LØYSING ØVING 2

Løysing oppgåve 1 Krumningseigenskapar for eindimensjonale energiegenfunksjonar

a) For grunntilstanden for den harmoniske oscillatoren har vi

$$\psi_0 = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \qquad \psi_0' = \psi_0 \left(-\frac{m\omega}{\hbar}\,x\right), \qquad \psi_0'' = \psi_0 \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\,x^2 - \frac{m\omega}{\hbar}\right),$$

slik at den relative krumninga er

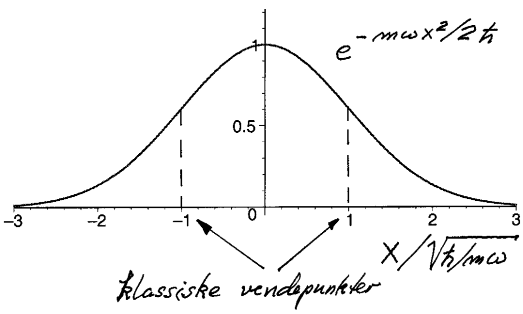
$$\frac{\psi_0''}{\psi_0} = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\left(x^2 - \frac{\hbar}{m\omega}\right).$$

Her ser vi at

(i) ψ_0''/ψ_0 er negativ for $-\sqrt{\hbar/m\omega} < x < \sqrt{\hbar/m\omega}$, dvs mellom dei klassiske vendepunkta, altså i det klassisk tillatne området der $E > V(x)$. I dette området krummer altså ψ_0 mot aksen.

(ii) Utafor dette området ser vi på tilsvarende måte at ψ_0 krummer bort frå aksen.

(iii) For $x = \pm\sqrt{\hbar/m\omega}$ er $\psi_0'' = 0$, og vi konkludere at den relative krumninga skiftar forteikn i dei klassiske vendepunkta.



b) I områda $a < |x| < b$ er $V = 0$ og $\psi'' = 0$. Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga gjev då

$$E = \frac{\hat{H}\psi}{\psi} = \frac{(-\hbar^2/2m)\psi'' + V\psi}{\psi} = 0.$$

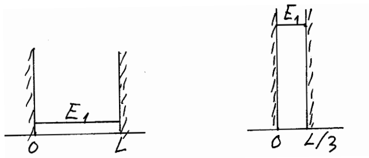
Energien til denne tilstanden er altså lik null. For $|x| < a$ kan vi da skrive

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V_0\psi = 0, \qquad \Longrightarrow \qquad V_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''}{\psi}.$$

Diagrammet viser at den relative krumninga er *negativ* i dette området (krumning mot aksen). Potensialverdien V_0 i dette området må difor vere negativ, slik at området er klassisk tillate.

Løysing oppgåve 2 **Ymse**

a)



For grunntilstanden i boksen med breidde L kan ein finne bølgjetalet k_1 frå kravet $k_1 L = \pi$, slik at energien er

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Når breidda reduserast til ein tredel, blir bølgjetalet tre ganger så stort Dette tyder større krumning av bølgefunksjonen $\sin(k_1 x)$, og dermed blir energien ni gangar så stor. Jo mindre plass vi gjev partikkelen, desto høgare blir grunntilstandsenergien (og dei andre energinivåa). Med andre ord, jo mindre plass vi gjev partikkelen, desto høgare (kinetisk) energi er den *nøydd* til å ha. Dette kallar vi gjerne for "kvantevillskap".

b) Middelverdien til p_x i grunntilstanden ψ_1 er

$$\begin{aligned}
\langle p_x \rangle &= -i\hbar \int_0^L \psi_1(x) \frac{d}{dx} \psi_1(x)\, dx \\
& -i\hbar \frac{2\pi}{L^2} \int_0^L \sin(\tfrac{\pi x}{L}) \cos(\tfrac{\pi x}{L})\, dx \\
&= \underline{\underline{0}}\,.
\end{aligned} \tag{0.1}$$

Dette resultatet kan ein og finne ved å bruke at integranden er ein odde funksjon om midtpunktet $\frac{L}{2}$. Middelverdien til p_x^2 i grunntilstanden ψ_1 kan ein rekne ut på same måte:

$$\begin{aligned}
\langle p_x^2 \rangle &= (i\hbar)^2 \int_0^L \psi_1(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x)\, dx \\
& \hbar^2 \frac{\pi^2}{L^2} \frac{2}{L} \int_0^L \sin^2(\tfrac{\pi x}{L})\, dx \\
&= \underline{\underline{\frac{\hbar^2 \pi^2}{L^2}}}\,,
\end{aligned} \tag{0.2}$$

Vi noterer oss at dette integralet er lik normeringsintegralet for $\psi_1(x)$. Dette gjev $\Delta p_x = \frac{\hbar\pi}{L}$. Frå oppgåveteksen kan ein lett finne $\Delta x = \frac{L}{\sqrt{12}}\sqrt{1 - \frac{6}{\pi^2}}$ og dermed får vi

$$\underline{\underline{\Delta x \Delta p_x = \hbar \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} \approx 0.567862\hbar}}\,. \tag{0.3}$$

Vi ser at $\Delta x \Delta p > \frac{1}{2}\hbar$, altså er Heisbergs uskarpheitsrelasjon tilfredsstilt.

c) **$\langle\, V \,\rangle$ og $\langle\, K \,\rangle$ for grunntilstanden i hydrogen**

Her treng vi forventningsverdien av $1/r$ i den oppgjevne tilstanden. Kulesymmetrien gjer at vinkelintegralet blir 4π. Ein får

$$\begin{aligned}\langle\, 1/r\,\rangle &= \int \frac{1}{r}|\psi_1|^2 d^3r = \int_0^\infty \frac{1}{r}\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-2r/a_0}\cdot 4\pi r^2 dr \\ &= \frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty r\, e^{-2r/a_0}dr = \frac{4}{a_0^3}\frac{1!}{(2/a_0)^2} = \frac{1}{a_0}.\end{aligned}$$

Dermed er forventningsverdien av den potensielle energien i tilstanden ψ_1

$$\langle\, V\,\rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{a_0} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\right)^2 m_ec^2 = -\alpha^2 m_e c^2 = \underline{\underline{2E_1}}$$

og for den kinetiske energien har vi da

$$\langle\, K\,\rangle = E_1 - \langle\, V\,\rangle = \tfrac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 = \underline{\underline{-E_1}}\ .$$

d) **Estimat av** $\langle\, K\,\rangle$.

Vi har at $|\psi_1(r)|^2 \sim e^{-2r/a_0}$ der a_0 har dimensjon lengde. Det implisererer at middelverdien til x er proporsjonal med a_0 og middelverdien til x^2 er proporsjonal med a_0^2. Usikkerheiten i x er då proporsjonal med a_0 og vha uskarpheitsrelasjonen kan vi lage estimatet

$$\Delta p_x \approx \frac{\frac{1}{2}\hbar}{\Delta x} \approx \frac{\hbar}{2a_0}$$

for usikkerheiten i x-komponenten av impulsen. Da $\langle\, p_x^2\,\rangle = \langle\, p_x\,\rangle^2 + (\Delta p_x)^2 = (\Delta p_x)^2$, blir det tilsvarande estimatet for den kinetiske energien i grunntilstanden

$$\langle\, K\,\rangle \approx \frac{1}{2m_e}\left\langle p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right\rangle = \frac{1}{2m_e}\cdot 3\cdot\frac{\hbar^2}{4a_0^2} = \frac{3\hbar^2}{8m_e a_0^2} = \frac{3}{4}\cdot\tfrac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2,$$

altså 75 % av den eksakte verdien.

Løysing oppgåve 3

a) Vi merkar oss at sannsynleghetstettheiten $|\Psi(x,0)|^2 = (2\pi\sigma^2)^{-1/2}e^{-x^2/2\sigma^2}$ er ei normalfordeling (Gauss-fordeling), symmetrisk mhp origo. Forventningsverdien til x er difor lik null:

$$\langle\, x\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,0)\, x\,\Psi(x,0)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi(x,0)|^2 dx = 0.$$

Dette følgjer og av at integranden er antisymmetrisk med omsyn på origo, eller er ein odde funksjon.

Fordi $|\Psi(x,0)|^2$ er uavhengig av p_0, vil også $\langle\, x^2\,\rangle$ og dermed $\Delta x = \sqrt{\langle\, x^2\,\rangle - \langle\, x\,\rangle^2}$ vere uavhengige av p_0.

b) La oss først kontrollere normeringa. Med notasjonen $\alpha \equiv 1/2\sigma^2$ er $|\Psi(x,0)|^2 = \sqrt{\alpha/\pi}\, e^{-\alpha x^2}$, slik at

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1, \quad \text{q.e.d.}$$

Vidare finn vi ved hjelp av eit av dei oppgjevne Gauss-integrala

$$\begin{aligned} \left\langle x^2 \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,0) x^2 \Psi(x,0) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi(x,0)|^2 dx \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \sqrt{\pi} \cdot \tfrac{1}{2} \alpha^{-3/2} = \frac{1}{2\alpha} = \sigma^2. \end{aligned}$$

Dette gjev usikkerheiten

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sigma.$$

> Moralen er difor at ein sannsynleghetstettheit på Gauss-forma $|\Psi|^2 \propto e^{-x^2/2\sigma^2}$ er usikkerheiten (standardavviket) Δx gitt ved σ. At $\Delta x \sim \sigma$, skjønar vi utan å rekne.

Fysisk tolkning av $\langle x \rangle$ og Δx: Dersom vi preparerer systemet (N ganger) slik at det er i tilstanden $\Psi(x,0)$ ved $t = 0$, og kvar gang måler posisjonen x ved dette tidspunktet, [1] eventuelt måler på N identisk preparerte system, vil middelverdien av dei målte posisjonane,

$$\overline{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x_n,$$

nærme seg den teoretiske forventningsverdien $\langle x \rangle = 0$ for store N. Tilsvarende vil standardavviket

$$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \overline{x})^2},$$

nærme seg den teoretiske usikkerheiten $\Delta x = \sigma$.

c) Ei rein harmonisk planbølgje $\exp(ip_0 x/\hbar) \equiv \exp(ikx)$ svarer til ein skarpt definert impuls p_0 (dvs eit skarpt definert bølgjetal $k = p_0/\hbar$). Fordi $\Psi(x,0)$ liknar meir og meir på ei slik rein harmonisk bølgje jo større σ er, må ein da vente at $\langle p_x \rangle \to p_0$ og $\Delta p_x \to 0$ når $\sigma \to \infty$.

d) Vi reknar først ut

$$\widehat{p}_x \Psi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (\pi/\alpha)^{-1/4} e^{ip_0 x/\hbar - \alpha x^2/2} = (p_0 + i\hbar\alpha x)\Psi$$

og

$$\widehat{p}_x^2 \Psi = [(p_0 + i\hbar\alpha x)^2 + \hbar^2 \alpha]\Psi.$$

Det er nå lett å rekne ut at forventningsverdien av p_x faktisk er uavhengige av α (dvs av σ):

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \widehat{p}_x \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (p_0 + i\hbar\alpha x) \Psi dx = p_0 \cdot 1 + i\hbar\alpha \cdot \langle x \rangle = p_0.$$

[1] Hvorfor må vi preparere systemet på nytt foran hver måling? Svar: Se "målepostulatet" (D).

Her har vi brukt at leddet med p_0 gjev normeringsintegralet, medan leddet med x gjev integralet for $\langle x\rangle$. Dette er eit døme på at det løner seg å ha oversikt. Vidare har vi

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(p_0^2+2p_0\cdot i\hbar\alpha x-\hbar^2\alpha^2x^2+\hbar^2\alpha)\Psi dx = (p_0^2+\hbar^2\alpha)\cdot 1+0-\hbar^2\alpha^2\cdot\left\langle x^2 \right\rangle = p_0^2+\frac{\hbar^2}{4\sigma^2}.$$

Usikkerheiten i impulsen for tilstanden $\Psi(x,0)$ er dermed

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle\, p_x^2\, \rangle - \langle\, p_x\, \rangle^2} = \frac{\hbar}{2\sigma}.$$

Vi ser at Δp_xgår mot null når "utstrekninga" σ av bølgepakka går mot uendeleg, slik vi var inne på i c). At forventningsverdien $\langle\, p_x\, \rangle$ er lik p_0 ikkje berre for *store* σ, men for alle, kunne vi kanskje ikkje gjette.

Vi merkar oss at produktet av usikkerhetene i x og p_x er

$$\Delta x\cdot\Delta p_x = \tfrac{1}{2}\hbar,$$

som er den minste verdien vi kan ha ifølge Heisenberg.
Moralen er: Dersom ein ønskjer ein veldig skarpt definert impuls (liten Δp_x), så må ein betale prisen gjennom ei stor utstrekning $\Delta x = \sigma$. Omvendt kan ein ønskje seg ei veldig skarpt *lokalisert* bølgepakke (liten $\Delta x = \sigma$), men da blir både $\Delta p_x = \hbar/2\sigma$ og $\langle\, p_x^2\, \rangle = p_0^2 + \hbar^2/4\sigma^2$ veldig store. Altså, jo mindre plass vi gjev partikkelen, desto meir uskarp blir impulsen, og desto større kinetisk energi er partikkelen nødt til å ha. "Jo trangere bur, desto villare tiger"; denne "kvante-villskapen" er éin av konsekvensane av partiklers bølgjenatur, og spelar ofte ei sentral rolle i kvantemekaniske problemstillingar.

Desse eigenskapane gjeld ikkje berre for den spesielle bølgepakkea $\Psi(x,0)$. Relasjonen ovanfor er nemleg eit spesialtilfelle av **Heisenbergs uskarphetsrelasjon**, som seier at

$$\Delta x\cdot\Delta p_x \geq \tfrac{1}{2}\hbar \qquad\qquad (\text{for alle tilstandar } \Psi(\mathbf{r},t)).$$

I avsnitt 4.5 i boka er det vist at ein kan utleie uskarpheitsrelasjonen frå kommutatorrelasjonen $[x,p_x] = i\hbar$. Der er det og vist likheit ovanfor gjeld berre for ei klasse av Gaussiske funksjonar. Bølgjepakka $\Psi(x,0)$ ovanfor er eit spesialtilfelle av desse funksjonene. Merk elles at grunntilstanden $\psi_0(x)$ for den harmoniske oscillatoren er eit spesialtilfelle av $\Psi(x,0)$ (for $p_0 = 0$), slik at denne bølgjefunksjonen har minimalt usikkerheitsprodukt.

Den fysiske tolkninga av $\langle\, p_x\, \rangle$ og Δp_x er nøyaktig den same som for $\langle\, x\, \rangle$ og Δx, når vi byttar ut x med p_x i tolkninga i b).

Ifølge tilstandspostulatet (B) inneheld $\Psi(x,0)$ og informasjon om sannsynlegheitsfordelinga av impulsar p_x i den aktuelle tilstanden.

Kommentar: Stikkordet her er Fourier-analyse: Som vi var inne på i innleiinga til oppgaveteksten, kan $\Psi(x,0)$ skrivast som eit Fourier-integral over planbølgjer,

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)e^{ipx/\hbar}dp \equiv \int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)\psi_p(x)dp.$$

Her er koeffisient-funksjonen $\phi(p)$ essensielt Fourier-transformen av $\Psi(x,0)$. Som vi skal sjå, kan ein finne den ved å projisere $\Psi(x,0)$ på planbølgja $\psi_p(x)$:

$$\phi(p) = \langle\, \psi_p, \Psi(0)\, \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty}\psi_p^*(x)\Psi(x,0)dx.$$

Integralet er av typen $I(a,b) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2+by}dy = e^{b^2/4a}\sqrt{\pi/a}$, og det viser seg at resultatet blir

$$\phi(p) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2},$$

altså ei Gaussfordeling omkring p_0. Denne funksjonen gjev oss direkte informasjon om impulsinnhaldet i den aktuelle tilstanden; i kapittel 2.4.2 i boka lærer vi at $|\phi(p)|^2 dp$ er sannsynlegheiten for å finne impulsen p_x i intervallet $(p, p+dp)$. $|\phi(p)|^2$ er såleis sannsynleghetstettheiten i impulsrommet. Denne fortel at forventningsverdien av impulsen er p_0, og vi kan også bruke den til å lese ut usikkerheiten i impulsen. Denne er sjølsagt den same som vi fann i d).

e) Sidan gruppehastigheiten til ei de Broglie-bølge er

$$v_g = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{\bar{k}} = \left.\frac{dE}{dp_x}\right|_{\bar{p}_x} = \frac{\bar{p}_x}{m},$$

der $\bar{p}_x = \hbar\bar{k}$ er den dominerande impulsen i bølgepakka, må ein vente at

$$v_g \left(= \frac{d\langle x \rangle_t}{dt}\right) = \frac{p_0}{m},$$

der p_0 er impuls-parameteren som inngår i $\Psi(x, 0)$.
Dette kan ein vise på fleire måtar t.d ved å løyse Schrödingerligningen for den frie partikkelen,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t),$$

med den oppgjevne intialtilstanden $\Psi(x, 0)$. Det følgjer og frå Ehrenfests teorem, se avsnitt 4.4 i boka. Dette kjem vi tilbake til.