

LØSNING ØVING 3

Løsning oppgave 3 – 1 Ikke-stasjonær bokstilstand

a. ♠ For $0 < x < L$ er potensialet i boksen lik null, slik at Hamilton-operatoren har formen $\widehat{H} = \widehat{K} + V(x) = -(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2$ i dette området. Da den andrederiverte av $\sin kx$ er $-k^2 \sin kx$, finner vi at

$$\widehat{H}\psi_1(x) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \psi_1(x) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \psi_1(x) \quad \text{og} \quad \widehat{H}\psi_2(x) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \psi_2(x) = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \psi_2(x),$$

dvs de to energieigenverdiene er

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad \text{og} \quad E_2 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 4E_1.$$

♠ Vi merker oss videre at også de tidsavhengige bølgefunksjonene er egenfunksjoner til Hamilton-operatoren. Innsetting på høyresiden i den tidsavhengige Schrödingerligningen gir da

$$\widehat{H}\Psi_i(x, t) = e^{-iE_i t/\hbar} \widehat{H}\psi_i(x) = E_i \Psi_i(x, t), \quad i = 1, 2.$$

Samme resultat finner vi ved innsetting på venstre side:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_i(x, t)}{\partial t} = \psi_i(x) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-iE_i t/\hbar} = E_i \Psi_i(x, t), \quad \text{q.e.d.}$$

♠ I integralet

$$\int \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx \equiv \langle \psi_1, \psi_2 \rangle$$

er $\psi_1(x)$ symmetrisk mhp midtpunktet av integrasjonsintervallet, mens $\psi_2(x)$ er antisymmetrisk. Integranden er altså totalt sett antisymmetrisk, slik at integralet er lik null. De to funksjonene er mao **ortogonale**. (Indreproduktet $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle$ er lik null.)

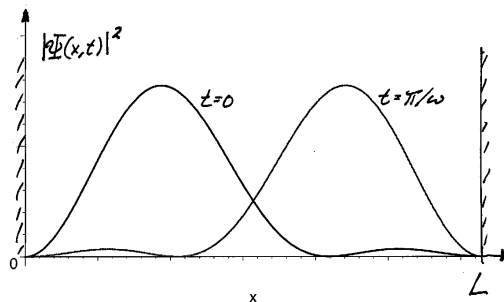
b. ♠ Lineærkombinasjonen $\Psi(x, t)$ oppfyller Schrödingerligningen fordi denne er lineær og homogen. (Operatorene $i\hbar\partial/\partial t$ og \widehat{H} er begge lineære.) Hva dette betyr innser du ved å sette inn. ♠ En stasjonær løsning skal ha form av en romlig funksjon multiplisert med en eksponentialfunksjon på formen $e^{-iEt/\hbar}$. Dette er ikke tilfelle for $\Psi(x, t)$, så denne bølgefunksjonen beskriver en ikke-stasjonær tilstand.

c. ♠ Sannsynlighetstettheten er

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= \frac{1}{2}[(\Psi_1^* + \Psi_2^*)(\Psi_1 + \Psi_2)] \\ &= \frac{1}{2}|\Psi_1(x, t)|^2 + \frac{1}{2}|\Psi_2(x, t)|^2 + \frac{1}{2}[\Psi_1^*(x, t)\Psi_2(x, t) + \Psi_1(x, t)\Psi_2^*(x, t)] \\ &= \frac{1}{2}[\psi_1(x)]^2 + \frac{1}{2}[\psi_2(x)]^2 + \Re[\Psi_1(x, t)\Psi_2^*(x, t)] \\ &= \frac{1}{2}[\psi_1(x)]^2 + \frac{1}{2}[\psi_2(x)]^2 + \Re[\psi_1(x)\psi_2(x)e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}] \\ &= \frac{1}{2}[\psi_1(x)]^2 + \frac{1}{2}[\psi_2(x)]^2 + \psi_1(x)\psi_2(x) \cos \omega t, \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Her er $\omega (\equiv \omega_{21}) = (E_2 - E_1)/\hbar = 3E_1/\hbar$. Vi ser at tidsavhengigheten i $|\Psi(x, t)|^2$ oppstår fordi de to tidsavhengige eksponentialfaktorene i $\Psi_1(x, t)$ og $\Psi_2(x, t)$ ikke varierer i takt.

Morale er at en superposisjon av to stasjonære tilstander med forskjellige energier gir en ikke-stasjonær tilstand, hvor sannsynlighetstettheten endrer seg med tiden. Kurven til venstre i figuren viser $|\Psi(x, t)|^2$ for $t = 0$ og $t = 2\pi/\omega$, $4\pi/\omega$ osv. Periodetiden, som er tiden mellom hver gang $|\Psi(x, t)|^2$ er identisk med sannsynlighetstettheten i begynnelsestilstanden, er altså her $T_{21} = 2\pi/\omega_{21} \equiv 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$. Kurven til høyre i figuren viser $|\Psi(x, t)|^2$ for $t = \pi/\omega$ (osv).



Her ser vi at sannsynlighetsfordelingen (og dermed tyngdepunktet $\langle x \rangle$ av denne) flytter seg med tiden, et typisk trekk for en ikke-stasjonær tilstand. (Tyngdepunktet oscillerer mellom to ytterpunkter.)

♠ Superponerer vi i stedet $\Psi_1(x, t)$ og $\Psi_3(x, t)$, så blir frekvensen $\omega_{31} \equiv (E_3 - E_1)/\hbar = 8E_1/\hbar = 8\omega_{21}/3$, slik at periodetiden T_{31} blir en faktor $8/3$ mindre enn T_{21} .

d. ♠ Integralet over sannsynlighetstettheten ovenfor blir

$$\int |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{1}{2} \int [\psi_1(x)]^2 dx + \frac{1}{2} \int [\psi_2(x)]^2 dx + \cos \omega t \int \psi_1(x) \psi_2(x) dx = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 0 = 1 \quad \forall t, \quad \text{q.e.d.,}$$

hvor de to første integralene er lik 1 (normering), mens det siste er lik null (ortogonalitet). Dette illustrerer at det er lett å finne normen av en funksjon som er utviklet i ortonormerte funksjoner, som her. Så det er altså en fordel med ortogonale egenfunksjoner.

e. ♠ Kjøring av “box_non_stationary.m” (med $n_1 = 1$ og $n_2 = 2$, dvs superposisjon av grunntilstanden og første eksiterte tilstand) viser hvordan $|\Psi(x, t)|^2$ “svinger mellom de to ytterpunktene” i figuren ovenfor. ♠ Fra denne animasjonen kan vi lese av at $\langle x \rangle$ svinger mellom $\approx 0.32 L$ og $\approx 0.68 L$. ♠ Middelverdien over en hel periode av $\langle x \rangle$ er opplagt $L/2$. ♠ Animasjonen indikerer at tyngdepunktet $\langle x \rangle_t$ av sannsynlighetsfordelingen oscillerer tilnærmet harmonisk. ♠ Dette er nettopp hva vi bør vente ut fra formelen oppgitt i pkt. c. Ifølge denne er

$$\langle x \rangle_t = \frac{1}{2} \int x [\psi_1(x)]^2 dx + \frac{1}{2} \int x [\psi_2(x)]^2 dx + \cos \omega t \int x \psi_1(x) \psi_2(x) dx.$$

Her er alle integralene tidsuavhengige (og forskjellige fra null). Så $\langle x \rangle_t$ vil ganske riktig oscillere harmonisk.

Kommentar: De to første integralene er opplagt lik $L/2$ (hvorfor?). Det siste er $-16 L/(9\pi^2) \approx -0.18$, så $\langle x \rangle_t \approx L(0.5 - 0.18 \cos \omega t)$, i overensstemmelse med animasjonen.

f. ♠ Her ser det da vel ut som om bølgegruppen beveger seg med jevn hastighet når den ikke er “i kontakt med veggene”, og slik bør det faktisk også være; bølgegruppen bør bevege seg “fritt” når den ikke har kontakt med veggene.

Løsning Oppgave 3 – 2 Litt mer om krumning av egenfunksjoner

a. ♠♠ Da ψ'' er endelig innenfor veggene, følger det (ved integrasjon) at ψ' må være kontinuerlig og endelig. Da må også ψ være kontinuerlig og endelig.

b. ♠ Egenverdiligningen $\widehat{H}\psi = E\psi$ er oppfylt når $\widehat{H}\psi(x)$ er lik konstanten E multiplisert med $\psi(x)$, for alle x . Vi har altså

$$E = \frac{\widehat{H}\psi(x)}{\psi(x)} = \text{en konstant uavhengig av } x.$$

Denne konstanten E kan vi beregne vha uttrykket ovenfor dersom vi kjenner $\psi(x)$ i et lite område. Et eksempel følger i pkt. **c**.

c. ♠ For $-a_0 < x < a_0$ er

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0,$$

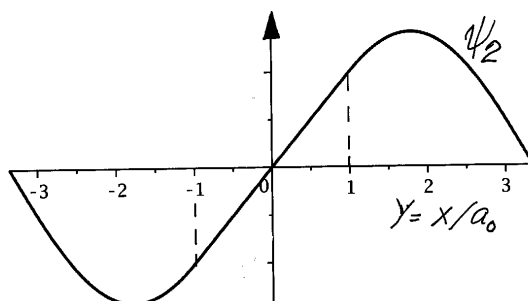
og siden $\psi_2 = Ax$ er lineær slik at $\psi_2'' = 0$ i dette området, finner vi ganske enkelt at

$$E_2 = \frac{\widehat{H}\psi(x)}{\psi(x)} = \frac{V_0\psi_2}{\psi_2} = V_0.$$

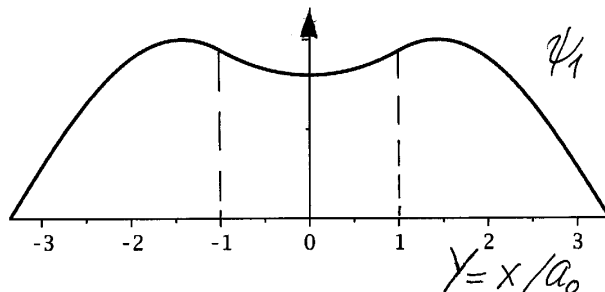
♠ Mellom barrieren og de harde veggene er $V(x) = 0$, slik at disse områdene er klassisk tillatte (med en kinetisk energi $K_2 = E_2 = V_0$), og slik at den tidsuavhengige Schrödingerligningen i disse områdene tar formen

$$\psi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E_2] \psi_2 = \frac{2m}{\hbar^2} [0 - V_0] \psi_2 = -\frac{1}{a_0^2} \psi_2.$$

I disse områdene vil da ψ_2 bli sinusformet med bølgetall $k_2 = 1/a_0$. Her krummer altså ψ_2 mot x -aksen. Den ser slik ut:



d. ♠ Da grunntilstandsenergien (som alltid) er lavere enn energien for 1. eksiterte tilstand, blir barriereområdet klassisk forbudt for grunntilstanden. Fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen følger det da at grunntilstanden ψ_1 må krumme *utover* fra x -aksen i barriereområdet, mens den krummer *mot* akse utenfor dette området, noe langsommere enn først eksiterte. Den ser slik ut:



Løsning Oppgave 3 – 3 Δx og Δp_x for grunntilstanden i harmonisk oscillator m.m.

a. ♠♠ Ved å sammenligne $\psi_0(x) = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ (oppg 3) med $\Psi(x, 0) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} e^{-x^2/4\sigma^2 + ip_0 x/\hbar}$ (oppg 7), ser vi at den første er et spesialtilfelle av den andre, for

$$\frac{m\omega}{2\hbar} = \frac{1}{4\sigma^2} \quad \text{og} \quad p_0 = 0.$$

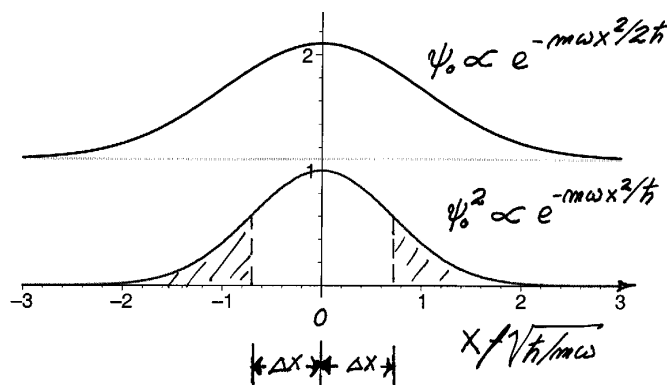
Ved hjelp av resultatene fra oppgave 7, $\langle p_x \rangle = p_0$, $\Delta x = \sigma$ og $\Delta p_x = \hbar/2\sigma = \hbar/2\Delta x$, innser vi da at usikkerhetene i posisjonen og impulsen for tilstanden $\psi_0(x)$ er gitt ved

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \equiv \frac{b_0}{\sqrt{2}} \quad \text{og} \quad \Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}, \quad \text{slik at} \quad \Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{1}{2}\hbar,$$

mens forventningsverdien av impulsen p_x for grunntilstanden i oscillatoren er

$$\langle p_x \rangle = 0.$$

Det siste resultatet gjelder i virkeligheten for alle bundne, stasjonære tilstander. Her kan vi ellers merke oss at $b_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ er avstanden fra origo til det klassiske vendepunktet for tilstanden $\psi_0(x)$. (Se oppgave 3, hvor vi fant at $P_{|x|>b_0} = 16\%$. Til sammenligning har vi at $P_{|x|>\Delta x} \approx 1/3$.) Se figuren nedenfor.



b. ♠ Forventningsverdien av energien er

$$\langle E \rangle = \sum_n P_n E_n = \sum_n |c_n|^2 E_n = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 \cdot 4E_1 = \frac{7}{4} E_1 = 1.75 E_1.$$

Kvadratet av usikkerheten er middelveien av det kvadratiske avviket fra middelveien:

$$(\Delta E)^2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \sum_n |c_n|^2 (E_n - \langle E \rangle)^2 = \dots = \frac{27}{16} E_1^2.$$

Dette gir en usikkerhet

$$\Delta E = \sqrt{27/16} E_1 \approx 1.3 E_1.$$

c. ♠ Vi regner ut

$$\psi' = C \exp[-m\omega(x-a)^2/2\hbar] \left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x-a) \right] = \left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x-a) \right] \psi$$

og

$$\psi'' = \left[-\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}(x-a)^2 \right] \psi,$$

og setter inn i den tidsuavhengige Schrödingerligningen, som gir

$$[E - V(x)]\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' = \left[\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2 \right] \psi.$$

Her er $\psi \neq 0$ for alle x . Siden energieigenverdien skal være en konstant (uavhengig av x) må løsningen da bli at

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2 + K \quad \text{og} \quad E = \frac{1}{2}\hbar\omega + K,$$

der K er en ubestemt konstant (med dimensjon energi). Potensialet er altså harmonisk.

Løsning Oppgave 3 – 4 Oppfølger til oppgave 7

a. ♠ Fra relasjonen

$$\langle p_x^2 \rangle = \langle p_x \rangle^2 + (\Delta p_x)^2 \geq \langle p_x \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2},$$

som følger fra Heisenbergs uskarphetsrelasjon, ser vi at når partikkelen gis veldig liten plass, ved at $\Delta x \rightarrow 0$, så er $\langle p_x^2 \rangle$ (og dermed $\langle K \rangle = \langle p_x^2/2m \rangle$) nødt til å gå mot uendelig. Da partikkelen umulig kan ha uendelig høy energi, skjønner vi at den umulig kan ha helt skarpt definert posisjon, som svarer til $\Delta x = 0$.

b. ♠ Med $V(x) = 0$ blir forventningsverdien av energien $\langle E \rangle = \langle p_x^2/2m \rangle$. Da det er oppgitt at likhetstegnet i pkt. **a** gjelder for den aktuelle tilstanden, har vi at

$$\langle p_x^2 \rangle = \langle p_x \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2},$$

idet $\langle p_x \rangle = p_0$ og $\Delta x = \sigma$. Alle disse resultatene ble funnet i forrige øving. Men la oss like godt kontrollere dette, med en metode som kan komme godt med senere. Da \hat{p}_x er hermitesk, har vi generelt

$$\langle p_x^2 \rangle_\Psi = \int \Psi^* \hat{p}_x \hat{p}_x \Psi d\tau = \int (\hat{p}_x \Psi)^* \hat{p}_x \Psi d\tau = \int |\hat{p}_x \Psi|^2 d\tau.$$

For den aktuelle tilstanden er

$$\hat{p}_x \Psi(x, 0) = (p_0 + i\hbar x/2\sigma^2) \Psi(x, 0).$$

Med $\langle x^2 \rangle = \sigma^2$ har vi da

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle p_x^2/2m \rangle = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} (p_0^2 + \hbar^2 x^2/4\sigma^4) |\Psi(x, 0)|^2 dx \\ &= \frac{p_0^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{8m\sigma^2}. \end{aligned}$$

♠ Når $\sigma \rightarrow \infty$ ($\Delta p_x \rightarrow 0$), ser vi at $\langle E \rangle \rightarrow p_0^2/2m$; en fri partikkel med noenlunde veldefinert impuls har også en noenlunde veldefinert energi ($\Delta E \rightarrow 0$). Insisterer vi derimot på en veldig liten Δx ($\sigma \rightarrow 0$), så ser vi at $\langle E \rangle$ får et veldig stort tillegg i den forventede energien, pga kvantevillskapen. I denne situasjonen vil også usikkerheten i energien bli veldig stor. (Den som orker kan regne ut ΔE .)

c. ♠♠ Fra den oppgitte formelen for sannsynlighetstettheten $|\Psi(x, t)|^2$ ser vi at denne er normalfordelt, omkring punktet $x = p_0 t/m$. Følgelig er forventningsverdien for posisjonen ved tiden t gitt ved

$$\langle x \rangle_t \left(= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \right) = \frac{p_0 t}{m}.$$

Denne forventningsverdien er lik null for $t = 0$ (slik vi fant i oppg. 7), og beveger seg med hastigheten

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{p_0}{m},$$

som er gruppehastigheten vi fant i oppg. 7.

♠ Usikkerheten $(\Delta x)_t$ leser vi rett ut av normalfordelingen (jf oppgaveteksten og moralen i oppgave 7.b):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2(\Delta x)_t^2} &= \frac{1}{2(\sigma^2 + \hbar^2 t^2/4m^2\sigma^2)} \implies \\ (\Delta x)_t &= \sqrt{\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^2}}. \end{aligned}$$

(Som en kontroll legger vi merke til at $(\Delta x)_t$ går mot den korrekte verdien σ for $t \rightarrow 0$.)

Kommentar: Resultatene ovenfor forteller at både forventningsverdien $\langle x \rangle_t$ og usikkerheten $(\Delta x)_t$ ved en ny måling ved tiden t er forskjellige fra verdiene ved $t = 0$. Samme resultat som ved den første “målingen” (prepareringen) kan vi derfor bare få umiddelbart etter denne. Moralene er at den tilstanden som systemet tvinges inn i ved den første målingen vanligvis endrer seg raskt med tiden, i henhold til Schrödingerligningen. Dette er grunnen til at vi understreker dette med “umiddelbart etter” i målepostulatet. Det finnes unntak: Måler vi f.eks energien til den harmoniske oscillatoren, og finner resultatet E_1 , vil oscillatoren fortsette å være i den stasjonære tilstanden $\Psi_1(x, t)$, og en ny måling lenge etter vil gi samme energi E_1 .

d. ♠♠ Dersom vi påtvinger den frie partikkelen en tilstand $\Psi(x, 0)$ med veldig liten usikkerhet $\Delta x = \sigma$ ved $t = 0$, ser vi av formelen for $(\Delta x)_t$ at spredningen av bølgepakken øker raskere med t jo mindre σ vi velger. Moralene er at jo skarpere definert posisjon vi velger ved $t = 0$, desto hardere straffes vi i form av økt uskarphet ved tiden t .

e. ♠ Meningen her er å vise at denne “straffen” ikke er særlig mystisk. Jo mindre $\Delta x = \sigma$ vi velger ved $t = 0$, desto større er spredningen $\Delta p_x = \hbar/2\sigma$ i impulsen. Om vi tenker halvklassisk, så vil en partikkel med en impuls i intervallet $-\Delta p_x < p_x < \Delta p_x$ etter tiden t befinne seg et sted i intervallet

$$|x| < \Delta v_x \cdot t = \frac{\Delta p_x}{m} \cdot t = \frac{\hbar t}{2m\sigma}.$$

Dette er samme budskap som vi får fra formelen for usikkerheten i x ,

$$(\Delta x)_t \approx \frac{\hbar t}{2m\sigma}.$$

I dette tilfellet har altså den halvklassiske tankegangen noe for seg.

Løsning oppgave 3 – 5

a. ♠

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

b. ♠ Her er vel oppgaveteksten selvforklarende.