Frist for innlevering: *Tirsdag 21. april kl 17*

ØVING 11

Oppgåve 1 Variasjonsmetoden

I dei fleste tilfella i kvantemekanikk kan ein ikkje løyse Schrödingerliknikngа eksakt. Ein kan da løyse problemet numerisk. Eit alternativ er å bruke *variasjonsmetoden.* Ein gjettar på ei rimeleg form på bølgjefunksjonen ψ. Denne bølgjefunksjonen ψ kallar ein da ein *prøvebølgjefunksjon.* 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 $E_{\rm min}$ 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 $E_{\rm min}$ for Helium. Han brukte svært mange parametre i prøvebølgjefunksjonen 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

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

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

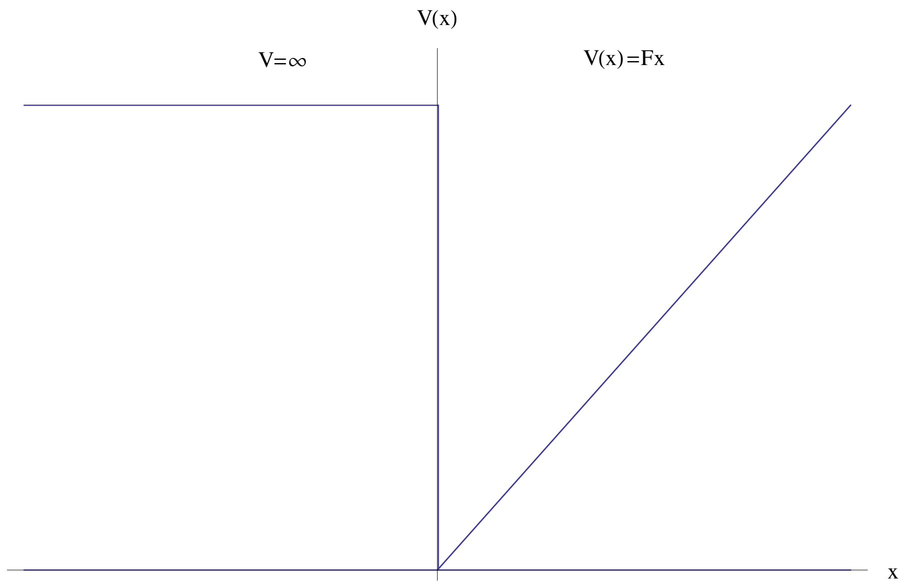

Figure 0.1: Potensialet $V(x)$ i oppgåve 1.

Prøvebølgjefunksjonen vi skal bruke er

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

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 bølgjefunksjonen er

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

b) Vis at middelverdien til den potensielle energien er

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

c) Vis at middelverdien til den kinetiske energien er

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

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

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

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

Oppgåve 2 **Ehrenfests teorem**

Ehrenfests teorem er

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

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

$$V(z) = mgz , \tag{0.8}$$

der z er høgda over bakken og g er tyngedeakselerasjonen. 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 $\langle \mathbf{p} \rangle_{t=0} = m v_0 \mathbf{e}_z$ der z_0 og v_0 er konstantar.