ØVING 1

Oppgave 1A **Forventningsverdien $\langle K \rangle$ av den kinetiske energien**

a. I Tillegg 2 (se under Lærebok på hjemmesiden) har vi sett hvordan en en hermitesk operator $\widehat{F}$ kan "flyttes",

$$\int (\widehat{F}\Psi_1)^*\Psi_2 d\tau = \int \Psi_1^* \widehat{F}\Psi_2 d\tau,$$

(fra å virke på Ψ_1 til å virke på Ψ_2, forutsatt at disse er kvadratisk integrerbare). [1] Herav følger at

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle_\Psi = \int \Psi^* \widehat{p}_x \widehat{p}_x \Psi d\tau = \int (\widehat{p}_x\Psi)^*(\widehat{p}_x\Psi) d\tau, \quad \text{osv.}$$

Bruk dette til å vise at forventningsverdien av den kinetiske energien kan skrives på formen

$$\langle K \rangle_\Psi = \frac{\hbar^2}{2m}\int |\nabla \Psi|^2 d\tau.$$

[Gradienten av Ψ (altså $\nabla\Psi$) forteller hvor raskt Ψ endrer seg. Moralen er at $\langle K \rangle$ er større jo mer variasjon vi har i bølgefunksjonen.]

b. Finn størrelse og retning av $\nabla\psi$ for grunntilstanden $\psi = (\pi a^3)^{-1/2}\exp(-r/a)$ for et hydrogenlignende system, og vis at $\langle K \rangle$ for denne tilstanden er lik $\hbar^2/(2ma^2)$, som vi gjenkjenner som $-E$, der E er grunntilstandsenergien. (Hint: For en funksjon f som avhenger bare av r, er gradienten $\nabla f = \hat{\mathbf{e}}_r\, \partial f/\partial r$. Merk også at ψ er normert, og at dens gradient kommer ut proporsjonal med ψ.)

Oppgave 1B **Måling av degenerert egenverdi**

Først en repetisjon av målepostulatet:

En måling av en observabel F må gi en av egenverdiene f_n, og vil etterlate systemet i en egentilstand som svarer til den målte egenverdien. Dette innebærer at den delen av bølgefunksjonen *før* målingen som ikke er forenlig med måleverdien f_n "skrelles bort" i måleprosessen. Det er dette som ofte kalles "kollaps av bølgefunksjonen".

a. Anta at et hydrogenatom er preparert i tilstanden

$$\psi_A = 0.8\,\psi_{100} + 0.5\,\psi_{210} + 0.3\,\psi_{310} + 0.1\,\psi_{420} + 0.1\,\psi_{430}.$$

Sjekk at denne tilstanden er normert. (Hint: Egenfunksjonssettet ψ_{nlm} er ortonormert.) Hva blir måleresultatet dersom z-komponenten L_z av dreieimpulsen måles for dette atomet? Hva blir tilstanden til atomet *etter* målingen av L_z?

b. Hva er sannsynligheten P_4 for at en måling av energien til dette atomet gir resultatet E_4, og hva blir tilstanden etter en måling med dette resultatet? (Husk at tilstanden skal normeres.)

c. Hvordan kan vi gå fram videre for å preparere enten tilstanden ψ_{420} eller tilstanden ψ_{430}?

[1] Dette knepet får du bruk for også i oppgave 2.

d. Anta nå at vi har et H-atom preparert i tilstanden

$$\psi_B = 0.8\,\psi_{320} + 0.6\,\psi_{410}.$$

Forklar hvorfor det er umulig å preparere denne tilstanden ved hjelp av målinger av de kompatible observablene E, $\mathbf{L}^2$ og L_z. Forklar også hvorfor det er tilstrekkelig å måle én av observablene E eller $\mathbf{L}^2$ for å "kollapse" denne tilstanden til enten ψ_{320} eller ψ_{410}.

Oppgave 2 Uskarphetsrelasjonen

I forelesningene har vi lært at operatorer som kommuterer, kan ha **simultane egenfunksjoner**. Når systemet er preparert i en slik egentilstand, vil de tilhørende observablene ha skarpe verdier samtidig. Disse observablene er altså **kompatible**, som vi sier.

Omvendt er det slik at når to operatorer *ikke* kommuterer, slik vi har i tilfellet

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

så *kan* ikke observablene ha skarpe verdier samtidig; det finnes ingen simultane egentilstander til de to operatorene. Observablene er da **ikke-kompatible**. Dette resulterer i **Heisenbergs uskarphetsrelasjon** for de to observablene:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \tfrac{1}{2} |\, \langle\, i[x, \widehat{p}_x]\, \rangle\, | = \tfrac{1}{2}\hbar.$$

Oppgaven går ut på å vise dette, eller egentlig en mer generell utgave av denne uskarphetsrelasjonen:

a. La A og B være to observable, og $\widehat{A}$ og $\widehat{B}$ de tilhørende hermitske operatorene. Vis først at operatoren $i[\widehat{A}, \widehat{B}]$ er hermitesk (slik at den har reelle forventningsverdier og egenverdier). [Hint: Vis at denne operatoren er selvadjungert; jf regelen $(\widehat{A}\widehat{B}\widehat{C})^\dagger = \widehat{C}^\dagger \widehat{B}^\dagger \widehat{A}^\dagger$ i "Tillegg 2".]

b. Når $\widehat{A}$ og $\widehat{B}$ er hermiteske, blir også operatorene $\bar{A} \equiv \widehat{A} - \langle\, A\,\rangle$ og $\bar{B} \equiv \widehat{B} - \langle\, B\,\rangle$ hermiteske. Her er $\langle\, A\,\rangle$ og $\langle\, B\,\rangle$ forventningsverdiene av observablene A og B i en vilkårlig tilstand. Legg merke til at $\left\langle\, \bar{A}^2\, \right\rangle = \langle\, (A - \langle\, A\,\rangle)^2\, \rangle = (\Delta A)^2$ osv, der ΔA er usikkerheten i observabelen A i vedkommende tilstand. Overbevis deg om at $[\bar{A}, \bar{B}] = [\widehat{A}, \widehat{B}]$.

c. Kunstgrepet i denne oppgaven er å betrakte det åpenbart ikke-negative integralet

$$I(\alpha) \equiv \int |(\bar{A} + i\alpha\bar{B})\Psi|^2 d\tau = \int (\bar{A}\Psi + i\alpha\bar{B}\Psi)^*(\bar{A}\Psi + i\alpha\bar{B}\Psi)d\tau \geq 0,$$

der Ψ er en vilkårlig (normert) funksjon og α en valgbar reell parameter. Vis ved å multiplisere ut uttrykket til høyre at

$$I(\alpha) = (\Delta A)^2_\Psi + \alpha^2(\Delta B)^2_\Psi + \alpha \left\langle\, i[\widehat{A}, \widehat{B}]\, \right\rangle_\Psi,$$

(hvor alle de tre leddene er reelle). [Husk at $\bar{A}$ og $\bar{B}$ er hermiteske og kan "flyttes", men at de ikke nødvendigvis kommuterer.]

d. Finn minimum av $I(\alpha)$ ved å derivere mhp α, og bruk dette til å utlede den generaliserte uskarphetsrelasjonen

$$(\Delta A)_\Psi(\Delta B)_\Psi \geq \tfrac{1}{2}\left|\left\langle\, i[\widehat{A},\widehat{B}]\,\right\rangle_\Psi\right|.$$

e. Når de to operatorene oppfyller relasjonen

$$[\widehat{A},\widehat{B}] = i\hbar,$$

sier vi at de er **kanonisk konjugerte**. Vis at den resulterende uskarphetsrelasjonen har Heisenbergs uskarphetsrelasjon for x og p_x som spesialtilfelle.

f. Hvor stor må minimalverdien av integralet $I(\alpha)$ være for at usikkerhetsproduktet $\Delta x \cdot \Delta p_x$ skal bli lik minimalverdien $\frac{1}{2}\hbar$? (Side 78 i Hemmer og side 215 i Bransden & Joachain kan du se hva dette fører til for bølgefunksjonen Ψ.)