

LØSNING ØVING 4

Løsning oppgave 4 – 1 Vibrerende to-partikkelsystem

a. ♠ Vi kontrollerer først at kreftene på de to massene kommer ut som annonsert:

$$F_1 = -\frac{\partial V}{\partial x_1} = -\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_1} = -k(x-l) \quad \text{og} \quad F_2 = -\frac{\partial V}{\partial x_2} = -\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial x_2} = k(x-l),$$

som selvsagt er motsatt like store.

To derivasjoner med hensyn på t av $A \cos(\omega_1 t + \alpha)$ gir en faktor $-\omega_1^2$. Innsetting gir da

$$\frac{d^2}{dt^2}(x-l) = -\omega_1^2(x-l) = -\frac{k}{m_1}(x-l) \quad \text{dvs} \quad \omega_1 = \sqrt{\frac{k}{m_1}}, \quad \text{q.e.d.}$$

♠ Med begge massene fri til å svinge finner vi ved hjelp av Newtons 2. lov den oppgitte differensialligningen for relativ-koordinaten x ,

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}(x-l) &= \frac{d^2 x_1}{dt^2} - \frac{d^2 x_2}{dt^2} = \frac{F_1}{m_1} - \frac{F_2}{m_2} = -k(x-l) \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \\ &= -k(x-l) \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \equiv -\frac{k}{\mu}(x-l), \end{aligned}$$

hvor μ er den såkalte reduserte massen. (Et kjent begrep for to-partikkel-systemer i klassisk mekanikk.)

♠ Med prøveløsningen $x-l = A \cos(\omega t + \alpha)$ finner vi da vinkelfrekvensen $\omega = \sqrt{k/\mu}$ for den klassiske svingningen. Her legger vi merke til at den reduserte massen er mindre enn den minste av de to massene:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = m_1 \frac{1}{1 + m_1/m_2} = m_2 \frac{1}{1 + m_2/m_1} < \min(m_1, m_2).$$

Følgelig er vinkelfrekvensen ω større enn $\max(\omega_1, \omega_2)$.

[Kommentar: Dersom f.eks. $m_1 = m_2$, blir den reduserte massen $\mu = m_1/2$ og vinkelfrekvensen blir $\omega = \sqrt{2k/m_1}$. Denne frekvensen er en faktor $\sqrt{2}$ høyere enn den en får dersom den ene partikkelen er spent fast, mens den andre vibrerer ($\sqrt{k/m_1}$). Dette resultatet kan også forstås ved å merke seg at når *begge* partiklene svinger, i mottakt, så kan tyngdepunktet (midtpunktet av fjæren) antas å ligge i ro. Vinkelfrekvensen ω er da bestemt av fjærkonstanten til en "halv fjær", som er dobbelt så stor som fjærkonstanten til hele fjæren: $\omega = \sqrt{2k/m_1}$. Moral: Dersom du sager av en del av spiralfjærene på bilen din, for at den skal ligge lavere og se mer ut som en sportsmodell, så blir fjæringen stivere, og kjøreegenskapene kan bli dårligere.]

♠ Når det ikke virker noen ytre krefter på dette to-partikkel-systemet vil tyngdepunktet ifølge Newtons 1. lov bevege seg med jevn hastighet, fordi systemet ikke påvirkes av noen ytre kraft. Denne trivielle bevegelsen kan vi ellers eliminere ved å velge et koordinatsystem hvor tyngdepunktet ligger i ro.

b. ♠ Den oppgitte ligningen beskriver en (fiktiv) partikkel med masse μ som beveger seg i potensialet $\frac{1}{2}k(x-l)^2$. Vi har altså et harmonisk oscillatorpotensial med likevektsposisjon for $x = l$. Men at likevektsposisjonen er forskjellig fra null bør ikke spille noen rolle for energinivåene. Tviler du på dette, så er det bare å innføre variabelen $x' = x - l$. Den oppgitte ligningen tar da formen

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

Sammenligning med standardutgaven gir energinivåene

$$E_n = \hbar \sqrt{k/\mu} (n + \frac{1}{2}) = \hbar \omega (n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

der μ er den reduserte massen.

♠ Grunntilstanden er $C_0 \exp(-\mu\omega(x-l)^2/2\hbar)$, altså

$$\psi_0(x) = (\mu\omega/\pi\hbar)^{1/4} e^{-\mu\omega(x-l)^2/2\hbar},$$

dvs en Gauss-funksjon som er symmetrisk med hensyn på likevektsposisjonen $x = l$. Sannsynlighetsfordelingen $|\psi(x)|^2$ for avstanden $x = x_1 - x_2$ har altså sitt maksimum for likevektsavstanden $x = l$.

c. ♠ Ved hjelp av de oppgitte uttrykkene for $\partial/\partial x_1$ og $\partial/\partial x_2$ har vi for impulsoperatorene for partikkel 1 og 2:

$$\hat{p}_1 = \frac{m_1}{M} \hat{P} + \hat{p} \quad \text{og} \quad \hat{p}_2 = \frac{m_2}{M} \hat{P} - \hat{p}.$$

Innsetting gir da for Hamilton-operatoren:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(x) \\ &= \frac{1}{2m_1} \left(\frac{m_1}{M} \hat{P} + \hat{p} \right)^2 + \frac{1}{2m_2} \left(\frac{m_2}{M} \hat{P} - \hat{p} \right)^2 + V(x) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{m_1}{M^2} + \frac{m_2}{M^2} \right) \hat{P}^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \hat{p}^2 + V(x) \quad (\text{kryssleddene kansellerer}) \\ &= \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(x) \quad \left(\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X}; \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right), \end{aligned}$$

der

$$\frac{1}{\mu} \equiv \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad \text{slik at} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Her er μ den såkalte reduserte massen. Merk at Hamilton-operatoren er uavhengig av tyngdepunktskoordinaten X . Det første leddet i \hat{H} beskriver en fri partikkel med masse M . Det andre leddet beskriver en partikkel med masse μ som beveger seg i potensialet $V(x)$. Dersom vi blir bedt om å skrive ned Hamilton-operatoren for to slike uavhengige partikler, er svaret nettopp operatoren \hat{H} ovenfor.

♠ Vi merker oss at $\hat{p}_1 + \hat{p}_2 = \hat{P}$. Operatoren \hat{P} svarer derfor til en observabel som består av den samlede impulsen $P = p_1 + p_2$ til de to partiklene.

d. ♠ Dersom ψ skal være en egenfunksjon til \hat{H} med energi E og til \hat{P} med egenverdi $P = 0$, må den oppfylle ligningene

$$\hat{P}\psi = 0 \quad \text{og} \quad \hat{H}\psi = E\psi.$$

Den første av disse forteller at ψ er uavhengig av tyngdepunktskoordinaten X . Den andre gir

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

som er ligningen under pkt. **b.** I denne oppgaven har vi altså vist hvordan denne ligningen med den reduserte massen oppstår. [Kommentar: Som du lett kan kontrollere er løsningen av ligningene $\hat{H}\psi_{\text{tot}} = E_{\text{tot}}\psi_{\text{tot}}$ og $\hat{P}\psi_{\text{tot}} = P\psi_{\text{tot}}$ generelt

$$\psi_{\text{tot}}(x, X) = \psi(x) \cdot e^{iPX/\hbar},$$

hvor $\psi(x)$ er en løsning av ligningen over.]

Løsning oppgave 4 – 2 Vibrasjonsfrihetsgraden for to-atomig molekyl

a. ♠ Vi finner

$$k = \frac{1}{2}m\omega^2 = \frac{1}{2}m(\hbar\omega/\hbar)^2 \approx \frac{1}{2} \cdot 16 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} \text{kg} \left(\frac{0.2 \text{eV}}{0.658 \cdot 10^{-15} \text{eVs}} \right)^2 \approx 1.23 \cdot 10^3 \text{ N/m}.$$

Altså en ganske kraftig “fjær”. (For en *makroskopisk* fjær med denne fjærkonstanten koster det en kraft på 123 N å strekke den med 10 cm.)

b. ♠ Svaret er nei! Kvantemekanikken forteller at avstanden mellom de to kjernene *ikke* kan være skarpt definert. Usikkerheten i avstanden er minst når oscillatoren er i grunntilstanden. *Forventningsverdien* for avstanden mellom kjernene er da lik likevektsavstanden (som svarer til et minimum for den potensielle energien for systemet). Avstanden er “sannsynlighetsfordelt” omkring denne verdien, med en usikkerhet av *størrelsesorden* $\sqrt{\hbar/m\omega}$. Denne lengden gir også skalaen for typiske “utsving” for denne oscillatoren (når den befinner seg i en av de laveste energiegentilstandene).

♠ Denne lengden er

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \frac{\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}} = \frac{1.055 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{16 \cdot 1.673 \cdot 10^{-27} \cdot 0.2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})}} \text{ m} = 3.6 \cdot 10^{-12} \text{ m}.$$

Altså vesentlig mindre enn 1 atomradius, som er av størrelsesorden 10^{-10} m.

c. ♠ For den makroskopiske oscillatoren er vinkelfrekvensen $\omega' = \sqrt{k/M}$. Med $k = \frac{1}{2}m\omega^2$, dvs $\omega = \sqrt{2k/m}$, blir altså forholdet mellom de to energibeløpene

$$\frac{\hbar\omega'}{\hbar\omega} = \frac{\sqrt{k/M}}{\sqrt{2k/m}} = \sqrt{\frac{m}{2M}} = \sqrt{\frac{16 \cdot 1.673 \cdot 10^{-27}}{2 \cdot 1}} = 1.16 \cdot 10^{-13}.$$

Avstanden mellom energinivåene for den makroskopiske oscillatoren er altså $\hbar\omega' = 0.2 \text{ eV} \cdot 1.16 \cdot 10^{-13} \approx 2.3 \cdot 10^{-14} \text{ eV}$. Så disse energinivåene ligger *virkelig tett*! [Merk ellers at moralen er at: Energinivåene for oscillatoren “skaleres” som $M^{-1/2}$.]

♠ For forholdet mellom de to lengdeskalaene finner vi

$$\frac{\sqrt{\hbar/M\omega'}}{\sqrt{\hbar/m\omega}} = \left(\frac{2m}{M}\right)^{1/4} \approx 4.8 \cdot 10^{-7}.$$

[Så her er moralen at den typiske lengden (for f.eks grunntilstanden) skalerer som $M^{-1/4}$.] Merk at lengdeskalaen for den makroskopiske oscillatoren da er ca 10^{-18} m . I grunntilstanden for denne oscillatoren er usikkerheten i posisjonen omtrent så stor som dette.

d. ♠ Med et utsving på $x_{max} = 10 \text{ cm}$ er energien til den makroskopiske oscillatoren

$$E = \frac{1}{2} k x_{max}^2 = \frac{1}{2} \cdot 1.23 \cdot 10^3 \cdot (0.1)^2 \text{ Nm} = 6.15 \text{ Nm}.$$

Denne energien svarer til kvantetall i området

$$n \sim \frac{E}{\hbar\omega'} = \frac{E}{\hbar\omega} \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega'} = \frac{6.15 \text{ Nm}}{0.2 \text{ eV}} \cdot \frac{1}{1.16 \cdot 10^{-13}} = 1.65 \cdot 10^{33}. (!)$$

[Kommentar: Ved å superponere stasjonære tilstander med kvantetall i dette området kan vi bygge opp en bølgegruppe med en oppførsel som ligner på den klassiske oscillasjonen med et utsving på 10 cm .]

Løsning oppgave 4 – 3 Ikke-stasjonær tilstand for partikkel i boks

a. ♠ Da sannsynlighetstettheten $|\Psi(x, 0)|^2$ er symmetrisk mhp midtpunktet av boksen, er forventningsverdien av posisjonen ved $t = 0$

$$\langle x \rangle_0 = L/2.$$

♠ Ut fra kurven for $|\Psi(x, 0)|^2$ anslo oppgaveforfatteren (på øyemål) usikkerheten Δx til å ligge et sted i hogget mellom $0.12 L$ og $0.13 L$. Men her gis du et betydelig slingsringsmonn. (Kommentar: En beregning vha Maple ga $\Delta x \approx 0.1199 L$.)

b. ♠ Vha de oppgitte formlene kan vi skrive begynnelsestilstanden på formen

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) &= \sqrt{\frac{16}{5L}} \sin^3 \frac{\pi x}{L} = \sqrt{\frac{8}{5}} \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{3}{4} \sin \frac{\pi x}{L} - \frac{1}{4} \sin \frac{3\pi x}{L} \right) \\ &= \sqrt{\frac{9}{10}} \psi_1(x) - \sqrt{\frac{1}{10}} \psi_3(x). \end{aligned}$$

Begynneslestilstanden er altså en superposisjon av grunntilstanden og 2. eksiterte tilstand, og koeffisientene er

$$c_1 = \sqrt{\frac{9}{10}} \quad \text{og} \quad c_3 = -\sqrt{\frac{1}{10}}.$$

c. ♠ Med $\Psi(x, 0) = c_1\psi_1 + c_3\psi_3$ har vi for normeringsintegralet

$$\begin{aligned} \int_0^L \Psi^*(x, 0)\Psi(x, 0)dx &= \int (c_1\psi_1 + c_3\psi_3)^* (c_1\psi_1 + c_3\psi_3) dx \\ &= |c_1|^2 \int \psi_1^* \psi_1 dx + |c_3|^2 \int \psi_3^* \psi_3 dx + c_1^* c_3 \int \psi_1^* \psi_3 dx + \text{kompl.-konj.} \end{aligned}$$

De to første integralene er lik 1 (normering). De to siste er lik null (ortogonalitet). Så

$$\int \Psi^*(x, 0)\Psi(x, 0)dx = |c_1|^2 + |c_3|^2 = \frac{9}{10} + \frac{1}{10} = 1, \quad \text{q.e.d.}$$

d. ♠(i) Bølgefunksjonen har formen

$$\Psi(x, t) = c_1(t)\psi_1(x) + c_2(t)\psi_2(x),$$

med $c_1(t) = (3/\sqrt{10}) \exp(-iE_1 t/\hbar)$ og $c_3(t) = (-1/\sqrt{10}) \exp(-iE_3 t/\hbar)$. Ifølge sannsynlighetstolkningen av utviklingskoeffisientene er de mulige måleverdiene for energien da

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad \text{og} \quad E_3 = \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} = 9E_1,$$

og de respektive sannsynlighetene ved $t = 0$ er

$$P_1(0) = |c_1(0)|^2 = \frac{9}{10} \quad \text{og} \quad P_3(0) = |c_3(0)|^2 = \frac{1}{10}.$$

♠(ii) Forventningsverdien av energien ved $t = 0$ er etter dette

$$\langle E \rangle_0 = P_1(0)E_1 + P_3(0)E_3 = \frac{9}{10} E_1 + \frac{1}{10} E_3 = \frac{9}{5} E_1.$$

♠(iii) Ved en måling av energien E_n etterlates systemet i tilstanden $\psi_n(x) = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L)$, der $n = 1$ eller 3 .

♠(iv) Da sannsynlighetene $|c_1(t)|^2$ og $|c_3(t)|^2$ er tidsuavhengige, blir svarene på (i) og (ii) (ved en måling ved tiden t) de samme som for $t = 0$.

e. ♠ Forventningsverdien av impulsen er

$$\langle p_x \rangle = \int \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx.$$

Da Ψ er symmetrisk (også for $t > 0$), blir $d\Psi/dx$ antisymmetrisk, slik at integranden er en odde funksjon (mhp midtpunktet av boksen). Følgelig er $\langle p_x \rangle = 0$, både for $t = 0$ og senere.

♠ Videre er (fra $E = K = p_x^2/2m$)

$$\langle p_x^2 \rangle = 2m \langle E \rangle = 2m \cdot \frac{9}{5} E_1 = \frac{9\hbar^2 \pi^2}{5L^2} \quad \text{slik at} \quad \Delta p_x = \frac{3\hbar\pi}{L\sqrt{5}}.$$

Med estimatet $\Delta x \approx 0.13 L$ blir da

$$(\Delta x)_0(\Delta p_x) = \hbar \cdot 0.13 \cdot 3/\sqrt{5} \approx 0.55 \hbar.$$

[Kommentar: Siden produktet ligger så nær minimalverdien, er det på sin plass å regne det ut med den mer nøyaktige numeriske verdien $(\Delta x)_0 = 0.1199 L$. Med denne innsatt finner en $(\Delta x)_0(\Delta p_x) = 0.5054 \hbar$, som jo ligger svært nær minimalverdien $\frac{1}{2}\hbar$.]