Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet
NTNU
Institutt for fysikk

EKSAMEN I: MNFFY 245 – INNFØRING I KVANTEMEKANIKK

DATO: Fredag 10. januar 2003 TID: 9.00 – 15.00

Antall vekttall: 4
Antall sider: 4

Tillatte hjelpemidler: Kalkulator, matematisk formelsamling.

Faglig kontakt under eksamen: Ingjald Øverbø, telefon (735)91867.
Sensurdato: 31. januar 2003.
BOKMÅL
Et ark med formler og uttrykk er vedlagt, side 5

Oppgave 1

En partikkel med masse m beveger seg i et éndimensjonalt potensial $V(x)$.

a. La $\psi(x)$ være en løsning av den tidsuavhengige Schrödingerligningen, $\hat{H}\psi = E\psi$, for det aktuelle potensialet. Bruk denne ligningen til å forklare hvordan energiegenfunksjonen $\psi(x)$ *krummer* i områder hvor

(i) $E > V(x)$,
(ii) $E < V(x)$,
(iii) $E = V(x)$.

b. Hva kan du si om degenerasjonsgrad og symmetriegenskaper for bundne energiegentilstander i et symmetrisk éndimensjonalt potensial?

c. Anta en éndimensjonal symmetrisk brønn,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad |x| < a/2, \\ V_0 & \text{for} \quad |x| > a/2. \end{cases}$$

For en slik symmetrisk brønn finnes det alltid minst én energiegenfunksjon som svarer til en bundet tilstand (grunntilstanden), uansett hvor små a og V_0 er. Dersom vidden a av brønnen (for en gitt verdi av V_0) er bare litt større enn en viss minimumsverdi a_0, vil det i tillegg til grunntilstanden også eksistere en første eksitert, bundet tilstand, med en energi som er bare litt mindre enn V_0. Finn minimumsvidden a_0 uttrykt ved V_0 og m. [Hint: Finn ut hvordan $\psi(x)$ må oppføre seg i områdene $-a/2 < x < a/2$ og $x > a/2$, og lag en omtrentlig skisse av $\psi(x)$ for denne tilstanden.]

d. For en *asymmetrisk* éndimensjonal brønn finnes det ingen bundne tilstander dersom brønnen er "for liten". Betrakt som et eksempel brønnen

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for} \quad x < 0, \\ 0 & \text{for} \quad 0 < x < a, \\ 2V_0 & \text{for} \quad x > a. \end{cases}$$

Forutsatt at vidden a av denne brønnen (for en gitt verdi av V_0) er bare litt større enn en viss minimumsverdi a_1, vil det eksistere (bare) én bundet tilstand med en energi som er bare litt mindre enn V_0. Finn denne minimumsvidden a_1 uttrykt ved V_0 og m. [Hint: Du kan finne det nyttig med en røff skisse av $\psi(x)$ også i dette tilfellet, og beregningen forenkles ved å betrakte kontinuiteten av ψ'/ψ.]

Oppgave 2

"Systemet" vi betrakter i denne oppgaven består av en partikkel med masse m som beveger seg i det éndimensjonale harmoniske oscillatorpotensialet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega$.

a. Hva kan du si om energinivåene E_n og energiegenfunksjonene $\psi_n(x)$ for potensialet $V(x)$, sammenlignet med de tilsvarende resultatene for standard-potensialet $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ (som du kan lese ut av det vedlagte formel-arket) ?

b. Ved $t = 0$ prepareres det aktuelle systemet i den normerte begynnelsestilstanden

$$\Psi(x, 0) = (2\beta/\pi)^{1/4} e^{-\beta(x-a)^2},$$

der parametrene a og β begge er positive. Forventningsverdien av posisjonen ved $t = 0$ er $\langle x \rangle_0 = a$. Hva er det enkleste argumentet for dette resultatet? Vis (så enkelt som du kan) at $\langle p_x \rangle_0 = 0$.

c. Bruk resultatene for $\langle x \rangle_0$ og $\langle p_x \rangle_0$ til å finne forventningsverdiene $\langle x \rangle_t$ og $\langle p_x \rangle_t$ som funksjoner av t.

d. Finn usikkerheten $(\Delta x)_0$ i posisjonen i begynnelsestilstanden $\Psi(x, 0)$. Finn også usikkerheten $(\Delta x)_{n=0}$ for oscillatorens grunntilstand, og beregn forholdet $(\Delta x)_0/(\Delta x)_{n=0}$. Her, og i resten av oppgaven, antar vi at $\beta = 50m\omega/\hbar$, dvs vi bruker en begynnelsestilstand som er nokså sterkt "skviset". [Hint: En sannsynlighetsfordeling på Gauss-formen $|\psi|^2 \propto \exp(-x^2/2\sigma^2)$ svarer til en usikkerhet i posisjonen gitt ved $\Delta x = \sigma$.]

e. Den sterke skvisingen av begynnelsestilstanden medfører en ganske høy forventningsverdi $\langle K \rangle_0$ av den kinetiske energien. Vis at $\langle K \rangle_0 = 25\hbar\omega$. Hint: Bruk forbindelsen mellom $(\Delta p_x)_0$ og $\langle p_x^2 \rangle_0$. Det opplyses at usikkerheten i impulsen for den Gaussiske begynnelsestilstanden er $(\Delta p_x)_0 = \frac{1}{2}\hbar/(\Delta x)_0$.

Bruk tilsvarende forbindelsen mellom $(\Delta x)_0$ og $\langle x^2 \rangle_0$ til å vise at $\langle V \rangle_0$ er tilnærmet lik $V(x = a) = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega$.

f. Vis at forventningsverdien $\langle\, E\,\rangle_t = \langle\, K + V\,\rangle_t$ av energien for dette systemet er konstant (uavhengig av t). Anta i resten av oppgaven at $a^2 = 22\hbar/m\omega$ og finn $\langle\, E\,\rangle_t$ i dette tilfellet.

Energien er ikke skarpt definert i tilstanden $\Psi(x,t)$. Derfor kan vi ikke skille skarpt mellom klassisk tillatt og klassisk forbudte områder, og vi har ingen veldefinerte klassiske vendepunkter. I hvilken avstand fra origo ville de klassiske vendepunktene ligge dersom energien *var* skarpt definert, lik den verdien som nettopp ble funnet for $\langle\, E\,\rangle_t$? Sammenlign denne avstanden med usikkerheten $(\Delta x)_{n=0}$ for grunntilstanden, og med usikkerheten $(\Delta x)_0$ for begynnelsestilstanden.

g. Uansett hvilken form begynnelsestilstanden $\Psi(x,0)$ har, vil bølgefunksjonen $\Psi(x,t)$ for denne oscillatoren få en periodisk oppførsel, i den forstand at for $t = N \cdot T$ er

$$\Psi(x, N\cdot T) = \Psi(x,0), \qquad T = \frac{2\pi}{\omega}, \qquad N = 1, 2, \cdots.$$

Vis dette. Hint: Bølgefunksjonen kan utvikles i de stasjonære tilstandene for oscillatoren;

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Vi er her vitne til en såkalt periodisk "revival" (gjenfødelse) av bølgefunksjonen, ved tidspunktene $t = N \cdot T$. Faktum er at vi har en slags "revival" også for $t = N \cdot T + \frac{1}{2}T$; det viser seg at

$$\Psi(x, N\cdot T + \tfrac{1}{2}T) = \Psi(-x, 0).$$

Dette betyr at usikkerheten $(\Delta x)_t$ er lik den opprinnelige ("skvisete") verdien $(\Delta x)_0$ for tidspunktene $t = N \cdot T/2$, $N = 1, 2, \cdots$. Du inviteres nå til å spekulere rundt hva som skjer med $\Psi(x,t)$ og $(\Delta x)_t$ *mellom* de nevnte tidspunktene. Hva tror du tendensen vil være umiddelbart etter $t = 0$? Hvor stor (omtrent) vil du gjette at $(\Delta x)_t$ er for $t = T/4 = \pi/2\omega$?

Oppgave 3

a. La F betegne en observabel, $\{f_n\}$ dens egenverdispektrum (som antas å være diskret og ikke-degenerert), og $|n\rangle$ dens normerte egenvektorer.
Betrakt et fysisk system som er i en vilkårlig tilstand $|\psi\rangle$. Ved å bruke fullstendighets-relasjonen kan vi utvikle tilstandsvektoren $|\psi\rangle$ i egenvektorsettet $|n\rangle$ til F:

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle\, |n\rangle.$$

Anta nå at det foretas en måling av observabelen F på dette systemet. (i) Hva er de mulige målte verdiene for F? (ii) Hva er *sannsynlighetsamplituden*, og hva er *sannsynligheten*, for å måle verdien f_n? (iii) Dersom måleresultatet er f_7, hva er da resultatet ved en ny måling av F umiddelbart etter den første målingen?

I resten av denne oppgaven betrakter vi et isolert spinn-$\frac{1}{2}$-system, hvor vi bruker egen-tilstandene $|\hat{\mathbf{z}}\rangle \equiv |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ og $|-\hat{\mathbf{z}}\rangle \equiv |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ til operatorene $\mathbf{S}^2$ og S_z som basis. Dette leder til en matriserepresentasjon, hvor basis-tilstandene representeres av Pauli-spinorene

$$\chi_{\hat{\mathbf{z}}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{og} \qquad \chi_{-\hat{\mathbf{z}}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

mens spinnoperatorene representeres ved

$$S_i = \tfrac{1}{2}\hbar\sigma_i, \qquad i = x, y, z, \qquad \text{der}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

b. Vis at spinoren

$$\chi_{\hat{\mathbf{n}}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}$$

er en egentilstand til operatoren

$$\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}} \equiv \mathbf{S}\cdot(\hat{\mathbf{e}}_x \sin\theta + \hat{\mathbf{e}}_z \cos\theta) = \tfrac{1}{2}\hbar(\sigma_x \sin\theta + \sigma_z \cos\theta),$$

og bestem egenverdien.

c. Anta at S_z måles for et ensemble som er preparert i tilstanden $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$. Hva er de mulige måleresultatene, og hva er sannsynlighetene for disse måleresultatene?
Hva kan du si om tilstanden til et spinn *etter* en slik måling av S_z?

d. Anta at et ensemble av 1000 slike spinn $\frac{1}{2}$ er preparert i tilstanden $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$, og at det så gjøres først en måling av S_z og deretter en måling av $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$, på hvert av medlemmene i ensemblet. Finn det forventede antallet av tilfeller hvor den siste målingen (av $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$) gir $\frac{1}{2}\hbar$, som funksjon av vinkelen θ. Kontrollér at resultatet er fornuftig i grensen $\theta \to 0$.

Vedlegg: Formler og uttrykk

Noe av dette kan du få bruk for.

Harmonisk oscillator

Energiegenfunksjonene for standardpotensialet $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ oppfyller egenverdiligningen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 - (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\right]\psi_n(x) = 0, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots,$$

med løsninger på formen

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n(\xi), \qquad \xi = \frac{x}{\sqrt{\hbar/m\omega}};$$

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad \cdots.$$

Tidsutvikling av forventningsverdier

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \rangle.$$

Ehrenfests teorem

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\langle p_x \rangle, \qquad \frac{d}{dt}\langle p_x \rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle.$$

Litt trigonometri

$$\cos(u-v) = \cos u \cos v + \sin u \sin v\ , \qquad \sin(u-v) = \sin u \cos v - \cos u \sin v.$$

$$cos\theta = 2\cos^2 \tfrac{1}{2}\theta - 1 = 1 - 2\sin^2 \tfrac{1}{2}\theta.$$

$$- - - * - - -$$

English version:

Problem 1

A particle with mass m moves in a one-dimensional potential $V(x)$.

a. Let $\psi(x)$ be a solution of the time-independent Schrödinger equation, $\hat{H}\psi = E\psi$, for the potential in question. Use this equation to explain how the energy eigenfunction $\psi(x)$ *curves* in regions where

$$\begin{array}{ll} \text{(i)} & E > V(x), \\ \text{(ii)} & E < V(x), \\ \text{(iii)} & E = V(x). \end{array}$$

b. What can you say about the degree of degeneracy and the symmetry properties for bound energy eigenstates in a symmetric one-dimensional potential?

c. Assume a one-dimensional symmetric square well,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad |x| < a/2, \\ V_0 & \text{for} \quad |x| > a/2. \end{cases}$$

For such a symmetric well one always finds at least one energy eigenfunction corresponding to a bound state (the ground state), no matter how small a and V_0 are. If the width a of the well (for a given value of V_0) is only slightly larger than a certain minimal value a_0, there will in addition to the ground state also exist a first excited bound state, with an energy that is only slightly smaller than V_0. Find the minimal value a_0 expressed in terms of V_0 and m. [Hint: Find out how $\psi(x)$ must behave in the regions $-a/2 < x < a/2$ and $x > a/2$ and make a rough sketch of $\psi(x)$ for this state.]

d. For an *asymmetric* one-dimensional well there exists no bound state if the well is "too small". Consider as an example the well

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for} \quad x < 0, \\ 0 & \text{for} \quad 0 < x < a, \\ 2V_0 & \text{for} \quad x > a. \end{cases}$$

Provided that the width a of this well (for a given value of V_0) is only slightly larger than a certain minimal value a_1, there will exist (only) one bound state with an energy that is only slightly less than V_0. Find this minimal width a_1 expressed in terms of V_0 and m. [Hint: You may find it useful with a rough sketch of $\psi(x)$ also for this case, and the calculations are simplified by considering the continuity of ψ'/ψ.]

Problem 2

The "system" that we consider in this Problem, consists of a particle with mass m moving in the one-dimensional harmonic-oscillator potential $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega$.

__a.__ What can you say about the energy levels E_n and the energy eigenfunctions $\psi_n(x)$ for the potential $V(x)$, compared with the corresponding results for the standard potential $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ (which you can read out from the formula sheet which is appended to the problem set) ?

__b.__ At $t = 0$ the system in question is prepared in the initial state

$$\Psi(x, 0) = (2\beta/\pi)^{1/4} e^{-\beta(x-a)^2},$$

where the parameters a and β are both positive. The expectation value of the position at $t = 0$ is $\langle x \rangle_0 = a$. What is the simplest argument for this resultat? Show (as simply as you can) that $\langle p_x \rangle_0 = 0$.

__c.__ Use the results for $\langle x \rangle_0$ and $\langle p_x \rangle_0$ to find the expectation values $\langle x \rangle_t$ and $\langle p_x \rangle_t$ as functions of t.

__d.__ Find the uncertainty $(\Delta x)_0$ in the position in the initial state $\Psi(x, 0)$. Find also the uncertainty $(\Delta x)_{n=0}$ for the ground state of the oscillator, and calculate the ratio $(\Delta x)_0/(\Delta x)_{n=0}$. Here, and in the rest of this Problem, we assume that $\beta = 50m\omega/\hbar$, that is, we are using an initial state that is fairy tightly "squeezed". [Hint: Make use of the fact that a probability density with the Gaussian form $|\psi|^2 \propto \exp(-x^2/2\sigma^2)$ corresponds to an uncertainty in the position given by $\Delta x = \sigma$.]

__e.__ The strong "squeezing" of the initial state implies a rather large expectation value $\langle K \rangle_0$ of the kinetic energy. Show that $\langle K \rangle_0 = 25\hbar\omega$. Hint: Use the connection between $(\Delta p_x)_0$ and $\langle p_x^2 \rangle_0$, and the fact that the uncertainty in the momentum for the Gaussian initial state is $(\Delta p_x)_0 = \frac{1}{2}\hbar/(\Delta x)_0$.

Use, in a similar manner, the connection between $(\Delta x)_0$ and $\langle x^2 \rangle_0$ to show that $\langle V \rangle_0$ is approximately equal to $V(x = a) = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega$.

__f.__ Show that the expectation value $\langle E \rangle_t = \langle K + V \rangle_t$ of the energy for this system is constant (independent of t). Assume in what remains of the Problem that $a^2 = 22\hbar/m\omega$ and find $\langle E \rangle_t$ for this case.

The energy is not sharply defined in the state $\Psi(x, t)$. Therefore, we cannot distinguish sharply between classically allowed and classically forbidden regions, and we have no well-defined classical turning points. How far away from the origin would the classical turning points lie if the energy *were* sharply defined, equal to the value just found for $\langle E \rangle_t$? Compare this distance with the uncertainty $(\Delta x)_{n=0}$ for the ground state of the oscillator, and with the uncertainty $(\Delta x)_0$ for the initial state.

__g.__ No matter which form we give the initial wavefunction $\Psi(x, 0)$, the wavefunction $\Psi(x, t)$ for this oscillator will behave in a periodic manner, in the sense that for $t = N \cdot T$,

$$\Psi(x, N \cdot T) = \Psi(x, 0), \qquad T = \frac{2\pi}{\omega}, \qquad N = 1, 2, \cdots.$$

Show this. Hint: The wavefunction can be expanded in terms of the stationary states of the oscillator;

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

We are here witnessing a so-called periodic revival ("Wiedergeburt") of the wavefunction, at the times $t = N \cdot T$. The fact is that we have a kind of revival also for $t = N \cdot T + \frac{1}{2}T$; it turns out that

$$\Psi(x, N \cdot T + \tfrac{1}{2}T) = \Psi(-x, 0).$$

This means that the uncertainty $(\Delta x)_t$ is equal to the initial ("squeezed") value $(\Delta x)_0$ for the times $t = N \cdot T/2$, $N = 1, 2, \cdots$. You are now invited to speculate around what happens with $\Psi(x,t)$ and $(\Delta x)_t$ *between* these points in time. What do you think is the tendency immediately after $t = 0$? How large (roughly) will you guess that $(\Delta x)_t$ is for $t = T/4 = \pi/2\omega$?

Problem 3

a. Let F denote an observable, $\{f_n\}$ its eigenvalue spectrum (which is assumed to be discrete and non-degenerate), and $|n\rangle$ its normalized eigenvectors.
Consider a physical system which is in an arbitrary state $|\psi\rangle$. Using the completeness relation, we may expand the state vector $|\psi\rangle$ in terms of the eigenvectors $|n\rangle$ of F:

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n \langle n|\psi\rangle\, |n\rangle.$$

Suppose now that a measurement of the observable F is carried out on this system. (i) What are the possible measured values of F? (ii) What is the *probability amplitude*, and what is the *probability*, of measuring the value f_n? (iii) If the measured value is f_7, what is then the result of a new measurement of F immediately after the first measurement?

In the remaining part of this Problem, we consider an isolated spin-$\frac{1}{2}$ system, where we use the eigenstates $|\hat{\mathbf{z}}\rangle \equiv |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ and $|-\hat{\mathbf{z}}\rangle \equiv |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ of the operators $\mathbf{S}^2$ and S_z as a basis. This leads to a matrix representation, where the basis states are represented by the Pauli spinors

$$\chi_{\hat{\mathbf{z}}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{and} \qquad \chi_{-\hat{\mathbf{z}}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

while the spin operators are represented by

$$S_i = \tfrac{1}{2}\hbar\sigma_i, \qquad i = x, y, z, \qquad \text{where}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

b. Show that the spinor

$$\chi_{\hat{\mathbf{n}}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}$$

is an eigenstate of the operator

$$\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}} \equiv \mathbf{S}\cdot(\hat{\mathbf{e}}_x \sin\theta + \hat{\mathbf{e}}_z \cos\theta) = \tfrac{1}{2}\hbar(\sigma_x \sin\theta + \sigma_z \cos\theta),$$

and determine the eigenvalue.

c. Assume that S_z is measured for an ensemble which is prepared in the state $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$. What are the possible measured values, and what are the probabilities for these results?
What can you say about the state of a spin *after* such a measurement of S_z?

d. Assume that an ensemble of 1000 such spins are prepared in the state $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$, and that measurements are made first of S_z and then of $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$, on each of the members of the ensemble. Find the expected number of cases for which the last measurement (of $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$) gives $\frac{1}{2}\hbar$, as a function of the angle θ. Check that the result is reasonable in the limit $\theta \to 0$.

Appendix: Formulae and expressions

Some of the following material may be useful.

Harmonic oscillator

The energy eigenfunctions for the standard potential $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ satisfy the eigenvalue equation

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2}m\omega^2 x^2 - (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\right]\psi_n(x) = 0, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots,$$

with the solutions

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n(\xi), \qquad \xi = \frac{x}{\sqrt{\hbar/m\omega}};$$

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad \cdots.$$

Time development of expectation values

$$\frac{d}{dt}\langle F \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \rangle.$$

Ehrenfest's theorem

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\langle p_x \rangle, \qquad \frac{d}{dt}\langle p_x \rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle.$$

A little trigonometry

$$\cos(u-v) = \cos u \cos v + \sin u \sin v\ , \qquad \sin(u-v) = \sin u \cos v - \cos u \sin v.$$

$$cos\theta = 2\cos^2 \tfrac{1}{2}\theta - 1 = 1 - 2\sin^2 \tfrac{1}{2}\theta.$$

$- - - * - - -$

NTNU – INSTITUTT FOR FYSIKK

EKSAMEN I : MNFFY 245 – Innføring i kvantemekanikk – 10. jan. 2003
LØSNINGSFORSLAG

Oppgave 1

a. Ved å skrive egenverdiligningen på formen

$$\frac{d^2\psi/dx^2}{\psi} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E],$$

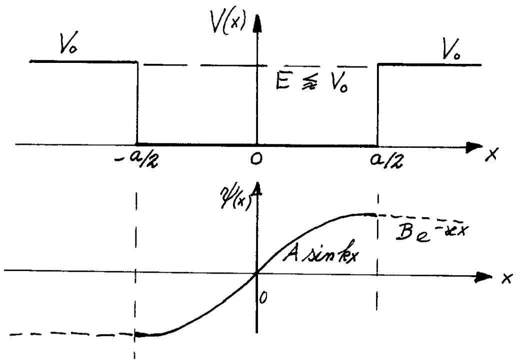
ser vi at forholdet mellom den 2.-deriverte (krumningen) og ψ selv er

(i)	< 0 når $E > V(x)$	$\Longrightarrow \psi$	krummer *mot* x-aksen,
(ii)	> 0 når $E < V(x)$	$\Longrightarrow \psi$	krummer *bort fra* x-aksen,
(iii)	$= 0$ når $E = V(x)$	$\Longrightarrow \psi$	krummer *ikke.*

For tilfelle (iii) gjelder altså at ψ har et vendepunkt dersom $E = V(x)$ bare i et punkt; er $E = V(x)$ i et endelig område, blir $\psi(x)$ lineær i dette området.

b. Energinivåene for bundne tilstander i et éndimensjonalt potensial er ikkedegenererte, dvs vi har bare én tilstand pr energinivå. Når potensialet er symmetrisk, er grunntilstanden symmetrisk, 1. eksiterte tilstand er antisymmetrisk, 2. eksiterte tilstand er symmetrisk, osv.

c. Første eksiterte tilstand er antisymmetrisk, og fra egenverdiligningen ovenfor følger det da at den må ha formen $A \sin kx$ (der $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$) for $|x| < a/2$. For $x > a/2$ følger det fra samme ligning at en akseptabel løsning må ha formen $B \exp(-\kappa x)$, der $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ er tilnærmet lik null når E er bare litt mindre enn V_0.



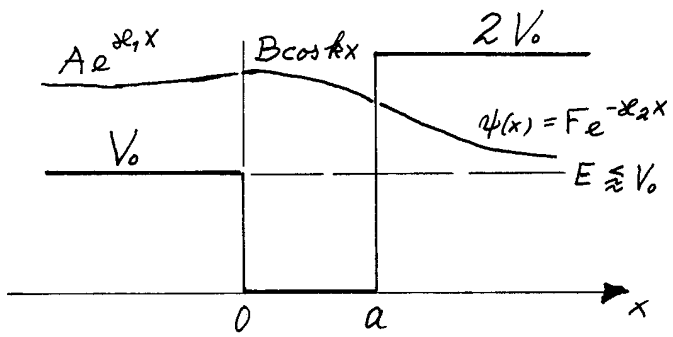
Som indikert i skissen, må egenfunksjonen $\psi(x)$ derfor være tilnærmet flat i punktet $x = a/2$. Minimumsvidden $a = a_0$ svarer altså til at $\sin kx$ når sitt første maksimum i $x = a/2$. Vi må da ha

$$ka/2 \approx \sqrt{2mV_0/\hbar^2} \cdot a_0/2 = \pi/2,$$

dvs minimumsvisdden a_0 er gitt ved

$$a_0 = \frac{\pi}{\sqrt{2mV_0/\hbar^2}} = \frac{h}{\sqrt{8mV_0}}.$$

d.



I grensetilfellet, når a er bare så vidt stor nok til å gi binding, er energien også her tilnærmet lik V_0. Den akseptable løsningen for $x < 0$, $\psi = A\exp(\kappa_1 x)$, er da tilnærmet flat i $x = 0$. Følgelig må løsningen for $0 < x < a$ være av typen $B\cos kx$, der $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \approx \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$. For $x > a$ har den akseptable løsningen formen $F\exp(-\kappa_2 x)$, der $\kappa_2 = \sqrt{2m(2V_0 - E)/\hbar^2} \approx \sqrt{2mV_0/\hbar^2} = k$. Kontinuitetskravet for ψ'/ψ gir da

$$\frac{-kB\sin ka_1}{B\cos ka_1} = -\kappa_2, \quad \text{dvs.} \qquad ka_1 = \pi/4,$$

idet $k = \kappa_2$. Minimumsvidden a_1 for å få én bundet tilstand i dette potensialet er altså gitt ved

$$a_1 = \frac{\pi}{4k} = \frac{h}{4\sqrt{8mV_0}},$$

som er en firedel av vidden a_0 funnet i forrige spørsmål.

Oppgave 2

a. Da potensialet $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega$ er "senket" med beløpet $\frac{1}{2}\hbar\omega$ i forhold til standardpotensialet $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$, er det vel nokså opplagt at energinivåene senkes med det samme beløpet, dvs vi må ha

$$E_n = n\hbar\omega, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots$$

for potensialet $V(x)$. Siden de to potensialene beskriver samme kraftfelt, er det vel like opplagt at energiegenfunksjonene er de samme som for standardpotensialet.

På begge disse punktene kan eventuell tvil ryddes av veien ved en liten omskriving av egenverdiligningen for standardpotensialet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + (\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega) - n\hbar\omega\right]\psi_n(x) = 0.$$

b. Siden sannsynlighetstettheten, Gauss-fordelingen

$$|\Psi(x,0)|^2 = (2\beta/\pi)^{1/2} e^{-2\beta(x-a)^2},$$

er symmetrisk med hensyn på punktet $x = a$, må forventningsverdien av posisjonen være

$$\langle\, x \,\rangle_0 = a.$$

For impulsen har vi

$$\langle\, p_x \,\rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,0) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi(x,0) dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) \frac{d}{dx} \Psi(x,0) dx.$$

Da $\Psi(x,0)$ er reell, kan det her se ut som om forventningsverdien er rent imaginær. Men samtidig vet vi at denne er reell. Følgelig må integralet være lik null.

Dette kan også kontrolleres på flere måter. F.eks:

(i) Den deriverte av en symmetrisk funksjon er antisymmetrisk, slik at integranden totalt sett blir antisymmetrisk med hensyn på punktet $x = a$, og integralet blir lik null.

(ii) $$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi \frac{d\Psi}{dx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \tfrac{1}{2} \frac{d\Psi^2}{dx} dx = \Psi^2(\infty) - \Psi^2(-\infty) = 0.$$

c. Fra Ehrenfests teorem,

$$\frac{d}{dt} \langle\, x \,\rangle_t = \frac{\langle\, p_x \,\rangle_t}{m} \qquad \text{og} \qquad \frac{d}{dt} \langle\, p_x \,\rangle_t = \langle\, -\frac{\partial V}{\partial x} \,\rangle_t = -m\omega^2 \langle\, x \,\rangle_t,$$

følger det at

$$\frac{d^2 \langle\, x \,\rangle_t}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{d}{dt} \langle\, p_x \,\rangle_t = -\omega^2 \langle\, x \,\rangle_t.$$

Den generelle løsningen er

$$\langle\, x \,\rangle_t = A \cos \omega t + B \sin \omega t,$$

$$\langle\, p_x \,\rangle_t = m \frac{d}{dt} \langle\, x \,\rangle_t = m\omega(-A \sin \omega t + B \cos \omega t).$$

For $t = 0$ skal vi da ha

$$\langle\, x \,\rangle_0 = A = a \qquad \text{og} \qquad \langle\, p_x \,\rangle_0 = m\omega B = 0.$$

Løsningen er altså

$$\langle\, x \,\rangle_t = a \cos \omega t \qquad \text{og} \qquad \langle\, p_x \,\rangle_t = -m\omega a \sin \omega t.$$

Vi ser at disse forventningsverdiene oppfører seg akkurat som koordinatene x og p_x for en klassisk oscillasjon.

d. Ved å skrive sannsynlighetstettheten for begynnelsestilstanden (som er Gauss-fordelt med hensyn på punktet $x = a$) på formen

$$|\Psi(x,0)|^2 \;\propto\; e^{-(x-a)^2/(1/2\beta)},$$

og sammenligne med standardformen $\exp(-x^2/2\sigma^2)$, ser vi at usikkerheten i begynnelsestilstanden er gitt ved

$$2(\Delta x)_0^2 = 1/2\beta, \quad \text{dvs.} \qquad (\Delta x)_0 = \frac{1}{2\sqrt{\beta}}.$$

For oscillatorens grunntilstand er

$$|\psi_{n=0}(x)|^2 \;\propto\; e^{-x^2/(\hbar/m\omega)},$$

og vi kan tilsvarende lese ut at

$$2[(\Delta x)_{n=0}]^2 = \hbar/m\omega, \quad \text{dvs.} \qquad (\Delta x)_{n=0} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Forholdet mellom de to usikkerhetene blir da

$$\frac{(\Delta x)_0}{(\Delta x)_{n=0}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\beta\hbar}} = \frac{1}{10},$$

når vi setter inn den oppgitte verdien $\beta = 50m\omega/\hbar$. Begynnelsestilstanden er altså nokså hardt "skviset", med en utstrekning som er bare en tidel av utstrekningen til oscillatorens grunntilstand.

e. Fra definisjonen av usikkerhet har vi

$$(\Delta p_x)_0^2 = \langle\, (p_x - \langle\, p_x\,\rangle_0)^2\,\rangle_0 = \langle\, p_x^2\,\rangle_0, \qquad\qquad \text{idet } \langle\, p_x\,\rangle_0 = 0,$$

og

$$(\Delta x)_0^2 = \langle\, (x - \langle\, x\,\rangle_0)^2\,\rangle_0 = \langle\, x^2\,\rangle_0 - 2\langle\, x\,\rangle_0\langle\, x\,\rangle_0 + \langle\, x\,\rangle_0^2 = \langle\, x^2\,\rangle_0 - a^2.$$

Med den oppgitte sammenhengen $(\Delta p_x)_0 = \frac{1}{2}\hbar/(\Delta x)_0$ (for den Gaussiske begynnelsestilstanden $\Psi(x,0)$] finner vi da

$$\begin{aligned}
\langle\, K\,\rangle_0 \;&=\; \frac{\langle\, p_x^2\,\rangle_0}{2m} = \frac{(\Delta p_x)_0^2}{2m} = \frac{\hbar^2/4}{2m(\Delta x)_0^2} \\
&=\; \frac{\hbar^2/4}{2m(\Delta x)_{n=0}^2}\cdot 100 = 25\hbar\omega,
\end{aligned}$$

(som er 100 ganger større enn for oscillatorens grunntilstand).

Da $\langle\, x\,\rangle_0 = a$ og usikkerheten $(\Delta x)_0$ er så liten, er det vel opplagt at $\langle\, V\,\rangle_0$ må bli tilnærmet lik verdien av potensialet i punktet $x = a$, som er $V(a) = \frac{1}{2}m\omega^2a^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega$. Dette er lett å kontrollere:

$$\begin{aligned}
\langle\, V\,\rangle_0 \;&=\; \tfrac{1}{2}m\omega^2\langle\, x^2\,\rangle_0 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega = \tfrac{1}{2}m\omega^2[a^2 + (\Delta x)_0^2] - \tfrac{1}{2}\hbar\omega \\
&=\; \tfrac{1}{2}m\omega^2a^2 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega + \tfrac{1}{2}m\omega^2\cdot\frac{\hbar}{2m\omega}\cdot 100.
\end{aligned}$$

Her er det siste leddet, $\hbar\omega/400$ neglisjerbart, så vi har ganske riktig at

$$\langle\, V\,\rangle_0 \approx V(a) = \tfrac{1}{2}m\omega^2a^2 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega.$$

f. At energien er en bevegelseskonstant viser vi slik:

$$\frac{d}{dt}\langle\, E\,\rangle_t = \frac{i}{\hbar}\langle\, [\hat{H},\hat{H}]\,\rangle_t + \langle\, \frac{\partial \hat{H}}{\partial t}\,\rangle_t = 0, \qquad \Longrightarrow \qquad \langle\, E\,\rangle_t = \langle\, E\,\rangle_0 = \text{konstant}.$$

Med $a^2 = 22\hbar/m\omega$ blir

$$\langle\, E\,\rangle_0 = \langle\, K+V\,\rangle_0 = 25\hbar\omega + \tfrac{1}{2}m\omega^2\cdot 22\frac{\hbar}{m\omega} - \tfrac{1}{2}\hbar\omega = 36\hbar\omega - \tfrac{1}{2}\hbar\omega.$$

En skarpt definert energi med denne verdien ville svare til vendepunktene $x = \pm b$, gitt ved

$$V(b) = \langle\, E\,\rangle_0, \quad \text{dvs.} \qquad \tfrac{1}{2}m\omega^2 b^2 - \tfrac{1}{2}\hbar\omega = 36\hbar\omega - \tfrac{1}{2}\hbar\omega \qquad \Longrightarrow$$

$$b = \sqrt{72\hbar/m\omega} = 12\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = 12(\Delta x)_{n=0} = 120(\Delta x)_0.$$

Vi ser at avstanden b ut til disse "vendepunktene" er vesentlig større enn usikkerheten $(\Delta x)_{n=0}$ for oscillatorens grunntilstand, som på en måte er den naturlige lengdeskalaen for oscillatoren. Vider$b$ 120 ganger større enn usikkerheten i begynnelsestilstanden, som var liten i forhold til den nevnte lengdeskalaen.

g. For $t = NT = N\cdot 2\pi/\omega$ har vi

$$e^{-iE_nt/\hbar} = e^{-in\hbar\omega\cdot N\cdot 2\pi/\omega\hbar} = (e^{-2i\pi})^{nN} = 1,$$

slik at

$$\Psi(x,NT) = \sum_{n=0} c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar} = \sum c_n\psi_n(x) = \Psi(x,0), \quad \text{q.e.d.}$$

For $t > 0$ er det til å begynne med ingen ting som kan hindre "kvantevillskapen" i å gi en økende Δx. Men siden vi her har en harmonisk oscillator, ligger det i sakens natur at også fordelingen mellom kinetisk og potensiell energi, og dermed også Δx, vil oscillere. Det kan faktisk vises at $\langle\, V\,\rangle_{max}$ (ved $t = T/4$) er lik $\langle\, K\,\rangle_0$. Når $\langle\, V\,\rangle$ er på sitt maksimale er det rimelig at også Δx er det, og det er ikke urimelig å anta at $(\Delta x)_{max}$ er av samme størrelsesorden som avstanden ut til det klassiske vendepunktet for en energi $\langle\, E\,\rangle$, som vi ovenfor regnet ut til $12(\Delta x)_{n=0}$.

Oppgave 3

a. (i) Ifølge et av grunnpostulatene i kvantemekanikk er de mulige målte verdiene av observabelen F gitt ved spektret av egenverdier: $\{f_n\}$.
(ii) *Sannsynlighetsamplituden* for å måle egenverdien f_n ("eller for å finne the systemet i tilstanden $|n\rangle$") er gitt ved "$|n\rangle$"-komponenten av $|\psi\rangle$, eller projeksjonen av $|\psi\rangle$ på $|n\rangle$:

$$A_n = \langle n|\psi\rangle,$$

og *sannsynligheten* for å måle f_n er

$$P_n = |A_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2.$$

(iii) Ifølge et annet postulat, vil en måling som gir $F = f_7$ generelt endre tilstanden for systemet, ved at den etterlater det i tilstanden $|7\rangle$. En ny måling umiddelbart etter den første målingen vil da gi samme måleverdi f_7.

b. Ved innsetting finner vi

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}\chi_{\hat{\mathbf{n}}} &= \tfrac{1}{2}\hbar(\sigma_x \sin\theta + \sigma_z \cos\theta) = \tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix} \\
&= \tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\frac{1}{2}\theta + \sin\theta\sin\frac{1}{2}\theta \\ \sin\theta\cos\frac{1}{2}\theta - \cos\theta\sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} \cos(\theta - \frac{1}{2}\theta) \\ \sin(\theta - \frac{1}{2}\theta) \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} \cos\frac{1}{2}\theta \\ \sin\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Spinoren $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$ er altså en egentilstand til $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ med egenverdi $\frac{1}{2}\hbar$.

c. De mulige måleresultatene for S_z er egenverdiene $\pm\frac{1}{2}\hbar$, som svarer til egentilstandene $\chi_{\hat{\mathbf{z}}}$ og $\chi_{-\hat{\mathbf{z}}}$. Sannsynlighets*amplituden* for å måle $S_z = \frac{1}{2}\hbar$ er projeksjonen av $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$ på $\chi_{\hat{\mathbf{z}}}$,

$$A_+ = \chi_{\hat{\mathbf{z}}}^\dagger \chi_{\hat{\mathbf{n}}} = \cos\tfrac{1}{2}\theta,$$

og sannsynligheten er

$$P_+ = |A_+|^2 = \cos^2\tfrac{1}{2}\theta.$$

Tilsvarende finner vi sannsynligheten

$$P_- = |\chi_{-\hat{\mathbf{z}}}^\dagger \chi_{\hat{\mathbf{n}}}|^2 = \sin^2\tfrac{1}{2}\theta$$

for å måle $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$. En måling som gir $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$ vil etterlate systemet i tilstanden $\chi_{\hat{\mathbf{z}}}$ (osv).

d. De 1000 spinnene er i utgangspunktet i tilstanden $\chi_{\hat{\mathbf{n}}}$. Ved den første målingen venter vi da å finne $S_z = \frac{1}{2}\hbar$ for et antall gitt ved $1000\,P_+ = 1000\,\cos^2\frac{1}{2}\theta$. Disse etterlates i tilstanden $\chi_{\hat{\mathbf{z}}}$. For hvert av disse spinnene er sannsynligheten for at andre måling skal gi $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{2}\hbar$ gitt ved $|\chi_{\hat{\mathbf{n}}}^\dagger \chi_{\hat{\mathbf{z}}}|^2 = \cos^2\frac{1}{2}\theta$, slik at det forventede antallet blir

$$1000\,\cos^2\tfrac{1}{2}\theta \cdot \cos^2\tfrac{1}{2}\theta.$$

Den første målingen kan også gi $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$, og det forventede antallet med dette resultatet er $1000\,P_- = 1000\,\sin^2\frac{1}{2}\theta$. For hvert av *disse* spinnene er sannsynligheten for at andre måling gir $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{2}\hbar$ gitt ved $|\chi_{\hat{\mathbf{n}}}^\dagger \chi_{-\hat{\mathbf{z}}}|^2 = \sin^2\frac{1}{2}\theta$, slik at det forventede antallet blir

$$1000\,\sin^2\tfrac{1}{2}\theta \cdot \sin^2\tfrac{1}{2}\theta.$$

Totalt er altså det forventede antallet som gir $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}} = \frac{1}{2}\hbar$ ved andre måling gitt ved

$$N_+ = 1000\left[\left(\frac{1+\cos\theta}{2}\right)^2 + \left(\frac{1-\cos\theta}{2}\right)^2\right] = 500(1+\cos^2\theta).$$

For $\theta = 0$ fås $N_+ = 1000$. Dette er rimelig, fordi $\theta = 0$ svarer til $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{z}}$, slik at det er snakk om to målinger av S_z for 100 spinn som i utgangspunktet er i tilstanden $\chi_{\hat{\mathbf{z}}}$.