FY6019 Moderne fysikk. Institutt for fysikk, NTNU. Våren 2017.
Løsningsforslag til øving 2.

Oppgave 1: Partikkel i boks

a) Normering av Ψ:

$$1 = \int_0^L |\Psi(x,0)|^2\, dx.$$

De stasjonære løsningene er ortogonale. Derfor vil "kryssleddene" av typen

$$\int_0^L \sin\frac{\pi x}{L} \sin\frac{2\pi x}{L}\, dx$$

bli lik null og ikke bidra. Fra forelesningene, og fra oppgave 4 i øving 1, vet vi at de stasjonære løsningene er normert hver for seg med konstanten $\sqrt{2/L}$ foran sinusfunksjonen. Dermed må vi ha

$$\begin{aligned}
1 &= |A|^2 \int_0^L \left(\sin^2\frac{\pi x}{L} + \sin^2\frac{2\pi x}{L}\right) dx \\
&= |A|^2 \cdot \left(\frac{L}{2} + \frac{L}{2}\right) \\
\Rightarrow |A|^2 &= \frac{1}{L} \\
\Rightarrow |A| &= \frac{1}{\sqrt{L}}
\end{aligned}$$

Her spiller det ingen rolle om vi velger den positive reelle løsningen $A = 1/\sqrt{L}$, den negative reelle løsningen $A = -1/\sqrt{L}$, eller en hvilken som helst kompleks løsning for A, bare absoluttverdien er riktig. Som regel velger vi da $A = 1/\sqrt{L}$.

b) De stasjonære løsningene har tidsavhengig faktor $\exp(-iE_n t/\hbar)$. Her er Ψ en sum av to stasjonære løsninger, med hhv $n = 1$ og $n = 2$, som betyr at

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left(\sin\frac{\pi x}{L} e^{-iE_1 t/\hbar} + \sin\frac{2\pi x}{L} e^{-iE_2 t/\hbar}\right),$$

med $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2mL^2$.

c) Da Ψ og den komplekskonjugerte Ψ^* begge er en sum av to ledd, vil produktet gi i alt en sum av fire ledd. To av disse blir uavhengige av t, siden Ψ og Ψ^* bidrar med samme tidsavhengige eksponent, men med motsatt fortegn. De to "kryssleddene" har den samme tidsuavhengige funksjonen, og tidsavhengig faktor med motsatt fortegn oppe i eksponenten, $\exp[\pm i(E_2 - E_1)t/\hbar]$. Fra Eulers formel vet vi at $\exp(i\alpha) + \exp(-i\alpha) = 2\cos\alpha$. Dermed kan vi slå sammen de to kryssleddene til ett, som dermed får den tidsavhengige faktoren $2\cos[(E_2 - E_1)t/\hbar] = 2\cos(3\pi^2\hbar t/2mL^2)$. Alt i alt:

$$\rho(x,t) = \frac{1}{L}\left[\sin^2\frac{\pi x}{L} + \sin^2\frac{2\pi x}{L} + 2\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}\cos\frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2}\right].$$

d) Vi trenger

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{\pi}{L\sqrt{L}}\left(\cos\frac{\pi x}{L} e^{-iE_1 t/\hbar} + 2\cos\frac{2\pi x}{L} e^{-iE_2 t/\hbar}\right).$$

Denne skal multipliseres med Ψ^* og konstanten $\hbar/mi$, og til slutt skal vi ta realdelen av det hele for å finne $j(x,t)$. Vi innser at her vil kun de to kryssleddene kunne gi bidrag. Hvorfor? Jo, ledd som har produkt av samme tidsavhengige faktor men med motsatt fortegn i eksponenten, blir rent imaginære, pga den imaginære enheten $1/i$. Kryssleddene har en sinus fra Ψ^* og en cosinus fra $\partial\Psi/\partial x$. Alt i alt:

$$\begin{aligned}
j(x,t) &= \frac{\pi\hbar}{mL^2}\mathrm{Re}\left(\frac{1}{i}\cos\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}+\frac{2}{i}\cos\frac{2\pi x}{L}\sin\frac{\pi x}{L}e^{i(E_1-E_2)t/\hbar}\right)\\
&= \frac{\pi\hbar}{mL^2}\left(\cos\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}\sin\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}+2\cos\frac{2\pi x}{L}\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar}\right)\\
&= \frac{\pi\hbar}{mL^2}\sin\frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2}\left(\cos\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}-2\cos\frac{2\pi x}{L}\sin\frac{\pi x}{L}\right).
\end{aligned}$$

Her har vi igjen brukt Eulers formel, $\exp(i\alpha)=\cos\alpha+i\sin\alpha$, at $\sin\alpha=-\sin(-\alpha)$, samt satt inn for E_1 og E_2.

Innsetting av $x=L/2$ gir

$$j(L/2,t)=\frac{2\pi\hbar}{mL^2}\sin\frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2},$$

da $\cos(\pi/2)=\sin\pi=0$ og $\cos\pi=-\sin(\pi/2)=-1$.

e) Kun det siste leddet i $\rho(x,t)$ er avhengig av t. Derivasjon av cosinus gir minus sinus, og kjerneregelen medfører at vi får en faktor $3\pi^2\hbar/2mL^2$. Dermed:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\frac{3\pi^2\hbar}{mL^3}\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L}\sin\frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2}.$$

Derivasjon av $j(x,t)$ mhp x gir i alt 4 ledd, siden det er 2 produkter av 2 funksjoner som skal deriveres. Derivasjon av sinusene, med bruk av kjerneregelen, resulterer i to ledd som kansellerer hverandre. Derivasjon av cosinusene gir "prefaktor" $-\pi/L$ i det første leddet og $+4\pi/L$ i det andre, og begge inneholder $\sin(\pi x/L)\sin(2\pi x/L)$. Dermed:

$$-\frac{\partial j}{\partial x}=-\frac{3\pi^2\hbar}{mL^3}\sin\frac{3\pi^2\hbar t}{2mL^2}\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L},$$

som er presis det samme vi fant for $\partial\rho/\partial t$!

Oppgave 2: Kvantemekaniske kommutatorer

Som i notatene side 52 og 56 lar vi kommutatorene virke (operere) på en (vilkårlig) bølgefunksjon ψ, som da generelt må antas å avhenge av de koordinatene som påvirkes av de ulike matematiske operasjonene i den aktuelle kommutatoren:

a)

$$\begin{aligned}
\left[\frac{1}{x},\widehat{p}\right]\psi &= \frac{1}{x}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{x}\psi\right)\\
&= \frac{\hbar}{ix}\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\hbar}{ix}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\hbar}{ix^2}\psi\\
&= \frac{\hbar}{ix^2}\psi.
\end{aligned}$$

Dvs: $\left[\frac{1}{x},\widehat{p}\right]=\hbar/ix^2$.

b) Siden $\widehat{L}_x$ inneholder partiell derivasjon mhp y og z, men ikke mhp x, har vi umiddelbart at $\left[x,\widehat{L}_x\right]=0$.

c)

$$\left[x, \widehat{L}_y\right]\psi = x\frac{\hbar}{i}z\frac{\partial}{\partial x}\psi - x^2\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\psi - \frac{\hbar}{i}z\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) + x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}(x\psi).$$

Som i *a*) vil de fleste bidragene kansellere, med unntak av ett:

$$-\frac{\hbar}{i}z\frac{\partial x}{\partial x}\psi = i\hbar z\psi.$$

Dvs: $\left[x, \widehat{L}_y\right] = i\hbar z$.

d) Her inneholder både $\widehat{L}_x$ og $\widehat{L}_y$ en differanse mellom to ledd som hver inneholder en partiellderivert. Vi ser at $y\partial/\partial z$ fra $\widehat{L}_x$ og $-x\partial/\partial z$ fra $\widehat{L}_y$ kommuterer med hverandre, og det er også tilfelle med $-z\partial/\partial y$ fra $\widehat{L}_x$ og $z\partial/\partial x$ fra $\widehat{L}_y$. Imidlertid vil $y\partial/\partial z$ fra $\widehat{L}_x$ ikke kommutere med $z\partial/\partial x$ fra $\widehat{L}_y$, og $-z\partial/\partial y$ fra $\widehat{L}_x$ vil ikke kommutere med $-x\partial/\partial z$ fra $\widehat{L}_y$. Med konstanten $(\hbar/i)^2$ på plass, en fra hver dreieimpulsoperator, får vi:

$$\begin{aligned}
\left[\widehat{L}_x, \widehat{L}_y\right]\psi &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[y\frac{\partial}{\partial z}z\frac{\partial}{\partial x}\psi - z\frac{\partial}{\partial x}y\frac{\partial}{\partial z}\psi + z\frac{\partial}{\partial y}x\frac{\partial}{\partial z}\psi - x\frac{\partial}{\partial z}z\frac{\partial}{\partial y}\psi\right] \\
&= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left[y\frac{\partial}{\partial x}\psi - x\frac{\partial}{\partial y}\psi\right] \\
&= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\cdot\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\widehat{L}_z\psi \\
&= i\hbar\widehat{L}_z\psi.
\end{aligned}$$

Hva *betyr* så alt dette? Fra side 53 i notatene: Dersom operatorene til to fysiske størrelser kommuterer med hverandre, betyr det at begge størrelser kan måles helt nøyaktig på samme tidspunkt. Hvis de derimot ikke kommuterer med hverandre, kan de to størrelsene ikke måles "skarpt" på samme tidspunkt. Vi ser f.eks at x- og y-komponentene av dreieimpulsen $\boldsymbol{L}$ (som er en vektor) ikke kan måles skarpt samtidig. Siden det ikke er noe "spesielt" med akkurat disse to komponentene, er det klart at det ikke er mulig å måle to vilkårlige komponenter av $\boldsymbol{L}$ skarpt samtidig. Faktisk kan vi uten å regne slå fast at $\left[\widehat{L}_y, \widehat{L}_z\right] = i\hbar\widehat{L}_x$ og $\left[\widehat{L}_z, \widehat{L}_x\right] = i\hbar\widehat{L}_y$, fordi z må forholde seg til (x, y) på samme måte som x forholder seg til (y, z) og som y forholder seg til (z, x) – i nevnte rekkefølge. (Såkalt *syklisk variabelbytte* – hvis z-aksen bytter navn til x, må samtidig x-aksen bytte navn til y og y-aksen bytte navn til z, dersom vi fortsatt skal ha et høyrehåndssystem!)

Oppgave 3: Usikkerhet

a) Den romlige delen av bølgefunksjonen til grunntilstanden i en uendelig dyp potensialbrønn er

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi x}{L}.$$

I eksemplet side 44 i notatene har vi allerede konkludert med at $\langle x\rangle = L/2$ og at $\langle p\rangle = 0$ for denne tilstanden. (Dette gjelder for alle stasjonære tilstander i et potensial som er symmetrisk omkring $L/2$.) Vi behøver derfor bare å beregne $\langle x^2\rangle$ og $\langle p^2\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle x^2\rangle &= \int_0^L x^2|\psi_1(x)|^2 dx = \frac{2}{L}\int_0^L x^2\sin^2\frac{\pi x}{L}dx \\
&= \frac{2}{L}\left(\frac{L}{\pi}\right)^3\int_0^\pi \alpha^2\sin^2\alpha d\alpha \\
&= \frac{2}{L}\left(\frac{L}{\pi}\right)^3\frac{\pi(2\pi^2-3)}{12} \\
&= \frac{2\pi^2-3}{6\pi^2}L^2 \\
&\simeq 0.283\,L^2.
\end{aligned}$$

Her har vi substituert $\alpha = \pi x/L$ og brukt Rottmann eller wolframalpha.com til å fastlegge verdien av det bestemte integralet. Vi trenger den andre deriverte av ψ_1 for å beregne $\langle p^2 \rangle$:

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} = -\sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \sin \frac{\pi x}{L}.$$

Dermed har vi

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \int_0^L \psi_1^* \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} dx \\
&= \frac{2}{L} \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 \int_0^L \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx \\
&= \frac{2}{L} \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 \cdot \frac{L}{\pi} \cdot \int_0^\pi \sin^2 \alpha \, d\alpha \\
&= \frac{2}{L} \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2 \cdot \frac{L}{\pi} \cdot \frac{\pi}{2} \\
&= \frac{\pi^2 \hbar^2}{L^2}.
\end{aligned}$$

Usikkerheten i partikkelens posisjon x blir

$$\begin{aligned}
\Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\
&= \sqrt{\frac{2\pi^2 - 3}{6\pi^2} L^2 - \frac{1}{4} L^2} \\
&= \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12\pi^2}} L \\
&\simeq 0.18 \, L,
\end{aligned}$$

mens usikkerheten i partikkelens impuls p blir

$$\begin{aligned}
\Delta p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \\
&= \frac{\pi\hbar}{L}.
\end{aligned}$$

Produktet av disse to er

$$\Delta x \cdot \Delta p = \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12\pi^2}} \cdot \pi\hbar \simeq 0.57\hbar,$$

som er noe mer enn det teoretisk minimale usikkerhetsproduktet $\hbar/2$.

b) Vi starter med å normere Ψ:

$$1 = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} \, dx.$$

Her substituerer vi $y = \sqrt{2\alpha} x$ slik at vi får bare $-y^2$ oppe i eksponenten. Videre blir $dx = dy/\sqrt{2\alpha}$, mens integrasjonsgrensene forblir uendret:

$$1 = C^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} \, dy.$$

Igjen bruker vi Rottmann eller wolframalpha.com til å bestemme det bestemte integralet, som viser seg å være $\sqrt{\pi}$. Konstanten i bølgefunksjonen blir dermed $C = (2\alpha/\pi)^{1/4}$, slik at

$$\Psi(x) = \Psi^*(x) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2}.$$

Vi har oppgitt at $\langle x\rangle = 0$ og $\langle p\rangle = 0$. Som i a) må vi regne ut middelverdien av x^2 og p^2, og der det er nødvendig finner vi verdien av bestemte integraler i Rottmann eller på wolframalpha.com:

$$\begin{aligned}
\langle x^2\rangle &= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2}\,dx \\
&= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\left(\frac{1}{2\alpha}\right)^{3/2}\cdot\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2}\,dy \\
&= \frac{1}{2\alpha\sqrt{\pi}}\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{2} \\
&= \frac{1}{4\alpha},
\end{aligned}$$

og

$$\langle p^2\rangle = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{-\alpha x^2}\,dx.$$

Den andre deriverte av eksponentialfunksjonen er

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(-2\alpha x e^{-\alpha x^2}\right) = \left(-2\alpha + 4\alpha^2 x^2\right)e^{-\alpha x^2},$$

som innsatt gir

$$\begin{aligned}
\langle p^2\rangle &= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\hbar^2\cdot 2\alpha\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}\,dx - 2\alpha\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2}\,dx\right) \\
&= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\hbar^2\cdot 2\alpha\left(\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} - 2\alpha(2\alpha)^{-3/2}\sqrt{\pi}/2\right) \\
&= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\hbar^2\cdot 2\alpha\cdot\frac{1}{2}\cdot\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \\
&= \hbar^2\alpha.
\end{aligned}$$

Usikkerhetsproduktet blir

$$\Delta x\cdot\Delta p = \sqrt{\langle x^2\rangle\cdot\langle p^2\rangle} = \sqrt{(1/4\alpha)\cdot\hbar^2\alpha} = \frac{\hbar}{2}.$$

Med andre ord, en slik gaussisk bølgefunksjon representerer en tilstand med så lite usikkerhetsprodukt som teoretisk mulig.

Kommentar: Parameteren α, eller kanskje like gjerne $1/\sqrt{\alpha}$ angir et mål for bredden på $\Psi(x)$. Stor verdi på α betyr at $\Psi(x)$ er en skarp funksjon omkring $x = 0$, med stor maksimumsverdi, gitt ved $(2\alpha/\pi)^{1/4}$, og liten bredde, gitt ved $1/2\sqrt{\alpha}$.