi)$ fra $e^{im\phi}$. Imidlertid er alltid $X_l^0 = Y_l^0$ reell siden $m = 0$, og for $m < 0$ er

$$\begin{aligned}
X_l^m &= \frac{i}{\sqrt{2}}[Y_l^m - (-1)^m Y_l^{-m}] \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}[N_l^m P_l^m e^{im\phi} - (-1)^m N_l^{-m} P_l^{-m} e^{-im\phi}] \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}[N_l^m P_l^m e^{im\phi} - (-1)^m N_l^m (-1)^m P_l^m e^{-im\phi}] \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}} N_l^m P_l^m [\cos(m\phi) + i\sin(m\phi) - \cos(m\phi) + i\sin(m\phi)] \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}} N_l^m P_l^m 2i\sin(m\phi) \\
&= -\sqrt{2} N_l^m P_l^m \sin(m\phi),
\end{aligned} \tag{30}$$

som er en reell funksjon. For $m > 0$ er

$$\begin{aligned}
X_l^m &= \frac{1}{\sqrt{2}}[Y_l^{-m} + (-1)^m Y_l^m] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}[N_l^{-m} P_l^{-m} e^{-im\phi} + (-1)^m N_l^m P_l^m e^{im\phi}] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}[N_l^m (-1)^m P_l^m e^{im\phi} + (-1)^m N_l^m P_l^m e^{im\phi}] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(-1)^m N_l^m P_l^m [\cos(m\phi) - i\sin(m\phi) + \cos(m\phi) + i\sin(m\phi)] \\
&= \sqrt{2}(-1)^m N_l^m P_l^m \cos(m\phi). \qquad (31)
\end{aligned}$$

Oppgave 2 Opprullet dimensjon

I denne oppgaven skal vi se på kvantemekanikk i to romdimensjoner, men hvor en av de to dimensjonene er en sluttet sirkel med omkrets L. Vi bruker koordinatene (x, u) hvor $x \in \mathbb{R}$ og $u \in [0, L]$. Vi vil i denne oppgaven bruke et vanlig uendelig brønn potensial

$$V(x,u) = \begin{cases} 0 & \text{dersom } 0 < x < a \\ \infty & \text{ellers} \end{cases} . \qquad (32)$$

a) Forklar hvorfor Schrødingerligningen i to dimensjoner da skrives som

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial u^2}\right)\Psi(x,u,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,u,t). \qquad (33)$$

når $0 < x < a$. [3 poeng]

Svar: (Den tidsavhengige) Schrødingerligningen er:

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi \qquad (34)$$

hvor $\hat{H}$ er den tilhørende Hamiltonoperatoren. I to dimensjoner, med koordinater (x, u), er Hamiltonoperatoren

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x,u) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial u^2} + V(x,u), \qquad (35)$$

slik at med det oppgitte potensialet, som har $V(x,u) = 0$ når $0 < x < a$, er Schrødingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial u^2}\right)\Psi(x,u,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,u,t). \qquad (36)$$

b) Hva slags grensebetingelse må vi bruke for bølgefunksjonen i u-retningen? [2 poeng]

Svar: I u-retningen må vi kreve kontinuitet for bølgefunksjonen og den deriverte. Spesielt må vi ha $\psi(x,0) = \psi(x,L)$.

Vi antar nå separasjon av variable, altså at løsningene $\psi(x,u)$ av den tidsuavhengige Schrødingerligningen kan skrives som produktet $\psi(x,u) = X(x)U(u)$.

c) Vis at de følgende uttrykkene for funksjonene X og U gir oss løsninger av den tidsuavhengige Schrødingerligningen for $0 < x < a$:

$$X(x) = A\sin(k_x x) + B\cos(k_x x) \quad \text{og} \quad U(u) = Ce^{ik_u u}. \tag{37}$$

[4 poeng]

Svar: Vi viser ved innsetting. De andrederiverte av den foreslåtte løsningen er

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,u) &= \frac{\partial^2}{\partial x^2}X(x)U(u) \\
&= U(u)\frac{d^2}{dx^2}(A\sin(k_x x) + B\cos(k_x x)) \\
&= U(u)(-Ak_x^2\sin(k_x x) - Bk_x^2\cos(k_x x)) \\
&= -k_x^2 X(x)U(u) = -k_x^2\psi(x,u),
\end{aligned} \tag{38}$$

og

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial u^2}\psi(x,u) &= \frac{\partial^2}{\partial u^2}X(x)U(u) \\
&= X(x)\frac{d^2}{du^2}Ce^{ik_u u} \\
&= -k_u^2 X(x)U(u) = -k_u^2\psi(x,u).
\end{aligned} \tag{39}$$

Innsatt i den tidsuavhengige Schrødingerligningen får vi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial u^2}\right)\psi(x,u) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_u^2)\psi(x,u). \tag{40}$$

Dette er altså en løsning med energien gitt som

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_u^2). \tag{41}$$

d) Bruk grensebetingelsene for $\psi(x,u)$ til å vise at $B=0$,

$$k_x = \frac{\pi n_x}{a}, \tag{42}$$

hvor $n_x = 1,2,3\ldots$, og

$$k_u = \frac{2\pi n_u}{L}, \tag{43}$$

hvor $n_u = 0, \pm1, \pm2, \ldots$. [6 poeng]

Svar: Vi må ha $\psi(0,u) = 0$ og $\psi(a,u) = 0$ fordi potensialet blir uendelig i endene av brønnen. $x=0$ gir $X(0) = A\sin(0) + B\cos(0) = B$, som betyr at $B = 0$. ($U(u)$ er alltid forskjellig fra null så lenge $C \neq 0$.)

$x = a$ gir $X(a) = A\sin(k_x a)$ som er null dersom $k_x a = \pi n_x$ hvor $n_x = 0, \pm1, \pm2, \ldots$. Dette betyr at

$$k_x = \frac{\pi n_x}{a}, \tag{44}$$

hvor vi kan begrense oss til positive n_x fordi negative k_x gir de samme løsningene bare med motsatt fortegn for A. $n_x = 0$ gir ikke en normerbar løsning. Altså må $n_x = 1,2,3\ldots$.

Til slutt krever grensebetingelsen for u-retningen at $U(0) = U(L)$, slik at $e^{ik_u\cdot 0} = e^{ik_u L}$, eller $e^{ik_u L} = 1$. Dette er oppfylt for $k_u L = 2\pi n_u$, hvor $n_u = 0, \pm1, \pm2, \ldots$. Dette gir

$$k_u = \frac{2\pi n_u}{L}. \tag{45}$$

Her gir alle verdiene av n_u forskjellige løsninger.

e) Vis at energien kan skrives ved hjelp av kvantetallene n_x og n_u som

$$E_{n_x n_u} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left[n_x^2 + \left(\frac{2a}{L}\right)^2 n_u^2\right]. \tag{46}$$

[4 poeng]

Svar: Vi så fra løsningen av den tidsuavhengige Schrødingerligningen at energien er gitt ved (41). Vi setter inn uttrykkene for k_x og k_u og får:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi^2 n_x^2}{a^2} + \frac{4\pi^2 n_u^2}{L^2}\right) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + \left(\frac{2a}{L}\right)^2 n_u^2\right). \tag{47}$$

f) Hva er energien til grunntilstanden i dette potensialet, og hvor mange elektroner kan befinne seg i den? Hvor mange kan finnes i tilstanden(e) med nest lavest energi? Anta at bredden av brønnen er $a = 1\,\mathrm{nm}$. Massen til et elektron er $m = 0.511\,\mathrm{MeV/c^2}$. [6 poeng]

Svar: Grunntilstanden, tilstanden med lavest energi, er gitt ved $n_x = 1$ og $n_u = 0$. Denne har energi

$$\begin{aligned}
E_{10} &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(1^2 + \left(\frac{2a}{L}\right)^2 \cdot 0^2\right) \\
&= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \\
&= \frac{\hbar^2 c^2\pi^2}{2mc^2a^2} \\
&= \frac{(197.3 \text{ nm eV})^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot 0.511 \text{ MeV} \cdot (1 \text{ nm})^2} \\
&= 0.376 \text{ eV}. \qquad (48)
\end{aligned}$$

Fordi elektroner er fermioner kan ikke to elektroner befinne seg i samme tilstand, men, om vi tar hensyn til spinn, er det to elektroner som kan befinne seg i grunntilstanden, så lenge de har motsatt spinn.

For den neste tilstanden er svaret avhengig av lengden på L. Dersom $L < 2a/\sqrt{3}$ er den neste eksiterte tilstanden gitt ved $n_x = 2$ og $n_u = 0$ fordi dette da gir den nest minste energien. Vi kan igjen bare ha to elektroner i tilstanden. Dersom $L > 2a/\sqrt{3}$ gir $n_x = 1$ og $n_u = \pm 1$ den minste energien og vi har to degenererte tilstander med forskjellig n_u. Vi kan da i alt ha fire elektroner med denne energien.

g) Bruk normeringskravet til $\psi(x, u)$ for å vise at $AC = \sqrt{2/aL}$ slik at den fullstendige løsningen blir

$$\psi_{n_x n_u}(x, u) = \sqrt{\frac{2}{aL}} \sin(k_x x) e^{ik_u u}. \qquad (49)$$

[4 poeng]

Svar: Normeringskravet i to dimensjoner er

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^L |\psi(x, u)|^2 \, du dx = 1. \qquad (50)$$

Integralet gir

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}\int_0^L |\psi(x,u)|^2\,dudx &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_0^L |X(x)|^2|U(u)|^2\,dudx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}|X(x)|^2\,dx\int_0^L |U(u)|^2\,du \\
&= \int_0^a |A\sin(k_x x)|^2\,dx\int_0^L |Ce^{ik_u u}|^2\,du \\
&= |AC|^2\int_0^a \sin^2(k_x x)\,dx\int_0^L du \\
&= |AC|^2\int_0^{k_x a}\sin^2(y)\,\frac{dy}{k_x}\,[u]_0^L \\
&= |AC|^2\frac{L}{k_x}\left[-\frac{1}{2}\sin y\cos y+\frac{y}{2}\right]_0^{\pi n_x} \\
&= |AC|^2\frac{L}{k_x}\left[-\frac{1}{2}\sin\pi n_x\cos\pi n_x+\frac{\pi n_x}{2}\right] \\
&= |AC|^2\frac{L}{k_x}\frac{\pi n_x}{2} \\
&= |AC|^2\frac{aL}{2}
\end{aligned} \tag{51}$$

hvor vi har brukt fra Rottmann at

$$\int \sin^2 x\,dx = -\frac{1}{2}\sin x\cos x+\frac{x}{2}+C. \tag{52}$$

Når vi velger normeringskonstantene reelle gir dette $AC=\sqrt{2/aL}$.

h) Finn forventningsverdien til p_x^2 for tilstanden $\psi_{n_x n_u}(x,u)$. [3 poeng]

Svar: Forventningsverdien til p_x^2 er gitt ved integralet

$$\langle p_x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_0^L \psi^*_{n_x n_u}(x,u)\hat{p}_x^2\psi_{n_x n_u}(x,u)\,dudx. \tag{53}$$

Med

$$\hat{p}_x^2 = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \tag{54}$$

er

$$\begin{aligned}
\hat{p}_x^2\psi_{n_x n_u}(x,u) &= -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sqrt{\frac{2}{aL}}\sin(k_x x)e^{ik_u u} \\
&= \hbar^2 k_x^2\sqrt{\frac{2}{aL}}\sin(k_x x)e^{ik_u u} \\
&= \hbar^2 k_x^2\psi_{n_x n_u}(x,u).
\end{aligned} \tag{55}$$

Altså er $\psi_{n_x n_u}(x,u)$ en egentilstand til $\hat{p}_x^2$ med egenverdi $\hbar^2 k_x^2$. Forventningsverdien blir da

$$\begin{aligned}
\langle p_x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_0^L \psi^*_{n_x n_u}(x,u)\hat{p}_x^2 \psi_{n_x n_u}(x,u)\, du dx. \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_0^L \psi^*_{n_x n_u}(x,u)\hbar^2 k_x^2 \psi_{n_x n_u}(x,u)\, du dx. \\
&= \hbar^2 k_x^2 \int_{-\infty}^{\infty}\int_0^L |\psi_{n_x n_u}(x,u)|^2\, du dx. \\
&= \hbar^2 k_x^2, \qquad (56)
\end{aligned}$$

hvor vi har brukt at $\psi_{n_x n_u}(x,u)$ er normert.

i) I grensen $L \ll a$ viser ligning (46) hva som skjer dersom det eksisterer små ekstra opprullede dimensjoner i verden. Vi minner om at energien for en uendelig brønn i en vanlig dimensjon er

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n_x^2. \qquad (57)$$

Gitt at størrelsen på denne ekstra dimensjonen er $L = 10^{-3}$ nm, hvor mye energi trenger jeg for å eksitere et elektron i den nye dimensjonen? [3 poeng]

Svar: Det å endre kvantetallet n_u fra 0 til 1 gir en energiforskjell på

$$\begin{aligned}
\Delta E &= E_{n_x 1} - E_{n_x 0} \\
&= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + \left(\frac{2a}{L}\right)^2 \cdot 1^2\right) - \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + \left(\frac{2a}{L}\right)^2 \cdot 0^2\right) \\
&= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + \left(\frac{2a}{L}\right)^2\right) - \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} n_x^2 \\
&= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(\frac{2a}{L}\right)^2 = \frac{2\hbar^2\pi^2}{mL^2}. \qquad (58)
\end{aligned}$$

Numerisk er dette

$$\begin{aligned}
\Delta E &= \frac{2\hbar^2\pi^2}{mL^2} \\
&= \frac{2\hbar^2 c^2\pi^2}{mc^2L^2} \\
&= \frac{2\cdot(197.3\text{ nm eV})^2\cdot\pi^2}{0.511\text{ MeV}\cdot(10^{-3}\text{ nm})^2} \\
&= 1.50\times 10^6\text{ eV} = 1.50\text{ MeV}. \qquad (59)
\end{aligned}$$

j) Hvor mye ekstra effektiv masse (hvileenergi) ser det ut som et elektron som er eksitert i den ekstra dimensjonen har? *Hint:* Ta utgangspunkt i Einsteins formel for relativistisk energi i en vanlig dimensjon $E^2 = p_x^2 c^2 + m^2 c^4$. [3 poeng]

Svar: Siden endringen i energi ved eksitasjonen ikke gir elektronet ekstra bevegelsesmengde i den vanlige x-dimensjonen hvor vi gjør målinger, tilsvarer endringen i energi en direkte endring i massen $(\Delta E)^2 = (\Delta m)^2 c^4$, eller $\Delta E = \Delta m c^2$. Eksitasjonen på 1.50 MeV vil da gi en tilsynelatende endring i masse på 1.50 MeV/c^2 for elektronet. Vi har laget det som ofte kalles en Kaluza-Klein-eksitasjon av elektronet, en mer massiv utgave av det vanlig elektronet.