LØSNING ØVING 2

Løsning oppgave 2 – 1 Krumningsegenskaper for endimensjonale energiegenfunksjoner

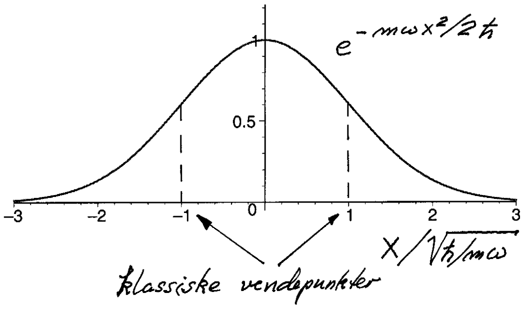
a. For oscillator-grunntilstanden i oppgave 3b har vi som et eksempel

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

slik at den relative krumningen er

$$\frac{\psi_0''}{\psi_0} = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}(x^2 - \frac{\hbar}{m\omega}).$$

Her ser vi at
(i) ψ_0''/ψ_0 ganske riktig er negativ for $-\sqrt{\hbar/m\omega} < x < \sqrt{\hbar/m\omega}$, dvs mellom de klassiske vendepunktene ($\pm a_0$) som vi fant i oppgave 3, altså i det klassisk tillatte området, hvor $E > V(x)$. I dette området krummer altså ψ_0 mot aksen.
(ii) Utenfor dette området ser vi på tilsvarende måte at ψ_0 krummer bort fra aksen.
(iii) For $x = \pm\sqrt{\hbar/m\omega}$ er $\psi_0'' = 0$, og vi kan konstatere at den relative krumningen skifter fortegn i hvert av de klassiske vendepunktene:



b. I områdene $a < |x| < b$ er $V = 0$ og $\psi'' = 0$. Den tidsuavhengige Schrödingerligningen gir da

$$E = \frac{\widehat{H}\psi}{\psi} = \frac{(-\hbar^2/2m)\psi'' + V\psi}{\psi} = 0.$$

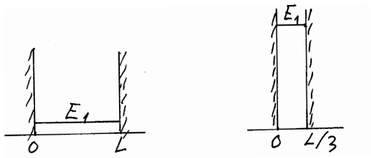
Energien til denne tilstanden er altså lik null. For $|x| < a$ følger det da fra den tidsuavhengige Schrödingerligningen at

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V_0\psi = 0, \qquad \Longrightarrow \qquad V_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''}{\psi}.$$

Diagrammet viser at den relative krumningen er negativ i dette området (krumning mot aksen). Potensialverdien V_0 i dette området må derfor være negativ, slik at området er klassisk tillatt.

Løsning oppgave 2 – 2 Litt av hvert

a. Jo mindre plass, desto høyere energi



For grunntilstanden i boksen med vidde L er bølgetallet k_1 bestemt av betingelsen $k_1 L = \pi$, slik at energien er

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Når vidden reduseres til en tredel, blir bølgetallet tre ganger så stort (raskere krumning av bølgefunksjonen $\sin(k_1 x)$), og dermed blir energien ni ganger så stor. Jo mindre plass vi gir partikkelen, desto høyere blir grunntilstandsenergien (og de andre energinivåene) liggende. Så jo mindre plass vi gir partikkelen, desto høyere (kinetisk) energi er den *nødt* til å ha. Dette kaller vi gjerne for "kvantevillskap". (Jo mindre bur, desto villere tiger. Og villest av alle er er tigerungene med minst masse.)

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

Her trenger vi forventningsverdien av $1/r$ i den oppgitte tilstanden. Kulesymmetrien gjør beregningen enkel:

$$\begin{aligned}\langle 1/r \rangle &= \int \frac{1}{r} |\psi_1|^2 d^3r = \int_0^\infty \frac{1}{r} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} \cdot 4\pi r^2 dr \\ &= \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r\, e^{-2r/a_0} dr = \frac{4}{a_0^3} \frac{2!}{(2/a_0)^2} = \frac{1}{a_0}.\end{aligned}$$

Dermed er forventningsverdien av den potensielle energien i tilstanden ψ_1

$$\langle V \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_0} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^2 m_e c^2 = -\alpha^2 m_e c^2 = 2E_1, \quad \text{q.e.d.},$$

og for den kinetiske energien har vi da

$$\langle K \rangle = E_1 - \langle V \rangle = \tfrac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 = |E_1|, \quad \text{q.e.d.}$$

c. Estimat av $\langle K \rangle$

Da usikkerheten i x er av størrelsesorden a_0, kan vi vha uskarphetsrelasjonen lage oss estimatet

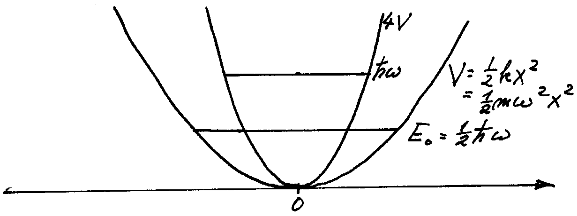
$$\Delta p_x \approx \frac{\frac{1}{2}\hbar}{\Delta x} \approx \frac{\hbar}{2a_0}$$

for usikkerheten i x-komponenten av impulsen. Da $\langle p_x^2 \rangle = \langle p_x \rangle^2 + (\Delta p_x)^2 = (\Delta p_x)^2$, blir det tilsvarende estimatet for den kinetiske energien i grunntilstanden

$$\langle K \rangle \approx \frac{1}{2m_e} \left\langle p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \right\rangle = \frac{1}{2m_e} \cdot 3 \cdot \frac{\hbar^2}{4a_0^2} = \frac{3\hbar^2}{8m_e a_0^2} = \frac{3}{4} \cdot \tfrac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2,$$

altså 75 % av den eksakte verdien. (Sjekk at du har kontroll på den siste overgangen.)

d. Sammenheng mellom energinivåer og fjærkonstant for oscillatoren



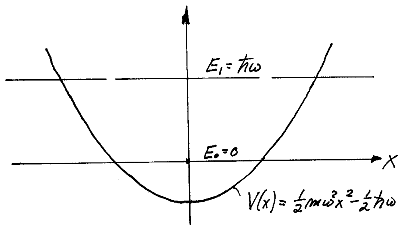
Vi har tidligere sett at potensialet $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ svarer til en klassisk vinkelfrekvens $\omega(= \sqrt{k/m})$ og energiene $E_0(= \frac{1}{2}\hbar\omega)$ og $E_1(= \frac{3}{2}\hbar\omega)$ for hhvis grunntilstanden og første eksiterte tilstand. Et fire ganger så sterkt potensial svarer til en klassisk vinkelfrekvens som er to ganger så stor, og dermed fås en dobling av energiene.

e. Valg av nullpunkt for potensiell energi

Da potensialet $V_1(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega$ er "senket" med beløpet $\frac{1}{2}\hbar\omega$ i forhold til standardpotenssialet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, er det vel nokså opplagt at energinivåene senkes med det samme beløpet, dvs vi må ha

$$E_0 = 0 \qquad \text{og} \qquad E_1 = \hbar\omega$$

for potensialet V_1. Siden de to potensialene beskriver samme kraftfelt, $F_x = -m\omega^2 x$, er det vel like opplagt at energiegenfunksjonene er de samme for de to potensialene.



På begge disse punktene kan eventuell tvil ryddes av veien ved en liten omskriving av egenverdiligningen for standardpotensialet. De to egentilstandene ψ_0 og ψ_1 for det opprinnelige oscillatorpotensialet $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ oppfyller egenverdiligningen(e)

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

En liten omskriving (som svarer til at vi trekker fra beløpet $\frac{1}{2}\hbar\omega\,\psi_n$ på begge sider av det siste likhetstegnet) gir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega)\right]\psi_n(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x)\right]\psi_n = n\hbar\omega\,\psi_n, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots.$$

Fra denne kan vi lese ut at energiegenfunksjonene er de samme for de to potensialene, mens $E_0 = 0$ og $E_1 = \hbar\omega$ for potensialet $V_1(x)$. (Sjekk at du forstår dette skikkelig.)

f. Eksempel

Når vi "løfter" bunnen av bokspotensialet med beløpet V_0, blir energiegenfunksjonene uendret, mens alle energiene får tillegget V_0.

g. Valg av koordinatsystem

Potensialet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2$ har samme form som standardpotensialet $\frac{1}{2}m\omega x^2$. Eneste forskjell er at det er forskjøvet slik at likevektspunktet faller i $x = a$ istedenfor $x = 0$. Vi merker oss også at forskjellen forsvinner helt hvis vi innfører et eget koordinatsystem for det nye potensialet, der posisjonen til partikkelen angis ved koordinaten $x' = x - a$. Siden vi står fritt i valget av koordinatsystem, er det vel da klart at energien til grunntilstanden må bli den samme som for standardpotensialet (og tilsvarende for alle de eksiterte tilstandene). Tilsvarende må bølgefunksjonen bli

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

Løsning oppgave 2 – 3 Bølgepakke for fri partikkel

a. Vi merker oss at sannsynlighetstettheten $|\Psi(x,0)|^2 = (2\pi\sigma^2)^{-1/2}e^{-x^2/2\sigma^2}$ er en normalfordeling (Gauss-fordeling), symmetrisk mhp origo. Forventningsverdien er derfor lik null:

$$\langle\, x \,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,0)\, x\, \Psi(x,0)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi(x,0)|^2 dx = 0.$$

[Mer formelt følger dette også av at integranden er antisymmetrisk med hensyn på origo, eller en odde funksjon.]

Fordi $|\Psi(x,0)|^2$ ikke avhenger av p_0, vil også $\langle\, x^2 \,\rangle$ og dermed $\Delta x = \sqrt{\langle\, x^2 \,\rangle - \langle\, x \,\rangle^2}$ være uavhengige av p_0.

b. La oss først kontrollere normeringen. Med "forkortelsen" $\alpha \equiv 1/2\sigma^2$ er $|\Psi(x,0)|^2 = \sqrt{\alpha/\pi}\, e^{-\alpha x^2}$, slik at

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1, \quad \text{q.e.d.}$$

Videre finner vi ved hjelp av et av de oppgitte Gauss-integralene

$$\begin{aligned} \left\langle\, x^2 \,\right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi(x,0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,0) x^2 \Psi(x,0) dx \qquad (\text{“sandwich”}) \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \sqrt{\pi} \cdot \tfrac{1}{2}\alpha^{-3/2} = \frac{1}{2\alpha} = \sigma^2. \end{aligned}$$

Dette gir usikkerheten

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

> Moralen er (som dere antakelig også vil lære i statistikken): Med en sannsynlighetstetthet på Gauss-formen $|\Psi|^2 \propto e^{-x^2/2\sigma^2}$ er usikkerheten (standardavviket) Δx gitt ved σ.

[At Δx må være av *størrelsesorden* σ, skjønner vi uten regning, ved å tenke på hvordan en skisse av sannsynlighetsfordelingen vi ta seg ut.]

Fysisk tolkning av $\langle\, x \,\rangle$ og Δx: Dersom vi preparerer systemet (N ganger) slik at det er i tilstanden $\Psi(x,0)$ ved $t = 0$, og hver gang måler posisjonen x ved dette tidspunktet, [1] eventuelt måler på N identisk preparerte systemer, så vil middelverdien av de målte

[1]Hvorfor må vi preparere systemet på nytt foran hver måling? Svar: Se "målepostulatet" (D).

posisjonene,

$$\overline{x} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} x_n,$$

nærme seg den teoretiske forventningsverdien $\langle\, x\,\rangle = 0$ for store N. Tilsvarende vil standardavviket (rms-avviket)

$$\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \overline{x})^2},$$

nærme seg den teoretiske usikkerheten $\Delta x = \sigma$.

<u>**c.**</u> Vi var vel enige om at en ren harmonisk planbølge $\exp(ip_0x/\hbar) \equiv \exp(ikx)$ svarer til en skarpt definert impuls p_0 (dvs et skarpt definert bølgetall $k = p_0/\hbar$)?
Fordi $\Psi(x,0)$ ligner mer og mer på en slik ren harmonisk bølge jo større σ er, må vi da vente at $\langle\, p_x\,\rangle \to p_0$ og $\Delta p_x \to 0$ når $\sigma \to \infty$.

<u>**d.**</u> Vi regner først ut

$$\widehat{p}_x\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(\pi/\alpha)^{-1/4}e^{ip_0x/\hbar-\alpha x^2/2} = (p_0 + i\hbar\alpha x)\Psi$$

og

$$\widehat{p}_x^2\Psi = [(p_0 + i\hbar\alpha x)^2 + \hbar^2\alpha]\Psi.$$

Det er nå lett å regne ut at forventningsverdien av p_x faktisk er uavhengig av α (dvs av σ):

$$\langle\, p_x\,\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\widehat{p}_x\Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(p_0 + i\hbar\alpha x)\Psi dx = p_0\cdot 1 + i\hbar\alpha\cdot\langle\, x\,\rangle = p_0.$$

(Her har vi brukt at leddet med p_0 gir normeringsintegralet, mens leddet med x gir forventningsverdiintegralet for x. Dette er et eksempel på at det lønner seg å ha "oversikt".) Videre er (ut fra samme type "oversikt")

$$\left\langle\, p_x^2\,\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(p_0^2 + 2p_0\cdot i\hbar\alpha x - \hbar^2\alpha^2x^2 + \hbar^2\alpha)\Psi dx = (p_0^2 + \hbar^2\alpha)\cdot 1 + 0 - \hbar^2\alpha^2\cdot\left\langle\, x^2\,\right\rangle = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}.$$

Usikkerheten i impulsen for tilstanden $\Psi(x,0)$ er dermed

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle\, p_x^2\,\rangle - \langle\, p_x\,\rangle^2} = \frac{\hbar}{2\sigma}.$$

Vi ser at denne går mot null når "utstrekningen" σ av bølgepakken går mot uendelig, slik vi var inne på i pkt. <u>**c**</u>. At forventningsverdien $\langle\, p_x\,\rangle$ er lik p_0 ikke bare for *store* σ, men for alle, kunne vi kanskje ikke gjette.

Vi merker oss at produktet av usikkerhetene i x og p_x er

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \tfrac{1}{2}\hbar,$$

som er den minste verdien vi kan ha ifølge Heisenberg.
Moralen er: Dersom en ønsker en veldig skarpt definert impuls (liten Δp_x), så går det på bekostning av en veldig stor utstrekning $\Delta x (= \sigma)$. Omvendt kan en ønske seg en veldig skarpt *lokalisert* bølgepakke (liten $\Delta x = \sigma$), men da blir nødvendigvis både $\Delta p_x = \hbar/2\sigma$ og

$\langle\, p_x^2 \,\rangle = p_0^2 + \hbar^2/4\sigma^2$ veldig store. Så, jo mindre plass vi gir partikkelen, desto mer uskarp blir impulsen, og desto større kinetisk energi er partikkelen nødt til å ha. "Jo trangere bur, desto villere tiger"; denne "kvante-villskapen" er én av konsekvensene av partiklers bølgenatur, og spiller ofte en sentral rolle i kvantemekaniske problemstillinger.

Disse egenskapene gjelder ikke bare for den spesielle bølgepakken $\Psi(x, 0)$. Relasjonen ovenfor er nemlig et spesialtilfelle av **Heisenbergs uskarphetsrelasjon**, som sier at

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \tfrac{1}{2}\hbar \qquad\qquad \text{(for alle tilstander } \Psi(\mathbf{r}, t)\text{)}.$$

I avsnitt 4.5 i boka er det vist at uskarphetsrelasjonen kan utledes fra kommutator-relasjonen $[x, p_x] = i\hbar$. Der framgår det også at likhetstegnet ovenfor gjelder bare for en viss klasse av "Gaussiske" funksjoner. Bølgepakken $\Psi(x, 0)$ ovenfor er et spesialtilfelle av disse funksjonene. Merk ellers at grunntilstanden $\psi_0(x)$ for den harmoniske oscillatoren (Oppgave 3) er et spesialtilfelle av $\Psi(x, 0)$ (for $p_0 = 0$), så også for denne har vi "minimalt usikkerhetsprodukt".

Den fysiske tolkningen av $\langle\, p_x \,\rangle$ og Δp_x er nøyaktig den samme som for $\langle\, x \,\rangle$ og Δx, når vi bytter ut x med p_x i tolkningen i pkt. **b**.

Ifølge tilstandspostulatet (B) må $\Psi(x, 0)$ også inneholde informasjon om sannsynlighetsfordelingen av impulser p_x i den aktuelle tilstanden.

[**Kommentar:** Stikkordet her er Fourier-analyse: Som vi var inne på i innledningen til oppgaveteksten, kan $\Psi(x, 0)$ skrives som et Fourier-integral over planbølger,

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) \psi_p(x) dp.$$

Her er koeffisient-funksjonen $\phi(p)$ essensielt Fourier-transformen av $\Psi(x, 0)$. Som vi skal se, finnes den ved å projisere $\Psi(x, 0)$ på planbølgen $\psi_p(x)$:

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

Det resulterende integralet er av typen $I(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2+by} dy = e^{b^2/4a}\sqrt{\pi/a}$, og det viser seg at resultatet blir

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

altså en Gauss-fordeling omkring p_0. Denne funksjonen gir oss en mer direkte informasjon om impulsinnholdet i den aktuelle tilstanden; i kapittel 2.4.2 i boka lærer vi at $|\phi(p)|^2 dp$ er sannsynligheten for å finne impulsen p_x i intervallet $(p, p+dp)$. $|\phi(p)|^2$ er altså sannsynlighetstettheten i "impulsrommet". Denne forteller umiddelbart at forventningsverdien av impulsen er p_0, og vi kan også bruke den til å lese ut usikkerheten i impulsen, som selvsagt vil bli den samme som vi fant i pkt. **d**, vha $\Psi(x, 0)$.]

e. Siden gruppehastigheten til en de Broglie-bølge er

$$v_g = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{\bar{k}} = \left.\frac{dE}{dp_x}\right|_{\bar{p}_x} = \frac{\bar{p}_x}{m},$$

der $\bar{p}_x = \hbar\bar{k}$ er "den mest fremherskende impulsen"" i bølgepakken, må vi vente at

$$v_g \left(= \frac{d\,\langle\, x\,\rangle_t}{dt} \right) = \frac{p_0}{m},$$

der p_0 er impuls-parameteren som inngår i $\Psi(x,0)$.
[At dette virkelig er tilfelle kan vises på flere måter, f.eks ved å løse Schrödingerligningen for den frie partikkelen,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t),$$

med den oppgitte begynnelsestilstanden $\Psi(x,0)$. Det følger også fra Ehrenfests teorem, se avsnitt 4.4 i boka.] Men dette får vi (eventuelt) komme tilbake til.