ØVING 2

Oppgave 2 – 1 "nesten" en posisjonsegentilstand

Vi har sett at en posisjon ikke kan måles med en usikkerhet som er eksakt lik null. Derimot er det i prinsippet fullt mulig å preparere et ensemble av partikler i en tilstand som er slik at usikkerheten i posisjonen er vilkårlig liten (men forskjellig fra null). La oss forestille oss at dette skjer ved en slags "måling" på ensemblet, som etterlater det i en tilstand beskrevet ved den normerte bølgefunksjonen

$$\psi(x) = (2\beta/\pi)^{1/4} e^{-\beta(x-a)^2}, \qquad \beta \text{ stor.}$$

a. Finn (uten regning) forventningsverdien $\langle\, x \,\rangle$ av posisjonen. [Hint: Ta en titt på sannsynlighetstettheten $(\psi(x))^2$.]

b. Vis at usikkerheten Δx i posisjonen er $1/\sqrt{4\beta}$. [Hint: Husk at $(\Delta x)^2 = \langle\, (x - \langle\, x \,\rangle)^2 \,\rangle$. Regningen blir kanskje enklere om du innfører $x' = x - a$ som ny integrasjonsvariabel. Noen Gauss-integraler er oppgitt nedenfor.] Vis også at den Gauss-fordelte sannsynlighetstettheten $|\psi(x)|^2$ kan skrives på formen

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta x)^2}} \exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2(\Delta x)^2}\right].$$

Moral: For en Gauss-fordelt sannsynlighetsfordeling kan vi lese usikkerheten rett ut av eksponenten.

c. Anta at β velges veldig stor, for å oppnå at Δx blir veldig liten. På denne måten får vi preparert ensemblet med en veldig skarpt definert posisjon. Regn ut $\langle\, p_x \,\rangle$ og $\langle\, p_x^2 \,\rangle$, og vis at vi til gjengjeld for den nokså veldefinerte posisjonen "straffes" med en veldig stor usikkerhet Δp_x i impulsen. (Sjekk også at resultatene for Δx og Δp_x stemmer med Heisenbergs uskarphetsrelasjon.) [Hint: Her kan det være lurt å vise at $\langle\, p_x \,\rangle$ alltid er lik null når bølgefunksjonen er reell.]
Uttrykk forventningsverdien av den kinetiske energien ved usikkerheten Δx. Hva skjer dersom du insisterer på å la Δx gå mot null?

d. Bølgefunksjonen $\psi(x)$ inneholder *all* informasjon om impulsfordelingen i den preparerte tilstanden (ikke bare usikkerheten Δp_x). Denne informasjonen kan vi hente ut ved å beregne impulsbølgefunksjonen $\phi(p)$, som er "utviklingskoeffisienten" $\phi(p)$ i Fourier-integralet

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\psi_p(x)dp \qquad \left[\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}\right].$$

Som vi har sett i forelesningene (Tillegg 2), er $\phi(p)$ projeksjonen av $\psi(x)$ på impulsbølgefunksjonen $\psi_p(x)$:

$$\phi(p) = \langle\, \psi_p, \psi \,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\psi(x)dx \qquad \text{("omvendingsformelen").}$$

Beregn $\phi(p)$ vha integralet oppgitt nedenfor, og vis at sannsynlighetstettheten i impulsrommet i dette tilfellet er Gauss-fordelt og kan skrives på formen

$$|\phi(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta p_x)^2}} \exp\left[-\frac{p^2}{2(\Delta p_x)^2}\right],$$

der Δp_x er usikkerheten funnet i pkt. <u>**c**</u>. [Hint: Innfør $x - a$ som ny integrasjonsvariabel.] Hva skjer med denne sannsynlighetsfordelingen når β velges veldig stor?
En liten utfordring: Hvorfor kan vi si (uten regning) at selve impulsbølgefunksjonen $\phi(p)$ må avhenge av a? [Hint: Ta en titt på tilstandspostulatet.]

<u>**e.**</u> Hva som skjer *etter* prepareringen av denne tilstanden $\psi(x)$ avhenger av potensialet $V(x)$, og bestemmes av Schrödingerligningen. Med et gitt potensial kan denne i prinsippet løses matematisk, slik at en finner bølgefunksjonen som funksjon av tid og rom. Denne vil inneholde all mulig informasjon om det som skjer med partikkelen (ifølge tilstandspostulatet).

Anta som eksempel at partikkelen er fri ($V(x) = 0$). I stedet for å angripe problemet rent matematisk inviteres du nå til å spekulere: Hvor langt vil en partikkel med masse m og impuls i området $-\Delta p_x < p_x < +\Delta p_x$ bevege seg i løpet av tiden t? Hvor stor usikkerhet i posisjonen vil du ut fra en slik tankegang vente å finne ved tiden t (når du antar at tilstanden ble preparert ved $t = 0$)?

Oppgitt: Noen Gauss-integraler

$$\begin{aligned} I_0(\alpha) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\pi/\alpha}; \\ I_2(\alpha) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{d}{d\alpha} I_0(\alpha) = \tfrac{1}{2}\sqrt{\pi}\,\alpha^{-3/2}; \\ J(A,B) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Ay^2+By} dy = e^{B^2/4A}\sqrt{\pi/A}, \qquad (\Re\mathrm{e}(A) > 0). \end{aligned}$$

<u>Oppgave 2 − 2</u> Gaussisk bølgepakke for fri partikkel

Noen opplysninger først: Det er lett å sjekke at den Gaussiske (dvs normalfordelte) **sannsynlighetstettheten**

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = (2\pi\sigma^2)^{-1/2}\, e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$$

er normert ($\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)dx = 1$), og at forventningsverdien av x er

$$\langle\, x\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)dx = x_0.$$

Det er også lett å vise at kvadratet av usikkerheten i posisjonen er

$$(\Delta x)^2 = \left\langle\, (x - \langle\, x\,\rangle)^2 \,\right\rangle = \sigma^2.$$

Vi har altså følgende *regel*:

$$\boxed{|\psi(x)|^2 = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\, e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2} \quad \Longrightarrow \quad \Delta x = \sigma \quad \text{og} \quad \langle\, x\,\rangle = x_0.}$$

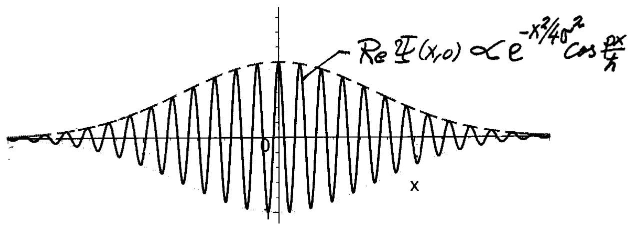
Denne regelen er det nyttig å ha klart for seg når en arbeider med gaussiske sannsynlighetstettheter, både i x- og p-rommet. Sammenhengene ovenfor følger fra resultatene vi kom fram til i forrige oppgave, og kan selvsagt også sjekkes direkte ved hjelp av de oppgitte integralene.

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

Problemstillingen vi skal se på i denne oppgaven er en fri partikkel med masse m. Energi- og impulsegenfunksjonene for den frie partikkelen er ikke-lokaliserte, men vi står selvsagt fritt til å preparere en begynnelsestilstand som er lokalisert. En slik *lokalisert* begynnelsestilstand er *ikke* en impuls- eller energiegentilstand, og gjør at tilstanden for denne partikkelen i høyeste grad blir ikke-stasjonær. Her velger vi, ved $t = 0$, å preparere partikkelen i begynnelsestilstanden

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

Denne har form av en impulsegenfunksjon ($e^{ip_0x/\hbar}$) modulert av Gauss-faktoren $e^{-x^2/4\sigma^2}$. Vi skal etter hvert prøve å finne ut hvordan bølgepakken $\Psi(x,t)$ oppfører seg for $t > 0$, men starter med å se på selve begynnelsestilstanden: Figuren viser realdelen av denne tilstanden, der $e^{ip_0x/\hbar}$ er erstattet med $\cos(p_0x/\hbar) \equiv \cos(k_0x)$. (Imaginærdelen ser nesten likedan ut, med $\sin(k_0x)$ istedenfor $\cos(k_0x)$.)



a. Skriv ned sannsynlighetstettheten $|\Psi(x,0)|^2$ og les ut begynnelsesverdiene for $\langle\, x\,\rangle_0$ og $(\Delta x)_0$ vha regelen ovenfor.

I avsnitt 2.7 i Tillegg 2 kan du repetere den generelle framgangsmåten en bruker for å finne tidsutviklingen av en tilstand når begynnelsestilstanden er oppgitt ("begynnelsestilstandsproblemet"): En skriver den ukjente tidsavhengige bølgefunksjonen som en superposisjon av stasjonære tilstander for vedkommende system. For en fri partikkel i én dimensjon er dette impulsegentilstandene

$$\Psi_p(x,t) = \psi_p(x)\, e^{-i(p^2/2m)t/\hbar} = (2\pi\hbar)^{-1/2}\, e^{i[px-(p^2/2m)t]/\hbar}.$$

Ifølge oppskriften i Tillegg 2 har vi da

$$(i) \qquad \Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\Psi_p(x,t)dp \qquad \Longrightarrow$$

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\psi_p(x)dp \qquad \Longrightarrow$$

$$(ii) \qquad \phi(p) = \langle\, \psi_p, \Psi(0)\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\Psi(x,0)dx.$$

Fourier-transformen $\phi(p)$ finnes altså ved å projisere begynnelsestilstanden på impulsegenfunksjonen $\psi_p(x)$. Tredje skritt i oppskriften er å sette uttrykket for $\phi(p)$ inn i (i), som da gir bølgefunksjonen ved tiden t:

$$(iii) \qquad \Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle\, \psi_p, \Psi(0)\, \rangle\, \Psi_p(x,t)dp.$$

b. Det viser seg at "koeffisient-funksjonen" $\phi(p)$ er Gauss-fordelt omkring impulsverdien p_0:

$$\phi(p) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-(p-p_0)^2\sigma^2/\hbar^2}.$$

Vis dette ved å regne ut integralet (ii). Så slik ser altså Fourier-transformen $\phi(p)$ ut for den gaussiske bølgepakken $\Psi(x,0)$. [Hint: Integralet er av typen $J(a,b)$ nevnt ovenfor. Du trenger bare å identifisere hva a og b er i dette tilfellet.] Hva er den "sentrale" impulsen i bølgepakken $\Psi(x,t)$?

c. For å finne ut hva som skjer med bølgepakken $\Psi(x,t)$ og størrelsene $(\Delta x)_t$ og $\langle\, x\, \rangle_t$ for $t > 0$, kan vi sette $\phi(p)$ inn i utviklingen (i). [Dette er trinn (iii) i den framgangsmåten vi nå bruker.]
Hint: Vis at $\Psi(x,t)$ kan skrives som

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{\sigma^2}{2\pi^3}\right)^{1/4} e^{i\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2+by}dy,$$

hvor $\alpha = p_0x/\hbar - (p_0^2/2m)t/\hbar$, $a = \sigma^2 + i\hbar t/2m$ og $b = i(x - p_0t/m)$. [Innfør $y = (p - p_0)/\hbar$ som integrasjonsvariabel.]
Vis at resulatet er

$$\Psi(x,t) = \frac{(2\pi)^{-1/4}}{\sqrt{\sigma + i\hbar t/2m\sigma}}\, e^{i[p_0x-(p_0^2/2m)t]/\hbar} \exp\left[-\frac{(x-p_0t/m)^2}{4(\sigma^2 + i\hbar t/2m)}\right],$$

og sjekk at denne reduserer seg til den korrekte begynnelsestilstanden $\Psi(x,0)$ i grensen $t \to 0$. Vis også at sannsynlighetstettheten for denne bølgepakken blir

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

Hint: For reelle a, b, c har en at

$$|e^{ia}| = 1, \quad |a + ib|^2 = a^2 + b^2,$$

$$\left|\exp\left(\frac{c}{a+ib}\right)\right| = \left|\exp\left(\frac{c(a-ib)}{a^2+b^2}\right)\right| = \exp\left(\frac{ca}{a^2+b^2}\right).$$

d. Ved å bruke reglene på første side skal du nå kunne lese ut fra formen på $|\Psi(x,t)|^2$ verdiene for $\langle\, x\, \rangle_t$ og $(\Delta x)_t$ (ved tiden t). Bruk resultatet for $\langle\, x\, \rangle_t$ til å sjekke at gruppehastigheten blir korrekt. Diskuter dispersjonen av bølgepakken, og påvis at resultatene i den kvalitative diskusjonen i forrige oppgave er korrekte.

e. Vis at usikkerheten i x kan skrives som $(\Delta x)_t = \sigma\sqrt{1+(t/t_1)^2}$, hvor $t_1 = 2m\sigma^2/\hbar$. Med denne skrivemåten kan vi si at t_1 røfft er tiden det tar før bølgepakken har doblet sin opprinnelige utstrekning. Finn t_1 for et elektron med masse 511000 eV/c^2 og en σ-verdi av atomær størrelse ($\sim 10^{-10}$ m).[1] Hva er t_1 for $\sigma = 10$ cm ? Hva er t_1 for en ping-pong-ball med masse 2g og $\sigma \sim 10^{-6}$ m ? [Bruk $\hbar \approx 0.6582 \cdot 10^{-15}$ eVs $\sim 10^{-34}$ Nms.]

Oppgave 2 – 3 Matlab-program for bølgepakker

Vedlagt (se hjemmesiden) finner du et Matlab-program, fripartikkel.m, som du kan prøve å kjøre for å se nærmere på oppførselen til bølgepakker:

Her vises real- og imaginærdelene av en bølgepakke for en fri partikkel, av den typen som det regnes på i oppgaven ovenfor — vha et tredimensjonalt animerings-plott. Kjør dette programmet for å se hvordan pakken propagerer. Legg merke til dispersjonen. Prøv også å observere at fasehastigheten er halvparten av gruppehastigheten. Merk også at dispersjonen kan "skrues av", om du ønsker. Merk at parametrene kan justeres, "observasjons-vinklene" kan endres, osv.

[1] I partikkelfysikk er det vanlig å angi massen til f.eks elektronet som $m_e = 0.510999..$ MeV/c^2, der $c = 2.998..$m/s er lyshastigheten. Jf Einsteins formel for hvilemasse-energien. Vi har altså for elektronet

$$t_1 = \frac{2m_e\sigma^2}{\hbar} = \frac{2m_e c^2\,\sigma^2}{\hbar c^2} \sim \frac{2\cdot 511999\,\mathrm{eV}\,(10^{-10}\mathrm{m})^2}{0.6582\cdot 10^{-15}\mathrm{eVs}\,(2.998\,\mathrm{m/s})^2} = \cdots .$$