

Oppgave 2

Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga for en 1-dimensjonal harmonisk oscillator har følgende form:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x). \quad (4)$$

(a) Vis ved et variabelskifte at likning (4) kan skrives på formen

$$\hat{H}\psi_\lambda(y) = \lambda\psi_\lambda(y), \quad (5)$$

der

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \quad (6)$$

og

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (7)$$

(b) Innfør hjelpeoperatorene

$$\begin{aligned} \hat{a}_+ &\equiv -\frac{d}{dy} + y \\ \hat{a}_- &\equiv \frac{d}{dy} + y \end{aligned} \quad (8)$$

Vis at

$$\hat{H} = \hat{a}_- \hat{a}_+ - 1 = \hat{a}_+ \hat{a}_- + 1 \quad (9)$$

(c) Utled relasjonene

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{a}_+] &= 2\hat{a}_+ \\ [\hat{H}, \hat{a}_-] &= -2\hat{a}_- \end{aligned} \quad (10)$$

og vis at

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{a}_- \psi_\lambda) &= (\lambda - 2)\hat{a}_- \psi_\lambda \\ \hat{H}(\hat{a}_+ \psi_\lambda) &= (\lambda + 2)\hat{a}_+ \psi_\lambda \end{aligned} \quad (11)$$

(d) Gi en begrunnelse for at egenverdispektret til $\hat{H}$ er begrenset nedenfra.

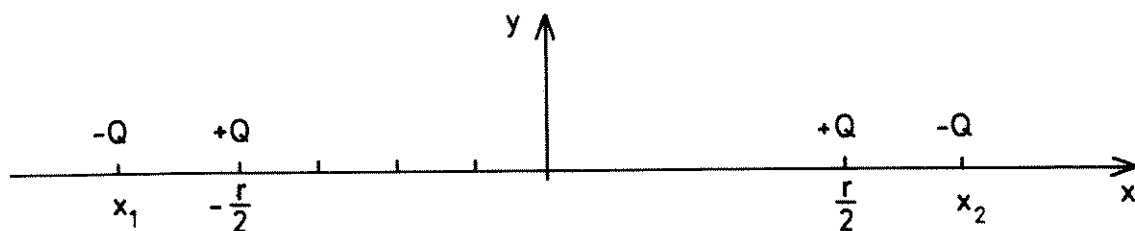
(e) La $\lambda_{\min}$ være laveste egenverdi for $\hat{H}$. Vis at

$$\hat{a}_- \psi_{\lambda_{\min}} = 0, \quad (12)$$

og bestem $\lambda_{\min}$.

(f) Bestem de mulige egenverdier E i likning (4).

I resten av oppgaven skal vi gi en forenklet beskrivelse av vekselvirkningen mellom to identiske molekyler. Hvert molekyl representeres ved to ladninger, $+Q$ og $-Q$. Den positive ladninga i hvert molekyl er stasjonær, og den negative ladninga utfører harmoniske oscillasjoner langs x -aksen og omkring den positive ladninga. De positive ladningene har henholdsvis x -koordinatene $-r/2$ og $r/2$, og de negative ladningene x_1 og x_2 (se figuren nedenfor).



Massen til de oscillerende ladningene er m , og kraftkonstanten for oscillatorene er $k = m\omega^2$.

I første omgang antar vi at avstanden r mellom de positive ladningene er uendelig stor.

Innfør variabelskiftet

$$\eta_1 = x_1 + \frac{r}{2} \quad \text{og} \quad \eta_2 = x_2 - \frac{r}{2} \quad (13)$$

(g) Vis at Hamiltonoperatoren for systemet kan skrives på formen

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta_1^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \eta_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta_2^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \eta_2^2 \quad (14)$$

Angi de mulige energiegenverdier for systemet.

I resten av oppgaven er avstanden r mellom molekylerne endelig, men stor ($r \gg |x_1 + \frac{r}{2}|$ og $r \gg |x_2 - \frac{r}{2}|$). Vekselvirkningen mellom molekylerne betraktes som en ren Coulomb vekselvirkning mellom de aktuelle ladningene.

- (h) Vis at det dominerende leddet i vekselvirkningen mellom molekylene gir opphav til følgende ledd i Hamiltonoperatoren:

$$\hat{H}_{12} = -\frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\left(x_1 + \frac{r}{2}\right)\left(x_2 - \frac{r}{2}\right)}{r^3} \quad (15)$$

- (j) Vis at variabelskiftet

$$\xi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_1 + \eta_2), \quad \xi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_1 - \eta_2) \quad (16)$$

gir den separable Hamiltonoperatoren

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \left(\frac{1}{2} m \omega^2 - \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \right) \xi_1^2 \\ & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} + \left(\frac{1}{2} m \omega^2 + \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \right) \xi_2^2 \end{aligned} \quad (17)$$

- (k) Bestem energiegenverdiene for modellsystemet når vi forutsetter at $\frac{1}{2}m\omega^2 > \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r^3}$.