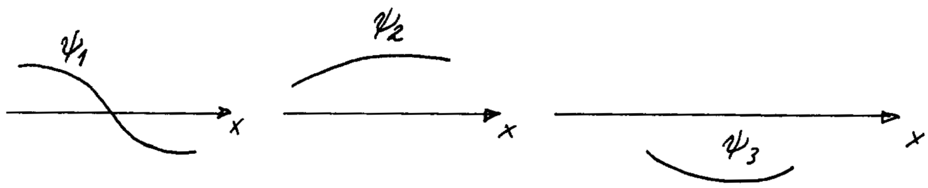
ØVING 2

Oppgave 2 – 1 Krumningsegenskaper for endimensjonale energiegenfunksjoner

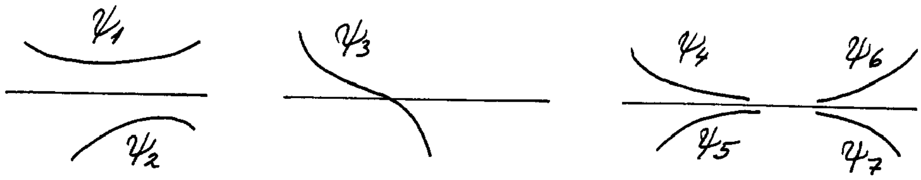
En partikkel med masse m beveger seg i et endimensjonalt potensial $V(x)$. Partikkelen befinner seg i en tilstand som svarer til en reell løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen, $\widehat{H}\psi(x) = E\psi(x)$, med energien E. Med $\widehat{H} = \widehat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ kan vi skrive denne energiegenverdiligningen (Schrödingers tidsuavhengige ligning) på formen

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

(i) I *klassisk tillatte områder* (hvor $E > V(x)$) er altså krumningen $d^2\psi/dx^2$ negativ når ψ er positiv (og omvendt); i begge tilfeller er den *relative* krumningen ψ''/ψ negativ. Vi ser at dette betyr at ψ må *krumme mot aksen.* Eksempler:



(ii) I *klassisk forbudte områder* (hvor $E < V(x)$) har krumningen samme fortegn som ψ (positiv relativ krumning). ψ vil da *krumme bort fra aksen.* Eksempler:



(iii) I et klassisk vendepunkt, hvor $V(x) - E$ skifter fortegn, ser vi av formelen ovenfor at den relative krumningen skifter fortegn. Er $V(x) = E$ over et endelig område (som kan forekomme for et potensial som er lokalt flatt), blir $\psi'' = 0$ i dette området. Da blir ψ selv en lineær funksjon, $\psi = Ax + B$, i dette området.

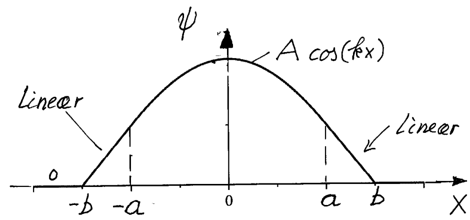
Vi skal etter hvert se at dette med krumning er et veldig nyttig redskap når en skal studere energiegenfunksjoner.

a. Kontrollér at grunntilstanden for den harmoniske oscillatoren i oppgave 3a, med potensialet $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2x^2$,

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

oppfører seg slik reglene ovenfor sier, bl.a at den relative krumningen skifter fortegn for de x-verdiene som svarer til de *klassiske* vendepunktene, som er der hvor $E_0 = V(x)$. (Energien E_0 for grunntilstanden er lik $\frac{1}{2}\hbar\omega$.)

b.

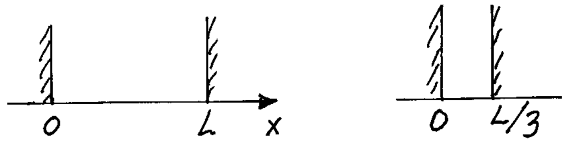


Figuren viser grunntilstanden for et endimensjonalt potensial

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

Bruk det at ψ er lineær i områdene $a < |x| < b$ til å finne energien E for denne tilstanden. Hvilket fortegn har V_0. [Finn svarene på disse spørsmålene vha den tidsuavhengige Schrödingerligningen.]

Oppgave 2 – 2 Litt av hvert



a. Jo mindre plass, desto høyere energi

Hva skjer med energinivået E_1 for grunntilstanden i et boks-potensial når vidden (L) av boksen reduseres til en tredel av den opprinnelige? (Partikkelen i boksen har masse m, og energiegenfunksjonen for grunntilstanden er $\psi_1(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(\pi x/L)$ når boksen har lengde L.)

b. $\langle V \rangle$ og $\langle K \rangle$ for grunntilstanden i hydrogen

I forelesningene og i øving 1 har vi sett at energiegentilstanden

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

for elektronet i Coulomb-potensialet $V = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ (som i realiteten er grunntilstanden) har energien $E_1 = -\frac{1}{2}\alpha^2 m_e c^2 (\approx -13.6 \text{ eV})$. Vis at forventningsverdiene av den kinetiske og den potensialle energien i denne tilstanden er

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

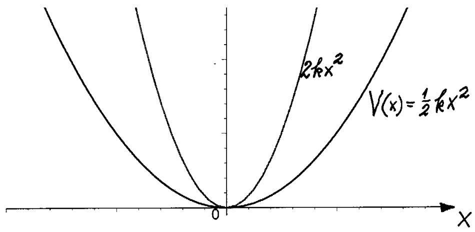
Oppgitt:

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

c. Estimat av $\langle K \rangle$

Gjør et enkelt *overslag* av $\langle K \rangle = \left\langle p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \right\rangle / 2m$ for hydrogentilstanden ψ_1, ved hjelp av uskarphetsrelasjonen (se side 4 i dette oppgavesettet), og sammenlign med formelen ovenfor. [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 formen $\hbar^2/(2m_e a_0^2)$.]

d. Sammenheng mellom energinivåer og fjærkonstant for oscillatoren



Hva skjer med energinivåene $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ og $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ for grunntilstanden og første eksiterte tilstand for oscillatoren i oppgave 5b (og 3a) dersom vi erstatter potensialet $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ med et potensial som er fire ganger så sterkt (dvs firedobler fjærkonstanten)? [Hint: Finn ut hva som skjer med den klassiske vinkelfrekvensen ω når k firedobles.]

e. Valg av nullpunkt for potensiell energi

Vi kan egentlig velge fritt hvor vi vil legge nullpunktet for et potensial. (Dette endrer jo ikke kraften.) Hva blir energinivåene og energiegenfunksjonene for grunntilstanden og første eksiterte tilstand for potensialet $V_1(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega$? Hint: Skissér det nye potensialet, $V_1(x)$, sammen med standard-potensialet for den harmoniske oscillatoren, $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Dette skulle gi en god pekepinn.

Dersom du fortsatt er i tvil, kan vi opplyse om at energiegenfunksjonene $\psi_n(x)$ for standardpotensialet oppfyller egenverdiligningen

$$\widehat{H}\psi_n(x) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi_n(x) = E_n \psi_n(x), \qquad E_n = \hbar\omega(n+\tfrac{1}{2}), \qquad n = 0, 1, 2, \cdots,$$

dvs at energiegenverdiene for standardpotensialet er $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Denne ligningen kan lett omskrives til

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega) \right] \psi_n(x) = n\hbar\omega\, \psi_n(x),$$

som er energiegenverdiligningen for potensialet $V_1(x)$.

f. Et eksempel til

Hva er grunntilstandsenergien E_1 for en partikkel med masse m i det endimensjonale potensialet

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for} \quad 0 < x < L \\ \infty & \text{for} \quad x < 0 \quad \text{og} \quad x > L \end{cases} \qquad ?$$

(V_0 er en konstant med dimensjon energi.)

g. Valg av koordinatsystem

Vi står også fritt når det gjelder valg av koordinatsystem, f.eks hvor vi plasserer origo. (Dette kan ikke endre noe på selve fysikken i problemstillingen.) Hva blir energien og energiegenfunksjonen for grunntilstanden for en partikkel med masse m i potensialet

$$V(x) = \tfrac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2 \quad ?$$

$$---***---$$

Så en liten **innledning** til den neste oppgaven:
I bølgeteori lærer en at jo kortere en bølgegruppe (eller bølgepakke)

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

er, desto større blir nødvendigvis usikkerheten Δk i bølgetallet. Med $k = p_x/\hbar$ kan vi tilsvarende si at jo kortere en bølgegruppe

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

er, desto større må usikkerheten Δp_x i impulsen ($\Delta p_x = \hbar\Delta k$) være. Omvendt kan vi alltids gjøre Δp_x liten [ved å velge en "smal" funksjon $\phi(p_x)$ eller $g(k)$], men dette vil da "straffe seg" ved at bølgen $\psi(x)$ blir svært lang, dvs vi får en stor usikkerhet Δx i partikkelens posisjon. [1]

I tråd med dette kan det vises at usikkerhetsproduktet $(\Delta x)_\psi(\Delta p_x)_\psi$ aldri kan bli mindre enn $\frac{1}{2}\hbar$, uansett hvilken form vi velger for $\psi(x)$. I kap. 4.5 i Hemmer er det vist at denne såkalte **uskarphetsrelasjonen**,

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

er et spesialtilfelle av en mer generell uskarphetsrelasjon for to fysiske størrelser F og G,

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

Fra den siste relasjonen framgår det at Heisenbergs uskarphetsrelasjon er en konsekvens av at x og $\widehat{p}_x$ ikke kommuterer:

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

Det er denne relasjonen som (via ulikheten ovenfor) hindrer observablene x og p_x i å ha skarpe verdier samtidig.

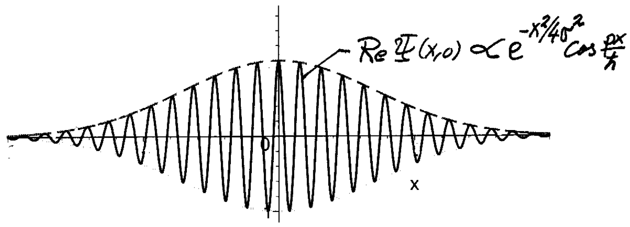
Et annet eksempel på observable som ikke kan ha skarpe verdier samtidig har en i komponentene $L_x = yp_z - zp_y$, $L_y = zp_x - xp_z$ og $L_z = xp_y - yp_x$ av dreieimpulsen $\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$ for en partikkel. [Jf ligning (T2.10) i Tillegg 2.] Disse er som vi skal se viktige observable for systemer som beskrives vha kulesymmetriske potensialer, som f.eks H-atomet.

[1]Husk at for en gitt bølgefunksjon $\psi(x)$ kan vi vha forventningsverdipostulatet beregne $\langle x\rangle = \int\psi^* x\psi\,dx$, $\langle x^2\rangle = \int\psi^* x^2\psi\,dx$, $\langle p_x\rangle = \int\psi^*\widehat{p}_x\psi\,dx$ og $\langle p_x^2\rangle = \int\psi^*\widehat{p}_x^2\psi\,dx$, som er hva vi behøver for å beregne usikkerhetene $\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$ og $\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2}$.

Oppgave 2 – 3 Bølgepakke for fri partikkel

I denne oppgaven ser vi på et "system" som ganske enkelt består av en fri partikkel med masse m. Anta at dette systemet (eller egentlig et *ensemble* av slike) prepareres i en tilstand som ved $t = 0$ beskrives ved bølgefunksjonen [2]

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



Merk at bølgegruppen $\Psi(x,0)$ er en harmonisk planbølge modulert med en Gauss-faktor. Den siste sørger for at $\Psi(x,0)$ er kvadratisk integrerbar (i motsetning til den harmoniske planbølgen $\exp(ip_0x/\hbar)$ som vi har i de Broglie-bølgene). Ifølge postulat B ("tilstandspostulatet") inneholder funksjonen $\Psi(x,0)$ all den informasjonen om ensemblet (ved $t = 0$) som det er mulig å skaffe seg. Som et ledd i arbeidet med å "knekke den kvantemekaniske koden" skal vi nå se hvordan (noe av) denne informasjonen kan hentes ut:

a. Argumentér for at forventningsverdien av posisjonen x for denne tilstanden (ved $t = 0$) er lik null, og for at usikkerheten Δx er uavhengig av parameteren p_0. Hint: Se på sannsynlighetstettheten $|\Psi(x,0)|^2$. (Moralen er her at det lønner seg med litt oversikt; istedenfor bare å regne slavisk i vei.) [3]

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

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

(Jf fotnote til løsning av Oppgave 3.) Hva er den fysiske tolkningen av $\langle\, x \,\rangle$ og Δx, sett i forhold til en serie målinger av posisjonen x?

[2] *Hvordan* en skal gå fram eksperimentelt for å preparere et ensemble av frie partikler slik at begynnelsestilstanden svarer til bølgefunksjonen $\Psi(x,0)$ er ikke helt lett å forestille seg. I kvantemekanisk *teori* er det vanlig å anta at en i prinsippet står fritt til å preparere en hvilken som helst begynnelsestilstand for det aktuelle ensemblet, uten å bekymre seg om hvordan dette eventuelt kan gjennomføres i praksis. La oss likevel gjøre et forsøk, ved å anta at vi har en "partikkel-kanon" som skyter ut en partikkel som forlater kanonen ($x \approx 0$) ved $t = 0$, med en impuls $\approx p_0$. For å få et *ensemble* av slike partikler må vi gjenta eksperimentet mange ganger og nullstille klokka for hver avfyring, eventuelt sende ut en skur av partikler samtidig, ved $t = 0$. Et slikt ensemble må opplagt representeres av en bølgefunksjon i form av en bølgegruppe som følger partikkelskuren (i stedet for en uendelig lang harmonisk bølge), dersom sannsynlighetstolkningen skal kunne brukes.

[3] Usikkerheten i x (også kalt spredningen eller standardavviket) er *rms-avviket* (root-mean-square deviation),

$$\Delta x = \sqrt{\langle\, (x - \langle\, x \,\rangle)^2 \,\rangle} = ... = \sqrt{\langle\, x^2 \,\rangle - \langle\, x \,\rangle^2}.$$

c. Dersom parameteren σ velges veldig stor, er $\Psi(x,0)$ praktisk talt en ren harmonisk planbølge. En harmonisk planbølge $\exp(ip_0x/\hbar)$ svarer som vi husker til en skarpt definert impuls, $p_x = p_0$. Hva *tror* du ut fra dette vil skje med forventningsverdien $\langle\, p_x \,\rangle$ og usikkerheten Δp_x når σ vokser mot uendelig?

d. Funksjonen $\Psi(x,0)$ gir også et *nøyaktig svar* på spørsmålene i pkt. **c**: Bruk forventningsverdipostulatet (C) til å *beregne* $\langle\, p_x \,\rangle$ og Δp_x (for vilkårlig p_0), og vis at usikkerhetsproduktet $\Delta x \cdot \Delta p_x$ faktisk har den minste verdien det kan ha ifølge Heisenbergs uskarphetsrelasjon, for alle σ og p_0.
[Hint: Vis at

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

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

Vha disse vil du se at de integralene som dukker opp under beregningen av $\langle\, p_x \,\rangle$ og $\langle\, p_x^2 \,\rangle$ er normeringsintegralet samt integralene for $\langle\, x \,\rangle$ og $\langle\, x^2 \,\rangle$, som jo allerede er beregnet. Her er det altså igjen lurt å skaffe seg litt "matematisk oversikt", i stedet for bare å regne i vei.]
Hva er den fysiske tolkningen av $\langle\, p_x \,\rangle$ og Δp_x, sett i forhold til en serie målinger av impulsen p_x? Størrelsene $\langle\, p_x \,\rangle$ og Δp_x har sammenheng med *sannsynlighetsfordelingen for impulsen* p_x for den aktuelle tilstanden. Kan det tenkes at også denne sannsynlighetsfordelingen kan finnes fra funksjonen $\Psi(x,0)$? [Hint: Hva sier tilstandspostulatet om slike spørsmål?]

e. Oppførselen til systemet vårt for $t > 0$ bestemmes av Schrödingerligningen for den frie partikkelen. Bølgegruppen vil da bevege seg. Du inviteres nå til å spekulere: Hvilken gruppehastighet tror du bølgegruppen $\Psi(x,t)$ vil få? [Hint: Tenk på partikkel-skuren fra "kanonen".]