

Frist for innlevering: *Tirsdag 14. april kl 17*

ØVING 10

Oppgave 1 Variasjonsmetoden

I dei fleste tilfella i kvantemekanikk kan ein ikkje løyse Schrödingerlikninga eksakt. Ein kan da løyse problemet numerisk. Eit alternativ er å bruke *variasjonsmetoden*. Ein gjetar på ei rimeleg form på bølgefunksjonen ψ . Denne bølgefunksjonen ψ kallar ein da ein *prøvebølgefunksjon*. ψ inneheld ein eller fleire parametre som ein kan variere. Ideen er å minimalisere energien til ψ som funksjon av desse parametrane. Ein kan da vise at energien E_{\min} som ein får med denne prosedyra alltid er høgare enn den verkelege grunntilstandsenergien til systemet. Egil Hylleraas (1898-1965) var ein norsk fysikar som i tida rett før 1930 brukte variasjonsmetoden til å rekne ut E_{\min} for Helium. Han brukte svært mange parametre i prøvebølgefunksjonen sin, men han hadde ikkje PC eller matlab tilgjengeleg. Han fekk eit resultat som berre var eit par prosent høgare enn den eksperimentelle verdien for grunntilstanden i Helium. Hylleraas var ein framifrå fysikar som gav store bidrag til å forstå to-elektron atom. Vi skal gå i Hylleraas' fotefar og bruke variasjonsmetoden på eit enkelt problem.

Potensialet vi skal studere er på forma

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ Fx, & x \geq 0 \end{cases}, \quad (0.1)$$

der $F > 0$ er ein konstant. Sjå figur 0.1.

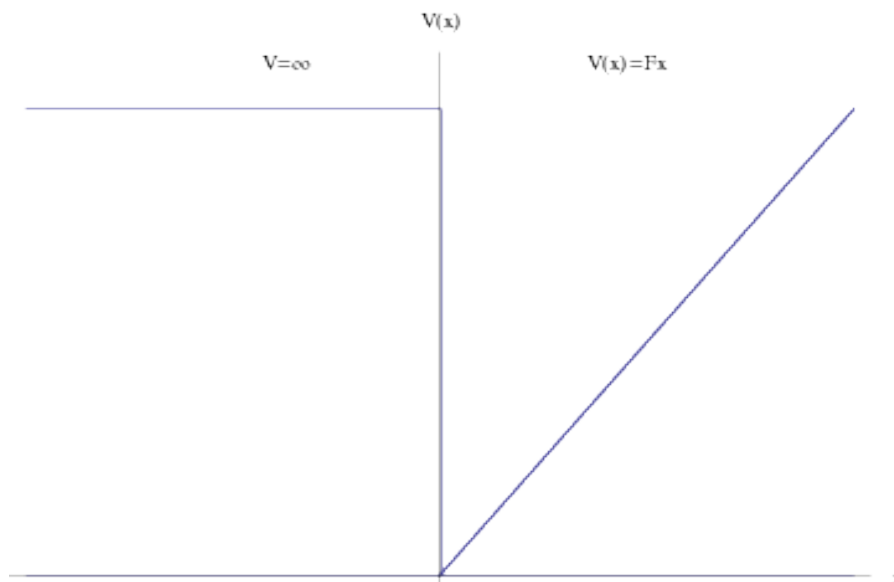


Figure 0.1: Potensialet $V(x)$ i oppgave 1.

Prøvebølgefunksjonen vi skal bruke er

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ Axe^{-\alpha x}, & x \geq 0 \end{cases}, \quad (0.2)$$

der A er ein normeringskonstant og $\alpha > 0$ er ein variasjonsparameter.

a) Forklar at $\psi(x)$ beskriv ein bunden tilstand i potensialet $V(x)$. Vis at den normerte bølgefunksjonen er

$$\psi(x) = 2\alpha^{\frac{3}{2}}xe^{-\alpha x}. \quad (0.3)$$

b) Vis at middelverdien til den potensielle energien er

$$\langle V(x) \rangle = \frac{3F}{2\alpha}. \quad (0.4)$$

c) Vis at middelverdien til den kinetiske energien er

$$\langle E_k \rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2. \quad (0.5)$$

d) Bruk resultatata i a) – c) til å finne den verdien av α som minimaliserer energien i tilstanden ψ og finn E_{\min} . Samanlikn svaret med

$$E_{\min}^{\text{eksakt}} = 2.33811 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}} F^{\frac{2}{3}}, \quad (0.6)$$

som er den numerisk eksakte verdien for grunntilstandsenergien for potensialet i likning (0.1).

Oppgave 2 Ehrenfests teorem

Ehrenfests teorem er

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle, \quad (0.7)$$

der \hat{H} er Hamiltonoperatoren for systemet og \hat{F} er ein vilkårleg operator. Ein partikkel med masse m bevegar seg i eit tyngdefelt slik at

$$V(z) = mgz, \quad (0.8)$$

der z er høgda over bakken og g er tyngdeakselerasjonen. Bruk Ehrenfests teorem til å finne $\langle \mathbf{r} \rangle_t$ når initialkrava er $\langle \mathbf{r} \rangle_{t=0} = z_0 \mathbf{e}_z$ og $\langle \mathbf{p} \rangle_{t=0} = mv_0 \mathbf{e}_z$ der z_0 og v_0 er konstantar.