ØVING 3

Gjør unna så mye du kan av dette før veiledningstimene, slik at disse kan brukes på *utfordringene* i denne øvingen.

Oppgave 3 − 1 **Ikke-stasjonær bokstilstand**

En partikkel med masse m beveger seg i et bokspotensial $V(x)$ (lik null for $0 < x < L$ og uendelig ellers). I forelesningene har vi sett at

$$\psi_1(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(\pi x/L) \qquad \text{og} \qquad \psi_2(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(2\pi x/L)$$

er de to (normerte) energiegenfunksjonene med de laveste energiene (grunntilstanden og første eksiterte tilstand).

a. ♠Kontrollér eksplisitt at begge disse er egenfunksjoner til Hamilton-operatoren $\widehat{H} = -(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2$ (dvs at de er løsninger av den tids<u>u</u>avhengige Schrödingerligningen for boksen) og bestem energiegenverdiene E_1 og E_2. ♠Kontrollér også at funksjonene

$$\Psi_i(x,t) = \psi_i(x)e^{-iE_it/\hbar} \qquad (i = 1,2)$$

begge oppfyller den tidsavhengige Schrödingerligningen for boksen. ♠Vis dessuten at de to energiegenfunksjonene er **ortogonale**; med dette mener vi at skalarproduktet (indreproduktet) av ψ_1 og ψ_2 er lik null,

$$\langle\, \psi_1, \psi_2 \,\rangle \equiv \int \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx = 0.$$

b. Løsninger av den tidsavhengige Schrödingerligningen på formen $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, kalles **stasjonære** løsninger. De to løsningene $\Psi_1(x,t)$ og $\Psi_2(x,t)$ er altså stasjonære. ♠Påvis at lineærkombinasjonen

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,[\Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t)]$$

av disse to stasjonære løsningene oppfyller Schrödingerligningen for boksen. ♠Er $\Psi(x,t)$ en stasjonær løsning?

c. På grunn av at de to tidsavhengige eksponensialfaktorene ovenfor ikke varierer i takt, vil sannsynlighetstettheten $|\Psi(x,t)|^2$ for denne ikke-stasjonære tilstanden oscillere som funksjon av tiden. ♠Vis at den kan skrives på formen

$$|\Psi(x,t)|^2 = \tfrac{1}{2}[\psi_1(x)]^2 + \tfrac{1}{2}[\psi_2(x)]^2 + \psi_1(x)\psi_2(x)\cos\omega t,$$

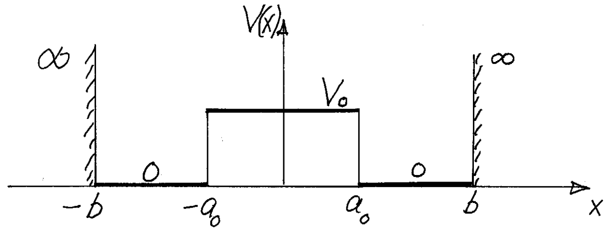
og bestem ω og periodetiden T for oscillasjonen.
[Hint: For en kompleks størrelse $z = \Re\mathrm{e}(z) + i\Im\mathrm{m}(z)$ er som du vil se $z + z^* = 2\Re\mathrm{e}(z)$. Bruk dette til å vise at $|z_1 + z_2|^2 = (z_1^* + z_2^*)(z_1 + z_2) = |z_1|^2 + |z_2|^2 + 2\Re\mathrm{e}(z_1^* z_2)$.]
♠Hva blir den tilsvarende periodetiden T dersom vi superponerer grunntilstanden og 2. eksiterte tilstand?

d. ♠Påvis at $\Psi(x,t)$ er normert (for alle t), ved å integrere sannsynlighetstettheten. [Hint: Gjør bruk av ortogonaliteten til $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$, samt det at både $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ er normerte.]

e. ♠Du bør nå prøve å kjøre Matlab-programmet "box_non_stationary.m", som er vedlagt på hjemmesiden, sammen med øvingen. Dette viser en animasjon av sannsynlighetstettheten $|\Psi(x,t)|^2$ og forventningsverdien $\langle x \rangle_t$ av posisjonen, som funksjoner av t. ♠Les ut fra animasjonen hvor store $\langle x \rangle_{\text{min}}$ og $\langle x \rangle_{\text{max}}$ er, omtrent. ♠Hva er $\langle x \rangle$ midlet over en hel periode? Programmet oppdaterer de nevnte størrelsene i en løkke over t som antakelig rusler og går nokså jevnt på maskina. ♠Hvordan vil du ut fra dette beskrive oppførselen av $\langle x \rangle$ som funksjon av t? ♠Hvordan skal denne t-avhengigheten egentlig være ut fra formelen ovenfor for $|\Psi(x,t)|^2$?

f. I programmet "box_non_stationary_3.m" (som også er lagt ved) har vi konstruert en mer avgrenset bølgegruppe, ved å superponere et stort antall stasjonære løsninger. ♠Hvordan ser det ut til at $\langle x \rangle$ beveger seg her (når bølgegruppen ikke er "i kontakt med veggen")?

Oppgave 3 – 2 Litt mer om krumning av egenfunksjoner



Et elektron med masse m_e beveger seg i det endimensjonale potensialet $V(x)$ vist i figuren. Her er høyden på barrieren i midten $V_0 = \hbar^2/(2m_e a_0^2)(= 13.6\ eV)$.

a. Dersom $\psi(x)$ er en energiegenfunksjon med (endelig) energi E for dette systemet, følger det fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at

$$\psi'' = \frac{2m_e}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi$$

er endelig for alle $-b < x < b$ (siden alle størrelsene på høyresiden er endelige). ♠Hva kan du da si om $\psi'(= d\psi/dx)$ i dette intervallet? [Hint: Kan ψ' være diskontinuerlig hvis ψ'' er endelig?] ♠Er ψ' endelig? ♠Hva kan du da si om ψ?

b. Anta at vi kjenner en av egenfunksjonene i *en liten del* av intervallet $-b < x < b$. ♠Hvorfor er dette tilstrekkelig til å bestemme energien E for denne egenfunksjonen? [Hint: Tenk deg at du bruker egenverdiligningen $\widehat{H}\psi = E\psi$ til å bestemme energien.] Et eksempel finner du i pkt. **c**.

c. Vi velger nå lengden b slik at 1. eksiterte tilstand ψ_2 får formen $\psi_2 = Ax$ for $-a_0 < x < a_0$. ♠Bruk dette til å finne energien E_2 til denne tilstanden. ♠Forklar hvilken form ψ_2 har i områdene mellom barrieren og de harde veggene, og tegn en skisse av den, der du tar hensyn til kontinuitetsegenskapene og krumningsegenskapene (jf forrige øving). [Oppgitt: Første eksiterte tilstand har bare ett nullpunkt (bortsett fra at den er lik null ved de harde veggene).]

d. Det opplyses at grunntilstanden ψ_1 er symmetrisk med hensyn på origo og fri for nullpunkter (bortsett fra at den er null ved de harde veggene). ♠Bruk dette samt det du vet om krumningsegenskapene til å lage en skisse av ψ_1. [NB! Grunntilstands-energien E_1 er lavere enn E_2, så for denne tilstanden er barriereområdet $|x| < a_0$ klassisk forbudt.]

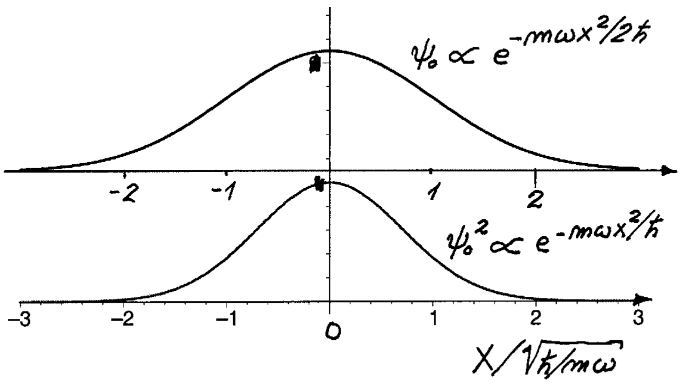
Oppgave 3 – 3 Δx og Δp_x for grunntilstanden i harmonisk oscillator, m.m.

I oppgave 7 fant vi at når bølgefunksjonen er

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

så er usikkerhetene i posisjon og impuls gitt ved $\Delta x = \sigma$ og $\Delta p_x = \hbar/2\sigma$, uavhengig av parameteren p_0. (Dessuten er $\langle\, p_x \,\rangle = p_0$.) Disse resultatene ble utledet direkte fra bølgefunksjonen ovenfor, og gjelder derfor uansett hvilket potensial partikkelen befinner seg i (ved prepareringstidspunktet $t = 0$).

a. ♠Hva blir etter dette usikkerhetene Δx og Δp_x for grunntilstanden for den harmoniske oscillatoren som vi så på i oppgave 3, $\psi_0(x) \propto \exp(-m\omega x^2/2\hbar)$? ♠Hva blir $\langle\, p_x \,\rangle$ for denne tilstanden? [Hint: $psi_0(x)$ er et spesialtilfelle av funksjonen ovenfor.]



[Figuren viser bølgefunksjonen ψ_0 og sannsynlighetstettheten, $\psi_0^2 \propto \exp(-m\omega x^2/\hbar)$, som funksjoner av $x/\sqrt{\hbar/m\omega}$, for den nevnte grunntilstanden.]

b. Anta at en partikkel i boks befinner seg i i den normerte tilstanden

$$\Psi(x,t) = c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}; \qquad |c_1| = \tfrac{1}{2}\sqrt{3}, \quad |c_2| = \tfrac{1}{2}.$$

Her er E_1 grunntilstandsenergien og $E_2 = 4E_1$. Det kan vises at sannsynlighetene for å måle energiene E_1 og E_2 er henholdsvis $P_1 = |c_1|^2$ og $P_2 = |c_2|^2$. ♠Finn den teoretiske forventningsverdien $\langle\, E \,\rangle = \sum_n P_n E_n$ av energien og usikkerheten ΔE, begge uttrykt ved E_1. Det opplyses at

$$(\Delta E)^2 = \left\langle\, (E - \langle\, E \,\rangle)^2 \,\right\rangle = \sum_n P_n (E_n - \langle\, E \,\rangle)^2.$$

c. En partikkel med masse m som beveger seg i et endimensjonalt potensial $V(x)$ har en energiegenfunksjon på formen

$$\psi = C \exp[-m\omega(x-a)^2/2\hbar].$$

♠Bruk disse opplysningene og den tidsuavhengige Schrödingerligningen til å bestemme energiegenverdien E og potensialet $V(x)$, begge på en konstant nær.

Oppgave 3 – 4 Oppfølger til oppgave 7

I denne oppgaven antar vi at partikkelen er fri, med samme begynnelsestilstand,

$$\Psi(x,0) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} e^{-x^2/4\sigma^2} e^{ip_0x/\hbar},$$

som i oppgave 7. Også denne oppgaven inneholder lite regning, men vil forhåpentligvis sette tankene i sving likevel. Resultatene fra oppgave 7 kunne brukes til flere ting: Vi fikk bl.a illustrert at partikkelens impuls p_x strengt tatt ikke kan være *helt* skarpt definert (fordi dette ville kreve preparering av en bølgepakke med uendelig utstrekning, $\Delta x = \sigma \to \infty$). [1]

a. ♠Forklar hvorfor det heller ikke er mulig å gå til den motsatte ytterligheten, dvs å preparere en tilstand der partikkelen har *helt* skarpt definert posisjon x (dvs $\Delta x = 0$). [Hint: Fra definisjonen av Δp_x og vha Heisenbergs uskarphetsrelasjon har vi at

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = \langle p_x \rangle^2 + (\Delta p_x)^2 \geq \langle p_x \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} \qquad \text{(jf “kvante-villskap”)},$$

(der likhetstegnet gjelder bl.a for den spesielle tilstanden $\Psi(x,0)$ øverst på siden). Hva skjer med $\langle p_x^2 \rangle$ når $\Delta x \to 0$?]

b. ♠Hva er forventningsverdien $\langle E \rangle$ av partikkelens energi i tilstanden $\Psi(x,0)$? (Uttrykk resultatet ved p_0 og σ.) ♠Hva skjer med $\langle E \rangle$ i grensene $\sigma \to \infty$ og $\sigma \to 0$?

Hvis $\Delta x = \sigma$ velges liten, kan vi betrakte prepareringen av begynnelsestilstanden $\Psi(x,0)$ nærmest som en *måling* av posisjonen, som etterlater partikkelen i en tilstand karakterisert ved $\langle x \rangle = 0$ og $\Delta x = \sigma$. Spørsmålet er da hva som skjer med $\langle x \rangle$ og Δx for $t > 0$, og i det hele tatt hvordan bølgepakken $\Psi(x,t)$ vil utvikle seg med tiden. Dette vil selvsagt avhenge av det potensialet $V(x)$ som partikkelen beveger seg i, og det bestemmes av den tidsavhengige Schrödingerligningen for dette potensialet, med $\Psi(x,0)$ som begynnelses-”betingelse”.

c. For en *fri* partikkel ($V = 0$), som vi ser på her, er det forholdsvis enkelt å løse Schrödingerligningen, og det viser seg at bølgefunksjonen $\Psi(x,t)$ for $t > 0$ er slik at sannsynlighetstettheten er gitt ved normalfordelingen

$$|\Psi(x,t)|^2 = [2\pi(\sigma^2 + \hbar^2t^2/4m^2\sigma^2)]^{-1/2} \exp\left[-\frac{(x - p_0t/m)^2}{2(\sigma^2 + \hbar^2t^2/4m^2\sigma^2)}\right].$$

I oppgave 7 lærte vi at en sannsynlighetstetthet på formen $\exp(-x^2/2\sigma^2)$ svarer til $\langle x \rangle = 0$ og $\Delta x = \sigma$. ♠Hva blir da (den tidsavhengige) forventningsverdien av posisjonen, $\langle x \rangle_t$ for den aktuelle tilstanden (bølgegruppen)? ♠Hvordan samsvarer resultatet med gruppehastigheten som ble funnet i oppgave 7, $v_g = p_0/m$? ♠Les tilsvarende ut usikkerheten $(\Delta x)_t$ som funksjon av t.

Det at bølgepakken ikke bare endrer posisjon, men også *form*, kalles **dispersjon,** og henger sammen med at fasehastigheten $v_f = p_x/2m = \hbar k/2m$ for en de Broglie-bølge avhenger av bølgetallet k (jf bølgeteori). Siden denne dispersjonen (eller *spredningen*) av bølgepakken er den samme for alle p_0, antar vi i resten av oppgaven at prepareringen (målingen) ved $t = 0$ er slik at $p_0 = 0$.

[1] Den rene harmoniske planbølgetilstanden, $\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp(ipx/\hbar)$, er altså strengt tatt ikke realiserbar fysisk. Den spiller likevel en sentral rolle i mange praktiske kvantemekaniske beregninger.

d. ♠Hva vil du si skjer med dispersjonen dersom vi insisterer på å ha en veldig skarpt definert posisjon (veldig liten σ) ved $t = 0$? ♠Hva skjer om vi velger en *enda mindre* σ?

Vi kan hente enda litt mer "moral" ut av dette eksemplet:

e. For $t >> 2m\sigma^2/\hbar$ ser vi at dispersjonen får bølgegruppen $\Psi(x,t)$ til å spre seg ut over et område som svarer til $(\Delta x)_t \approx \hbar t/2m\sigma$ [altså et område som blir større jo mindre vi velger $(\Delta x)_0 = \sigma$]. ♠Prøv å "forstå" dette. Hint: Jo mindre σ vi velger, desto større er spredningen $\Delta p_x = \hbar/2\sigma$ i impulsen (omkring middelverdien $p_0 = 0$). Prøv med en "halvklassisk" tankegang: Dersom partikkelens posisjon ved $t = 0$ er $x \approx 0$, og den har en impuls som "for det meste" befinner seg i intervallet $-\Delta p_x < p_x < \Delta p_x$, hvor vil vi da "for det meste" finne partikkelen ved tiden t, om vi regner klassisk?

Oppgave 3 − 5 Diracs δ-funksjon

a. I uttrykkene nedenfor er $\delta(x)$ Diracs δ-funksjon, jf forelesningene og Appendix B i boka. ♠Fyll ut:

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

(Les f_1 og f_2 som "faktor 1" og "faktor 2".)

b. ♠Ved å tegne et diagram vil du se at funksjonen

$$f(x) = \begin{cases} \text{const} & \text{for} \quad x < 0, \\ \text{const} + x & \text{for} \quad x > 0 \end{cases}$$

har en "knekk" for $x = 0$. Den deriverte av denne funksjonen er åpenbart **sprangfunksjonen,**

$$\frac{df}{dx} = \Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad x < 0, \\ 1 & \text{for} \quad x > 0. \end{cases}$$

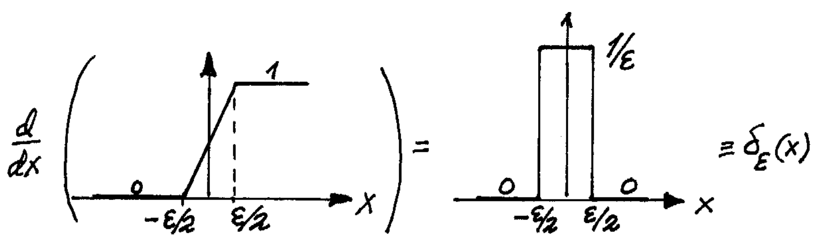
♠Overbevis deg om at den 2.-deriverte av "knekk"-funksjonen $f(x)$, dvs den 1.-deriverte av sprangfunksjonen, er δ-funksjonen:

$$\boxed{\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{d\Theta}{dx} = \delta(x).}$$

Hint: Bruk relasjonen

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} \frac{d\Theta(x)}{dx}\, dx = \Theta(\Delta) - \Theta(-\Delta) \qquad (\text{for } \Delta > 0),$$

eller se på relasjonen



i grensen $\epsilon \to 0$.