Institutt for fysikk 2013

TFY4108 Fysikk
Øving 13

Rettleiing: Tysdag 19. nov. kl. 10:15-12:00.
Innlevering: Fredag 22. nov. kl. 14:00.

Oppgåve 1.

Sjå på ein partikkel i ein gaussisk potensialbrønn, dvs. den potensielle energien er

$$U(x) = -U_0 \, e^{-(x/L)^2} \; , \tag{1}$$

der U_0 og L er positive konstantar.

(a) Skisser potensialet. Kva er betydninga av U_0 og L?

Vi skal her bestemme grunntilstandsenergien til partikkelen. Vi bruker følgjande metode (som vart kort diskutert for harmonisk-oscillator-potensialet i forelesingane, sjå evt. også Sec. 40.5 i læreboka): Prøv med ein verdi E for energien, og sjå på oppførselen til bølgjefunksjonen $\psi(x)$ i den tidsuavhengige Schrödingerlikninga. For eit typisk val av E vil $\psi(x) \to \pm\infty$ for store $|x|$, og løysinga er difor ikkje fysisk akseptabel. Kun bestemte verdier av E, nemlig dei som gir $\psi(x) \to 0$ for store $|x|$, svarer til energinivå for bundne tilstander. Grunntilstandsenergien er den lågaste slike energien.

Vi skal her finne $\psi(x)$ ved å integrere den tidsuavhengige Schrödingerlikninga numerisk. Sidan dette er ei 2. ordens differensiallikning treng vi to grensebetingelsar. Bølgjefunksjonen $\psi(x)$ er symmetrisk i grunntilstanden, dvs. $\psi(-x) = \psi(x)$. Det betyr at $d\psi/dx = 0$ for $x = 0$. Dette er éin av grensebetingelsane. Den andre grensebetingelsen er verdien av $\psi(x)$ i samme punkt $x = 0$, som vi vilkårleg vel lik 1.[1] Vi integrerer differensiallikninga fra $x = 0$ til $x = D$, der D bør veljast stor nok ($D \gg L$) til at den asymptotiske oppførselen til $\psi(x)$ er openbar.

Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga er

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \; . \tag{2}$$

Vi diskretiserer no Schrödingerlikninga etter å ha skrive den på forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{c}{U_0}\,(U(x) - E)\psi(x) = 0 \tag{3}$$

der $c = 2mU_0/\hbar^2$. Diskretiseringa består i å gjere det kontinuerlige intervallet $0 < x < D$ om til det diskrete settet $x_i = ia$ der $a = D/n$ og n er antall punkt. Den andrederiverte blir

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \to \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{a^2} \tag{4}$$

der $\psi_i = \psi(x_i) = \psi(ia)$. Vi definerer også $u_i = U(x_i)/U_0$ og $e = E/U_0$. Då kan den diskretiserte Schrödingerlikninga skrivast

$$\psi_{i+1} = 2\psi_i - \psi_{i-1} + ca^2(u_i - e)\psi_i \; . \tag{5}$$

Grensebetingelsane i $x = 0$ er $\psi_0 = 1$ og $\psi_1 = \psi_0$. For enkelheits skuld set vi heretter U_0, L og $2m/\hbar^2$ til å ha numerisk verdi 1. Itererer vi då likning (5) for ein vald verdi av e, vil vi oppdage at ψ_i går mot pluss eller minus uendeleg — *med eitt unntak,* når e faktisk er grunntilstandsenergien (dvs. dette systemet har kun éin bunden tilstand). Vi kan difor starte med å gjette ein verdi for e (som bør vere mindre enn maksimumsverdien 0 av $u(x)$, sidan tilstanden skal vere bunden, og større enn minimumsverdien -1 av $u(x)$, sidan energien kan ikkje vere mindre enn denne). Går ψ_i mot $+\infty$, endrar vi verdien for e; går ψ_i mot $-\infty$, endrar vi verdien for e den andre vegen. Etterkvart klarer vi då å bestemme e, og dermed også $E = U_0 e$.

(b) Matlab-skriptet `tfy4108_ov11_oppg4.m`, tilgjengeleg på websida, utfører iterasjonen skildra her. Køyr skriptet og bestem E. (Dersom du er litt meir ambisiøs kan du evt. prøve å modifisere skriptet til å utføre søket etter E meir automatisk.)

[1] Du vil kanskje innvende at dette valet vil ikkje vere konsistent med normeringsbetingelsen $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1$. Det er korrekt, men sidan normeringa kun inneber ein skalering av $\psi(x)$, har den ikkje nokon betydning når vi skal finne energinivåa. Etter at ein har funne ein bølgjefunksjon som går mot 0 for store x, kan den skalerast slik at den tilfredsstiller normeringa.

Oppgåve 2.

Som diskutert i forelesingane er den tidsuavhengige Schrödingerlikninga (TUSL) for ein partikkel i 3 dimensjonar, uttrykt i kartesiske koordinatar, gjeven som

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2}\right]+U(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z), \tag{6}$$

der $U(x,y,z)$ er den potensielle energien. Men når den potensielle energien har sfærisk symmetri, dvs. når $U(x,y,z)$ avheng av x, y, og z kun via kombinasjonen $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$, er det mykje betre å bruke sfæriske koordinatar (r,θ,ϕ). I desse koordinatane blir TUSL

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right]+U(r)\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi). \tag{7}$$

I TUSL for elektronet i hydrogenatomet er

$$U(r)=-\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{8}$$

der $\epsilon_0=8.85\cdot10^{-12}$ F/m er den elektriske permittiviteten i vakuum og $\pm q=\pm1.60\cdot10^{-19}$ C er proton/elektronladninga (vi kallar ladninga q og ikkje e for å unngå potensiell forvirring seinare med grunntalet for den naturlege logaritmen, $e=2.718....$).

(a) Bølgjefunksjonen for elektronet i det lågaste energinivået til hydrogenatomet er på forma

$$\psi(r,\theta,\phi)=Ce^{-r/a} \tag{9}$$

der konstanten

$$a=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{mq^2} \tag{10}$$

kallast Bohr-radien (C er ein normeringskonstant som vi kjem tilbake til).

Vis at (9) er ei løysing av TUSL for hydrogenatomet og finn grunntilstandsenergien uttrykt vha. diverse konstantar i problemet. Finn også den numeriske verdien for grunntilstandsenergien, i einingar av elektronvolt (eV) (1 eV $=1.60\cdot10^{-19}$ J).

(b) Bestem konstanten C frå kravet om at bølgjefunksjonen er normert, dvs.

$$\int_V dV\;|\psi(r,\theta,\phi)|^2=1 \tag{11}$$

der volumintegralet er over heile rommet.

(c) For ein normert bølgjefunksjon ψ er $|\psi(r,\theta,\phi|^2dV$ sannsynlegheiten for å finne partikkelen i eit infinitesimalt volumelement dV omkring punktet (r,θ,ϕ). Dersom vi no integrerer dette uttrykket over alle ϕ og alle θ får vi sannsynlegheiten for å finne partikkelen innanfor eit kuleskal med radius r og breidde dr. La oss kalle denne sannsynlegheiten $P(r)dr$, der $P(r)$ er den tilhøyrande sannsynlegheitstettleiken. M.a.o. (vha. $dV=d\phi\;d(\cos\theta)dr\,r^2$)

$$P(r)dr=\int_0^{2\pi}d\phi\int_{-1}^{1}d(\cos\theta)dr\;r^2|\psi(r,\theta,\phi)|^2. \tag{12}$$

Vis at for bølgjefunksjonen (9) blir

$$P(r)=\frac{4r^2}{a^3}e^{-2r/a}. \tag{13}$$

I (d)-(g) under skal du bruke dette uttrykket for $P(r)$.

(d) Vis at $P(r)$ er maksimal for $r=a$. Med andre ord: For hydrogenatomet er Bohr-radien a den *mest sannsynlege* avstanden mellom elektronet og atomkjernen når elektronet er i grunntilstanden.

(e) Finn forventningsverdien av r, dvs.

$$\langle r\rangle=\int_0^\infty rP(r)dr. \tag{14}$$

(f) Plott $P(r)$ (i einingar av $1/a$) som funksjon av r/a. Merk av Bohr-radien og forventningsverdien av r på figuren.

(g) Finn sannsynlegheiten for å finne elektronet innanfor ein radius r (uttrykt som funksjon av r/a). Kva blir denne sannsynlegheiten for $r=a$ og for $r=2a$?

(h) Anta at eit elektron i grunntilstanden blir eksitert til ein tilstand med høgare energi ved å absorbere eit foton frå ein lysstråle med ei bølgjelengd på ca. 103 nm. Kva er kvantetalet n for den eksiterte tilstanden?

Oppgåve 3.

(a) Eit elektron med masse m befinn seg i ein tre-dimensjonal boks med sidekantar med lengde L_x, L_y, og L_z langs hhv. x-, y-, og z-retningane. Veggane i boksen er uendeleg harde, slik at bølgjefunksjonen $\psi(x, y, z)$ til systemet kan vere forskjellig frå null kun når $0 < x < L_x$, $0 < y < L_y$, og $0 < z < L_z$.

Vis at løysingane til den tidsuavhengige Schrödingerlikninga inne i boksen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y,z)}{\partial z^2}\right] + U(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z), \tag{15}$$

kan skrivast

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = X_{n_x}(x)Y_{n_y}(y)Z_{n_z}(z) \tag{16}$$

med

$$X_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}}\sin\left(\frac{\pi n_x x}{L_x}\right), \tag{17}$$

$$Y_{n_y}(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}}\sin\left(\frac{\pi n_y y}{L_y}\right), \tag{18}$$

$$Z_{n_z}(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}}\sin\left(\frac{\pi n_z z}{L_z}\right), \tag{19}$$

$$\tag{20}$$

og finn uttrykk for dei tilhøyrande energiane E_{n_x,n_y,n_z}. Her er kvantetala n_x, n_y, og n_z er heiltal større enn 0. Du kan anta at løysinga for ein partikkel i ein ein-dimensjonal boks er kjent.

(b) I det følgjande set vi $L_x = L_y \equiv L$ og $L_z \neq L$. Vi skal no anta at det er fleire elektron i boksen. Sjå først bort frå eigenspinnet til elektronet. Kor mange elektron kan maksimalt vere i nest lågaste energinivå dersom (i) $L_z > L$, (ii) $L_z < L$? Endrar svara seg når ein tek omsyn til at elektronet har eit eigenspinn? Dersom ja, korleis?

Utvalde fasitsvar:
2b: $|C| = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$; 2e: $(3/2)a$.
3a: $E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$.