FYS2140
Obligatorisk innlevering 4

Oppg.1.

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t}$$

a) Jeg skal normalisere Ψ, noe som vil si at jeg må finne riktig verdi for A som tilfredsstiller ligningen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$$

Dette vil kort sagt si at når vi summer alle sannsynlighetene, skal svaret bli 1. Jeg har den den generelle formelen:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$$

I mitt tilfelle er

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\lambda|x|}e^{i\omega t}$$

Så jeg skal altså finne riktig verdi for A. Starter med å mikse sammen uttrykkene ovenfor:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t}Ae^{-\lambda|x|}e^{i\omega t}dx = \int_{-\infty}^{+\infty} Ae^{-\lambda|x|}Ae^{-\lambda|x|}e^{i\omega t-i\omega t}dx$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} A^2e^{-2\lambda|x|}dx$$

Ser at dette integralet er symmetrisk om y-aksen (alle eksponensialfunksjoner er det), noe som vil si at bidraget fra positiv og negativ side av y-aksen er det samme. Kan også fjerne absoluttegnet siden vi bare integrerer over positive verdier. Får da at:

$$2\int_0^{+\infty} A^2\, e^{-2\lambda x}dx = 2\left[\frac{-A^2}{2\lambda}e^{-2\lambda x}\right]_0^{\infty} = 2\frac{A^2}{2\lambda} = \frac{A^2}{\lambda}$$

Husker at for normalisering skulle dette være lik 1, noe som gir:

$$A = \sqrt{\lambda}$$

b) Generelt har vi at forventningsverdien til en fysisk størrelse er gitt ved:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* \,\hat{x}\, \Psi(x,t)dx$$

I vårt tilfelle er x posisjon, og $x = \hat{x}$. Jeg har alt regnet ut $\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$, så jeg får

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} xA^2 e^{-2\lambda|x|}dx$$

Jeg har allerede nevnt at enhver eksponensialfunksjon er symmetrisk om y-aksen, men hvordan er det med $f(x) = x$? Den er jo ikke symmetrisk om y-aksen, og dermed er ikke integranden symmetrisk om y-aksen. Det kan vises at ethvert slik integral blir null, så

$$\langle x\rangle = 0$$

Når jeg skal regne ut $\langle x^2\rangle$, kan jeg bruke akkurat samme formel som ovenfor, bare at $\widehat{x^2} = x^2$. Får da at:

$$\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 A^2 e^{-2\lambda|x|}dx$$

I dette tilfellet har vi funksjonen $f(x) = x^2$ i tillegg til eksponensialfunksjonen. Siden begge er symmetriske om y-aksen, er hele integranden symmetrisk, og svaret kan ikke bli lik null. Vi kan likevel bruke dette til noe nyttig. Siden vi vet at bidraget fra positiv og negativ side er likt, kan vi halvere området vi multipliserer over og heller gange integralet med 2. Da kan vi også fjerne absoluttverditegnet siden vi bare integrerer over positive tall:

$$\langle x^2\rangle = 2A^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\lambda x}dx$$

Dette integralet kan løses ved delvis integrasjon, men å løse dette er mye jobb og enda mer jobb er det å føre inn i Word, så jeg bruker heller sammenhengen fra oblig1:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x}dx = \frac{1}{\alpha^{n+1}} n!$$

Jeg gjenkjenner $n = 2$ og $\alpha = 2\lambda$, noe som gir at:

$$\langle x^2\rangle = 2A^2 \frac{1}{(2\lambda)^3} 2!$$

Jeg har alt regnet ut at $A = \lambda$, og hvis jeg nå setter inn dette, får jeg at:

$$\langle x^2\rangle = \frac{2\lambda}{(2\lambda)^3} 2 = \frac{1}{2\lambda^2}$$

Men hvordan skal jeg vite at dette stemmer? I klassisk fysikk har man ofte en intuisjon om hva som er logisk, men i kvantefysikk er det litt verre. Jeg kan se på om enheter stemmer. Forventningsverdien til posisjon burde ha enhet $meter$, og i normaliseringen min har jeg at $[A]^2 \cdot meter = dimensjonsløst$. Derfor må A ha enhet $[A] = meter^{-0.5}$. Da ser jeg at det stemmer med enheter for $\langle x^2 \rangle$.

c) Jeg har at variansen er gitt ved

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{2\lambda^2} - 0 = \frac{1}{2\lambda^2}$$

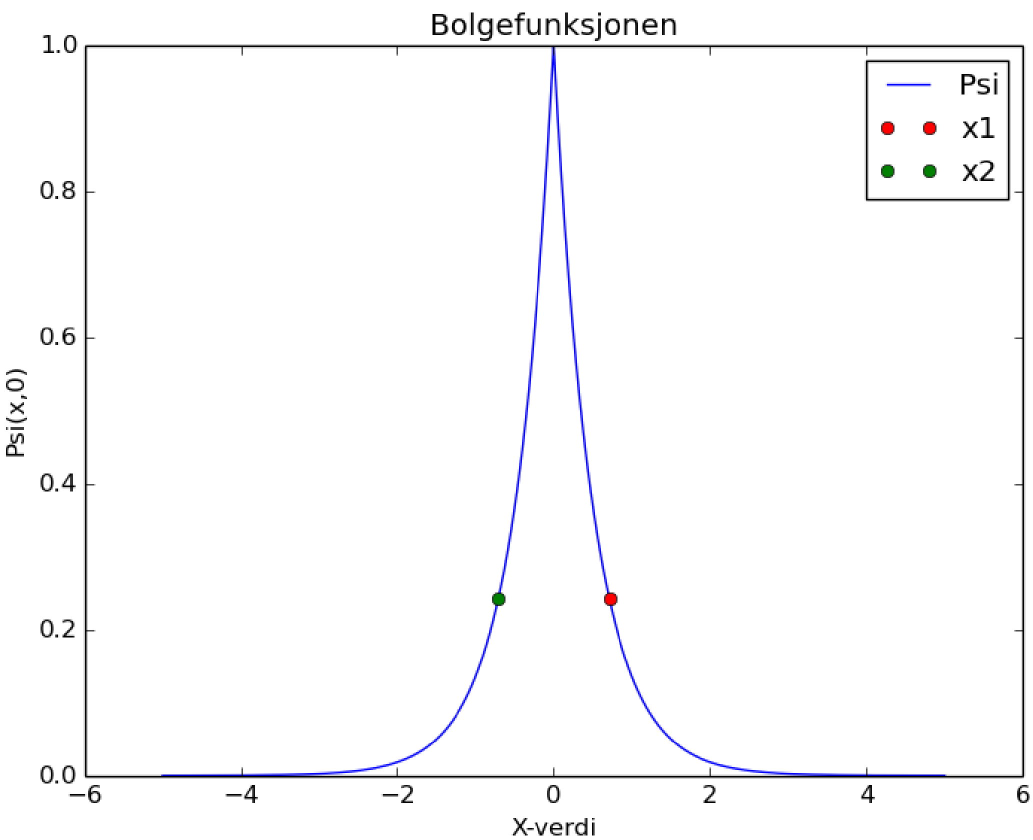
Standardavviket er gitt ved kvadratroten til variansen, altså σ:

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda}$$

Har da at

$$x_1 = \langle x \rangle + \sigma = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda}$$
$$x_2 = \langle x \rangle - \sigma = -\frac{1}{\sqrt{2}\lambda}$$

Jeg har valgt å plotte funksjonen min ved hjelp av Python, programmet er å finne i 'vedlegg1.pdf'. Jeg har markert x_1 og x_2 på grafen (se *Figur 1*).



Figur 1 *Bølgefunksjonen min plottet som funksjon av x*

Jeg kan regne ut sannsynligheten for at partikkelen befinner seg innenfor σ og $-\sigma$ ved å integrere normeringsintegralet fra σ til $-\sigma$:

$$\int_{-\sigma}^{\sigma} A^2 e^{-2\lambda|x|} dx = 2\left[\frac{-A^2}{2\lambda} e^{-2\lambda x}\right]_0^{\sigma} = 2\left(-\frac{A^2}{2\lambda} e^{-(\sqrt{2})} + \frac{A^2}{2\lambda}\right) = \frac{A^2}{\lambda}\left(1 - e^{-\sqrt{2}}\right)$$

Jeg skulle finne sannsynligheten for at partikkelen befant seg utenfor disse grensene, og denne må da være en minus sannsynligheten for at den befinner seg der:

$$Prob = 1 - \frac{A^2}{\lambda}\left(1 - e^{-\sqrt{2}}\right) = 1 + \frac{A^2}{\lambda}\left(e^{-\sqrt{2}} - 1\right)$$

Oppg.2.

$$\Psi(x,t) = Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}$$

a) Jeg skal normalisere $\Psi(x,t)$, altså finne A på tilsvarende måte som i forrige oppgave:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 e^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)-it\right]} dx$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 e^{-2a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)\right]} dx$$

Inni integranden har vi nå bare en funksjon som avhenger av x, og siden dette er en eksponensialfunksjon, er den symmetrisk om y-aksen. Kan da skrive:

$$2A^2 \int_0^{\infty} e^{-kx^2} dx$$

Hvor $k = \frac{2am}{\hbar}$.
Dette integralet kan se lite og søtt ut, men er verre å løse enn det ser ut. Dette kalles et gaussisk integral, og det er lettest å slå opp i Rottmann når man skal løse det. Integral 49 sier at

$$2\int_0^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

Mitt integral blir dermed:

$$2A^2 \int_0^{\infty} e^{-kx^2} dx = A^2\sqrt{\frac{\pi}{k}} = A^2\sqrt{\frac{\hbar\pi}{2am}} = 1$$

Setter dette lik 1 ettersom dette er definisjonen av normering. Får da at

$$A = \sqrt[4]{\left(\frac{2am}{\hbar\pi}\right)}$$

b) Schrödingerligningen sier at

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

Den ukjente jeg skal finne er altså $V(x)$. Jeg velger å dele opp uttrykket ved å først regne ut de partiellderiverte:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x}=\left(-\frac{2amx}{\hbar}\right)Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=\left(\frac{2amx}{\hbar}\right)^2 Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}-\left(\frac{2am}{\hbar}\right)Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}$$
$$=\left(\frac{2am}{\hbar}\right)Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}\left(\frac{2amx^2}{\hbar}-1\right)$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-iaAe^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}$$

Jeg kan nå sette inn i formelen:

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

$$=\frac{-i\hbar iaAe^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2am}{\hbar}\right)Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}\left(\frac{2amx^2}{\hbar}-1\right)}{Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}}$$

Ser at vi har Ψ i alle ledd, så stryker disse:

$$V(x)=\hbar a+a\hbar\left(\frac{2amx^2}{\hbar}-1\right)=a\hbar\left(1-1+\frac{2amx^2}{\hbar}\right)=2a^2mx^2$$

c) Når jeg skal finne $\langle x\rangle$ bruker jeg samme formel som i oppgave 1. $\Psi^*\Psi$ regnet jeg ut når jeg skulle normere Ψ, så ved å sette dette sammen får jeg:

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)^*\,\hat{x}\,\Psi(x,t)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{x}A^2e^{-2a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)\right]}dx$$

Kan med en gang se at denne er antisymmetrisk om y-aksen etter som $f(x)=x$ er antisymmetrisk, og det kan da vises at denne må bli null når vi integrerer over like stort positivt område som negativt område (lett å vise geometrisk). Så

$$\langle x\rangle=0$$

$$\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)^*\,\widehat{x^2}\,\Psi(x,t)dx=\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{x}^2A^2e^{-2a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)\right]}dx$$

I dette tilfellet har vi to funksjoner som er avhengige av x inni integranden, men begge er symmetriske. Dette integralet kan dermed ikke bli null. Jeg velger å forenkle ved å definere $k = \frac{2am}{\hbar}$:

$$A^2 \int_0^\infty \mathrm{x}^2 e^{-kx^2} dx$$

Dette er et gaussisk integral, så jeg velger å slå opp i Rottmann først som sist. Ligning 53 sier at:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(ax^2+2bx+c)} x^2 dx = \frac{a+2b^2}{2a^2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2-ac}{a}}$$

Dette er akkurat det vi trenger. I vårt tilfelle er $a = k$ og $b = c = 0$. Får da at:

$$A^2 \int_0^\infty \mathrm{x}^2 e^{-kx^2} dx = A^2 \frac{1}{2k} \sqrt{\frac{\pi}{k}}$$

Setter så inn uttrykkene for k og A:

$$A^2 \frac{1}{2k} \sqrt{\frac{\pi}{k}} = \sqrt{\left(\frac{2am}{\hbar\pi}\right)} \sqrt{\frac{\hbar\pi}{2am}} \frac{\hbar}{4am}$$

Ser at kvadratrøttene går mot hverandre, og

$$\langle x^2 \rangle = \left(\frac{\hbar}{4am}\right)$$

Den neste forventningsverdien jeg skal regne ut er $\langle p \rangle$. I klassisk fysikk er som kjent $p = mv$, og ifølge Ehrenfests teorem gjelder noe lignende for kvantefysikk:

$$\langle p \rangle = m\langle v \rangle = m\frac{d\langle x \rangle}{dt}$$

Vi har allerede regnet ut $\langle x \rangle$, kan vi bare sette inn dette i formelen, og siden den ikke er avhengig av t, må:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0$$

Så

$$\langle p \rangle = 0$$

Når jeg skal regne ut $\langle p^2 \rangle$ må jeg igjen tilbake til definisjonen av forventningsverdi. Jeg vet at:

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* \, \widehat{p^2} \, \Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* \, \hat{p}^2 \, \Psi(x,t) dx$$

Bevegelsesmengdeoperatoren er definert som $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, så vi får integralet:

$$\langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)-it\right]}(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{x}})^2\, Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}dx$$
$$= -\int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)-it\right]}\,\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial \mathrm{x}^2}\left(Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}\right)dx$$

Jeg har allerede regnet ut $\frac{\partial^2\Psi}{\partial \mathrm{x}^2}$:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{2am}{\hbar}\right)Ae^{-a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)+it\right]}\left(\frac{2amx^2}{\hbar}-1\right)$$

$$\langle p^2\rangle = -\int_{-\infty}^{\infty} A^2e^{-2a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)\right]}\,\hbar^2\left(\frac{2am}{\hbar}\right)\left(\frac{2amx^2}{\hbar}-1\right)dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2e^{-2a\left[\left(\frac{mx^2}{\hbar}\right)\right]}\,(2am\hbar)\left(1-\frac{2amx^2}{\hbar}\right)dx$$

$$= 2am\hbar A^2\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2}dx - \left(\frac{2am}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty} x^2\,e^{-kx^2}dx\right)$$

Hvor $k = \frac{2am}{\hbar}$. Jeg har her to gaussiske integraler. Det første kan jeg løse ved hjelp av ligning 49 i Rottmann:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

Det andre integralet kan jeg løse ved hjelp av ligning 53 i Rottmann (slik som gjort tidligere):

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-\lambda x^2}dx = \frac{1}{2\lambda}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

Hvis jeg setter alt dette inn i uttrykket mitt for $\langle p^2\rangle$ ovenfor, får jeg at:

$$2am\hbar A^2\left(\sqrt{\frac{\pi}{k}} - \left(\frac{2am}{\hbar}\right)\frac{1}{2k}\sqrt{\frac{\pi}{k}}\right)$$

Setter nå inn at

$$k = \frac{2am}{\hbar} \;\text{ og }\; A = \sqrt[4]{\left(\frac{2am}{\hbar\pi}\right)}:$$

$$2am\hbar\sqrt{\frac{2am}{\hbar\pi}}\sqrt{\frac{\hbar\pi}{2am}}\left(1-\frac{1}{2}\right)$$

$$\langle p^2\rangle = am\hbar$$

d) Variansen er definert som

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

Så hvis jeg skal finne variansen til posisjonen, får jeg at:

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle = \left(\frac{\hbar}{4am}\right)$$

Tilsvarende kan jeg gjøre for variansen til bevegelsesmengden:

$$\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle = am\hbar$$

Men hvorfor regner jeg egentlig ut variansen? Var det ikke standardavviket jeg skulle finne? Standardavviket er, som nevnt tidligere, definert som kvadratrota til variansen. Heisenbergs uskarphetsrelasjon sier at:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Passer standardavviket mitt inn i denne relasjonen?

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}}\sqrt{am\hbar} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4}} = \frac{\hbar}{2}$$

Ser at det passer inn, men det er bare så vidt!

Oppg.3. Schrödingerligningen sier at

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2} + V(x)\Psi_0 = i\hbar\frac{\partial \Psi_0}{\partial t}$$

Hvor Ψ_0 er en bølgefunksjon som passer inn i ligningen. Hvis jeg nå legger til et potensiale V_0 til potensialt $V(x)$ jeg allerede har, får jeg en ny bølgefunksjon Ψ som stemmer med ligningen. Oppgavens påstand er at denne ligningen er gitt ved:

$$\Psi = \Psi_0 e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}$$

Men stemmer egentlig dette? For å svare på dette kan jeg sette inn i Schrödingerligningen min for Ψ:

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + (V(x) + V_0)\Psi = i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Psi_0 e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}) + (V(x) + V_0)\Psi_0 e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi_0 e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}})$$

Dette blir litt mye å ta i ett jafs, så jeg tar et par mellomregninger:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\Psi_0 e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}\right) = e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}\frac{\partial^2 \Psi_0}{\partial x^2}$$

Siden ikke eksponensialfunksjonen vår ikke er avhengig av x.

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi_0 e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}\right) = e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}\frac{\partial \Psi_0}{\partial x} + \Psi_0\left(-i\frac{V_0}{\hbar}\right)e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}$$

Hvis jeg nå setter inn alt dette, får jeg:

$$\Rightarrow -\frac{\hbar}{2m}e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial x^2} + V(x)\Psi_0 e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}} + V_0)\Psi_0 e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}} = i\hbar\left(e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}\frac{\partial \Psi_0}{\partial x} + \Psi_0\left(-i\frac{V_0}{\hbar}\right)e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}\right)$$

Det første jeg legger merke til er at jeg har $e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}$ i alle ledd, så jeg kan stryke disse og få det mye penere:

$$\Rightarrow -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial x^2} + V(x)\Psi_0 + V_0\Psi_0 = i\hbar\left(\frac{\partial \Psi_0}{\partial x} + \Psi_0\left(-i\frac{V_0}{\hbar}\right)\right)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial x^2} + V(x)\Psi_0 + V_0\Psi_0 = i\hbar\frac{\partial \Psi_0}{\partial x} + \Psi_0 V_0$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi_0}{\partial x^2} + V(x)\Psi_0 = i\hbar\frac{\partial \Psi_0}{\partial x}$$

Som var det jeg skulle vise. Men hva har dette å si for forventningsverdien til en dynamisk variabel? Jeg tester for $\langle x\rangle$:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)^*\,\hat{x}\,\Psi(x,t)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi_0 e^{i\frac{V_0 t}{\hbar}}\,\mathrm{x}\,\Psi_0 e^{-i\frac{V_0 t}{\hbar}}dx = \int_{-\infty}^{\infty}x\Psi_0^2 dx$$

Ser at å legge til et konstant potensiale ikke har noen innvirkning på forventningsverdien, noe som er logisk ettersom vi burde kunne legge nullpunktet for potensiell energi hvor vi vil.