Eksamen FY1004 Innføring i kvantemekanikk
Lørdag 6. desember 2008
Løsninger

1a)

$$\begin{aligned}
\langle\sigma_x\rangle &= \psi^\dagger\sigma_x\psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0\,, \\
\langle\sigma_y\rangle &= \psi^\dagger\sigma_y\psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} = 0\,, \\
\langle\sigma_z\rangle &= \psi^\dagger\sigma_z\psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1\,.
\end{aligned}$$

Vi sier at tilstanden ψ har spinn opp i z-retningen fordi den er en egentilstand med egenverdi $+\hbar/2$ for z-komponenten av spinnet, $S_z = (\hbar/2)\sigma_z$. Vi har at $\sigma_z\psi = \psi$, og derfor $S_z\psi = (\hbar/2)\psi$.

1b)

$$\begin{aligned}
\langle\sigma_x\rangle &= \psi^\dagger\sigma_x\psi = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} = 0\,, \\
\langle\sigma_y\rangle &= \psi^\dagger\sigma_y\psi = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} \\ -1 \end{pmatrix} = -1\,, \\
\langle\sigma_z\rangle &= \psi^\dagger\sigma_z\psi = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ -1 \end{pmatrix} = 0\,.
\end{aligned}$$

Fordi

$$\sigma_x^{\,2} = \sigma_y^{\,2} = \sigma_z^{\,2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I\,,$$

er

$$\langle\sigma_x^{\,2}\rangle = \langle\sigma_y^{\,2}\rangle = \langle\sigma_z^{\,2}\rangle = \langle I\rangle = \psi^\dagger I\psi = \psi^\dagger\psi = 1\,.$$

Følgelig er

$$\begin{aligned}
\mathrm{var}(\sigma_x) &= \langle\sigma_x^{\,2}\rangle - \langle\sigma_x\rangle^2 = 1 - 0 = 1\,, \\
\mathrm{var}(\sigma_y) &= \langle\sigma_y^{\,2}\rangle - \langle\sigma_y\rangle^2 = 1 - 1 = 0\,, \\
\mathrm{var}(\sigma_z) &= \langle\sigma_z^{\,2}\rangle - \langle\sigma_z\rangle^2 = 1 - 0 = 1\,.
\end{aligned}$$

Den fysiske tolkningen av at $\mathrm{var}(\sigma_y) = 0$, er at vi får samme verdi hver gang vi måler σ_y. At dessuten $\langle\sigma_y\rangle = -1$, betyr at den verdien vi får hver gang vi måler σ_y, er -1. Altså er dette en tilstand som har spinn opp i negativ y-retning.

At $\mathrm{var}(\sigma_y) = 0$ i tilstanden ψ, er matematisk sett det samme som at ψ er en egentilstand for σ_y.

1c) Når Hamiltonoperatoren er 2×2-matrisen

$$H = \hbar\omega\,\sigma_z = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

har vi Schrödingerligningen

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar\omega\,\sigma_z \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix},$$

som er de to ligningene

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi_1 = -\mathrm{i}\omega\,\psi_2\,, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi_2 = -\mathrm{i}\omega\,\psi_1\,.$$

Innsetting viser at

$$\psi_1(t) = a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + b\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\,, \qquad \psi_2(t) = a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - b\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$$

løser ligningene, når a og b er vilkårlige komplekse konstanter. At dette er den mest generelle løsningen, vet vi fordi to førsteordens ordinære differensialligninger skal ha nettopp to vilkårlige integrasjonskonstanter.

Vi har at

$$\begin{aligned}
|\psi_1|^2 &= (a^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + b^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})(a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + b\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}) = |a|^2 + |b|^2 + a^*b\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t} + b^*a\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}\,, \\
|\psi_2|^2 &= (a^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} - b^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})(a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - b\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}) = |a|^2 + |b|^2 - a^*b\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t} - b^*a\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}\,, \\
\psi_1^*\psi_2 &= (a^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + b^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})(a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - b\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}) = |a|^2 - |b|^2 - a^*b\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t} + b^*a\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}\,.
\end{aligned}$$

Normeringsbetingelsen $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 1$ gir da at

$$2\,(|a|^2 + |b|^2) = 1\,.$$

Hvis vi definerer fasevinkelen α ved at $a^*b = |a||b|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$, så er

$$\begin{aligned}
|\psi_1|^2 &= \frac{1}{2} + 2\,|a||b|\cos(2\omega t + \alpha)\,, \\
|\psi_2|^2 &= \frac{1}{2} - 2\,|a||b|\cos(2\omega t + \alpha)\,, \\
\psi_1^*\psi_2 &= (\psi_2^*\psi_1)^* = |a|^2 - |b|^2 - 2\,\mathrm{i}\,|a||b|\sin(2\omega t + \alpha)\,.
\end{aligned}$$

1d)

$$\begin{aligned}
\langle\sigma_x\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_1^*\psi_2 + \psi_2^*\psi_1 = |a|^2 - |b|^2\,, \\
\langle\sigma_y\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = -\mathrm{i}\,(\psi_1^*\psi_2 - \psi_2^*\psi_1) = -4\,|a||b|\sin(2\omega t + \alpha)\,, \\
\langle\sigma_z\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = |\psi_1|^2 - |\psi_2|^2 = 4\,|a||b|\cos(2\omega t + \alpha)\,.
\end{aligned}$$

Hvis $a \neq 0$ og $b \neq 0$, så oscillerer de to forventningsverdiene $\langle\sigma_y\rangle$ og $\langle\sigma_y\rangle$ med vinkelhastighet 2ω, og med periode T gitt ved at $2\omega T = 2\pi$, altså

$$T = \frac{\pi}{\omega} = \frac{4\pi m}{geB} .$$

Forventningsverdien av $H = \hbar\omega\,\sigma_x$ er

$$\langle H\rangle = \hbar\omega\,\langle\sigma_x\rangle = 2\hbar\omega\,(|a|^2 - |b|^2) .$$

Den er ikke tidsavhengig. Det kunne vi ha sagt uten å regne, fordi H alltid er en bevegelseskonstant når den ikke er eksplisitt tidsavhengig. Definisjonen på en bevegelseskonstant er at den har tidsuavhengig forventningsverdi i enhver tilstand.

2a) Løsningen er

$$\Psi(x,t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\,\psi(x) .$$

Vi ser at dette er en løsning når vi setter inn i den tidsavhengige Schrödinger-ligningen, og vi ser at startbetingelsen ved $t = 0$ er oppfylt, nemlig $\Psi(x,0) = \psi(x)$.

$\Psi(x,t)$ kalles en stasjonær tilstand fordi forventningsverdien

$$\langle A\rangle = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\;(\Psi(x,t))^*\,A\,\Psi(x,t) = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\;(\psi(x))^*\,A\,\psi(x)$$

er tidsuavhengig for enhver observabel A som ikke er eksplisitt tidsavhengig. Med andre ord: det finnes ingen observabel som vi kan bruke til å påvise at tilstanden forandrer seg med tiden.

Ja, $\Psi(x,t)$ er en løsning av den tidsuavhengige Schrödinger-ligningen, både for $t = 0$ og for $t \neq 0$. Det ser vi når vi setter inn, faktoren $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$ er nemlig uavhengig av x og opptrer i ligningen som en konstant som kan forkortes vekk.

2b) Vi har en lineær andreordens ordinær differensialligning med de to randkravene $\psi(-a) = \psi(a) = 0$. Den generelle løsningen av differensialligningen uten randkrav inneholder to vilkårlige integrasjonskonstanter. Det ene randkravet, for eksempel $\psi(-a) = 0$, eliminerer den ene vilkårlige konstanten. Hvis det andre randkravet, $\psi(a) = 0$, eliminerer den andre vilkårlige konstanten, så står vi igjen med bare den trivielle løsningen $\psi(x) = 0$, som alltid eksisterer.

For at det skal finnes en ikke-triviell løsning, må løsningen altså inneholde nøyaktig en vilkårlig konstant. Både ligningen og randkravene er homogene, det vil si at hvis $\psi(x)$ er en løsning, så er $\phi(x) = \eta\psi(x)$ en løsning, der η er en vilkårlig konstant. Vi kan ikke ha mer enn en vilkårlig konstant, derfor finnes det ikke andre løsninger.

2c) Vi skal vise at hvis

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) = E\,\psi(x) \tag{1}$$

for $-a \le x \le a$, med randkravene $\psi(-a) = \psi(a) = 0$, så er

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\phi''(x) = E\,\phi(x) \tag{2}$$

for $-a \leq x \leq a$, og randkravene $\phi(-a) = \phi(a) = 0$ er oppfylt. Her har vi definert $\phi = P\psi$, altså $\phi(x) = \psi(-x)$ for $-a \leq x \leq a$.

Ta randkravene først. Vi har at $\phi(-a) = \psi(a) = 0$ og $\phi(a) = \psi(-a) = 0$.

Så ligningen. Deriver definisjonsligningen $\phi(x) = \psi(-x)$ og bruk kjerneregelen:

$$\phi'(x) = -\psi'(-x)\,, \qquad \phi''(x) = -(-\psi''(-x)) = \psi''(-x)\,.$$

Vi setter inn i ligning (2) og får ligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(-x) = E\,\psi(-x)\,, \tag{3}$$

som er rett og slett ligning (1) evaluert i $-x$ istedenfor i x.

Når $\psi(-x) = \eta\psi(x)$ for alle x (mer presist for $-a \leq x \leq a$), så må $\eta = \pm 1$.
Bevis: for alle x er

$$\psi(x) = \psi(-(-x)) = \eta\psi(-x) = \eta^2\psi(x)\ .$$

Siden det finnes minst en x der $\psi(x) \neq 0$, så må $\eta^2 = 1$.

2d) Vi skal vise at

$$\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\ |\phi_n(x)|^2 = \frac{1}{a}\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\ \cos^2\!\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) = 1$$

for $n = 1, 3, 5, \ldots$, og at

$$\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\ |\chi_n(x)|^2 = \frac{1}{a}\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\ \sin^2\!\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) = 1$$

for $n = 2, 4, 6, \ldots$.

Integralene er enkle å beregne når vi husker at $\cos^2$ og $\sin^2$ oscillerer omkring $1/2$, og gjennomsnittsverdien er $1/2$ når vi integrerer over hele perioder av svingningen.

Mer formelt kan vi for eksempel bruke identitetene

$$\cos^2\!\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \cos\!\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right), \qquad \sin^2\!\left(\frac{n\pi x}{2a}\right) = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\!\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right).$$

2e) Sett $\psi(x) = N\,(a^2 - x^2)$. Vi skal ha at

$$\begin{aligned}1 &= \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\ |\psi(x)|^2 = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\ |N|^2\,(a^2 - x^2)^2 = 2|N|^2 \int_{0}^{a} \mathrm{d}x\ (a^4 - 2a^2x^2 + x^4)\\ &= 2|N|^2\left(a^5 - \frac{2a^5}{3} + \frac{a^5}{5}\right) = \frac{16|N|^2a^5}{15}\,.\end{aligned}$$

Vi kan like gjerne velge N til å være positiv, da må

$$N = \sqrt{\frac{15}{16a^5}}\,.$$

Tilstanden har paritet $+1$, idet $\psi(-x) = N\,(a^2 - (-x)^2) = N\,(a^2 - x^2) = \psi(x)$.

Men den har ikke en bestemt energi, for hvis vi setter inn i den tidsuavhengige Schrödingerligningen, ser vi at den ikke er en løsning for noen verdi av energien E. (Husk at E skal være en konstant!!)

2f) Med $\psi(x) = N\,(a^2 - x^2)$ er

$$H\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi''(x) = \frac{N\hbar^2}{m}\,.$$

(I parentes bemerket: $\psi''(x) = -2N$ er ingen akseptabel bølgefunksjon, den oppfyller nemlig ikke randkravene $\psi''(-a) = \psi''(a) = 0$.) Forventningsverdien av energien er

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\,(\psi(x))^*\,H\,\psi(x) = \frac{\hbar^2}{m}\,|N|^2 \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\,(a^2 - x^2) \\ &= \frac{2\hbar^2}{m}\,|N|^2 \int_{0}^{a} \mathrm{d}x\,(a^2 - x^2) = \frac{2\hbar^2}{m}\,\frac{15}{16a^5}\left(a^3 - \frac{a^3}{3}\right) = \frac{5}{4}\,\frac{\hbar^2}{ma^2} = 1,25\,\frac{\hbar^2}{ma^2}\,.\end{aligned}$$

Til sammenligning er grunntilstandsenergien

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} = 1,2337\,\frac{\hbar^2}{ma^2}\,.$$

Vi har altså funnet en tilstand med en forventningsverdi av energien som ligger bare $1,3\%$ over grunntilstandsenergien. Når denne tilstanden gir en god tilnærming til grunntilstandsenergien, så betyr det at tilstanden er en god tilnærming til grunntilstanden. Se også kommentar under neste punkt.

Vi kan forøvrig snu argumentet rundt og si at vi har funnet en god tilnærming til π, nemlig $\pi^2/8 \approx 5/4$, det vil si at $\pi \approx \sqrt{10} = 3,162\ldots$.

2g) Når $\psi = b_1\phi_1 + b_3\phi_3 + \cdots$, så er

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\,\psi^*\,H\psi = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\,(b_1\phi_1 + b_3\phi_3 + \cdots)^*\,(b_1E_1\phi_1 + b_3E_3\phi_3 + \cdots) \\ &= |b_1|^2E_1 + |b_3|^2E_3 + |b_5|^2E_5 + \cdots\,.\end{aligned}$$

Det siste likhetstegnet følger av at energiegentilstandene $\phi_1, \phi_3, \phi_5, \ldots$ er ortonormale:

$$\int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\,(\phi_j(x))^*\phi_k(x) = \delta_{jk}\,.$$

At bølgefunksjonen ψ er normert, betyr at

$$\begin{aligned}1 &= \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\,\psi^*\psi = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\,(b_1\phi_1 + b_3\phi_3 + \cdots)^*\,(b_1\phi_1 + b_3\phi_3 + \cdots) \\ &= |b_1|^2 + |b_3|^2 + |b_5|^2 + \cdots\,.\end{aligned}$$

Tolkningen er, som kjent, at $p_k = |b_k|^2$ for $k = 1, 3, 5, \ldots$ er sannsynligheten for at partikkelen er i energiegentilstanden ϕ_k. Skriver vi $p_1 = 1 - p_3 - p_5 - \cdots$, så får vi at

$$\langle H\rangle = E_1 + p_3(E_3 - E_1) + p_5(E_5 - E_1) + \cdots\,.$$

Siden $p_k \geq 0$ og $E_k - E_1 > 0$ for $k = 3, 5, 7, \ldots$, så viser det at $\langle H\rangle \geq E_1$. Den nedre grensen $\langle H\rangle = E_1$ oppnås hvis og bare hvis $p_1 = 1$ og $p_3 = p_5 = \ldots = 0$, dvs. at ψ er grunntilstanden, $\psi = b_1\phi_1$.

2h) Svar: $c_n(t) = b_n\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$, og

$$\langle H\rangle = |c_1(t)|^2E_1 + |c_3(t)|^2E_3 + |c_5(t)|^2E_5 + \cdots = |b_1|^2E_1 + |b_3|^2E_3 + |b_5|^2E_5 + \cdots\,.$$

Forventningsverdien $\langle H\rangle$ er tidsuavhengig, se kommentar under punkt 1d).