Øving 8 for FY1004, høsten 2007

Vi tar for oss en partikkel med masse m i en endimensjonal boks med lengde L. Vi lar x betegne avstanden fra den ene veggen i boksen. Veggene i boksen er uendelig høye potensialbarrierer, slik at bølgefunksjonen er null utenfor boksen. Innenfor boksen, dvs. for $0 < x < L$, gjelder den stasjonære (tidsuavhengige) Schrödingerligningen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi \;, \tag{1}$$

der E er energien. Kontinuitet av bølgefunksjonen $\psi = \psi(x)$ ved $x = 0$ og $x = L$ gir de to randkravene at

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \;. \tag{2}$$

Løsningene av differensialligningen (1) med randkravene (2) er de stasjonære tilstandene (energiegentilstandene)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\!\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \qquad \text{for} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \;, \tag{3}$$

med de tilhørende energiene (energiegenverdiene)

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m} = n^2 E_1 \;. \tag{4}$$

Tolkningen av en bølgefunksjon ψ er at $|\psi(x)|^2$ er sannsynlighetstettheten for posisjonen x, det vil si at $|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x$ er (den infinitesimale) sannsynligheten for at partikkelen befinner seg mellom x og $x + \mathrm{d}x$. Den totale sannsynligheten for at partikkelen befinner seg innenfor boksen er lik 1, det vil si at vi bør normere bølgefunksjonen ψ slik at

$$\int_0^L \mathrm{d}x\; |\psi(x)|^2 = 1 \;.$$

Merk at den stasjonære Schrödingerligningen (1) er reell: den inneholder ikke den imaginære enheten $\mathrm{i} = \sqrt{-1}$. Derfor er det mulig å velge alle energientilstandene ψ_n til å være reelle, som i ligning (3). Men hvis vi skulle ønske det, står det oss fritt å gjøre en reell bølgefunksjon kompleks ved å multiplisere den med en kompleks fasefaktor (et komplekst tall c med $|c| = 1$). En ekstra fasefaktor forandrer ikke normeringen.

a) Vis at energiegenfunksjonen ψ_n gitt i ligning (3) er korrekt normert, altså at

$$\int_0^L \mathrm{d}x\; |\psi_n(x)|^2 = 1 \;.$$

Vis også at energiegenfunksjonene ψ_j og ψ_n med $j \neq n$ er *ortogonale*, det vil si at

$$\int_0^L \mathrm{d}x\; \psi_j^*\,\psi_n = \int_0^L \mathrm{d}x\; (\psi_j(x))^*\,\psi_n(x) = 0 \;.$$

Hint: Du kan for eksempel bruke de trigonometriske identitetene

$$\cos(u \pm v) = \cos u\,\cos v \mp \sin u\,\sin v \;, \qquad \sin(u \pm v) = \sin u\,\cos v \pm \cos u\,\sin v \;,$$

som gir, blant annet, at

$$\sin u \, \sin v = \frac{\cos(u-v) - \cos(u+v)}{2} \; .$$

Eller du kan bruke at

$$\cos u = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}u} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}u}}{2} \; , \qquad \sin u = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}u} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}u}}{2\mathrm{i}} \; ,$$

og omforme et produkt av trigonometriske funksjoner til en sum av komplekse eksponensialfunksjoner.

c) Den mest generelle tidsavhenginge bølgefunksjonen for partikkelen i boksen er

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \, \psi_n(x) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n t} \; , \tag{5}$$

der

$$\omega_n = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{2m} = n^2 \omega_1 \; ,$$

og der koeffisientene $a_1, a_2, \ldots, a_n, \ldots$ er komplekse tall som oppfyller normeringskravet

$$\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = 1 \; .$$

Vis at $\Psi(x,t)$ er normert til ethvert tidspunkt t, det vil si at

$$\int_0^L \mathrm{d}x \; |\Psi(x,t)|^2 = 1 \; .$$

d) Anta at $a_3 = a_4 = \ldots = 0$ i lineærkombinasjonen (5), slik at

$$\Psi(x,t) = a_1 \, \psi_1(x) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t} + a_2 \, \psi_2(x) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t} \; ,$$

med $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$. Beregn forventningsverdien av posisjonen x, definert som

$$\langle x \rangle = \int_0^L \mathrm{d}x \; x \; |\Psi(x,t)|^2 \; .$$

Beregn også forventningsverdien av x^2,

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^L \mathrm{d}x \; x^2 \; |\Psi(x,t)|^2 \; ,$$

og variansen av x,

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

For hvilke verdier av de komplekse koeffisientene a_1 og a_2 er forventningsverdien og variansen av x tidsuavhengige?

e) Impulsen til partikkelen, i en dimensjon, representeres i kvantemekanikken ved derivasjonsoperatoren

$$p = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x} = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x} \ .$$

La $\Psi(x,t)$ være den samme tidsavhengige bølgefunksjonen som ovenfor, under punkt d), og beregn forventningsverdien av impulsen p, definert som

$$\langle p \rangle = \int_0^L \mathrm{d}x \ \Psi^* \, p \, \Psi = \int_0^L \mathrm{d}x \ \left(\Psi(x,t)\right)^* \left(-\mathrm{i}\hbar \, \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}\right) .$$

Beregn også forventningsverdien av p^2,

$$\langle p^2 \rangle = \int_0^L \mathrm{d}x \ \Psi^* \, p^2 \, \Psi = \int_0^L \mathrm{d}x \ \left(\Psi(x,t)\right)^* \left((-\mathrm{i}\hbar)^2 \, \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}\right) ,$$

og variansen av p,

$$\mathrm{var}(p) = \left\langle \left(p - \langle p \rangle\right)^2 \right\rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \ .$$

For hvilke verdier av de komplekse koeffisientene a_1 og a_2 er forventningsverdien og variansen av p tidsuavhengige?