FYS2140 - Oblig 12

Aleksander Hansen, gruppe 1

14. mai 2012

Oppgave 1

a) Vi har likevektstilstand når $\frac{dV}{dr} = 0$.

$$\frac{dV}{dr} = 2aA\left[e^{-a(r-r_0)} - e^{-2a(r-r_0)}\right] = 0$$

Uttrykket i parantesen må være 0. Vi tar logaritmen:

$$-a(r-r_0) - 2a(r-r_0) = 0$$

$$3r_0 - 3r = 0$$

$$r = r_0$$

b) Taylorpolynomet til $V(r)$ av 2. orden om punktet $r = r_0$ er:

$$T_2V(r) = V(r_0) + \frac{dV(r_0)}{dr}(r-r_0) + \frac{1}{2}\frac{d^2V(r_0)}{dr^2}(r-r_0)^2$$

Vi vet at ved likevektspunktet er $V(r)$ ved et minimum og dermed er $\frac{dV(r_0)}{dr} = 0$. Den annenderiverte er:

$$\frac{d^2V}{dr^2} = 2a^2A\left[2e^{-2a(r-r_0)} - e^{-a(r-r_0)}\right]$$

og evaluert i likevektspunktet:

$$\frac{d^2V(r_0)}{dr^2} = 2a^2A\left[2e^0 - e^0\right] = 2a^2A \equiv K$$

Vi har da at:

$$T_2V(r) = \tilde{V}(r) = V(r_0) + \frac{1}{2}K(r-r_0)^2$$

Vi har at $\tilde{\psi}(y) = \psi(y+r_0) = \psi(r)$, hvor $y = r - r_0$. Schrödingerlikningen kan da skrives som:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi(y+r_0)}{dy^2}\frac{dy^2}{dr^2} + \tilde{V}(r)\psi(y+r_0) = E_{vib}\psi(y+r_0)$$

hvor $\frac{dy}{dr} = 1 \Rightarrow \frac{dy^2}{dr^2} = 1$,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\tilde{\psi}(y)}{dy^2} + [V(r_0) + \frac{1}{2}Ky^2]\tilde{\psi}(y) = E_{vib}\tilde{\psi}(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\tilde{\psi}(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}Ky^2\tilde{\psi}(y) = [E_{vib} - V(r_0)]\tilde{\psi}(y) = \epsilon\tilde{\psi}(y)$$

Dette er difflikningen til en harmonisk oscillator.

c) Energispekteret til den harmoniske oscillatoren er:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, ...$$

Hvor $\omega = \sqrt{\frac{K}{\mu}} = \sqrt{\frac{2a^2A}{\mu}}$.

Dette uttrykket er ikke gyldig fordi vi anntok små utslag, altså små energier, da vi tilnærmet potensialet med et Taylorpolynom av 2. grad. For store energier vil høyereordens ledd være viktige og systemet vil ikke lengre oppføre seg som en harmonisk oscillator.

d) Bindingsstyrken er:

$$K = 2a^2A = 2 \times (27nm^{-1})^2 \times 5.2eV \approx 7580eV/nm^2$$

Vi har at,

$$\mu = \frac{(16u)^2}{2 \cdot 16u} = 8u = 8 \times (931.5MeV/c^2) \approx 7450MeV/c^2$$

Dermed er:

$$\hbar\omega = \hbar c\sqrt{\frac{K}{\mu c^2}} = (192.3eVnm) \times \sqrt{\frac{7580eV/nm^2}{7450MeV}} \approx 0.2eV$$

Denne energien er to størrelsesordner større enn den typiske rotasjonsenergien.

Oppgave 2

a) En egenfunksjon til en operator er en funksjon som når operatoren virker på funksjonen, gir den tilbake et multiplum av egenfunksjonen, kalt egenverdien. $\hat{Q}\psi = q\psi$

$$\hat{p}\psi_n(x) = -i\hbar\frac{d\psi}{dx} = -i\hbar\sqrt{\frac{2}{L}}\frac{n\pi}{L}\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$\psi_n(x)$ er altså ikke en egenfunksjon for bevegelsesmengden.

Siden vi vet at partikkelen befinner seg i området $0 < x < L$ pga. det uendelige potensialet utenfor området, så er $\sigma_x \leq L$. Dermed må $\sigma_p > 0$ fordi $\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$. Som betyr at tilstandene i boksen ikke kan ha en skarp bevegelsesmengde.

b)

$$1 = \mathcal{N}^2 \int_0^L |\psi(x)|^2 = \mathcal{N}^2 \int_0^L \psi_2^2(x) + 4\psi_4^2(x) + \psi_6^2(x) + 4\psi_8^2(x) dx$$

Vi vet at,

$$\int \psi_m^* \psi_n = \delta_{mn}$$

Så vi får:

$$\mathcal{N}^2 \int_0^L 1 + 4 + 1 + 4 dx = 10\mathcal{N}^2 L = 1$$

$$N = \sqrt{\frac{1}{10L}}$$

c)

$$E = \frac{16\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \Rightarrow n = 4$$

$$< E_4 >= |c_4|^2 = \left(\frac{-2}{10L}\right) = \frac{2}{5L}$$

Siden $c_1 = 0$ er sannsynligheten for å finne partikkelen i grunntilstanden lik null.

d) Tilstandene i superposisjonen er like og er derfor antisymmetriske om $x = L/2$, dvs. at $|\psi(L/2)|^2 = 0$. Partikkelen kan derfor aldri observeres i midten.

e)

$$\psi_{rom}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_a(x_1) & \psi_a(x_2) \\ \psi_b(x_1) & \psi_b(x_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)]$$

Dette er korrekt bølgefunksjon for romdelen til to partikkler.

f) Bytter vi om på to koordinater tilsvarer dette å bytte om på to søyler i determinanten. Ved de vanlige reglene for determinanter følger det at determinanten bytter fortegn når man bytter om to søyler. $\psi(x_2, x_1, x_3) = -\psi(x_1, x_2, x_3)$, bølgefunksjonen er altså antisymmetrisk ved ombytting av koordinater.

Lar vi to partikkler ha samme tilstand, gir det oss to identiske rader. Regelen for to like rader i determinanten sier at determinanten da er lik null, og dermed også bølgefunksjonen. Altså to identiske fermioner har null sannsynlighetsamplitude for å være i samme tilstand samtidig, som er hva Pauliprinsipper sier.