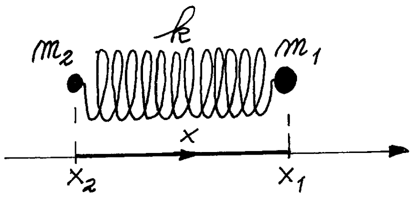
ØVING 4

Oppgave 4 − 1 Vibrerende to-partikkel-system

Som diskutert side 110 i boka, er det et viktig poeng — både i klassisk mekanikk og i kvantemekanikk — at et **to-partikkel-problem** essensielt kan "reduseres" til et enpartikkelproblem. Dette er relevant både for *bundne* to-partikkel-systemer (som f.eks H-atomet) og for *ubundne* systemer, slik vi har i spredningsprosesser.

Dette kan illustreres ved et "endimensjonalt" system, der to partikler med masser m_1 og m_2 er forbundet med en vektløs fjær med fjærkonstant k. Ved likevekt (med "avspent" fjær, og null krefter) er **relativ-koordinaten** mellom de to partiklene, $x = x_1 - x_2$, lik l (likevektsavstanden).



Ellers er kreftene på m_1 og m_2 er hele tiden motsatt rettet og proporsjonale med "utsvinget" fra likevektsavstanden, $x_1 - x_2 - l = x - l$:

$$F_1 = -F_2 = -k(x_1 - x_2 - l) \equiv -k(x - l).$$

Siden disse kreftene bare avhenger av relativ-koordinaten x, må det samme gjelde for den potensielle energien; det er lett å se at disse kreftene kan avledes av potensialet $V = \frac{1}{2}k(x-l)^2$, vha

$$F_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} = -\frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_i}, \qquad i = 1, 2.$$

[Vi tenker oss altså her at all bevegelse skjer i x-retningen, dvs vi ser bort fra at systemet kan *rotere* om tyngdepunktet for to-partikkelsystemet.]

a. Først en klassisk-mekanisk tilnærming: Om vi først tenker oss at vi holder m_2 fast i origo, slik at $x_2 = 0$, er ifølge Newtons 2. lov

$$\frac{F_1}{m_1} = \underline{\frac{-k(x-l)}{m_1}} = \frac{d^2x}{dt^2} = \underline{\frac{d^2(x-l)}{dt^2}}. \qquad (x_2 = 0,\ x = x_1)$$

♠Sett inn prøveløsningen $x - l = A\cos(\omega_1 t + \alpha)$ i differensialligningen som er understreket, og vis at den klassiske vinkelfrekvensen er

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{k}{m_1}}.$$

Holder vi m_1 fast, får vi tilsvarende en svingning med vinkelfrekvens $\omega_2 = \sqrt{k/m_2}$.

Og så kommer poenget: Lar vi både m_1 og m_2 svinge fritt (som to atomer i et toatomig molekyl), skal du vise at relativ-avstanden svinger med en vinkelfrekvens ω som er større enn både ω_1 og ω_2: ♠Vis først at den andrederiverte av utsvinget $x-l$ er lik $-(x-l)k/\mu$, der μ er den såkalte **reduserte massen**, definert ved $1/\mu = 1/m_1 + 1/m_2$:

$$\frac{d^2}{dt^2}(x-l) = \cdots = -\frac{k}{\mu}(x-l), \qquad \text{der} \quad \frac{1}{\mu} \equiv \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \qquad \left(\Longrightarrow \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}\right).$$

[Hint: Bruk $d^2x_i/dt^2 = F_i/m_i,\ (i=1,2)$.]
♠Sett deretter inn prøveløsningen $x-l = A\cos(\omega t+\alpha)$ i differensialligningen ovenfor, og påvis at den resulterende vinkelfrekvensen ω er større enn ω_1 og ω_2, som påstått ovenfor.

♠Hvordan beveger *tyngdepunktet* for to-partikkel-systemet seg når det ikke virker noen ytre krefter? [Jf Newtons 1. lov.]

b. Så til den kvantemekaniske behandlingen. Med utgangspunkt i energioperatoren $\widehat{H} = \widehat{K}_1 + \widehat{K}_2 + V(x)$ for de to partiklene kan det vises (se nedenfor, og se avsnitt 5.8 side 110 i Hemmer) at *relativbevegelsen* for de to partiklene beskrives av den tidsuavhengige Schrödingerligningen

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

der μ er den reduserte massen og x er relativkoordinaten. ♠Hva blir energinivåene? ♠Angi energiegenfunksjonen for grunntilstanden som funksjon av relativkoordinaten x.
[Hint: Svarene finner du uten å regne, ved å sammenligne med "standardutgaven" av en harmonisk oscillator, som er en partikkel med masse m som beveger seg i potensialet $V(q) = \frac{1}{2}kq^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2q^2$. Den tidsuavhengige Schrödingerligningen for dette systemet er

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \tfrac{1}{2}kq^2\right]\psi(q) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2q^2\right]\psi(q) = E\psi(q),$$

med energiegenverdiene

$$E_n = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\,(n+\tfrac{1}{2}) \equiv \hbar\omega(n+\tfrac{1}{2}), \qquad n = 0,1,2,\cdots.$$

Energiegenfunksjonen for grunntilstanden er (som vi har sett før)

$$\psi_0(q) = C_0 e^{-m\omega q^2/2\hbar}, \qquad C_0 = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}.$$]

c. ♠Vis at Hamilton-operatoren $\widehat{H} = \widehat{K}_1 + \widehat{K}_2 + V(x)$ (der $\widehat{K}_1 = \widehat{p}_1^2/2m_1$ osv) kan skrives som

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{P}^2}{2M} + \frac{\widehat{p}^2}{2\mu} + V(x) \qquad \text{med} \quad \widehat{P} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial X} \quad \text{og} \quad \widehat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},$$

hvor

$$x = x_1 - x_2 \qquad \text{og} \qquad X = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1+m_2} \equiv \frac{m_1}{M}x_1 + \frac{m_2}{M}x_2$$

er henholdsvis relativkoordinaten og tyngdepunktskoordinaten. [Hint: Ved hjelp av kjerneregelen har vi at

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_1} = \frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x} \qquad \text{og} \qquad \frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}.$$

Fra disse kan du finne $\widehat{p}_1$ og $\widehat{p}_2$ uttrykt ved $\widehat{P}$ og $\widehat{p}$.]
♠Hvilken fysisk observabel svarer operatoren $\widehat{P}$ til? [Hint: Vis at $\widehat{p}_1 + \widehat{p}_2 = \widehat{P}$.]

d. Da $\widehat{H}$ kommuterer med operatoren $\widehat{P}$, kan vi finne energiegenfunksjoner som samtidig er egenfunksjoner til $\widehat{P}$, med egenverdi P. Disse egenfunksjonene vil generelt avhenge både av relativ-koordinaten $x = x_1 - x_2$ og av tyngdepunktskoordinaten X. Anta at vi velger å betrakte dette systemet fra tyngdepunkts-systemet, hvor den samlede impulsen P til de to partiklene pr definisjon er lik null. ♠Forklar (vha egenverdiligningen $\widehat{P}\psi = P\psi$) hvorfor energiegenfunksjonen da blir uavhengig av tyngepunktskoordinaten X, og sammenlign den resulterende energiegenverdiligningen med ligningen under pkt. **b**.

Oppgave 4 − 2 Vibrasjonsfrihetsgraden for to-atomig molekyl

Når et oksygenmolekyl O_2 er i grunntilstanden (dvs har lavest mulig energi), er avstanden mellom de to kjernene *nokså nær* en viss likevektsavstand (av størrelsesorden Ångstrøm).

Denne likevektsavstanden svarer til et energiminimum for dette systemet. Prøver vi å dytte de to kjernene (og dermed elektronskyene) nærmere hverandre, eller å trekke dem fra hverandre, koster det energi, og molekylet motsetter seg endringen med en kraft som er tilnærmet proporsjonal med "utsvinget" (avviket fra likevektsavstanden). M.a.o: Vi har (for små utsving) en tilnærmet harmonisk oscillator. (Jf Tillegg 3, side 25–26.)

Kvantemekanisk kan denne oscillatoren være i grunntilstanden, men den kan også eksiteres.

a. Eksperimentelt viser det seg at den (tilnærmet ekvidistante) avstanden mellom energinivåene for denne oscillatoren er $\hbar\omega \approx 0.20$ eV. Med en oksygenmasse m finner vi fra forrige oppgave at "fjærkonstanten" for dette systemet er $k = \frac{1}{2}m\omega^2$. ♠Gjør et numerisk overslag over denne "fjærkonstanten", og påvis at "fjæren" er ganske kraftig, med en fjærkonstant av størrelsesorden 10^3 N/m. [Massen til et oksygenatom er ca 16 ganger protonmassen, som er $m_p \approx 1.67 \cdot 10^{-27}$ kg.]

b. ♠Et ja/nei-spørsmål ut fra det som hittil er sagt: Kan avstanden mellom de to kjernene være skarpt definert?
Som et mål for størrelsen av typiske "utsving" for denne oscillatoren kan vi ta lengden $\sqrt{\hbar/m\omega}$ (som er $\sqrt{2}$ ganger usikkerheten Δx). ♠Sett inn tallverdier for denne størrelsen, og vis at disse "utsvingene" for kjernene er små sammenlignet med atomradier (eller med avstandene mellom kjernene i et molekyl), som typisk er av størrelsesorden 10^{-10} m.

c. Anta at vi har en *makroskopisk* oscillator med samme fjærkonstant, dvs et potensial $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, og en makroskopisk "partikkel" med masse $M = 1$ kg. ♠Vis at forholdet mellom energibeløpet $\hbar\omega'$ for denne oscillatoren og beløpet $\hbar\omega$ for oscillatoren ovenfor er ca 10^{-13}. ♠Beregn også lengden $\sqrt{\hbar/M\omega'}$, som gir skalaen for "utsvinget" av den tunge massen (i grunntilstanden), og vis at denne lengden er ca en faktor 10^{-7} mindre enn størrelsen $\sqrt{\hbar/m\omega}$ for den lette massen.

d. Anta at den tunge massen oscillerer med et utsving på $x_{max} = 10$ cm. ♠Sammenlign energien $E = \frac{1}{2}k(x_{max})^2$ for en slik svingetilstand med energibeløpet $\hbar\omega'$ for denne oscillatoren, og finn ut hvor store kvantetall n' dette svarer til. [Hint: Husk at $E'_n = \hbar\omega'(n' + \frac{1}{2})$.]

Oppgave 4 − 3 Ikke-stasjonær tilstand for partikkel i boks

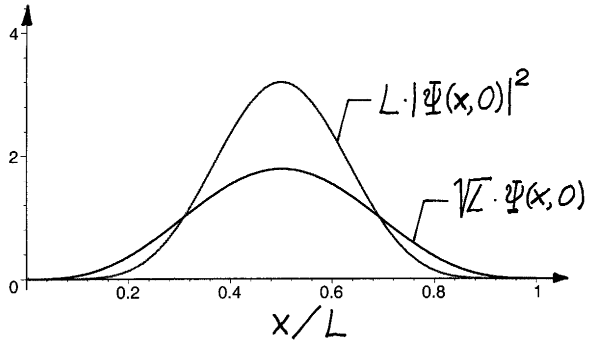
En partikkel med masse m befinner seg i en uendelig dyp endimensjonal potensialbrønn (boks) med vidde L:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } \ 0 < x < L, \\ \infty & \text{ellers.} \end{cases}$$

Ved $t = 0$ prepareres dette systemet i en tilstand beskrevet ved bølgefunksjonen

$$\Psi(x,0) \ = \ \sqrt{\frac{16}{5L}} \left(\sin\frac{\pi x}{L}\right)^3 .$$

Figuren viser $\sqrt{L}\Psi(x,0)$ og $L|\Psi(x,0)|^2$ som funksjoner av x/L.



a. ♠Angi (ut fra diagrammet ovenfor) forventningsverdien $\langle\, x \,\rangle_0$ av partikkelens posisjon ved $t = 0$. ♠Hvilken av kurvene i diagrammet er direkte relevant når du på øyemål skal anslå omtrent hvor stor *usikkerheten* $(\Delta x)_0$ i posisjonen er ved $t = 0$. ♠Hva *er* ditt anslag?

b. Da det ortonormerte energiegenfunksjonssettet for boksen,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin k_n x, \qquad k_n = \frac{n\pi}{L}, \qquad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \qquad n = 1, 2, \cdots,$$

utgjør et fullstendig sett (dvs danner en basis), kan begynnelsestilstanden utvikles i dette settet. ♠Bruk formelen $4\sin^3 y = 3\sin y - \sin 3y$ til å finne koeffisientene c_n i utviklingsformelen

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x).$$

c. ♠Vis at begynnelsestilstanden $\Psi(x,0)$ er normert. [Hint: Normeringsintegralet kan skrives som

$$\int_0^L \left(\sum_k c_k\psi_k\right)^* \left(\sum_n c_n\psi_n\right) dx = \sum_{k,n} c_k^* c_n \int_0^L \psi_k^* \psi_n dx. \Bigg]$$

<u>d.</u> Etter prepareringen (for $t > 0$) er bølgefunksjonen

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar},$$

der c_n er koeffisientene som skulle finnes ovenfor. [Denne er lik den oppgitte tilstanden ved $t = 0$, og den oppfyller Schrödingerligningen. Mer kan ingen kreve.] Anta at det gjøres en måling av energien E til partikkelen ved $t = 0$ (umiddelbart etter prepareringen). ♠(i) Hva er de mulige måleresultatene, og hva er sannsynlighetene for disse? ♠(ii) Beregn forventningsverdien $\langle E \rangle_0$ av energien ved $t = 0$ (uttrykt ved grunntilstandsenergien E_1). ♠(iii) Hva blir bølgefunksjonen for systemet etter en slik måling? ♠(iv) Hva blir svarene på (i) og (ii) dersom målingen i stedet gjøres ved tiden t (dvs en stund etter prepareringen)?

<u>e.</u> Etter overslaget av usikkerheten $(\Delta x)_0$ i pkt. **<u>a</u>** kan det være interessant å undersøke $(\Delta p_x)_0$. ♠Vis først at $\langle p_x \rangle_0 = 0$. ♠Finn deretter $\langle p_x^2 \rangle_0$ (f.eks vha resultatet for $\langle E \rangle_0$), og sett inn den resulterende usikkerheten $(\Delta p_x)_0$ (og overslaget over $(\Delta x)_0$) i usikkerhetsproduktet $(\Delta x)_0 (\Delta p_x)_0$.