Løsning til øving 6 for FY1004, høsten 2007

a) Vis at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-x^2} = \sqrt{\pi} \; .$$

Hint: Bruk at

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-x^2} \right)^2 = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-x^2} \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \; \mathrm{e}^{-y^2} \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \; \mathrm{e}^{-(x^2+y^2)} \; ,$$

og beregn dobbeltintegralet ved å transformere til polarkoordinater i planet.

Polarkoordinatene (r, φ) i planet er gitt ved at $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$. Det gir at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \; \mathrm{e}^{-(x^2+y^2)} = \int_{0}^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}r \; r\mathrm{e}^{-r^2} = 2\pi \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}r \; r\mathrm{e}^{-r^2} = -\pi\mathrm{e}^{-r^2}\big|_0^{\infty} = \pi \; .$$

Det kan også vises at for en vilkårlig reell konstant a er

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-(x+\mathrm{i}a)^2} = \sqrt{\pi} \; .$$

Her er beviset. Funksjonen $f(z) = \mathrm{e}^{-z^2}$ er en analytisk funksjon av z i hele det komplekse planet. Da er integralet av den rundt en vilkårlig lukket kurve C lik null,

$$\oint_C \mathrm{d}z \; \mathrm{e}^{-z^2} = 0 \; .$$

Nå velger vi den lukkede kurven C som et rektangel. Først integrerer vi langs den reelle aksen, med $z = x$ og x reell, det gir et bidrag til kurveintegralet som er lik

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-x^2} = \sqrt{\pi} \; .$$

Dernest integrerer vi parallelt med den imaginære aksen, fra $z = +\infty$ (dvs. z reell og vilkårlig stor) til $z = +\infty + \mathrm{i}a$, det gir null bidrag til kurveintegralet, fordi integranden e^{-z^2} er null (mer presist: $\mathrm{e}^{-z^2} \to 0$ når $z = x + \mathrm{i}y$, x og y er reelle, $0 \le y \le a$ eller $0 \ge y \ge a$, og $x \to \infty$). Videre integrerer vi over en uendelig lang rett linje parallelt med den reelle aksen, fra $z = \infty + \mathrm{i}a$ til $z = -\infty + \mathrm{i}a$, det gir et bidrag til kurveintegralet som er lik

$$\int_{\infty}^{-\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-(x+\mathrm{i}a)^2} = -\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-(x+\mathrm{i}a)^2} \; .$$

Til slutt integrerer vi parallelt med den imaginære aksen, fra $z = -\infty + \mathrm{i}a$ og tilbake til utgangspunktet $z = -\infty$, det gir også null bidrag til kurveintegralet, fordi integranden er null. Alt i alt gir det at

$$\sqrt{\pi} - \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-(x+\mathrm{i}a)^2} = 0 \; .$$

b) En partikkel har masse m og beveger seg i en dimensjon, slik at posisjonen er gitt ved en koordinat x. Bølgefunksjonen $\psi(x)$ tolkes slik at $|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x$ er den infinitesimale sannsynligheten for å finne partikkelen mellom x og $x+\mathrm{d}x$.

I det følgende setter vi

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma}\,\sqrt[4]{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}\ , \tag{1}$$

der σ er en positiv konstant. Vis at den totale sannsynligheten er lik 1, dvs. at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,|\psi(x)|^2 = 1.$$

Beregn forventningsverdien av x, definert som

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,x\,|\psi(x)|^2\ ,$$

og variansen av x, definert som

$$\mathrm{var}(x) = \langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\ .$$

Vi definerer usikkerheten i x, Δx, ved at $\mathrm{var}(x) = (\Delta x)^2$.

Normeringsintegralet er

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\ .$$

Vi innfører en ny integrasjonsvariabel $u = x/(\sqrt{2}\,\sigma)$, og får at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}u\,\mathrm{e}^{-u^2} = 1\ .$$

Forventningsverdien av x er

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,x\,|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,x\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = -\frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0\ .$$

At integralet er null, kan vi se uten å regne det ut, fordi integranden er antisymmetrisk om $x=0$, slik at bidragene fra negative og positive verdier av x summeres til null.

Variansen av x er, når $\langle x\rangle = 0$,

$$\mathrm{var}(x) = \langle x^2\rangle = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,x^2\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\ .$$

Dette integralet kan løses ved delvis integrasjon (la $f(x) = x$, $g(x) = x\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$, deriver $f(x)$ og integrer $g(x)$). Men en enklere metode er følgende. La $\lambda > 0$, og definer

$$F(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}u\,\mathrm{e}^{-u^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\lambda}}\ .$$

Den deriverte med hensyn på λ er da

$$F'(\lambda) = -\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,x^2\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2\lambda^{\frac{3}{2}}}\ .$$

Følgelig er

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\,x^2\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = \frac{\sqrt{\pi}(2\sigma^2)^{\frac{3}{2}}}{2} = \sqrt{2\pi}\,\sigma^3\ ,$$

og

$$\mathrm{var}(x) = \sigma^2\ .$$

c) Den Fourier-transformerte bølgefunksjonen

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \psi(x)$$

er en funksjon av bølgetallet k. Når vi setter inn $\psi(x)$ fra ligning (1), får vi at

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma}\,\sqrt[4]{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx - \frac{x^2}{4\sigma^2}} \; .$$

Vi kan løse integralet ved hjelp av formlene fra punkt a), og ved hjelp av følgende omskriving av eksponenten:

$$-\mathrm{i}kx - \frac{x^2}{4\sigma^2} = -\frac{1}{4\sigma^2}\,(x + 2\mathrm{i}\sigma^2 k)^2 - \sigma^2 k^2 \; .$$

Vis at det gir

$$\phi(k) = \frac{\sqrt{2\sigma}}{\sqrt[4]{2\pi}} \; \mathrm{e}^{-\sigma^2 k^2} \; .$$

Kontroller at formelen for den inverse Fourier-transformasjonen stemmer, nemlig at

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \phi(k) \; .$$

Vi har at

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma}\,\sqrt[4]{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-\frac{1}{4\sigma^2}\,(x+2\mathrm{i}\sigma^2 k)^2} \; \mathrm{e}^{-\sigma^2 k^2} \; .$$

Her setter vi inn $u = x/(2\sigma)$, og får at

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma}\,\sqrt[4]{2\pi}} \, \mathrm{e}^{-\sigma^2 k^2} \, 2\sigma \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}u \; \mathrm{e}^{-(u+\mathrm{i}\sigma k)^2} = \frac{\sqrt{2\sigma}}{\sqrt[4]{2\pi}} \, \mathrm{e}^{-\sigma^2 k^2} \; .$$

Den inverse Fourier-transformasjonen ser da slik ut:

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2\sigma}}{\sqrt[4]{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx - \sigma^2 k^2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2\sigma}}{\sqrt[4]{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; \mathrm{e}^{-(\sigma k - \mathrm{i}\,\frac{x}{2\sigma})^2} \; \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \; .
\end{aligned}$$

Her setter vi inn $v = \sigma k$, og får tilbake den bølgefunksjonen vi startet med,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{2\sigma}}{\sqrt[4]{2\pi}} \, \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \, \frac{1}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v \; \mathrm{e}^{-(v - \mathrm{i}\,\frac{x}{2\sigma})^2} = \frac{1}{\sqrt{\sigma}\,\sqrt[4]{2\pi}} \, \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} \; .$$

d) Vis at

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; |\phi(k)|^2 = 1.$$

Vi tolker $|\phi(k)|^2 \,\mathrm{d}k$ som sannsynligheten for at bølgetallet er mellom k og $k + \mathrm{d}k$.

Beregn forventningsverdien av k, definert som

$$\langle k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; k \, |\phi(k)|^2 \; ,$$

og variansen av k, definert som

$$\mathrm{var}(k) = \langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2 \; .$$

Vi definerer usikkerheten i k, Δk ved at $\mathrm{var}(k) = (\Delta k)^2$.

Normeringsintegralet for $\phi(k)$ er

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; |\phi(k)|^2 = \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; \mathrm{e}^{-2\sigma^2 k^2} = \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \, \frac{1}{\sqrt{2}\,\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v \; \mathrm{e}^{-v^2} = 1 \; ,$$

når vi bytter integrasjonsvariabel fra k til $v = \sqrt{2}\,\sigma k$.

Forventningsverdien av k er null, fordi vi får et antisymmetrisk integral,

$$\langle k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; k \, |\phi(k)|^2 = \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; k \, \mathrm{e}^{-2\sigma^2 k^2} = 0 \; .$$

Og variansen av k er, idet $\langle k \rangle = 0$,

$$\mathrm{var}(k) = \langle k^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; k^2 \, |\phi(k)|^2 = \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; k^2 \, \mathrm{e}^{-2\sigma^2 k^2} = \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \, \frac{\sqrt{\pi}}{2(2\sigma^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{4\sigma^2} \; .$$

e) Beregn $\Delta x \, \Delta k$.

Impulsen til partikkelen er $p = \hbar k$, i følge deBroglie. Beregn $\Delta x \, \Delta p$, og sammenlign med Heisenbergs usikkerhetsrelasjon,

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \; .$$

Kommentar?

Vi har at

$$\Delta x = \sigma \; , \quad \Delta k = \frac{1}{2\sigma} \; , \quad \Delta p = \hbar \, \Delta k = \frac{\hbar}{2\sigma} \; , \quad \Delta x \, \Delta k = \frac{1}{2} \; , \quad \Delta x \, \Delta p = \frac{\hbar}{2} \; .$$

For en slik Gaussisk bølgefunksjon er Heisenbergs usikkerhetsrelasjon oppfylt ikke som en ulikhet, men som en likhet.

Dette er altså en bølgefunksjon med minimum usikkerhet. Det vil si at den har minimal Δp for en gitt Δx, eller omvendt, den har minimal Δx for en gitt Δp.