LØYSING ØVING 3

Løysing oppgåve 1 Ikkje-stasjonær bokstilstand

a) For $0 < x < L$ er potensialet i boksen lik null, slik at Hamiltonoperatoren er på forma $\hat{H} = \hat{K} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ i dette området. Då den andrederiverte av $\sin kx$ er $-k^2 \sin kx$, finn vi at

$$\hat{H}\psi_1(x) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}\,\psi_1(x) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,\psi_1(x) \qquad \text{og} \qquad \hat{H}\psi_2(x) = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m}\,\psi_2(x) = \frac{4\,\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,\psi_2(x),$$

dvs dei to energiegienverdiane er

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \qquad \text{og} \qquad E_2 = \frac{4\,\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 4E_1.$$

Vi merkar oss i tillegg at dei tidsavhengige bølgjefunksjonane er eigenfunksjonar til Hamiltonoperatoren. Dette viser ein ved innsetting. Innsetting på høgresida i den tidsavhengige Schrödingerlikninga gjev da

$$\hat{H}\Psi_i(x,t) = e^{-iE_it/\hbar}\hat{H}\psi_i(x) = E_i\Psi_i(x,t), \qquad i = 1, 2.$$

Same resultat finn vi ved innsetting på venstresida:

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi_i(x,t)}{\partial t} = \psi_i(x)\,i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,e^{-iE_it/\hbar} = E_i\,\Psi_i(x,t), \quad \text{q.e.d.}$$

I integralet

$$\int \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx \equiv \langle\, \psi_1, \psi_2 \,\rangle$$

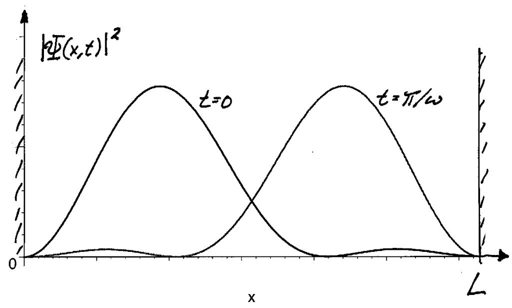
er $\psi_1(x)$ symmetrisk med omsyn på midtpunktet av integrasjonsintervallet, medan $\psi_2(x)$ er antisymmetrisk. Integranden er altså totalt sett antisymmetrisk, slik at integralet er lik null. Dei to funksjonane er såleis **ortogonale**, det vil seie at indreproduktet $\langle\, \psi_1, \psi_2 \,\rangle$ er lik null.

b) Lineærkombinasjonen $\Psi(x,t)$ oppfyller Schrödingerlikninga fordi den er lineær og homogen. Operatorene $i\hbar\partial/\partial t$ og $\hat{H}$ er nemleg båe lineære. Ei stasjonær løysing er ein romleg funksjon $\psi(x)$ multiplisert med ein tidsavhengig eksponensialfunksjon på forma $e^{-iEt/\hbar}$. Dette er ikkje tilfellet for $\Psi(x,t)$ slik at denne bølgjefunksjonen beskriv ein ikkje-stasjonær tilstand.

c) Sannsynlegheitstettheiten er

$$\begin{aligned}
|\Psi(x,t)|^2 &= \tfrac{1}{2}[(\Psi_1^* + \Psi_2^*)(\Psi_1 + \Psi_2)] \\
&= \tfrac{1}{2}|\Psi_1(x,t)|^2 + \tfrac{1}{2}|\Psi_2(x,t)|^2 + \tfrac{1}{2}[\Psi_1^*(x,t)\Psi_2(x,t) + \Psi_1(x,t)\Psi_2^*(x,t)] \\
&= \tfrac{1}{2}[\psi_1(x)]^2 + \tfrac{1}{2}[\psi_2(x)]^2 + \Re\mathrm{e}[\Psi_1(x,t)\Psi_2^*(x,t)] \\
&= \tfrac{1}{2}[\psi_1(x)]^2 + \tfrac{1}{2}[\psi_2(x)]^2 + \Re\mathrm{e}[\psi_1(x)\psi_2(x)e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}] \\
&= \tfrac{1}{2}[\psi_1(x)]^2 + \tfrac{1}{2}[\psi_2(x)]^2 + \psi_1(x)\psi_2(x)\,\cos\omega t, \quad \text{q.e.d.}
\end{aligned}$$

Her er $\omega \equiv \omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar = 3E_1/\hbar$. Vi ser at den tidsavhengige faktoren i $|\Psi(x,t)|^2$ oppstår fordi dei to tidsavhengige eksponensialfaktorene i $\Psi_1(x,t)$ og $\Psi_2(x,t)$ ikkje varierer i takt. Moralen er at ein superposisjon av to stasjonære tilstandar med forskjellige energiar gjev ein ikkje-stasjonær tilstand, der sannsynlegheitstettheiten varier med tida. Kurva til venstre i figuren viser $|\Psi(x,t)|^2$ for $t = 0$ og $t = 2\pi/\omega$, $4\pi/\omega$ osv. Perioden T_{21}, som er tida mellom kvar gong $|\Psi(x,t)|^2$ er identisk med sannsynlegheitstettheiten i begynnelsestilstanden $|\Psi(x,0)|^2$, er altså her $T_{21} = 2\pi/\omega_{21} \equiv 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$. Kurva til høgre i figuren viser $|\Psi(x,t)|^2$ for $t = \pi/\omega$ (osv).



Her ser vi at sannsynlegheitsfordelinga og dermed tyngdepunktet $\langle x \rangle$ flyttar seg med tida. Tyngdepunktet oscillerer mellom to ytterpunkt. Dette er eit typisk trekk for ein ikkje-stasjonær tilstand.

Superponerer vi i staden $\Psi_1(x,t)$ og $\Psi_3(x,t)$, så blir frekvensen $\omega_{31} \equiv (E_3 - E_1)/\hbar = 8E_1/\hbar = 8\omega_{21}/3$, slik at periodetida T_{31} blir ein faktor 8/3 mindre enn T_{21}.

d) Integralet over sannsynlegheitstettheiten ovanfor blir

$$\int |\Psi(x,t)|^2 dx = \tfrac{1}{2}\int [\psi_1(x)]^2 dx + \tfrac{1}{2}\int [\psi_2(x)]^2 dx + \cos\omega t \int \psi_1(x)\psi_2(x) dx = \tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}+0 = 1 \quad \forall\, t, \quad \text{q.e.d.,}$$

der dei to første integrala er lik 1 sidan $\psi_1(x)$ og $\psi_2(x)$ er normerte. Det siste integralet er lik null på grunn av ortogonalitet. Dette illustrerer at det er lett å finne normen av ein funksjon som er utvikla i ortonormerte funksjonar. Det er med andre ord ein fordel å jobbe med ortogonale egenfunksjonar.

e) Kjøyring av "box_non_stationary.m" (med $n1 = 1$ og $n2 = 2$, dvs superposisjon av grunntilstanden og første eksiterte tilstand) viser korleis $|\Psi(x,t)|^2$ svinger mellom dei to ytterpunkta i figuren ovanfor. Frå denne animasjonen kan vi lese av at $\langle x \rangle$ svinger mellom $\approx 0.32\,L$ og $\approx 0.68\,L$. Middelverdien over ein heil periode av $\langle x \rangle$ er opplagt $L/2$. Animasjonen indikerer at tyngdepunktet $\langle x \rangle_t$ av sannsynligheitsfordelinga oscillerer tilnærma harmonisk. Dette er nettopp kva vi bør vente ut fra formelen i c) . Ifølgje denne formelen er

$$\langle x \rangle_t = \tfrac{1}{2}\int x[\psi_1(x)]^2 dx + \tfrac{1}{2}\int x[\psi_2(x)]^2 dx + \cos\omega t \int x\psi_1(x)\psi_2(x) dx.$$

Her er alle integrala tidsuavhengige og forskjellige frå null. slik at $\langle x \rangle_t$ oscillerer harmonisk.

> Kommentar: Dei to første integrala er lik $L/2$ (kvifor?). Det siste integralet er $-16\,L/(9\pi^2) \approx -0.18$, så $\langle x \rangle_t \approx L(0.5 - 0.18\cos\omega t)$, som stemmer overeines med animasjonen.

f) Her ser det ut som om bølgjegruppa bevegar seg med jamn hastigheit når den ikkje er i kontakt med veggane. Slik bør det faktisk også vere; bølgjegruppa bør bevege seg fritt når den ikkje har kontakt med veggane.

Løysing Oppgåve 2 **Litt meir om krumning av eigenfunksjonar**

a) Da ψ'' er endeleg innanfor veggane, følgjer det ved integrasjon at ψ' må vere kontinuerleg og endeleg. Då må også ψ være kontinuerleg og endeleg.

b) Eigenverdilikninga $\hat{H}\psi = E\psi$ er oppfylt når $\hat{H}\psi(x)$ er lik konstanten E multiplisert med $\psi(x)$, for alle x. Vi har altså

$$E = \frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)} = \text{en konstant uavhengig av } x.$$

Denne konstanten E kan vi rekne ut vha uttrykket ovanfor dersom vi kjenner $\psi(x)$ i eit lite område. Eit døme finn du i punkt c)

c) For $-a_0 < x < a_0$ er

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0,$$

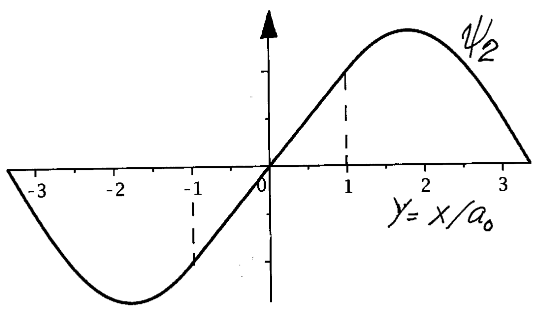
og sidan $\psi_2 = Ax$ er lineær slik at $\psi_2'' = 0$ i dette området, finn vi ganske enkelt at

$$E_2 = \frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)} = \frac{V_0\psi_2}{\psi_2} = V_0.$$

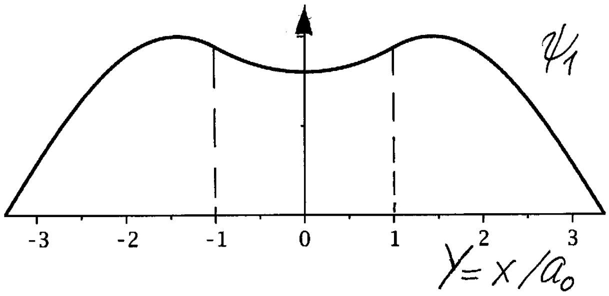
Mellom barrieren og dei harde veggane er $V(x) = 0$, slik at desse områda er klassisk tillatne der den kinetiske energi er $K_2 = E_2 = V_0$. Den tidsuavhengige Schrödingerlikninga i desse områda tar forma

$$\psi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E_2]\psi_2 = \frac{2m}{\hbar^2}[0 - V_0]\psi_2 = -\frac{1}{a_0^2}\psi_2.$$

I desse områda vil då ψ_2 bli sinusforma med bølgjetal $k_2 = 1/a_0$. Her krummar altså ψ_2 mot x-aksen og ser slik ut:



d) Då grunntilstandsenergien er lågere enn energien for 1. eksiterte tilstand, blir barriereområdet klassisk forbode for grunntilstanden. Frå den tidsuavhengige Schrödingerlikninga følgjer det at grunntilstanden ψ_1 må krumme *utover* frå x-aksen i barriereområdet, medan den krummar *mot* aksen utanfor dette området, litt langsommare enn første eksiterte. $\psi_1(x)$ ser slik ut:



Løysing Oppgåve 3 Δx og Δp_x for grunntilstanden i hamonisk oscillator m.m.

a) Ved å sammanlikne $\psi_0(x) = C_0 e^{-m\omega x^2/2\hbar}$ med $\Psi(x,0) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} e^{-x^2/4\sigma^2 + ip_0 x/\hbar}$, ser vi at den første er eit spesialtilfelle av den andre, for

$$\frac{m\omega}{2\hbar} = \frac{1}{4\sigma^2} \quad \text{og} \quad p_0 = 0.$$

Ved hjelp av resultata frå tidlegare, $\langle\, p_x \,\rangle = p_0$, $\Delta x = \sigma$ og $\Delta p_x = \hbar/2\sigma = \hbar/2\Delta x$, ser vi at usikkerheitene i posisjonen og impulsen for tilstanden $\psi_0(x)$ er gjevne ved

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \equiv \frac{b_0}{\sqrt{2}} \quad \text{og} \quad \Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}, \qquad \text{slik at} \qquad \Delta x \cdot \Delta p_x = \tfrac{1}{2}\hbar,$$

medan forventningsverdien av impulsen p_x for grunntilstanden i oscillatoren er

$$\langle\, p_x \,\rangle = 0.$$

Dette resultatet gjeld faktisk *for alle bundne, stasjonære tilstandar.* Her kan vi elles merke oss at $b_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ er avstanden frå origo til det klassiske vendepunktet for tilstanden $\psi_0(x)$.

b) Forventningsverdien av energien er

$$\langle\, E \,\rangle = \sum_n P_n E_n = \sum_n |c_n|^2 E_n = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 \cdot 4E_1 = \frac{7}{4}\, E_1 = 1.75\, E_1.$$

Kvadratet av usikkerheiten er middelverdien av det kvadratiske avviket frå middelverdien:

$$(\Delta E)^2 = \Big\langle\, (E - \langle\, E \,\rangle)^2 \,\Big\rangle = \sum_n |c_n|^2 (E_n - \langle\, E \,\rangle)^2 = \cdots = \frac{27}{16}\, E_1^2.$$

Dette gjev usikkerheitten

$$\Delta E = \sqrt{27/16}\, E_1 \approx 1.3\, E_1.$$

c) Vi reknar ut dei deriverte av ψ:

$$\psi' = C \exp[-m\omega(x-a)^2/2\hbar] \left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x-a)\right] = \left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x-a)\right] \psi$$

og

$$\psi'' = \left[-\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}(x-a)^2\right] \psi,$$

og sett inn i den tidsuavhengige Schrödingerlikninga. Dette gjev

$$[E - V(x)]\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi'' = \left[\tfrac{1}{2}\hbar\omega - \tfrac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2\right]\psi.$$

Her er $\psi \neq 0$ for alle x. Sidan energieigenverdien skal vere ein konstant og altså uavhengig av x må løysinga då bli at

$$V(x) = \tfrac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2 + K \qquad \text{og} \qquad E = \tfrac{1}{2}\hbar\omega + K,$$

der K er ein ukjend konstant med dimensjon energi. Potensialet $V(x)$ er altså harmonisk. Vanlegvis vil ein sette $K = 0$.

Løysing Oppgåve 4

a) Frå Heisenbergs uskarpheitsrelasjon får vi uttrykket

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = \langle p_x \rangle^2 + (\Delta p_x)^2 \geq \langle p_x \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}.$$

Vi ser at viss $\Delta x \to 0$, det vil seie viss uskarpheiten i posisjonen går mot null, vil $\langle p_x^2 \rangle \to \infty$ og dermed $\langle K \rangle = \left\langle \frac{p_x^2}{2m} \right\rangle \to \infty$. Då partikkelen ikkje kan ha uendeleg høg energi, skjønar vi at den ikkje kan ha heilt skarpt definert posisjon, noko som svarer til $\Delta x = 0$.

b) Med $V(x) = 0$ blir forventningsverdien av energien $\langle E \rangle = \left\langle \frac{p_x^2}{2m} \right\rangle$. Da vi har likheitsteikn for den aktuelle tilstanden i a) , har vi at

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle = \langle p_x \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2} = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2},$$

sidan $\langle p_x \rangle = p_0$ og $\Delta x = \sigma$. Alle desse resultata fann vi i førre øvinga. Men la oss like godt kontrollere dette, med ein metode som kan komme godt med seinare. Da $\hat{p}_x$ er hermitesk, har vi generelt

$$\left\langle p_x^2 \right\rangle_\Psi = \int \Psi^* \,\hat{p}_x\hat{p}_x\,\Psi\,d\tau = \int (\hat{p}_x\Psi)^*\,\hat{p}_x\Psi\,d\tau = \int |\hat{p}_x\Psi|^2 d\tau.$$

For den aktuelle tilstanden er

$$\widehat{p}_x\Psi(x,0) = (p_0 + i\hbar\,x/2\sigma^2)\Psi(x,0).$$

Med $\langle x^2 \rangle = \sigma^2$ har vi då

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \left\langle p_x^2/2m \right\rangle = \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}(p_0^2 + \hbar^2x^2/4\sigma^4)|\Psi(x,0)|^2 dx \\ &= \frac{p_0^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{8m\sigma^2}.\end{aligned}$$

Når $\sigma \to \infty$ $(\Delta p_x \to 0)$, ser vi at $\langle E \rangle \to p_0^2/2m$; ein fri partikkel med (passe) veldefinert impuls har også ein (passe) veldefinert energi $(\Delta E \to 0)$. Insisterer vi derimot på en veldig liten Δx $(\sigma \to 0)$, ser vi at $\langle E \rangle$ får eit veldig stort tillegg i den forventa energien, pga kvantevillskapen. I denne situasjonen vil også usikkerheiten i energien bli veldig stor. (Den som orkar kan rekne ut ΔE.)

c) Frå den oppgjevne formelen for sannsynligheitstettheiten $|\Psi(x,t)|^2$ ser vi at den er normalfordelt, omkring punktet $x = p_0 t/m$. Dette tyder at forventningsverdien for posisjonen ved tida t er gjeven ved

$$\langle\, x \,\rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, x\, \Psi(x,t) dx = \frac{p_0 t}{m}.$$

Denne forventningsverdien er lik null for $t = 0$ og bevegar seg med hastigheiten

$$\frac{d\,\langle\, x \,\rangle}{dt} = \frac{p_0}{m},$$

som er gruppehastigheiten vi fann tidlegare. Usikkerheiten $(\Delta x)_t$ les vi rett ut av normalfordelinga

$$\frac{1}{2(\Delta x)_t^2} = \frac{1}{2(\sigma^2 + \hbar^2 t^2/4m^2\sigma^2)} \qquad \Longrightarrow$$

$$(\Delta x)_t = \sqrt{\sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\sigma^2}}.$$

(Som kontroll legg vi merke til at $(\Delta x)_t$ går mot den korrekte verdien σ for $t \to 0$.)
Kommentar: Resultata ovanfor fortel at både forventningsverdien $\langle\, x \,\rangle_t$ og usikkerheiten $(\Delta x)_t$ ved ei ny måling ved tida t er ulike frå verdiane ved $t = 0$. Same resultat som ved den første målinga (prepareringa) kan vi difor berre få umiddelbart etterpå. Moralen er at den tilstanden som systemet "fell ned i" ved den første målinga vanlegvis endrar seg raskt med tida, i samsvar med den tidsavhenginge Schrödingerlikninga. Dette er grunnen til at vi understreker dette med "umiddelbart etter" i målepostulatet. Det finst unntak: Måler vi t.d energien til den harmoniske oscillatoren, og får resultatet E_1, vil oscillatoren halde fram med å vere i den stasjonære tilstanden $\Psi_1(x,t)$, og ei ny måling lenge etter vil gje same energi E_1.

d) Dersom vi preparerer den frie partikkelen i ein tilstand $\Psi(x,0)$ med veldig liten usikkerheit $\Delta x = \sigma$ ved $t = 0$, ser vi av formelen for $(\Delta x)_t$ at spreiinga av bølgjepakka aukar raskare med t desto mindre σ vi vel. Moralen er at jo skarpare definert posisjon ein vel ved $t = 0$, desto hardare blir vi straffa i form av auka uskarpheit ved tida t.

e) Meininga her er å vise at denne straffa ikkje er særleg merkeleg. Jo mindre $\Delta x = \sigma$ vi vel ved $t = 0$, desto større er spreiinga $\Delta p_x = \hbar/2\sigma$ i impulsen. Om ein tenkjer halvklassisk, vil ein partikkel med en impuls i intervallet $-\Delta p_x < p_x < \Delta p_x$ etter tida t vere ein sted i intervallet

$$|x| < \Delta v_x {\cdot} t = \frac{\Delta p_x}{m} \cdot t = \frac{\hbar t}{2m\sigma}.$$

Dette er samme bodskap som vi får frå formelen for usikkerheiten i x,

$$(\Delta x)_t \approx \frac{\hbar t}{2m\sigma}.$$

I dette tilfellet har altså den halvklassiske tankegangen noko for seg.