

## LØYSING ØVING 4

### Løysing oppgåve 1    Vibrerende to-partikkelsystem

a) Vi kontrollerer fyrst at kreftene på dei to massane er

$$F_1 = -\frac{\partial V}{\partial x_1} = -\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_1} = -k(x-l) \quad \text{og} \quad F_2 = -\frac{\partial V}{\partial x_2} = -\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_2} = k(x-l),$$

som sjølvsagt er motsett like store.

To derivasjonar med omsyn på  $t$  av  $A \cos(\omega_1 t + \alpha)$  gjev ein faktor  $-\omega_1^2$ . Innsetting gjev

$$\frac{d^2}{dt^2}(x-l) = -\omega_1^2(x-l) = -\frac{k}{m_1}(x-l) \quad \text{dvs} \quad \omega_1 = \sqrt{\frac{k}{m_1}}, \quad \text{q.e.d.}$$

Ved hjelp av Newtons 2. lov finn ein differensiallikninga for relativ-koordinaten  $x$ ,

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}(x-l) &= \frac{d^2 x_1}{dt^2} - \frac{d^2 x_2}{dt^2} = \frac{F_1}{m_1} - \frac{F_2}{m_2} = -k(x-l) \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \\ &= -k(x-l) \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \equiv -\frac{k}{\mu}(x-l), \end{aligned}$$

der  $\mu$  er den såkalla reduserte massen. (Eit kjent omgrep for to-partikkel-system i klassisk mekanikk.)

Med prøvfunksjonen  $x-l = A \cos(\omega t + \alpha)$  finn ein vinkelfrekvensen  $\omega = \sqrt{k/\mu}$  for den klassiske svingninga. Her legg vi merke til at den reduserte massen er mindre enn den minste av dei to massane:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = m_1 \frac{1}{1 + m_1/m_2} = m_2 \frac{1}{1 + m_2/m_1} < \min(m_1, m_2).$$

Dette impliserer at vinkelfrekvensen  $\omega$  er større enn  $\max(\omega_1, \omega_2)$ .

[Kommentar: Dersom f.eks  $m_1 = m_2$ , blir den reduserte massen  $\mu = m_1/2$  og vinkelfrekvensen blir  $\omega = \sqrt{2k/m_1}$ . Denne frekvensen er ein faktor  $\sqrt{2}$  høgare enn frekvensen ein får dersom den eine partikkelen er spent fast, medan den andre vibrerer ( $\sqrt{k/m_1}$ ). Dette resultatet kan vi og forstå når vi merkar oss at når *begge* partiklane svingar, i mottakt, så ligg tyngdepunktet (midtpunktet av fjæra) i ro. Vinkelfrekvensen  $\omega$  er bestemt av fjærkonstanten til ei "halv fjær", som er dobbelt så stor som fjærkonstanten til heile fjæra:  $\omega = \sqrt{2k/m_1}$ . Moral: Dersom du sagar av ein del av spiralfjærene på bilen din, for at den skal ligge lågare og sjå meir ut som ein sportsmodell, så blir fjæringa stivare, og kjøre-eigenskapene kan bli dårlegare.]

Når det ikkje verkar ytre krefter på to-partikkel systemet vil tyngdepunktet ifølgje Newtons 1. lov bevege seg med jamn hastigheit. Denne trivielle bevegelsen kan vi eliminere ved å velje eit koordinatsystem der tyngdepunktet ligg i ro.

b) Likninga beskriv ein (fiktiv) partikkel med masse  $\mu$  som bevegar seg i potensialet  $\frac{1}{2}k(x-l)^2$ . Vi har altså eit harmonisk oscillatorpotensial med likevektsposisjon for  $x = l$ . Men at

likevektsposisjonen er forskjellig frå null bør ikkje spele noka rolle for energinivåa. Tvilar du på dette, så er det berre å innføre variabelen  $x' = x - l$ . Den oppgjevne likninga kan då skrivast på forma

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial}{\partial x'} \right)^2 + \frac{1}{2}k(x')^2 \right] \psi(x') = E\psi(x').$$

Dersom du samanliknar med standardutgåva får du energinivåa

$$E_n = \hbar\sqrt{k/\mu}(n + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

der  $\mu$  er den reduserte massen.

Grunntilstanden er  $C_0 \exp(-\mu\omega(x')^2/2\hbar)$ , altså

$$\psi_0(x) = (\mu\omega/\pi\hbar)^{1/4} e^{-\mu\omega(x-l)^2/2\hbar},$$

dvs ein Gauss-funksjon som er symmetrisk med omsyn på likevektsposisjonen  $x = l$ . Sannsynlegheitsfordelinga  $|\psi(x)|^2$  for avstanden  $x = x_1 - x_2$  har altså eit maksimum for likevektsavstanden  $x = l$ .

c) Ved hjelp av dei oppgjevne uttrykka for  $\partial/\partial x_1$  og  $\partial/\partial x_2$  har vi for impulsoperatorane for partikkel 1 og 2:

$$\hat{p}_1 = \frac{m_1}{M} \hat{P} + \hat{p} \quad \text{og} \quad \hat{p}_2 = \frac{m_2}{M} \hat{P} - \hat{p}.$$

Innsetting gjev Hamiltonoperatoren:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(x) \\ &= \frac{1}{2m_1} \left( \frac{m_1}{M} \hat{P} + \hat{p} \right)^2 + \frac{1}{2m_2} \left( \frac{m_2}{M} \hat{P} - \hat{p} \right)^2 + V(x) \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{m_1}{M^2} + \frac{m_2}{M^2} \right) \hat{P}^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \hat{p}^2 + V(x) \quad (\text{kryssledda kansellerer}) \\ &= \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(x) \quad \left( \hat{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X}; \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right), \end{aligned}$$

der

$$\frac{1}{\mu} \equiv \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad \text{slik at} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Her er  $\mu$  den reduserte massen. Merk at Hamiltonoperatoren er uavhengig av tyngdepunktskoordinaten  $X$ . Det fyrste leddet i  $\hat{H}$  beskriv ein fri partikkel med masse  $M$ . Det andre leddet beskriv ein partikkel med masse  $\mu$  som bevegar seg i potensialet  $V(x)$ . Dersom vi blir bedne om å skrive ned Hamiltonoperatoren for to slike uavhengige partiklar, er svaret nettopp operatoren  $\hat{H}$  ovanfor.

Vi merkar oss at  $\hat{p}_1 + \hat{p}_2 = \hat{P}$ . Operatoren  $\hat{P}$  svarer difor til ein observabel som er den samla impulsen  $P = p_1 + p_2$  til dei to partiklane

d) Dersom  $\psi$  skal vere ein eigenfunksjon til  $\hat{H}$  med energi  $E$  og til  $\hat{P}$  med eigenverdi  $P = 0$ , må den oppfylle likningane

$$\hat{P}\psi = 0 \quad \text{og} \quad \hat{H}\psi = E\psi.$$

Den første likninga fortel at  $\psi$  er uavhengig av tyngdepunktskoordinaten  $X$ . Den andre likninga gjev

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x),$$

som er likninga i b). I denne oppgåva har vi altså vist korleis likninga med den reduserte massen oppstår. [Kommentar: Som du lett kan kontrollere er løysinga av likningane  $\hat{H}\psi_{\text{tot}} = E_{\text{tot}}\psi_{\text{tot}}$  og  $\hat{P}\psi_{\text{tot}} = P\psi_{\text{tot}}$  der

$$\psi_{\text{tot}}(x, X) = \psi(x) \cdot e^{iPX/\hbar},$$

og der  $\psi(x)$  er ei løysing av likninga over.]

## Løysing oppgåve 2    Vibrasjonsfriheitsgraden for toatomig molekyl

a) Vi finn

$$k = \frac{1}{2}m\omega^2 = \frac{1}{2}m(\hbar\omega/\hbar)^2 \approx \frac{1}{2} \cdot 16 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{kg} \left( \frac{0.2 \text{eV}}{0.658 \cdot 10^{-15} \text{eVs}} \right)^2 \approx 1.23 \cdot 10^3 \text{ N/m}.$$

Altså ei ganske kraftig fjær. (For ei *makroskopisk* fjær med denne fjærkonstanten kostar det ei kraft på 123 N å strekke den med 10 cm.)

b) Svaret er nei! Kvantemekanikken fortel at avstanden mellom dei to kjernene *ikkje* kan vere skarpt definert. Usikkerheiten i avstanden er minst når oscillatoren er i grunntilstanden. *Forventningsverdien* for avstanden mellom kjernene er da lik likevektsavstanden. Dette svarer til eit minimum for den potensielle energien for systemet. Avstanden er sannsynlegheitsfordelt rundt denne middelveidien med usikkerheit på omlag  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Denne lengda gjev også skalaen for typiske utslag for oscillatoren

Denne lengda er

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \frac{\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}} = \frac{1.055 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{16 \cdot 1.673 \cdot 10^{-27} \cdot 0.2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})}} \text{ m} = 3.6 \cdot 10^{-12} \text{ m}.$$

Altså vesentleg mindre enn 1 atomradius, som er omlag  $10^{-10}$  m.

c) For den makroskopiske oscillatoren er vinkelfrekvensen  $\omega' = \sqrt{k/M}$ . Med  $k = \frac{1}{2}m\omega^2$ , dvs  $\omega = \sqrt{2k/m}$ , blir altså forholdet mellom de to energibeløpa

$$\frac{\hbar\omega'}{\hbar\omega} = \frac{\sqrt{k/M}}{\sqrt{2k/m}} = \sqrt{\frac{m}{2M}} = \sqrt{\frac{16 \cdot 1.673 \cdot 10^{-27}}{2 \cdot 1}} = 1.16 \cdot 10^{-13}.$$

Avstanden mellom energinivåa for den makroskopiske oscillatoren er altså  $\hbar\omega' = 0.2 \text{ eV} \cdot 1.16 \cdot 10^{-13} \approx 2.3 \cdot 10^{-14} \text{ eV}$ . Desse energinivåa ligg altså *verkelig tett!* [Merk elles at moralen er at: Energinivåa for oscillatoren skalerer som  $M^{-1/2}$ .]

For forholdet mellom de to lengdeskalaene finn vi

$$\frac{\sqrt{\hbar/M\omega'}}{\sqrt{\hbar/m\omega}} = \left(\frac{2m}{M}\right)^{1/4} \approx 4.8 \cdot 10^{-7}.$$

Her er moralen at den typiske lengda (for f.eks grunntilstanden) skalerer som  $M^{-1/4}$ . Merk at lengdeskalaen for den makroskopiske oscillatoren då er ca  $10^{-18} \text{ m}$ . I grunntilstanden for denne oscillatoren er usikkerheiten i posisjonen omtrent like stor.

d) Med eit utslag på  $x_{max} = 10 \text{ cm}$  er energien til den makroskopiske oscillatoren

$$E = \frac{1}{2}kx_{max}^2 = \frac{1}{2} \cdot 1.23 \cdot 10^3 \cdot (0.1)^2 \text{ Nm} = 6.15 \text{ Nm}.$$

Denne energien svarer til kvantetal i området

$$n \sim \frac{E}{\hbar\omega'} = \frac{E}{\hbar\omega} \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega'} = \frac{6.15 \text{ Nm}}{0.2 \text{ eV}} \cdot \frac{1}{1.16 \cdot 10^{-13}} = 1.65 \cdot 10^{33}. (!)$$

[Kommentar: Ved å superponere stasjonære tilstandar med kvantetal i dette området kan vi byggje opp ei bølgegruppe med oppførsel som liknar på den klassiske oscillasjonen med eit utslag på 10 cm.]

### Løysing oppgåve 3 Ikkje-stasjonær tilstand for partikkel i boks

a) Då sannsynlegheitstettheiten  $|\Psi(x, 0)|^2$  er symmetrisk mop midtpunktet av boksen, er forventningsverdien av posisjonen ved  $t = 0$

$$\langle x \rangle_0 = L/2.$$

Ut frå kurva for  $|\Psi(x, 0)|^2$  estimerte oppgåveforfatteren (på augemål) usikkerheiten  $\Delta x$  til å ligge ein stad i hogget mellom  $0.12L$  og  $0.13L$ . Men her gjev NTNU deg eit stort slin-gringsmonn. (Kommentar: Ei utrekning vha Maple gav  $\Delta x \approx 0.1199L$ .)

b) Vha dei oppgjevne formlane kan vi skrive initialtilstanden på forma

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) &= \sqrt{\frac{16}{5L}} \sin^3 \frac{\pi x}{L} = \sqrt{\frac{8}{5}} \sqrt{\frac{2}{L}} \left( \frac{3}{4} \sin \frac{\pi x}{L} - \frac{1}{4} \sin \frac{3\pi x}{L} \right) \\ &= \sqrt{\frac{9}{10}} \psi_1(x) - \sqrt{\frac{1}{10}} \psi_3(x). \end{aligned}$$

Initialtilstanden er altså ein superposisjon av grunntilstanden og 2. eksiterte tilstand, og koeffisientane er

$$c_1 = \sqrt{\frac{9}{10}} \quad \text{og} \quad c_3 = -\sqrt{\frac{1}{10}}.$$

c) Med  $\Psi(x, 0) = c_1\psi_1 + c_3\psi_3$  har vi for normeringsintegralet

$$\begin{aligned} \int_0^L \Psi^*(x, 0)\Psi(x, 0)dx &= \int_0^L (c_1\psi_1 + c_3\psi_3)^* (c_1\psi_1 + c_3\psi_3) dx \\ &= |c_1|^2 \int_0^L \psi_1^*\psi_1 dx + |c_3|^2 \int_0^L \psi_3^*\psi_3 dx + c_1^*c_3 \int_0^L \psi_1^*\psi_3 dx + \text{kompl.-konj.} \end{aligned}$$

Dei to første integrala er lik 1 (normering). Dei to siste er lik null (ortogonalitet). Dette gjev

$$\int \Psi^*(x, 0)\Psi(x, 0)dx = |c_1|^2 + |c_3|^2 = \frac{9}{10} + \frac{1}{10} = 1, \quad \text{q.e.d.}$$

d) (i) Bølgjefunksjonen har forma

$$\Psi(x, t) = c_1(t)\psi_1(x) + c_2(t)\psi_2(x),$$

med  $c_1(t) = (3/\sqrt{10}) \exp(-iE_1t/\hbar)$  og  $c_3(t) = (-1/\sqrt{10}) \exp(-iE_3t/\hbar)$ . Ifølgje sannsynlegheitstolkninga av utviklingskoeffisientane er dei moglege måleverdiane for energien

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad \text{og} \quad E_3 = \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} = 9E_1,$$

og sannsynlegheitene ved  $t = 0$  er

$$P_1(0) = |c_1(0)|^2 = \frac{9}{10} \quad \text{og} \quad P_3(0) = |c_3(0)|^2 = \frac{1}{10}.$$

(ii) Forventningsverdien av energien ved  $t = 0$  er

$$\langle E \rangle_0 = P_1(0)E_1 + P_3(0)E_3 = \frac{9}{10} E_1 + \frac{1}{10} E_3 = \frac{9}{5} E_1.$$

(iii) Ved ei måling av energien  $E_n$  er systemet i tilstanden  $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$ , der  $n = 1$  eller 3.

(iv) Då sannsynlegheitene  $|c_1(t)|^2$  og  $|c_3(t)|^2$  er tidsuavhengige, blir svara på (i) og (ii) (ved ei måling ved tida  $t$ ) dei same som for  $t = 0$ .

e) Forventningsverdien av impulsen er

$$\langle p_x \rangle = \int \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx.$$

Då  $\Psi$  er symmetrisk (også for  $t > 0$ ), blir  $d\Psi/dx$  antisymmetrisk, slik at integranden er ein odde funksjon mop midtpunktet av boksen. Difor er  $\langle p_x \rangle = 0$ , både for  $t = 0$  og seinare. Videre er (frå  $E = K = p_x^2/2m$ )

$$\langle p_x^2 \rangle = 2m \langle E \rangle = 2m \cdot \frac{9}{5} E_1 = \frac{9\hbar^2 \pi^2}{5L^2} \quad \text{slik at} \quad \Delta p_x = \frac{3\hbar\pi}{L\sqrt{5}}.$$

Med estimatet  $\Delta x \approx 0.13 L$  blir

$$(\Delta x)_0(\Delta p_x) = \hbar \cdot 0.13 \cdot 3/\sqrt{5} \approx 0.55 \hbar.$$

[Kommentar: Sidan produktet ligg så nær minimalverdien, er det på sin plass å rekne det ut med den meir nøyaktige numeriske verdien  $(\Delta x)_0 = 0.1199 L$ . Innsett finn ein  $(\Delta x)_0(\Delta p_x) = 0.5054 \hbar$ , som ligg svært nær minimalverdien  $\frac{1}{2}\hbar$ .]

Løysing oppgåve 4

a) Integrala er:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx &= f(0) \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - c) g(x) dx &= g(c); \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) (Ax + B) dx &= B; \\ \int_{-\infty}^{\infty} [\delta(x - a) + \delta(x - b)] f(x) dx &= f(a) + f(b); \\ \int_{-1}^4 [\delta(x - 1) + \delta(x + 3)] g(x) dx &= g(1); \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta(2x) f(x) dx &= \frac{1}{2} f(0); \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta(3x - 6) f(x) dx &= \frac{1}{3} f(2); \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixa} dx &= \delta(a); \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixa} dx &= \delta(-a) = \delta(a); \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixa} da &= \delta(x); \quad (\text{NB! Integrasjon over } a) \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{if_1 f_2} df_1 &= \delta(f_2); \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \delta(x - x'') dx &= \delta(x' - x'') \quad . \end{aligned}$$

b) Her er vel oppgaveteksten sjølvforklarande.