TFY4215 Innføring i kvantefysikk. Institutt for fysikk, NTNU.
Løsningsforslag til Øving 7.

Løsning OPPGAVE 13 **Vibrerende to-partikkelsystem**

a. ♠Vi kontrollerer først at kreftene på de to massene kommer ut som annonsert:

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

som selvsagt er motsatt like store.
To derivasjoner med hensyn på t av $A\cos(\omega_1 t + \alpha)$ gir en faktor $-\omega_1^2$. Innsetting gir da

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

♠Med begge massene fri til å svinge finner vi ved hjelp av Newtons 2. lov den oppgitte differensialligningen for relativ-koordinaten x,

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dt^2}(x-l) &= \frac{d^2x_1}{dt^2} - \frac{d^2x_2}{dt^2} = \frac{F_1}{m_1} - \frac{F_2}{m_2} = -k(x-l)\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right) \\ &= -k(x-l)\,\frac{m_1+m_2}{m_1m_2} \equiv -\frac{k}{\mu}(x-l),\end{aligned}$$

hvor μ er den såkalte reduserte massen. (Et kjent begrep for to-partikkel-systemer i klassisk mekanikk.)
♠Med prøveløsningen $x - l = A\cos(\omega t + \alpha)$ finner vi da vinkelfrekvensen $\omega = \sqrt{k/\mu}$ for den klassiske svingningen. Her legger vi merke til at den reduserte massen er mindre enn den minste av de to massene:

$$\mu = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2} = m_1\,\frac{1}{1+m_1/m_2} = m_2\,\frac{1}{1+m_2/m_1} < \min(m_1, m_2).$$

Følgelig er vinkelfrekvensen ω 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 en faktor $\sqrt{2}$ høyere enn den en får dersom den ene partikkelen er spent fast, mens den andre vibrerer ($\sqrt{k/m_1}$). Dette resultatet kan også forstås ved å merke seg at når *begge* partiklene svinger, i mottakt, så kan tyngdepunktet (midtpunktet av fjæren) antas å ligge i ro. Vinkelfrekvensen ω er da bestemt av fjærkonstanten til en "halv fjær", som er dobbelt så stor som fjærkonstanten til hele fjæren: $\omega = \sqrt{2k/m_1}$. Moral: Dersom du sager av en del av spiralfjærene på bilen din, for at den skal ligge lavere og se mer ut som en sportsmodell, så blir fjæringen stivere, og kjøre-egenskapene kan bli dårligere.]
♠Når det ikke virker noen ytre krefter på dette to-partikkel-systemet, vil tyngdepunktet ifølge Newtons 1. lov bevege seg med jevn hastighet, fordi systemet ikke påvirkes av noen ytre kraft. Denne trivielle bevegelsen kan vi ellers eliminere ved å velge et koordinatsystem hvor tyngdepunktet ligger i ro.

b. ♠Den oppgitte ligningen beskriver en (fiktiv) partikkel med masse μ som beveger seg i potensialet $\frac{1}{2}k(x-l)^2$. Vi har altså et harmonisk oscillatorpotensial med likevektsposisjon for $x = l$. Men at likevektsposisjonen er forskjellig fra null bør ikke spille noen rolle for energinivåene. Tviler du på dette, så er det bare å innføre variabelen $x' = x - l$. Den oppgitte ligningen tar da formen

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

Sammenligning med standardutgaven gir energinivåene

$$E_n = \hbar\sqrt{k/\mu}(n + \tfrac{1}{2}) = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}), \qquad n = 0, 1, 2, \cdots,$$

der μ 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 en Gauss-funksjon som er symmetrisk med hensyn på likevektsposisjonen $x = l$. Sannsynlighetsfordelingen $|\psi(x)|^2$ for avstanden $x = x_1 - x_2$ har altså sitt maksimum for likevektsavstanden $x = l$.

c. ♠Ved hjelp av de oppgitte uttrykkene for $\partial/\partial x_1$ og $\partial/\partial x_2$ har vi for impulsoperatorene for partikkel 1 og 2:

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

Innsetting gir da for Hamilton-operatoren:

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

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 μ den såklate reduserte massen. Merk at Hamilton-operatoren er uavhengig av tyngdepunktskoordinaten X. Det første leddet i $\widehat{H}$ beskriver en fri partikkel med masse M. Det andre leddet beskriver en partikkel med masse μ som beveger seg i potensialet $V(x)$. Dersom vi blir bedt om å skrive ned Hamilton-operatoren for to slike uavhengige partikler, er svaret nettopp operatoren $\widehat{H}$ ovenfor.
♠Vi merker oss at $\widehat{p}_1 + \widehat{p}_2 = \widehat{P}$. Operatoren $\widehat{P}$ svarer derfor til en observabel som består av den samlede impulsen $P = p_1 + p_2$ til de to partiklene.

d. ♠Dersom ψ skal være en egenfunksjon til $\widehat{H}$ med energi E og til $\widehat{P}$ med egenverdi $P = 0$, må den oppfylle ligningene

$$\widehat{P}\psi = 0 \qquad \text{og} \qquad \widehat{H}\psi = E\psi.$$

Den første av disse forteller at ψ er uavhengig av tyngdepunktskoordinaten X. Den andre gir

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

som er ligningen under pkt. **b**. I denne oppgaven har vi altså vist hvordan denne ligningen med den reduserte massen oppstår. [Kommentar: Som du lett kan kontrollere er løsningen av ligningene $\widehat{H}\psi_{\rm tot}=E_{\rm tot}\psi_{\rm tot}$ og $\widehat{P}\psi_{\rm tot}=P\psi_{\rm tot}$ generelt

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

hvor $\psi(x)$ er en løsning av ligningen over.]

Løsning OPPGAVE 14 Vibrasjonsfrihetsgraden for to-atomig molekyl

a. ♠Vi finner

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

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

b. ♠Svaret er nei! Kvantemekanikken forteller at avstanden mellom de to kjernene *ikke* kan være skarpt definert. Usikkerheten i avstanden er minst når oscillatoren er i grunntilstanden. *Forventningsverdien* for avstanden mellom kjernene er da lik likevektsavstanden (som svarer til et minimum for den potensielle energien for systemet). Avstanden er "sannsynlighetsfordelt" omkring denne verdien, med en usikkerhet av *størrelsesorden* $\sqrt{\hbar/m\omega}$. Denne lengden gir også skalaen for typiske "utsving" for denne oscillatoren (når den befinner seg i en av de laveste energiegentilstandene).
♠Denne lengden 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 vesentlig mindre enn 1 atomradius, som er av størrelsesorden 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 energibeløpene

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

Avstanden mellom energinivåene for den makroskopiske oscillatoren er altså $\hbar\omega'=0.2\ \text{eV}\cdot 1.16\cdot 10^{-13}\approx 2.3\cdot 10^{-14}$ eV. Så disse energinivåene ligger *virkelig tett*! [Merk ellers at moralen er at: Energinivåene for oscillatoren "skalerer" som $M^{-1/2}$.]
♠For forholdet mellom de to lengdeskalaene finner vi

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

[Så her er moralen at den typiske lengden (for f.eks grunntilstanden) skalerer som $M^{-1/4}$.] Merk at lengdeskalaen for den makroskopiske oscillatoren da er ca 10^{-18} m. I grunntilstanden for denne oscillatoren er usikkerheten i posisjonen omtrent så stor som dette.

d. ♠Med et utsving på $x_{max} = 10$ 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 kvantetall 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 tilstander med kvantetall i dette området kan vi bygge opp en bølgegruppe med en oppførsel som ligner på den klassiske oscillasjonen med et utsving på 10 cm.]

Løsning OPPGAVE 15 **Ikke-stasjonær tilstand for partikkel i boks**

a. ♠Da sannsynlighetstettheten $|\Psi(x,0)|^2$ er symmetrisk mhp midtpunktet av boksen, er forventningsverdien av posisjonen ved $t = 0$

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

♠Ut fra kurven for $|\Psi(x,0)|^2$ anslo oppgaveforfatteren (på øyemål) usikkerheten Δx til å ligge et sted i hogget mellom $0.12\,L$ og $0.13\,L$. Men her gis du et betydelig slingringsmonn. (Kommentar: En beregning vha Maple ga $\Delta x \approx 0.1199\,L$.)

b. ♠Vha de oppgitte formlene kan vi skrive begynnelsestilstanden på formen

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

Begynnelsestilstanden er altså en superposisjon av grunntilstanden og 2. eksiterte tilstand, og koeffisientene er

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

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

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

De to første integralene er lik 1 (normering). De to siste er lik null (ortogonalitet). Så

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

d. ♠(i) Bølgefunksjonen har formen

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

med $c_1(t) = (3/\sqrt{10})\exp(-iE_1t/\hbar)$ og $c_3(t) = (-1/\sqrt{10})\exp(-iE_3t/\hbar)$. Ifølge sannsynlighetstolkningen av utviklingskoeffisientene er de mulige måleverdiene for energien da

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

og de respektive sannsynlighetene ved $t = 0$ er

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

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

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

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

♠(iv) Da sannsynlighetene $|c_1(t)|^2$ og $|c_3(t)|^2$ er tidsuavhengige, blir svarene på (i) og (ii) (ved en måling ved tiden t) de samme som for $t = 0$.

e. ♠Forventningsverdien av impulsen er

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

Da Ψ er symmetrisk (også for $t > 0$), blir $d\Psi/dx$ antisymmetrisk, slik at integranden er en odde funksjon (mhp midtpunktet av boksen). Følgelig er $\langle p_x \rangle = 0$, både for $t = 0$ og senere.

♠Videre er (fra $E = K = p_x^2/2m$)

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

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

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

[Kommentar: Siden produktet ligger så nær minimalverdien, er det på sin plass å regne det ut med den mer nøyaktige numeriske verdien $(\Delta x)_0 = 0.1199\,L$. Med denne innsatt finner en $(\Delta x)_0(\Delta p_x) = 0.5054\,\hbar$, som jo ligger svært nær minimalverdien $\frac{1}{2}\hbar$.]