Kvantemekanik, afl. 6

Gorm Balle Feldstedt

En partikel bevæger sig langs x-aksen i potentialet $V(x) = kx^n$, hvor k er en positiv konstant, og n er et positivt og lige heltal.

1) Antag, at partiklen befinder sig i en stationær tilstand, dvs. beskrevet ved bølgefunktionen $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{iEt/\hbar}$, hvor ψ opfylder den stationære Schrödinger-ligning. Vis, at forventningsværdierne for den kinetiske og potentielle energi kan skrives som $\langle T \rangle = \frac{n}{n+2}E, \langle V \rangle = \frac{2}{n+2}E$.

Vi benytter virialsætningen, der for stationære tilstande fortæller os, at $2\langle T \rangle = \langle x \frac{dV}{dx} \rangle$. Det giver os

$$2\langle T \rangle = \langle xnkx^{n-1} \rangle = n\langle kx^n \rangle = n\langle V \rangle$$

Derudover

$$\begin{aligned}
E = \langle E \rangle &= \langle T \rangle + \langle V \rangle \\
&= \langle T \rangle \frac{2}{n} \langle T \rangle \\
&= \langle T \rangle (1 + 2/n) \\
&= \langle T \rangle \frac{n+2}{n} \\
\langle T \rangle &= E \frac{n}{n+2} \\
&\text{og} \\
\langle V \rangle &= E - \langle T \rangle \\
&= E(1 - \frac{n}{n+2}) \\
&= E \frac{n+2-n}{n+2} \\
&= E \frac{n}{n+2}
\end{aligned}$$

2) Vi betragter nu en arbitræt tidsafhængig bølgefunktion $\Psi(x,t)$, altså ikke nødvendigvis en stationær tilstand. Vis, at $\frac{d\langle x^l \rangle}{dt} = \frac{l}{2m} \langle px^{l-1} + x^{l-1}p \rangle$ for alle l, og at $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -kn\langle x^{n-1} \rangle$.

Undervejs benyttes resultater fra G3.14. Desuden fortæller Ehrefensts sætning os, at $\frac{d}{dt}\langle x^l \rangle = i/\hbar \langle [\hat{H}, x^l] \rangle + \langle \frac{\partial x^l}{\partial t}] \rangle$. Først beregnes $[\hat{H}, x^l]$ ved hjælp af resultatet fra G3.14: $[x^n, p] = i\hbar n x^{-1}$

$$[\hat{H}, p] = -\frac{1}{2m}[p^2, x^l] + [V, x^l]$$

Det sidste led er åbenlyst 0, da det kun indeholder potenser af x.

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{1}{2m}\big(p[p,x^n] + [p,x^n]p\big) \\
&= -\frac{1}{2m} ni\hbar(px^{n-1} + x^{n-1}p)
\end{aligned}
$$

Det fortæller os, at

$$
\begin{aligned}
\frac{d\langle x^l\rangle}{dt} &= i/\hbar\langle[\hat{H},p]\rangle + \langle\frac{\partial x^l}{\partial t}\rangle \\
&= \frac{l}{2m}\langle px^{l-1} + x^{l-1}p\rangle,
\end{aligned}
$$

hvor det sidste led i summen forsvinder ved indsættelse i sandwichformlen.
Dernæst skal vi finde $\frac{d\langle p\rangle}{dt}$. Det gøres på samme vis vha. Ehrenfests sætning. Så først findes

$$
\begin{aligned}
[\hat{H},p]f &= \frac{1}{2m}[p^2,p]f + [V,p]f \\
&= (V\cdot p - p\cdot V)f \\
&= -i\hbar(V\frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}V)f \\
&= -i\hbar(V\frac{df}{dx} - \frac{dV}{dx} - V\frac{df}{dx}) \\
&= i\hbar f\frac{dV}{dx} = i\hbar knx^{n-1}f
\end{aligned}
$$

Så vi får

$$
\frac{d\langle p\rangle}{dt} = i^2\hbar/\hbar kn\langle x^{n-1}\rangle = -kn\langle x^{n-1}\rangle
$$

hvor det er udnyttet, at $\langle\frac{\partial p}{\partial t}\rangle = 0$, der er symmetri i potentialet (da n er lige), så partiklen vil ikke have tendens til at bevæge sig den ene vej frem for den anden.

3) Benyt resultaterne fra 2) til at udlede $\frac{d^2\langle p\rangle}{dt^2} = -\frac{kn(n-1)}{2m}\langle px^{n-2} + x^{n-2}p\rangle$. Indsæt herefter $n = 2$ og $k = m\omega^2/2$, svarende til den harmoniske oscillator, og argumenter for, at resultatet giver fysisk mening.

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2\langle p\rangle}{dt^2} = \frac{d}{dt}\frac{d\langle p\rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} - kn\langle x^{n-1}\rangle \\
&= -kn\frac{n-1}{2m}\langle px^{n-2} + x^{n-2}p\rangle \\
&= -\frac{kn(n-1)}{2m}\langle px^{n-2} + x^{n-2}p\rangle
\end{aligned}
$$

Vi indsætter $n = 2$ og $k = m\omega^2/2$ og får:

$$
\frac{d^2\langle p\rangle}{dt^2} = -\frac{1}{2}m\omega^2\frac{1}{m}\langle p + p\rangle = -\frac{1}{2}\omega^2\langle 2p\rangle = -\omega^2\langle p\rangle
$$

Løsningen til denne ligning er en forventningsværdi af impuls, der svinger som en sinus-funktion, hvilket er, hvad vi kender fra den harmoniske oscillator. Oftest tænker vi nok positionen (modsat impulsen) som svingende med en sinusfunktion, men det er jo ækvivalent, idet $\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt}$.