Frist for innlevering: *tirsdag 3. februar*

ØVING 2

Oppgave 1 Krumningseigenskapar for eindimensjonale energieigenfunksjonar

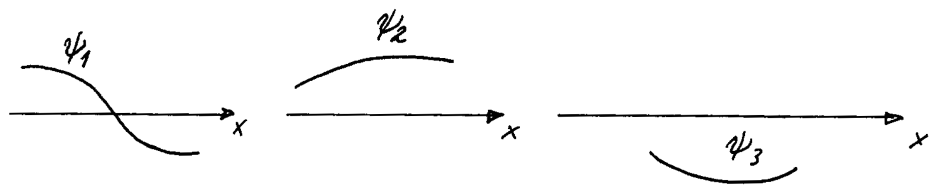
Ein partikkel med masse m bevegar seg i eit eindimensjonalt potensial $V(x)$. Partikkelen er i ein tilstand som svarer til ei reell løysing av den tidsuavhengige Schrödingerligningen, $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, med energien E. I ein dimensjon er Hamiltonoperatoren

$$\hat{H} = \hat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) . \tag{0.1}$$

Vi kan difor omskrive Schrödingers tidsuavhengige likning på forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = [E - V(x)]\psi(x) \qquad \text{dvs.} \qquad \frac{d^2\psi/dx^2}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E] . \tag{0.2}$$

(i) I *klassisk tillatne område*, det vil seie når $E > V(x)$ er altså krumninga $d^2\psi/dx^2$ negativ når ψ er positiv og vice versa; i begge tilfelle er den *relative* krumninga ψ''/ψ negativ. Vi ser at dette tyder at ψ må *krumme mot aksen.* Døme:



(ii) I *klassisk forbode område*, det vil seie når $E < V(x)$ er krumninga $d^2\psi/dx^2$ positiv når ψ er positiv og vice versa; i begge tilfelle er den *relative* krumninga ψ''/ψ positiv. ψ vil da *krumme bort frå aksen.* Døme:

(iii) I eit klassisk vendepunkt, der $V(x) - E$ skiftar forteikn, ser vi av formelen ovanfor at den relative krumninga skiftar fortein. Er $V(x) = E$ i eit endelig område blir $\psi'' = 0$ i dette området. Ved integrasjon ser ein at ψ sjøl er ein lineær funksjon, $\psi = Ax + B$, i dette området.

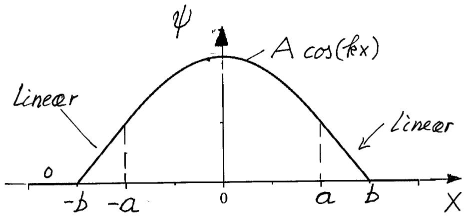
Vi skal sjå at krumninga er eit veldig nyttig redskap når ein skal studere energieigenfunksjonar.

a) Grunntilstanden for ein harmoniske oscillator med potensialet $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ er

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar} . \tag{0.3}$$

Energien E_0 for grunntilstanden er lik $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Kontrollér at $\psi_0(x)$ oppfører seg slik reglane ovanfor seier. Sjekk spesielt at den relative krumninga skiftar forteikn for dei x-verdiane som svarer til dei *klassiske* vendepunkta, det vil seie der $E_0 = V(x)$.

b)

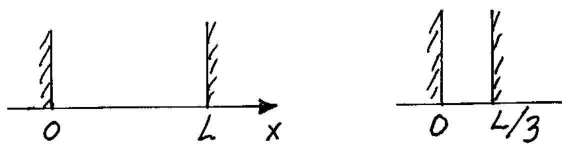


Figuren viser grunntilstanden ψ for eit eindimensjonalt potensial på forma

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for} \quad |x| > b, \\ 0 & \text{for} \quad a < |x| < b, \\ V_0 & \text{for} \quad |x| < a. \end{cases}$$

I områda $a < |x| < b$ er ψ ein lineær funksjon. Bruk dette til å finne energien E for denne tilstanden. Kva forteikn har V_0? Hint: bruk figuren til å finne den relative kruminga i området $|x| < a$.

Oppgave 2 Ymse



a) For ein partikkel med masse m i eit boks-potensial med breidde L er energieigenfunksjonen for grunntilstanden $\psi_1(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(\pi x/L)$. Kva skjer med energinivået E_1 for grunntilstanden i eit boks-potensial når breidda L av boksen reduserast til ein tredel av den opprinnelege?

b) For ein gjeven bølgjefunksjon $\psi(x)$ kan vi vha forventningsverdipostulatet rekne ut

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi \, dx \,, \qquad \langle x^2 \rangle = \int \psi^* x^2 \psi \, dx \,, \tag{0.4}$$

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^* \hat{p}_x \psi \, dx \qquad \langle p_x^2 \rangle = \int \psi^* \hat{p}_x^2 \psi \, dx \,, \tag{0.5}$$

der $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$. Med desse uttrykka kan vi rekne ut usikkerheitene $\Delta x = \sqrt{\langle\, x^2 \,\rangle - \langle\, x \,\rangle^2}$ og $\Delta p_x = \sqrt{\langle\, p_x^2 \,\rangle - \langle\, p_x \,\rangle^2}$. Med bølgjefunksjonen $\psi_1(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(\pi x/L)$ kan ein lett vise at $\langle x \rangle = \frac{L}{2}$ og $\langle x^2 \rangle = \frac{L^2}{6}(2 - \frac{3}{\pi^2})$. Rekn ut $\langle p_x \rangle$ og $\langle p_x^2 \rangle$. Bruk dette til å rekne ut Δx og Δp. Som du ser er usikkerheiten til x proporsjonal med L og usikkerheiten til p omvendt proporsjonal med L. Rekn til slutt ut produktet $\Delta x \Delta p$. Viss du har rekna rett, får du $\Delta x \Delta p > \frac{1}{2}\hbar$. Dette er eit døme på eit generelt resultat i kvantemekanikken, nemleg

Heisenberg *uskarpheitsrelasjon.* Ein kan vise at uansett korleis bølgjefunksjonen er, kan usikkerheitsproduktet aldri $\Delta x \Delta p$ aldri bli mindre enn $\frac{1}{2}\hbar$:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar \; . \tag{0.6}$$

I bølgjeteori lærer ein at jo kortare ei bølgjegruppe eller bølgepakke

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk$$

er, desto større blir usikkerheiten Δk i bølgjetalet. Med $k = p_x/\hbar$ kan vi og seie at jo kortare ei bølgjegruppe

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p_x) e^{ip_x x/\hbar} dp_x$$

er, desto større må usikkerheiten Δp_x i impulsen ($\Delta p_x = \hbar \Delta k$) vere. Omvendt kan vi alltid gjere Δp_x liten ved å velge ein "smal" funksjon $\phi(p_x)$ eller $g(k)$, men dette vil da "straffe seg" ved at bølgja $\psi(x)$ blir svært lang, dvs usikkerheiten Δx i partikkelens posisjon blir stor.

Uskarpheitsrelasjonen ovanfor er eit spesialtilfelle av ein meir generell uskarpheitsrelasjon for to fysiske observable F og G,

$$(\Delta F)_\Psi (\Delta G)_\Psi \geq \tfrac{1}{2} \left| \left\langle i[\widehat{F}, \widehat{G}] \right\rangle_\Psi \right| \qquad \forall \text{ (kvadratisk integrerbare) } \Psi.$$

Frå den siste relasjonen framgår det at Heisenbergs uskarpheitsrelasjon er ein konsekvens av at x og $\widehat{p}_x$ ikkje kommuterer:

$$[x, \widehat{p}_x] = i\hbar.$$

Det er denne relasjonen som gjer at observablane x og p_x ikkje kan ha skarpe verdiar samtidig.

Eit anna døme på observable som ikkje kan ha skarpe verdiar samtidig, er komponentane $L_x = yp_z - zp_y$, $L_y = zp_x - xp_z$ og $L_z = xp_y - yp_x$ av dreieimpulsen $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ for ein partikkel. Desse er som vi skal sjå viktige observable for system som beskrivast vha kulesymmetriske potensial, som t.d. H-atomet.

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

I forelesningane og i øving 1 har vi sett at grunntilstanden for hydrogenatomet er

$$\psi_1 = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$$

og har energien $E_1 = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2$ (≈ -13.6 eV). Vis at forventningsverdiane av den kinetiske og den potensialle energien i denne tilstanden er

$$\langle V \rangle = 2E_1 \,(\approx -27.2) \text{ eV} \qquad \text{og} \qquad \langle K \rangle = -E_1 \,(\approx 13.6) \text{ eV}.$$

Du kan få bruk for integralet

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.$$

og

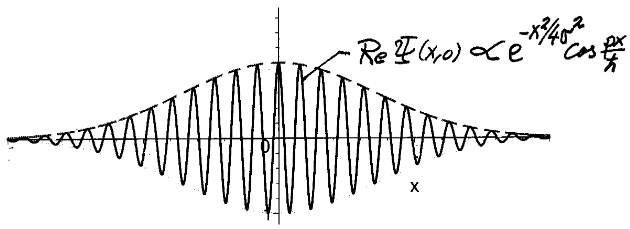
$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \tfrac{1}{2}\hbar \qquad \text{(Heisenbergs uskarphetsrelasjon)},$$

d) Estimat av $\langle K \rangle$ Gjør eit enkelt *overslag* av $\langle K \rangle = \frac{1}{2m} \left\langle p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \right\rangle$ for hydrogentilstanden ψ_1, ved hjelp av uskarpheitsrelasjonen og samanlikn med formelen ovanfor. Hint: Anta at $\Delta p_x \approx \frac{1}{2}\hbar/a_0$ osv, og bruk at $\langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = \langle p_z \rangle = 0$. Merk at $(\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2$. Det kan hende du får bruk for å vise at Rydberg-energien $\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2$ også kan skrives på forma $\hbar^2/(2m_e a_0^2)$.

Oppgave 3

I denne oppgåva ser vi på eit system som ganske enkelt består av ein fri partikkel med masse m. Ein tenkjer seg at dette systemet (eller eigentleg eit *ensemble* av slike) blir preparert i ein tilstand med bølgjefunksjon ved $t = 0$ [1]

$$\Psi(x, 0) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} e^{-x^2/4\sigma^2} e^{ip_0 x/\hbar}.$$



Merk at bølgegruppa $\Psi(x, 0)$ er ei harmonisk planbølgje modulert med ein Gauss-faktor. Gauss-faktoren sørgjer for at $\Psi(x, 0)$ er kvadratisk integrerbar (i motsetning til den harmoniske planbølgja $\exp(ip_0 x/\hbar)$ som vi har i de Broglie-bølgjene). Ifølgje postulat B ("tilstandspostulatet") inneheld funksjonen $\Psi(x, 0)$ all den informasjonen om ensemblet (ved $t = 0$) som det er mogleg å skaffe seg. Som eit ledd i arbeidet med å "knekke den kvantemekaniske koden" skal vi nå sjå korleis vi kan hente ut denne informasjonen

a) Argumentér for at forventningsverdien av posisjonen x for denne tilstanden ved $t = 0$ er lik null, og for at usikkerheiten Δx er uavhengig av parameteren p_0. Hint: Sjå på sannsynlegheitstettheiten $|\Psi(x, 0)|^2$. (Moralen er her at det lønner seg med litt oversikt; istadenfor berre å rekne slavisk i veg.)

b) *Rekn ut* Δx. Hint: For å spare litt arbeid med integrasjonene er det kanskje en fordel å innføre $\alpha = 1/2\sigma^2$, og merke seg Gauss-integrala

$$I_0(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \qquad I_2(\alpha) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial I_0}{\partial \alpha} = \sqrt{\pi} \cdot \tfrac{1}{2}\, \alpha^{-3/2}, \quad \text{osv.}$$

[1] *Korleis* ein skal gå fram eksperimentelt for å prepare eit einsemble av frie partiklar slik at initialtilstanden svarer til bølgefunksjonen $\Psi(x, 0)$ er kanskje ikkje heilt lett å førestille seg. I kvantemekanisk *teori* er det vanleg å anta at ein i prinsippet kan prepare einkvar initialtilstand for det aktuelle ensemblet utan å bekymre seg for mykje om det reint praktiske. La oss likevel gjere eit forsøk. Vi har ein "partikkel-kanon" som skyt ut ein partikkel som forlet kanonen ($x \approx 0$) ved $t = 0$, med impuls $\approx p_0$. For å få eit *ensemble* av slike partiklea må vi gjenta eksperimentet mange gangar og nullstille klokka etter kvar avfyring. Alternative kan vi sende ut ein skur av partiklar samtidig ved $t = 0$. Eit slikt ensemble kan vi representere ved ein bølgefunksjon i form av ei bølgegruppe som følgjer partikkelskuren.

Kva er den fysiske tolkninga av $\langle\, x \,\rangle$ og Δx, når ein gjer ein serie målingar av posisjonen x?

c) Dersom ein veljer parameteren σ veldig stor, er $\Psi(x,0)$ praktisk talt ei rein harmonisk planbølgje. Ei harmonisk planbølgje $\exp(ip_0 x/\hbar)$ svarer som vi husker til ein skarpt definert impuls, $p_x = p_0$. Kva *trur* du ut frå dette vil skje med forventningsverdien $\langle\, p_x \,\rangle$ og usikkerheiten Δp_x når σ vokser mot uendeleg?

d) Funksjonen $\Psi(x,0)$ gjev også eit *nøyaktig svar* på spørsmåla i c): Bruk forventningsverdipostulatet (C) til å *rekne ut* $\langle\, p_x \,\rangle$ og Δp_x (for vilkårleg p_0), og vis at usikkerheitsproduktet $\Delta x \cdot \Delta p_x$ faktisk har den minste verdien det kan ha ifølgje Heisenbergs uskarpheitsrelasjon, for alle σ og p_0.
[Hint: Vis at

$$\widehat{p}_x \Psi(x,0) = (p_0 + i\hbar\alpha x)\Psi(x,0) \qquad \text{og}$$

$$\widehat{p}_x^2 \Psi(x,0) = [(p_0 + i\hbar\alpha x)^2 + \hbar^2\alpha]\Psi(x,0), \qquad \alpha = 1/2\sigma^2.$$

Med desse uttrykka vil du sjå at dei integrala som dukkar opp under utrekninga av $\langle\, p_x \,\rangle$ og $\langle\, p_x^2 \,\rangle$ er normeringsintegralet samt integrala for $\langle\, x \,\rangle$ og $\langle\, x^2 \,\rangle$, som vi alt har rekna ut. Her er det altså igjen lurt å skaffe seg litt matematisk oversikt og ikkje rekne i veg.
Kva er den fysiske tolkninga av $\langle\, p_x \,\rangle$ og Δp_x, når ein gjer serie målingar av impulsen p_x? $\langle\, p_x \,\rangle$ og Δp_x har samanheng med *sannsynlegheitsfordelinga av impulsen* p_x i den aktuelle tilstanden. Kan ein tenkje seg at ein kan finne sannsynlegheitsfordelinga for impulsen frå bølgjefunksjonen $\Psi(x,0)$?

e) Oppførselen til systemet vårt for $t > 0$ er gjeven ved Schrödingerlikninga for ein fri partikkel. Bølgjegruppa vil da bevege seg. Kva gruppehastigheit trur du at bølgjegruppa $\Psi(x,t)$ får?