ØVING 1

En liten briefing om forventningsverdier, usikkerheter osv

Eksempel: Terningkast

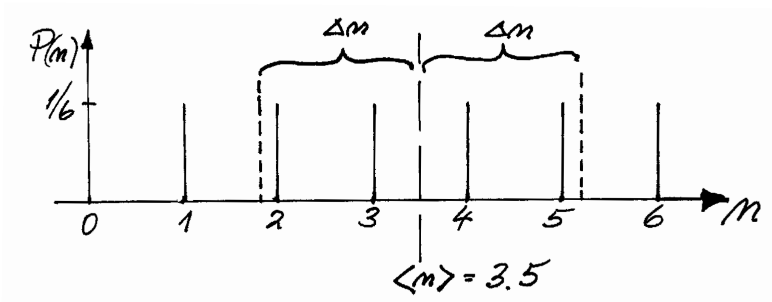
Ved terningkast er sannsynlighetene for å få 1, 2, 3, 4, 5 eller 6 like store:

$$P(1) = P(2) = \cdots = P(6) = 1/6.$$

Gjennomsnittsverdien $\bar{n}$ ved et stort antall kast vil da nærme seg den teoretiske **forventningsverdien**, som er

$$\langle\, n\,\rangle = \sum_{n=1}^{6} nP(n) = (1+2+3+4+5+6)\frac{1}{6} = 3.5.$$

Som illustrert i figuren svarer $\langle\, n\,\rangle$ til "tyngdepunktet" av sannsynlighetsfordelingen (som i dette tilfellet er diskret).



Figuren illustrerer videre **usikkerheten** (også kalt standardavviket) Δn, som pr definisjon er

$$\boxed{\text{roten av det midlere kvadratiske avviket,}}$$

på engelsk kalt "root-mean-square deviation" (rms-avviket). Vi har altså oppskriften

$$\Delta n = \underbrace{\sqrt{\underbrace{\left\langle \underbrace{(\underbrace{n-\langle\, n\,\rangle}_{\text{dev}})^2}_{\text{square}} \right\rangle}_{\text{mean}}}}_{\text{root}}.$$

Da

$$(\Delta n)^2 = \left\langle\, (n-\langle\, n\,\rangle)^2 \,\right\rangle = \left\langle\, n^2 - 2\,\langle\, n\,\rangle\, n + \langle\, n\,\rangle^2 \,\right\rangle = \left\langle\, n^2 \,\right\rangle - \langle\, n\,\rangle^2,$$

kan usikkerheten generelt skrives på to måter (du bør memorere begge disse):

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

Her kan vi nå regne ut

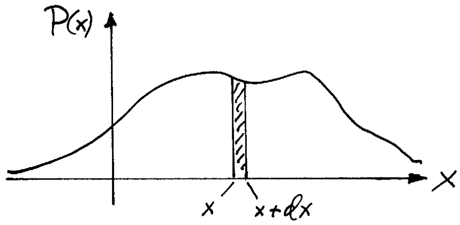
$$\left\langle\, n^2 \,\right\rangle = \sum_{n=1}^{6} n^2 P(n) = (1+2^2+3^2+\cdots+6^2)\cdot\frac{1}{6} = \frac{91}{6}.$$

Dermed blir usikkerheten i n (altså roten av det midlere kvadratiske avviket fra middelverdien ved et terningkast)

$$\Delta n = \sqrt{91/6 - 3.5^2} \approx 1.71.$$

(Se figuren på første side.)

Kontinuerlig sannsynlighetsfordeling



Figuren illustrerer en kontinuerlig sannsynlighetsfordeling, hvor x f.eks kan være posisjonen til en partikkel, og

$$P(x)dx = |\psi(x)|^2 dx$$

kan være sannsynligheten for å finne partikkelen i intervallet $[x, x + dx]$. Da kaller vi $P(x)$ for en sannsynlighets**tetthet** (sannsynlighet pr lengde-enhet blir det i dette endimensjonale eksemplet). Siden partikkelen har en eller annen posisjon, skal den totale sannsynligheten være lik 1:

$$\int P(x)dx = 1. \qquad \text{(normering)}$$

Forventningsverdien av posisjonen (tyngdepunktet av fordelingen) finner vi slik (analogt med beregningen av $\langle\, n \,\rangle$ på forrige side):

$$\langle\, x \,\rangle = \int x P(x)dx.$$

Videre er

$$\left\langle\, x^2 \,\right\rangle = \int x^2 P(x)dx,$$

osv. Fra disse kan vi finne usikkerheten $\Delta x = (\langle\, x^2 \,\rangle - \langle\, x \,\rangle^2)^{1/2}$.

Oppgave 1

Betrakt (den endimensjonale) bølgefunksjonen $\Psi(x,t) = A\, e^{-\lambda|x|} e^{-i\omega t}$, hvor A, λ og ω er reelle, positive konstanter (og $-\infty < x < \infty$). Ifølge Borns sannsynlighetstolkning er $|\Psi(x,t)|^2 dx$ sannsynligheten for å finne partikkelen i intervallet $(x, x + dx)$, forutsatt at Ψ er normert.

a. Skissér $|\Psi(x,t)|^2$ som funksjon av λx. Bestem normeringskonstanten A. [1] [Hint: Både bølgefunksjonen og sannsynlighetstettheten er symmetrisk med hensyn på origo, så integrasjonen kan forenkles.]

[1] Merk at for $n \geq 1$ følger det ved delvis integrasjon at

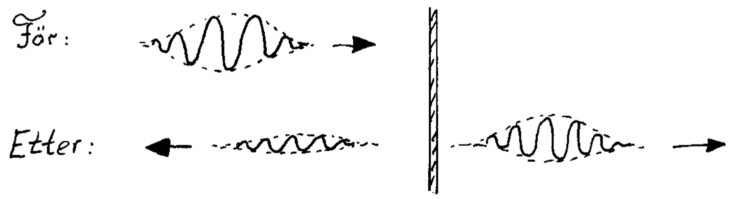
$$I_n \equiv \int_0^\infty x^n e^{-x} dx = [x^n(-e^{-x})]_0^\infty - \int_0^\infty n x^{n-1}(-e^{-x})dx = n I_{n-1}.$$

b. Finn forventningsverdiene av x og x^2, dvs $\langle x \rangle$ og $\langle x^2 \rangle$.

c. Finn usikkerheten for x $\left(\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}\right)$. Merk av punktene $\langle x \rangle - \Delta x$ og $\langle x \rangle + \Delta x$ i skissen for $|\Psi(x,t)|^2$, for å illustrere hvordan Δx representerer "spredningen" i x. Hva er sannsynligheten for å finne partikkelen utenfor (usikkerhets-)intervallet mellom de to punktene?

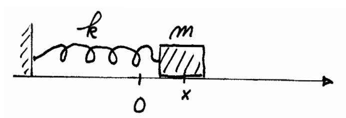
Oppgave 2 Fotoner mot et vindu

En elektromagnetisk bølgepakke — bygd opp ved superposisjon av planbølger med frekvenser ν i et lite intervall fra $\nu_0 - \Delta\nu$ til $\nu_0 + \Delta\nu$ — faller inn mot et butikkvindu. Ved hjelp av Maxwells ligninger, med dertil hørende grensebetingelser, samt brytningsindeksen $n(\nu_0)$ for glasset, kan en regne ut at bølgepakken ved møtet med vinduet deler seg i en reflektert pakke og en transmittert pakke.



La oss si at energi-innholdet i den reflekterte pakken er 4% av energien i den innkommende pakken, og se bort fra absorpsjon i glasset. — Hva skjer når ett enkelt foton med energi $h\nu_0$ sendes inn mot butikkvinduet? [Hint: Hent inspirasjon fra diskusjonen av dobbeltspalt-eksperimentet med lys; se Tillegg 1.]

Oppgave 3 Grunntilstand og 1. eksiterte tilstand for harmonisk oscillator



Det fysiske systemet vi tenker på i denne oppgaven er en endimensjonal harmonisk oscillator: En partikkel med masse m, påvirket av kraften $F_x = -kx$. Dette svarer til et potensial ($\equiv$potensiell energi) $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \equiv \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, der $\omega = \sqrt{k/m}$ er vinkelfrekvensen for den klassiske harmoniske svingningen.

I den kvantemekaniske behandlingen av oscillatoren spør en først etter *egenfunksjonene* $\psi_n(x)$ til Hamilton-operatoren for oscillatoren,

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

dvs funksjoner som oppfyller egenverdiligningen $\widehat{H}\psi = E\psi$, der E er en konstant som vi tolker som en energi-egenverdi.

Da $I_0 = 1$, innser vi herav at

$$I_n \equiv \int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n! \qquad \text{og} \qquad I_n(\alpha) \equiv \int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}; \qquad (n = 0, 1, 2...).$$

a. Hamilton-operatoren $\widehat{H}$ har én egenfunksjon på formen

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-\beta x^2}.$$

Bestem β og energiegenverdien E_0. [Hint: Begge disse størrelsene bestemmes ved innsetting i egenverdiligningen. Av de to løsningene for β gir bare den ene en bølgefunksjon som gir en fysisk akseptabel sannsynlighetstetthet. Hvorfor?]

b. Bestem konstanten C_0 slik at $\psi_0(x)$ er normert. [2] (Merk at du kan *velge fasen* til C_0 fritt, f.eks slik at C_0 blir reell og positiv.) Lag en rask skisse av sannsynlighetstettheten $|\psi_0(x)|^2$, og merk av de *klassiske vendepunktene* for partikkelen, dvs de punktene hvor $E = V$ for den aktuelle energien. Anslå ut fra skissen sannsynligheten for å finne partikkelen i det *klassisk forbudte området*, dvs der hvor $V(x) > E_0$.

c. Vi skal senere vise at egenfunksjonen $\psi_0(x)$ svarer til *grunntilstanden* (tilstanden med lavest mulig energi) for oscillatoren. Egenfunksjonen som svarer til den nest laveste energien viser seg å være

$$\psi_1(x) = C_1\, x\, e^{-\beta x^2}.$$

Finn den tilsvarende energiegenverdien E_1.

Oppgave 4 Grunntilstanden i H-atomet

a. Vis at den kulesymmetriske bølgefunksjonen

$$\psi(\mathbf{r}) = C\, e^{-r/a_0} \qquad \left(a_0 \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}\right)$$

er en egenfunksjon til Hamilton-operatoren

$$\widehat{H} = \widehat{K} + V = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0\, r}$$

for hydrogenatomet [dvs vis at $\widehat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$], og påvis at egenverdien E (energi-egenverdien) er som angitt i ligning (T1.26) i Tillegg 1. Laplace-operatoren i kulekoordinater er

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right).$$

b. Vis at når $\psi(\mathbf{r})$ er en energiegenfunksjon med energien E, slik vi fant ovenfor, så er

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

en løsning av den tidsavhengige Schrödingerligningen for H-atomet,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi.$$

c. Vis at $C = (\pi a_0^3)^{-1/2}$ gir en normert bølgefunksjon.

[2]Oppgitt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\pi/\alpha}$$

.