Usikkerhet. Uskarphetsrelasjoner

[PCH 4.5 ; DJG 1.6, 3.4 ; IØ Øving 1]

Standardavvik : $\Delta X = \sqrt{\langle \underbrace{(x - \langle x \rangle)}_{D}\rangle^2} = $ Root Mean Square Deviation
R M S

$$= \sqrt{\langle x^2 - 2x\langle x\rangle + \langle x\rangle^2\rangle}$$

$$= \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \qquad \text{(RMSD)}$$

For to målbare størrelser A og B gjelder :

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|}$$

Bevis:

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A\rangle)^2\rangle = \langle (\hat{A} - \langle A\rangle)^2\rangle = \langle \tilde{A}^2\rangle$$

dvs $\tilde{A} = \hat{A} - \langle A\rangle$

$$(\Delta B)^2 = \langle (B - \langle B\rangle)^2\rangle = \langle (\hat{B} - \langle B\rangle)^2\rangle = \langle \tilde{B}^2\rangle$$

dvs $\tilde{B} = \hat{B} - \langle B\rangle$

Dvs, $\tilde{A}$ og $\tilde{B}$ er operatorer for hhv ΔA og ΔB.

Triks : Start med

$$\int \left| \tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi \right|^2 dx \geq 0 ,$$

i første omgang med en vilkårlig, reell α.

Siden A og B er reelle, er alle operatorer $(\hat{A}, \hat{B}, \tilde{A}, \tilde{B})$ hermiteske, så PCH 2.8 kan brukes etter behov.

$$\int (\tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi)^* (\tilde{A}\Psi + i\alpha\tilde{B}\Psi)\, dx$$

$$\int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{A}\Psi \, dx + \alpha^2 \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{B}\Psi\, dx$$

$$+ i\alpha \int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{B}\Psi\, dx - i\alpha \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{A}\Psi\, dx$$

Med PCH2.8 fås alle integraler på formen $\int \Psi^* (\ldots)\Psi\, dx$:

$$\int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx = \int \Psi^* \tilde{A}\tilde{A}\Psi\, dx = \langle \tilde{A}^2\rangle = (\Delta A)^2$$

$$\int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{B}\Psi dx = \alpha^2 \langle \tilde{B}^2 \rangle = \alpha^2 (\Delta B)^2$$

$$\int (\tilde{A}\Psi)^* \tilde{B}\Psi\, dx - \int (\tilde{B}\Psi)^* \tilde{A}\Psi dx = \langle \tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A}\rangle = \langle [\tilde{A},\tilde{B}]\rangle$$

Med andre ord:

$$(\Delta A)^2 + \alpha^2 (\Delta B)^2 + i\alpha \langle [\tilde{A},\tilde{B}]\rangle \geq 0$$

Forenkler siste leddet:

$$[\tilde{A},\tilde{B}] = (\hat{A} - \langle A\rangle)(\hat{B} - \langle B\rangle) - (\hat{B} - \langle B\rangle)(\hat{A} - \langle A\rangle)$$

$$= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$ + 6 ledd som kansellerer, da $\langle A\rangle$ og $\langle B\rangle$ kommuterer med $\hat{A}$ og $\hat{B}$

$$= [\hat{A},\hat{B}]$$

$$\Rightarrow \quad (\Delta A)^2 + \alpha^2(\Delta B)^2 + i\alpha \langle [\hat{A},\hat{B}]\rangle \geq 0$$

Mult. med $(\Delta B)^2$ gir

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq -\alpha^2 (\Delta B)^4 - \alpha \langle [\hat{A},\hat{B}]\rangle i (\Delta B)^2$$

Her er høyre side en parabel med negativ krumning, når den betraktes som en funksjon av den vilkårlige reelle α. Ulikheten gjelder generelt, dvs også for den verdien av α som gir maksimal verdi på høyre side. Denne max-verdien finner vi ved å ta $d/d\alpha$ og sette lik null:

$$\frac{d}{d\alpha}\left\{-\alpha^2(\Delta B)^4 - \alpha\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle i(\Delta B)^2\right\} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \alpha = -\frac{i}{2(\Delta B)^2}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle$$

Setter denne α inn på høyre side og får

$$(\Delta A)^2\cdot(\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle^2 - \frac{1}{2}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle^2 = \underbrace{-\frac{1}{4}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle^2}_{\text{(Positiv! } [\hat{A},\hat{B}] \text{ er imaginær.)}}$$

$$\Rightarrow \quad \Delta A\cdot\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right| \qquad \underline{\text{qed}}$$

Eks 1: $[x, \hat{p}_x] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta x\cdot\Delta p_x \geq \hbar/2$

$\Rightarrow$ en partikkel <u>kan ikke</u> ha skarp x og p_x samtidig

Eks 2: $[x, \hat{p}_z] = 0$

$\Rightarrow$ <u>kan</u> ha skarp verdi av x og p_z samtidig

Eks 3: Bestem $\Psi(x)$ som gir minimalt uskarphetsprodukt, dvs $\Delta x\cdot\Delta p = \hbar/2$.

Løsn: Dette må tilsvare

$$\tilde{A}\,\Psi + i\alpha\,\tilde{B}\,\Psi = 0$$

med $\tilde{A} = x - \langle x\rangle$ og $\tilde{B} = \hat{p} - \langle p\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \langle p\rangle$

og $\alpha = -\frac{i}{2(\Delta p)^2}\langle[x,\hat{p}]\rangle = \frac{\hbar}{2(\Delta p)^2} = \frac{\Delta x\cdot\Delta p}{(\Delta p)^2} = \frac{\Delta x}{\Delta p}$

$$\Rightarrow \quad (x - \langle x \rangle)\Psi + \left(\alpha\hbar \frac{d}{dx} - i\alpha\langle p \rangle\right)\Psi = 0$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d\Psi}{\Psi} = \left(-\frac{x - \langle x \rangle}{\alpha\hbar} + \frac{i\langle p \rangle}{\hbar}\right)dx$$

$$\Rightarrow \quad \Psi(x) \sim \exp\left\{-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\alpha\hbar} + \frac{i\langle p \rangle x}{\hbar}\right\}$$

Her er $2\alpha\hbar = 2 \cdot \frac{\Delta x}{\Delta p} \cdot 2\Delta x \Delta p = (2\Delta x)^2$ slik at

$$\Psi(x) \sim \exp\left\{-\left(\frac{x - \langle x \rangle}{2\Delta x}\right)^2 + \frac{i\langle p \rangle}{\hbar} x\right\}$$

en <u>gaussisk</u> bølgepakke, sentrert om $x = \langle x \rangle$ med bredde Δx.

<u>Tidsutvikling av forventningsverdier</u>

[PCH 4.3 ; DJG 3.4.3 ; IØ 4.3]

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \frac{d}{dt}\left\{\int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx\right\}$$

$$= \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{F} \Psi \, dx + \int \Psi^* \hat{F} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx + \int \Psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \Psi \, dx$$

$$= \int \left(\frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar}\right)^* \hat{F} \Psi \, dx + \int \Psi^* \hat{F} \left(\frac{\hat{H}\Psi}{i\hbar}\right) dx + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* (\hat{H}\hat{F} - \hat{F}\hat{H}) \Psi \, dx + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left\langle [\hat{H}, \hat{F}] \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle$$

Har ofte $\partial \hat{F}/\partial t = 0$. Da er $d\langle \hat{F} \rangle / dt = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle$,

som betyr at $\langle F \rangle$ er en bevegelseskonstant når $\hat{F}$ kommuterer med $\hat{H}$.

ks: $\langle p \rangle$ for en fri partikkel $(V=0)$

$$\hat{H} = \hat{p}^2/2m \Rightarrow [\hat{H}, \hat{p}] = 0 \Rightarrow \langle p \rangle = \text{konstant},$$

som ventet, siden ingen krefter virker på partikkelen.

Men dersom V avhenger av x, blir $F = -dV/dx \neq 0$, og vi forventer at $\langle p \rangle$ blir avhengig av tida t.

hrenfests teorem [PCH 4.4; DJG 1.5, 4.1; IØ 4.4]

Uttrykker at kvantemek. middelverdier (forv. verdier) oppfyller klassiske bevegelsesligninger, dvs:

1D: $$\boxed{\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m} \;;\quad \frac{d}{dt}\langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle}$$

3D: $$\boxed{\frac{d}{dt}\langle \vec{r} \rangle = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m} \;;\quad \frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = \langle -\nabla V \rangle}$$

Bevises (i 1D) med bruk av $d\langle F \rangle/dt = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle$, med hhv $\hat{F} = x$ og $\hat{F} = \hat{p}$, og $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V$, der V generelt kan avhenge av både x og t.

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, x] \rangle = \frac{i}{2m\hbar}\langle [\hat{p}^2, x] \rangle \quad (\text{siden } [V, x] = 0)$$

Triks: $$[\hat{p}^2, x] = \hat{p}\hat{p}x - x\hat{p}\hat{p} = \hat{p}\hat{p}x - \hat{p}x\hat{p} + \hat{p}x\hat{p} - x\hat{p}\hat{p}$$
$$= \hat{p}[\hat{p}, x] + [\hat{p}, x]\hat{p} = -2i\hbar\hat{p}$$

$$\Rightarrow d\langle x \rangle/dt = \langle \hat{p} \rangle/m = \langle p \rangle/m$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{p}]\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[V,\hat{p}]\rangle \qquad (\text{siden } [\hat{p}^2,\hat{p}]=0)$$

$$[V,\hat{p}]\psi = V\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(V\psi) = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x}\psi$$

$\Rightarrow \quad d\langle p\rangle/dt = \langle -\partial V/\partial x\rangle$, som er Newtons 2.lov,

siden $F = dp/dt$ og $F = -\partial V/\partial x$ $\quad (3D: \vec{F} = d\vec{p}/dt = -\nabla V)$

qed

Vi kombinerer $\langle p\rangle = m\, d\langle x\rangle/dt$ med $d\langle p\rangle/dt = \langle -\partial V/\partial x\rangle = \langle F\rangle$:

$$m\, d^2\langle x\rangle/dt^2 = \langle F\rangle$$

Merk at dette ikke uten videre betyr at $\langle x\rangle$ vil følge den klassiske banen, bestemt av ligningen

$$m\, d^2\langle x\rangle/dt^2 = F(\langle x\rangle)$$

Finner forskjellen mellom $\langle F(x)\rangle$ og $F(\langle x\rangle)$ ved å rekkeutvikle $F(x)$ omkring $\langle x\rangle$:

$$F(x) = F(\langle x\rangle) + (x-\langle x\rangle)F'(\langle x\rangle) + \frac{1}{2}(x-\langle x\rangle)^2 F''(\langle x\rangle) + \ldots$$

$$\Rightarrow \langle F(x)\rangle = F(\langle x\rangle) + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 F''(\langle x\rangle) + \ldots$$

$\Rightarrow$ Klassisk newton-mekanikk er OK for $\langle x\rangle(t)$, dvs $\langle F(x)\rangle \approx F(\langle x\rangle)$ dersom

- Δx er neglisjerbar (f.eks. en makroskopisk "partikkel")

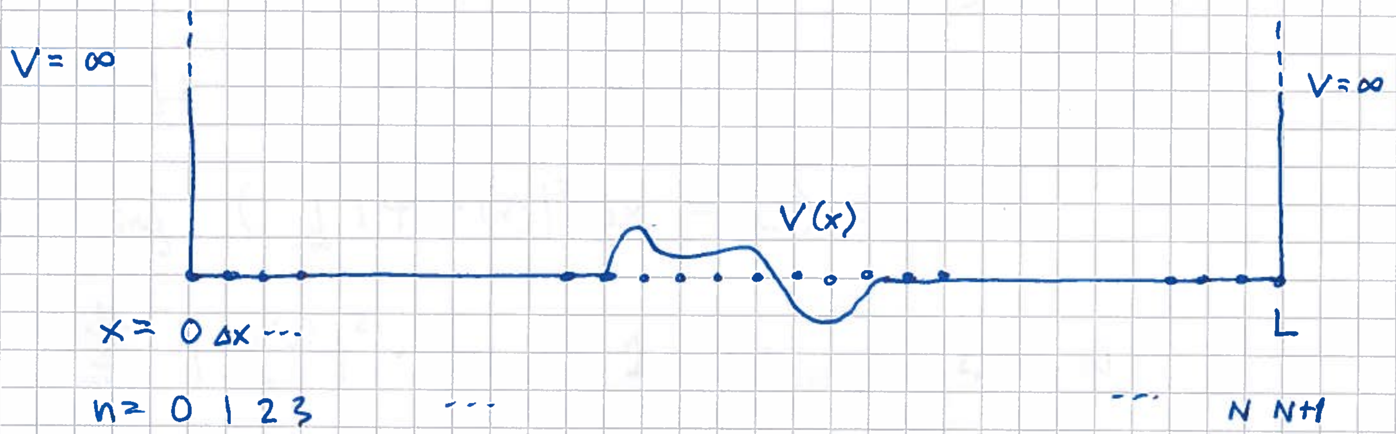
eller

- $V(x)$ varierer tilstrekkelig langsomt (dvs $F''(\langle x\rangle)$ og høyere ordens deriverte er neglisjerbare) (makroskopisk potensial)

Numerisk løsning av TUSL i 1D

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- Antar $V(x) \neq 0$ i et endelig område med utstrekning $\ll L$.
- Legger området med $V(x) \neq 0$ langt unna $x=0$ og $x=L$.
- Diskretiserer området $0 < x < L$.
- Setter $V=\infty$ for $x \leq 0$ og $x \geq L$, slik at $\psi = 0$ der.



$$\Rightarrow x_n = n \cdot \Delta x, \quad V_n = V(x_n), \quad \psi_n = \psi(x_n)$$

$$V_0 = V_{N+1} = \infty, \quad \psi_0 = \psi_{N+1} = 0$$

$$\psi_n'' \approx \frac{\psi'_{n+1/2} - \psi'_{n-1/2}}{\Delta x} \approx \frac{(\psi_{n+1}-\psi_n)/\Delta x - (\psi_n - \psi_{n-1})/\Delta x}{\Delta x}$$

$$= \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{(\Delta x)^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}\{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}\} + V_n\psi_n = E\psi_n \quad ; \quad n = 1, 2, \dots, N$$

Kan skrives på formen $\mathbb{H}\vec{\psi} = E\vec{\psi}$ med tridiagonal matrise $\mathbb{H}$, med matriseelementer

$$H_{nn} = \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + V_n \quad \text{(langs diagonalen)}$$

$$H_{n,n\pm1} = -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \quad \text{(over og under diagonalen)}$$

Dvs, $\mathbb{H}$ er reell og symmetrisk, med dimensjon $N \times N$.
Vi har ikke-trivielle løsninger, $\vec{\psi} \neq 0$, når

$$\det\left(\mathbb{H} - E\mathbb{1}\right) = 0$$

Tilsvarer N-te-gradsligning

$$c_N E^N - c_{N-1} E^{N-1} + \dots + c_1 E + c_0 = 0$$

med N løsninger $E_1, E_2, \dots, E_N$ og tilhørende egenvektorer $\vec{\psi}^{(1)}, \vec{\psi}^{(2)}, \dots, \vec{\psi}^{(N)}$ som bestemmes ved

$$\left(\mathbb{H} - E_j \mathbb{1}\right)\vec{\psi}^{(j)} = 0 \quad ; \quad j = 1, 2, \dots, N$$

Normering $\left(\int_{-\infty}^{\infty} |\psi^{(j)}(x)|^2 \, dx = 1 \right)$:

$$\sum_{n=1}^{N} |\psi_n^{(j)}|^2 \cdot \Delta x = 1 \quad ; \quad j = 1, 2, \dots, N$$

$\psi_n^{(j)} = \psi^{(j)}(x_n) =$ verdien av $\psi^{(j)}$ i posisjon $n \cdot \Delta x$

Implementeres enkelt i både python og matlab:

Python:

```
import numpy as np
   ⋮
w, v = np.linalg.eigh(H)
   ⋮
```

Da er

$w[0] = E_1, \dots, w[N-1] = E_N$

$v[n-1, j-1] = \psi_n^{(j)}$

Matlab:

```
[v, w] = eig(H)
   ⋮
```

Da er

$w(1,1) = E_1, \dots, w(N,N) = E_N$

$v(n,j) = \psi_n^{(j)}$

(Hva med julia ?!)

Vi har nå N stasjonære tilstander $\Psi^{(j)}(x,t) = \psi^{(j)}(x)\, e^{-iE_j t/\hbar}$ som vi kan bruke til å utvikle en hvilken som helst starttilstand i,

$$\Psi(x,0) = \sum_{j=1}^{N} c^{(j)} \psi^{(j)}(x)$$

med koeffisienter

$$c^{(j)} = \sum_{n=1}^{N} \psi^{(j)*}(x_n) \cdot \Psi(x_n, 0) \cdot \Delta x \qquad (\text{se s. } 32)$$

Og vi kan studere tidsutviklingen av starttilstanden,

$$\Psi(x,t) = \sum_{j=1}^{N} c^{(j)} \psi^{(j)}(x)\, e^{-iE_j t/\hbar}$$

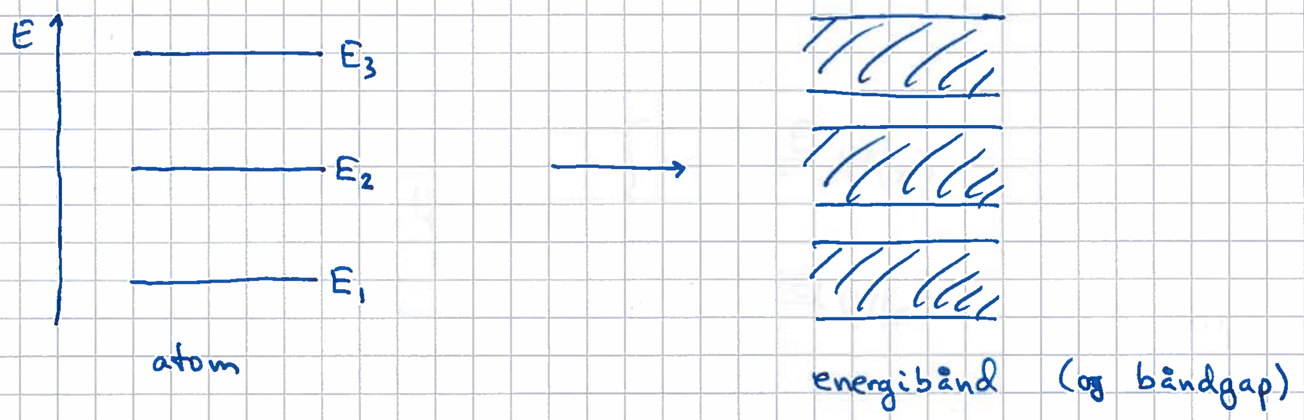
Og vi kan f.eks. regne ut forventningsverdier $\langle x\rangle(t)$ og $\langle p\rangle(t)$ i henhold til postulat G (s. 34), eller sannsynlighetsstrøm som på s. 37. Osv osv.

(Obligatorisk øving ; kommer ....)

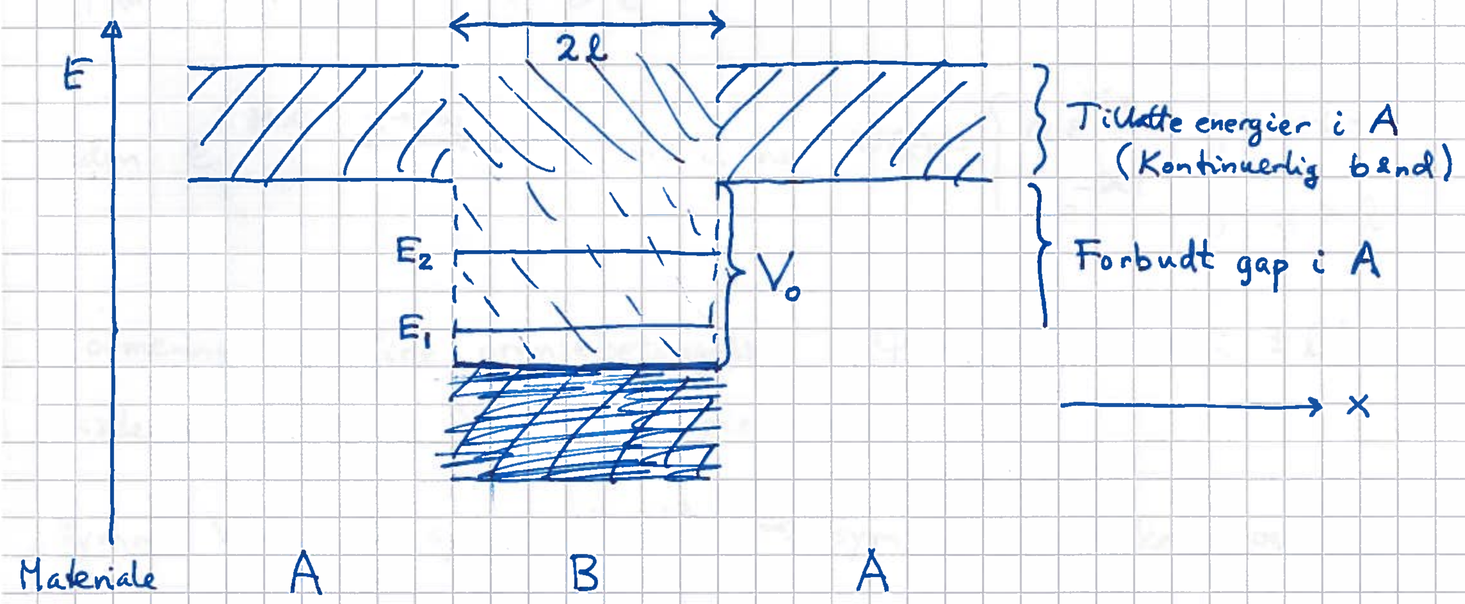
Endelig potensialbrønn [PCH 3.3 ; DJG 2.6 ; IØ 3.2]

Motivasjon / Relevans :

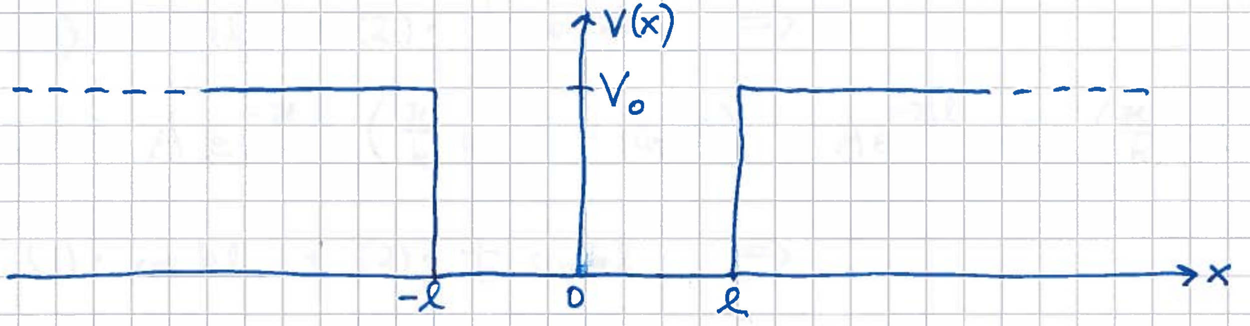
Når isolerte atomer settes sammen til en krystall, går diskrete energinivåer til kontinuerlige energibånd (se s. 27) :



Når ulike materialer settes sammen, lag for lag, vil energibånd og båndgap ikke "stemme overens". Eks :



Med et tynt lag av materiale B kan vi få diskrete energinivåer E_1, E_2, ---- under det tillatte energibåndet i materiale A. Vi får essensielt et potensial $V(x)$ som er V_0 høyere i A enn i B :



$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; \quad |x| < \ell \\ V_0 & ; \quad |x| > \ell \end{cases}$$

TUSL blir:

$$\psi''(x) = \begin{cases} -\dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) & ; \quad |x| < \ell \\[2ex] \dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x) & ; \quad |x| > \ell \end{cases}$$

$E < V_0$: Bundne tilstander

$$\psi(x) = C \sin kx + D \cos kx \quad ; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad ; \quad |x| < \ell$$

$$\psi(x) = A e^{\varkappa x} + B e^{-\varkappa x} \quad ; \quad \varkappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad ; \quad |x| > \ell$$

Siden $e^{\pm \varkappa x} \xrightarrow{x \to \pm\infty} \infty$, må vi ha $\psi(x) = \begin{cases} A e^{\varkappa x} & ; \quad x < -\ell \\ B e^{-\varkappa x} & ; \quad x > \ell \end{cases}$

Normering og fire grensebetingelser (ψ og ψ' kont. i $\pm\ell$) fastlegger A, B, C, D og energien E.

Symm. $V(x)$ $\Rightarrow$ symm. $|\psi|^2$ $\Rightarrow$ symm. $(D \cos kx)$ og antisymm. $(C \sin kx)$ løsn.

ψ og ψ' kont. i $x = -\ell$ $\Rightarrow$

$$A e^{-\varkappa \ell} = -C \sin k\ell + D \cos k\ell \qquad (1)$$

$$A \varkappa e^{-\varkappa \ell} = k(C \cos k\ell + D \sin k\ell) \qquad (2)$$

$$-(1)\cdot \sin k\ell \;+\; (2)\cdot \frac{1}{k}\cos k\ell \quad \Rightarrow$$

$$C = A e^{-\varkappa \ell}\left(\frac{\varkappa}{k}\cos k\ell - \sin k\ell\right) = A e^{-\varkappa \ell}\cos k\ell\left(\frac{\varkappa}{k} - \tan k\ell\right) \qquad (3)$$

$$(1)\cdot \cos k\ell \;+\; (2)\cdot \frac{1}{k}\sin k\ell \quad \Rightarrow$$

$$D = A e^{-\varkappa \ell}\left(\cos k\ell + \frac{\varkappa}{k}\sin k\ell\right) = A e^{-\varkappa \ell}\cos k\ell\left(1 + \frac{\varkappa}{k}\tan k\ell\right) \qquad (4)$$

ψ og ψ' kont. i $x = \ell \quad \Rightarrow$

$$B e^{-\varkappa \ell} = C \sin k\ell + D \cos k\ell \qquad (5)$$

$$-B\varkappa e^{-\varkappa \ell} = k\left(C \cos k\ell - D \sin k\ell\right) \qquad (6)$$

$$(5)\cdot \frac{\varkappa}{k} \;+\; (6)\cdot \frac{1}{k} \quad \Rightarrow$$

$$C\left(\frac{\varkappa}{k}\sin k\ell + \cos k\ell\right) + D\left(\frac{\varkappa}{k}\cos k\ell - \sin k\ell\right) = 0$$

$$\Rightarrow \quad C\left(\frac{\varkappa}{k}\tan k\ell + 1\right) + D\left(\frac{\varkappa}{k} - \tan k\ell\right) = 0 \qquad (7)$$

Innsetting av (3) og (4) i (7) gir to like ledd:

$$2\left(\frac{\varkappa}{k}\tan k\ell + 1\right)\left(\frac{\varkappa}{k} - \tan k\ell\right) = 0$$

Antisymm. løsn (AS):

$$\frac{\varkappa}{k}\tan k\ell + 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad D = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = C \sin kx$$

Symm. løsn (S)

$$\frac{\varkappa}{k} - \tan k\ell = 0 \quad \Rightarrow \quad C = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = D \cos kx$$

Energiegenverdier:

$$\tan k\ell = \begin{cases} \varkappa / k & (S) \\ -k/\varkappa & (AS) \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \tan \frac{\sqrt{2mE}\,\ell}{\hbar} = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{V_0 - E}{E}} & (S) \\ -\sqrt{\dfrac{E}{V_0 - E}} & (AS) \end{cases}$$