Norwegian University of Science and Technology

TFY4215 - Innføring i kvantefysikk
Numerisk øving - Bølgepakker og Heisenbergs uskarphetsrelasjon

Marius Sunde Sivertsen Svein Åmdal

Mars 2018

Oppgave 1

Usikkerheten i x, Δx, er definert som

$$\Delta x(t) = \sqrt{\langle x^2 \rangle(t) - [\langle x \rangle(t)]^2}, \tag{1}$$

der forventningsverdiene er gitt ved

$$\begin{aligned}\langle x \rangle(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} x \, |\Psi(x,t)|^2 \, dx \approx \sum_{n=1}^{N} x \, |\Psi(x,t)|^2 \, \Delta x, \\ \langle x^2 \rangle(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \, |\Psi(x,t)|^2 \, dx \approx \sum_{n=1}^{N} x^2 \, |\Psi(x,t)| \, \Delta x.\end{aligned} \tag{2}$$

Bølgefunksjonen $\Psi(x,t)$ vil generelt være en lineær kombinasjon av ulike stasjonære tilstander (det er dette som gir variasjon med t), nemlig

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{\frac{\imath E_n t}{\hbar}}. \tag{3}$$

En kan finne $\psi_n(x)$ og E_n som henholdsvis egenvektorer og tilhørende egenverdier til den tidsuavhengige Schrödingerlikningen,

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n \psi_n(x). \tag{4}$$

Vi har en initialtilstand som er en normert gaussformet bølgepakke, altså

$$\Psi(x,0) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{4\sigma^2}} e^{\frac{\imath p_0 x}{\hbar}}. \tag{5}$$

Numerisk

Ved å diskretisere et tidsuavhengig potensialområde opp i $N+1$ biter for et heltall N, kan en konstruere et ligningssystem over de forskjellige stasjonære tilstandene i det området. Numerisk beregner vi egenfunksjoner som egenvektorer, fremdeles med tilhørende egenverdier, ut ifra en matriserepresentasjon av Hamiltonoperatoren $\hat{H}$. Matrisen for $\hat{H}$ er

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m_e(\Delta x)^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} + V(x)\mathbb{I},$$

slik i (4) blir

$$\psi_n''(x_k) = \frac{\psi_n(x_{k+1}) - 2\psi_n(x_k) + \psi_n(x_{k-1})}{(\Delta x)^2}, \tag{6}$$

en numerisk approksimasjon til den 2. deriverte med hensyn på x. Da gir (4) at vi har N egenvektorer med tilhørende egenverdier, og disse kan brukes til å beregne utviklingskoeffisientene

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)^* \Psi(x,0)dx \approx \sum_{j=1}^{N} \psi_n(x_j)^* \Psi(x_j,0)\Delta x.$$

Dermed vil (3) kunne approksimeres numerisk, og dermed også (1).

Analytisk

For et fritt elektron ($V(x) \coloneqq 0$) med masse m_e og midlere impuls p_0 i en starttilstand gitt av ligning 5, vil løsningen av Schrödingerlikningen gi

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(2\pi\left(\sigma_0^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m_e\sigma_0}\right)^2\right)\right)^{-1/2} exp\left[-\frac{\left(x - \frac{p_0 t}{m_e}\right)^2}{2\left(\sigma_0^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m_e\sigma_0}\right)^2\right)}\right], \tag{7}$$

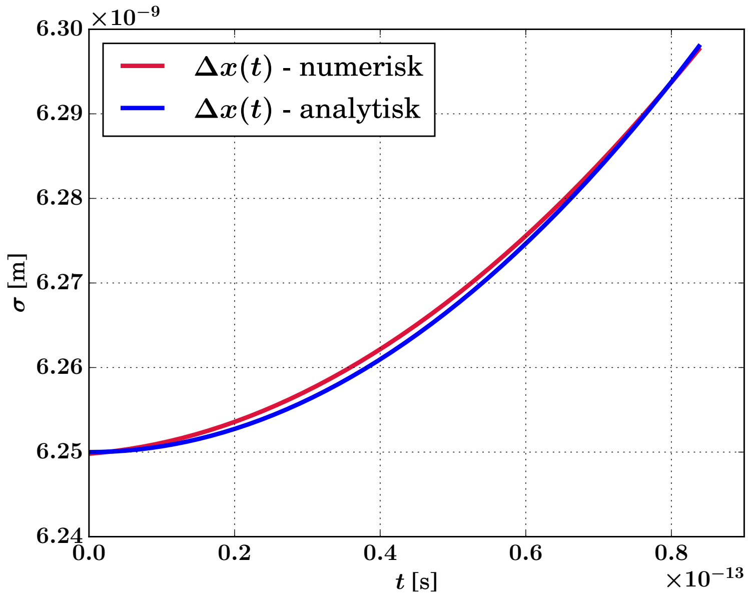
som er tolket som sannsynlighetstettheten for posisjonen av det fri elektronet. Det følger da at standardavviket $\sigma(t) = \Delta x(t)$ er gitt ved

$$\Delta x(t) = \sigma(t) = \sqrt{\sigma_0^2 + \left(\frac{\hbar t}{2m_e\sigma_0}\right)^2}, \tag{8}$$

ved å sammenligne ligning 7 med uttrykket for normalfordelingen.

Plott

Usikkerheten i posisjonen til elektronet over et begrenset intervall er vist i figur 1. For å rettferdiggjøre den numeriske implementasjonen, plottes også det analytiske uttrykket for usikkerheten i elektronets posisjon (8) i samme figur. Valgte parametre for denne situasjonen er skrittlengden dx = 1 Å, $\sigma_0 = dx \cdot 62.5$ og elektronets mekaniske energi E = 1 eV.



Figur 1: Analytisk og numerisk usikkerhet i posisjonen til elektronet, $\Delta x = \sigma$ som funksjoner av tid. Tidsintervallet er skalert til å være tiden elektronet bruker fra 1/4 ut i intervallet, til 3/4 av intervallet.

Oppgave 2

Av *Heisenbergs uskarphetsrelasjon* kan ikke posisjonen x og x-komponenten av impulsen $\vec{p}$ (heretter p) til elektronet måles samtidig. Helt konkret kan ikke *uskarphetsproduktet* $\Delta x \Delta p(t)$ bli mindre enn $\hbar/2$, og det gir at

$$\frac{2\Delta x \Delta p(t)}{\hbar} \geq 1 \tag{9}$$

til enhver tid t for elektronet.

Ved å kombinere ligning 1 med usikkerheten i impulsen

$$\Delta p(t) = \sqrt{\langle p^2 \rangle(t) - \langle p \rangle(t)^2}, \tag{10}$$

der

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle(t) &= \frac{\hbar}{\imath} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) dx \approx \frac{\hbar}{\imath} \sum_{j=0}^{N} \Psi(x_j,t)^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x_j,t) \Delta x, \\
\langle p^2 \rangle(t) &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) dx \approx -\hbar^2 \sum_{j=0}^{N} \Psi(x_j,t)^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x_j,t) \Delta x,
\end{aligned} \tag{11}$$

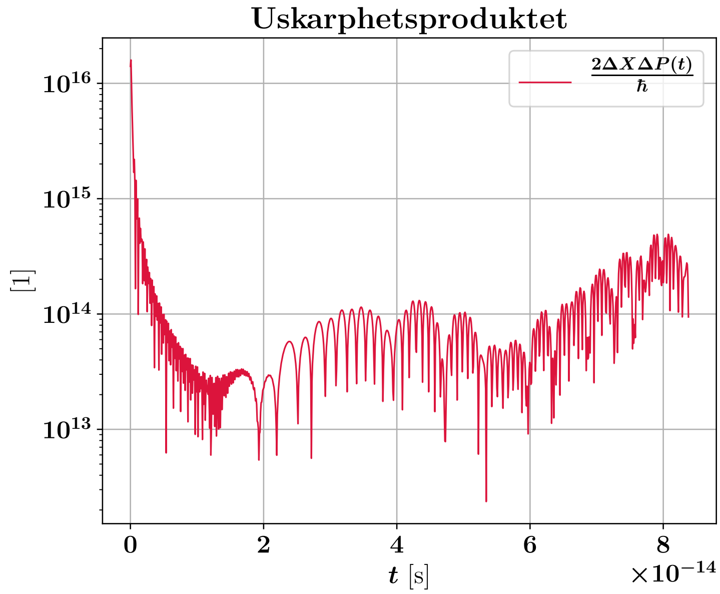
kan *uskarphetsproduktet* $\Delta x \Delta p(t)$ beregnes. $\Psi(x,t)$ beregnes som i ligning (3), og de deriverte av $\Psi(x,t)$ med hensyn på x regnes ut som i ligning 6.

Plott

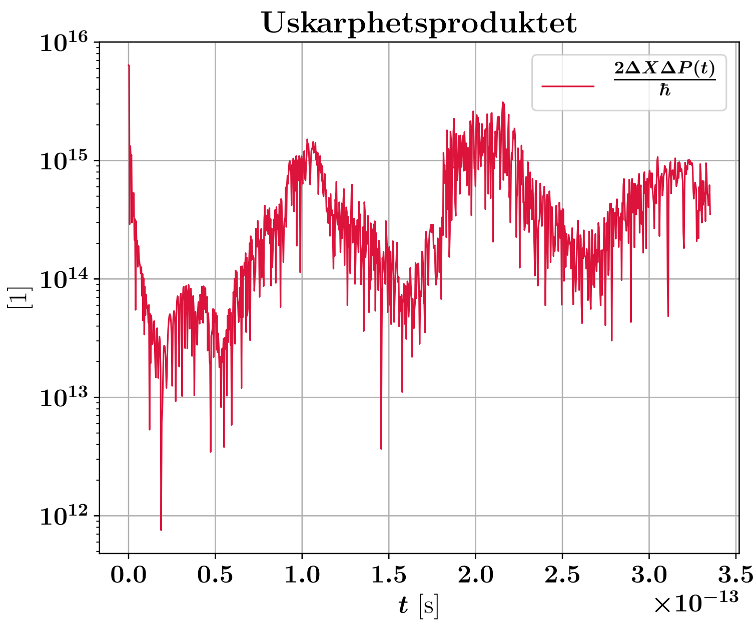
Vi har plottet uskarphetsproduktet for to ulike starttilstander (1) og (2) i et harmonisk potensial henholdsvis i figur 2 og 3. Potensialet $V(x)$ i denne oppgaven er modellert som en ideell fjær med fjærkonstant $k = 500$ μN/m med nullpunktet midt i intervallet.

Figur 2 viser uskarphetsproduktet for et elektron med starttilstand (1). Figuren viser tydelig at det aktuelle uskarphetsproduktet er konsistent med ligning 9 for alle t, og at produktet fluktuerer voldsomt over hele simuleringstiden.

Tilsvarende viser figur 3 uskarphetsproduktet for et elektron med starttilstand (2). Plottet viser tydelig igjen at uskarphetsproduktet er konsistent med ligning 9 for alle t.



Figur 2: *Uskarphetsproduktet* $\Delta x \Delta p$ som en funksjon av tid. Tidsintervallet tilsvarer tiden elektronet bruker fra 1/4 til 3/4 av intervallet. For denne translasjonen er σ_0 tilstrekkelig liten til å utelukke grensebetingelser ved endepunktene.



Figur 3: *Uskarphetsproduktet* $\Delta x \Delta p$ som en funksjon av tid, tidsaksen skalert på tilsvarende vis som i figur 2. Igjen er σ_0 tilstrekkelig liten til å utelukke grensebetingelser ved endepunktene.