Inlämningsuppgift 3

Lösning

(a) Utlämnas här, eftersom det baras handlar om att rita upp givna funktioner som man hittar i standarböcker om kvantmekanik. Om man vill kolla precisionen i graferna kan man t.ex. titta på var nollstället för $\psi_2(x)$ ligger (x_2 i bifogade tabell)

(b) Schrödingerekvationen för den harmoniska oscillatorn är

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2\psi = E\psi$$

Vi undersöker genom direkt insättning om den givna grundtillståndsfunktionen satisfierarschrödingerekvationen:

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}\alpha^2 x \exp\left(-\tfrac{1}{2}\alpha^2x^2\right)$$

$$\frac{d^2\psi_0}{dx^2} = -\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}\left(\alpha^2-\alpha^4x^2\right)\exp\left(-\tfrac{1}{2}\alpha^2x^2\right) = \alpha^2\left(\alpha^2x^2-1\right)\psi_0 = \frac{m\omega}{\hbar}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x^2-1\right)\psi_0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_0}{dx^2}+\frac{kx^2}{2}\psi_0 = -\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi_0+\frac{\hbar\omega}{2}\psi_0+\frac{kx^2}{2}\psi_0 = -\frac{kx^2}{2}\psi_0+\frac{\hbar\omega}{2}\psi_0+\frac{1}{2}kx^2\psi_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\psi_0$$

Detta visar att $\psi_0(x)$ är en lösning till schrödingerekvationen med $\underline{E=\hbar\omega/2}$.

Sambandet mellan amplituden A och energin E för en harmonisk oscillator är

$$E=\frac{kA^2}{2}$$

vilket ger

$$A=\sqrt{\frac{2E}{k}}=\sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}}=\sqrt[4]{\frac{\hbar^2}{km}}=\frac{1}{\alpha}$$

Siffervärden: se bifogade tabell. A blir av storleksordningen 10^{-12} eller 10^{-11} m.

Sannolikheten att finna partikeln i det klassiskt förbjudna området $|x| > A$ är

$$P=\int_{-\infty}^{-A}\psi^2(x)dx+\int_{A}^{\infty}\psi^2(x)dx = 2\int_{A}^{\infty}\psi^2(x)dx=\left(\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)\int_{1/\alpha}^{\infty}\exp\left(-\alpha^2x^2\right)dx$$

$$=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_{\sqrt{2}}^{\infty}\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)dz$$

där sluttuttrycket erhållits genom variabelsubstitutionen $z = x\sqrt{2}/\alpha$. Den integralen hittar man i matematiska tabeller t.ex. Beta. Det går naturligtvis också att göra en numerisk uppskattning med hjälp av räknedosa eller på annat sätt. Resultatet blir
$\underline{P = 16\ \%}$

(c) Amplituden hos nollpunktsvängningarna blir i samtliga fall mycket små i jämförelse med avstånden mellan atomerna, så de kan inte förväntas spela någon nämnvärd roll för materialets egenskaper.

Av uttrycket för amplituden A framgår att den är störst för ämnen med små värden på k och m, d.v.s. för lätta och mjuka ämnen som litium, och minst för tunga och hårda ämnen som wolfram. Ett mera extremt exempel än litium är helium, som dels är ett mycket lätt ämne, dels i egenskap av ädelgas har mycket svaga interatomära krafter. Det är skälet till att helium inte kondenserar till fast form utan vid normalt tryck förblir flytande ända ner till absoluta nollpunkten. En kristall av helium skulle helt enkelt ha så stora nollpunktssvängningar att den inte kan vara stabil.