Kwantummechanica Donderdag, 6 oktober 2016

OPGAVEN SET HOOFDSTUK 3 - OPLOSSINGEN

ALGEMENE VRAGEN

Opgave 1: De golffunctie $\Psi(x,t)$ voor de laagste energietoestand van een eenvoudige harmonische oscillator, bestaande uit een deeltje met massa m waarop een lineaire herstelkracht met krachtconstante C werkt, kan worden geschreven als

$$\Psi(x,t) = Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}, \tag{1}$$

waarbij de reëele constante A elke waarde kan aannemen. Verifieer dat deze uitdrukking een oplossing is van de Schrodingervergelijking voor de betreffende potentiaal ($V(x,t) = V(x) = Cx^2/2$).

Oplossing: We onderzoeken of vergelijking (1) een oplossing is, door hem in te vullen in de Schrödingervergelijking en te controleren of hij hieraan voldoet. De Schrödingervergelijking luidt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}. \tag{2}$$

Allereerst bepalen we de relevante partiële afgeleiden.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x} &= -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}x\Psi(x,t), \\
\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} &= -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}\Psi(x,t) + \frac{Cmx^2}{\hbar^2}\Psi(x,t), \\
\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} &= -\frac{i}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi(x,t).
\end{aligned} \tag{3}$$

Invullen in de Schrödingervergelijking levert

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}\Psi(x,t) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{Cmx^2}{\hbar^2}\Psi(x,t) + \frac{Cx^2}{2}\Psi(x,t) = -i\hbar\frac{i}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}\Psi(x,t). \tag{4}$$

We kunnen nu overal $\Psi(x,t)$ wegstrepen. We vinden dan

$$+\frac{\hbar}{2m}\sqrt{Cm} - \frac{Cx^2}{2} + \frac{Cx^2}{2} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{C}{m}} \tag{5}$$

en het is duidelijk dat vergelijking (1) een oplossing van de Schrödingervergelijking is.

Opgave 2: Bewijs dat $\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$ reëel is, en enkel positief of nul kan zijn.

Oplossing: Hiertoe schrijven we de golffunctie als

$$\Psi(x,t) = a(x,t) + ib(x,t), \tag{6}$$

met $a(x,t)$ het reële deel en $b(x,t)$ het imaginaire deel van de golffunctie. Voor de complex geconjugeerde golffunctie geldt dan

$$\Psi^*(x,t) = a(x,t) - ib(x,t), \tag{7}$$

Het product $\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$ kan geschreven worden als

$$\Psi(x,t)^*\Psi(x,t) = (a(x,t) - ib(x,t))\,(a(x,t) + ib(x,t)) = a^2(x,t) + b^2(x,t) \geq 0. \tag{8}$$

Opgave 3: Bereken de waarschijnlijkheidsdichtheid voor de eenvoudige harmonische oscillator in de laagste energietoestand met behulp van de golffunctie gegeven in opgave 1.

Oplossing: De waarschijnlijkheidsdichtheid wordt gegeven door de uitdrukking $\Psi(x,t)^*\Psi(x,t)$ en indien we de golffunctie gegeven in vergelijking (1) gebruiken, vinden we

$$\Psi(x,t)^*\Psi(x,t) = \left(Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}e^{+(i/2)\sqrt{C/m}t}\right)\left(Ae^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}\right). \tag{9}$$

De complexe exponenten (het fasedeel) vallen weg en we houden over

$$\Psi(x,t)^*\Psi(x,t) = A^2e^{-ax^2} \quad \text{met} \quad a = \frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}. \tag{10}$$

Opgave 4: Evalueer de voorspellingen van de klassieke fysica voor de waarschijnlijkheidsdichtheid van een eenvoudige harmonische oscillator in opgave 3 en vergelijk het resultaat met dat gevonden in opgave 3.

Oplossing: In de klassieke fysica hebben we te maken met een deeltje, dat zich als het ware in een paraboolvormige kom bevindt. Klassiek komt de laagste energietoestand overeen met de situatie dat het deeltje zich in rust op positie $x = 0$ bevindt. Uiteraard is dat in strijd met de onzekerheidsrelatie en vinden we in de kwantummechanica derhalve een nulpuntsenergie. We zullen in het volgende de situatie met klassieke fysica beschrijven.

Het klassieke deeltje is onderhevig aan een kracht die evenredig is met de verplaatsing van de evenwichttoestand en gericht is naar $x = 0$. De oscillator heeft een potentiële energie,

$$V(x) = \frac{C}{2}x^2, \tag{11}$$

zodat het deeltje een kracht

$$F = -\frac{dV}{dx} = -Cx \tag{12}$$

ervaart, met C de zogenaamde veerconstante. Door gebruik te maken van de tweede wet van Newton, vinden we de differentiaalvergelijking

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -Cx. \tag{13}$$

Deze vergelijking heeft als oplossing (controleer dat maar door invullen)

$$x(t) = A\cos(\omega_0 t + \phi), \tag{14}$$

waarbij A de amplitude, ϕ de fasehoek en $\omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}}$ de hoekfrequentie zijn. We kunnen de snelheid van het klassieke deeltje vinden door de afgeleide te nemen en dat levert

$$v(t) = \frac{dx}{dt} = -\omega_0 A\sin(\omega_0 t + \phi). \tag{15}$$

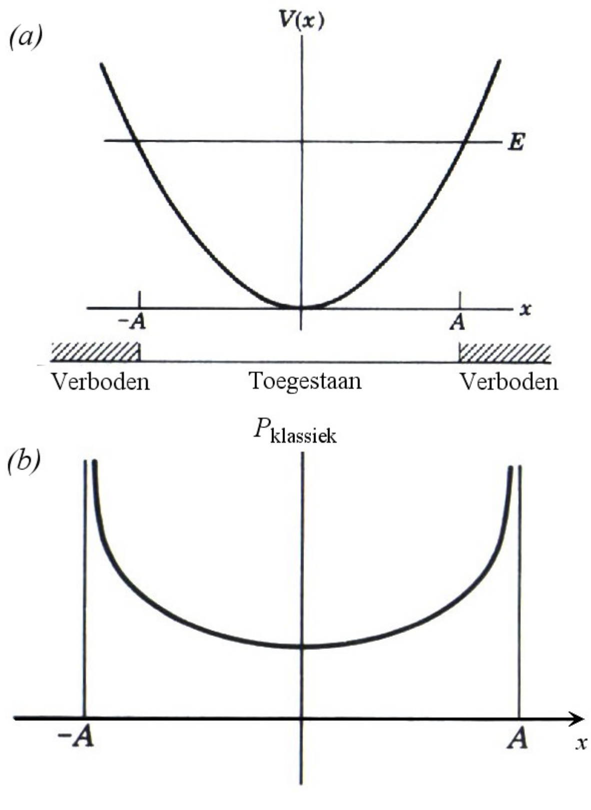
De uitdrukkingen voor x en v komen voor in de formule voor de totale energie en produceren een bewegingconstante.

$$\begin{aligned} E &= K + V = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}Cx^2 \\ &= \frac{m}{2}\omega_0^2 A^2 \sin^2(\omega_0 t + \phi) + \frac{C}{2}A^2\cos^2(\omega_0 t + \phi) \\ &= \frac{C}{2}A^2. \end{aligned} \tag{16}$$

Dit resultaat kan geherschikt worden, zodat we v als functie van x krijgen,

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{C}{2}x^2\right)} = \sqrt{\frac{C}{m}(A^2 - x^2)}. \tag{17}$$

Het is duidelijk dat x^2 niet groter kan zijn dan A^2, anders kan v niet de fysische snelheid van het klassieke deeltje voorstellen.



Figuur 1: *Potentiële energie voor een harmonische oscillator (figuur (a)) en klassieke waarschijnlijkheidsdichtheid (figuur (b)).*

We kunnen ons het klassieke beeld voorstellen met behulp van figuur 1. De bovenste figuur toont de potentiële energie $V(x)$ samen met een gekozen waarde voor de constante totale energie E. We merken op dat een dergelijke willekeurige keuze toegestaan is in de klassieke fysica. De figuur toont dat

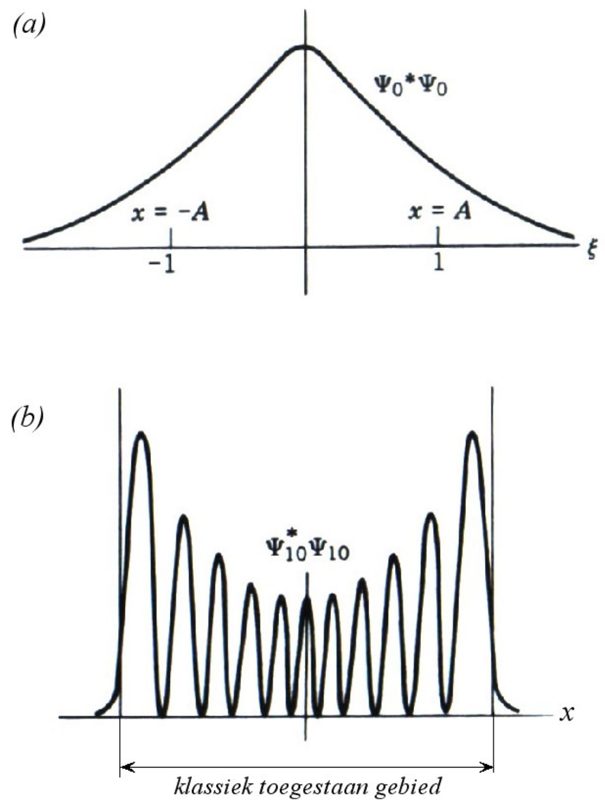
$$V(x) = E \quad \text{voor} \quad x = \pm A = \pm\sqrt{\frac{2E}{C}} \tag{18}$$

en klassieke beweging is verboden voor $|x| > A$.

Indien x in het toegestane gebied $[-A, A]$ is, kan een klassieke waarschijnlijkheidsdichtheid worden gedefinieerd, die tot uitdrukking brengt wat de kans is om het deeltje in een specifiek interval dx aan te treffen. De corresponderende waarschijnlijkheid $P_{\text{klassiek}}(x)dx$ moet omgekeerd evenredig zijn met de snelheid in het gegeven interval. We vinden

$$P_{\text{klassiek}}(x)dx = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}} \tag{19}$$

en merken op dat de totale waarschijnlijkheid gelijk aan 1 dient te zijn. Deze waarschijnlijkheidsverdeling is getekend in figuur 1. Ter vergelijking tonen we in figuur 2 de kwantummechanische waarschijnlijkheidsdichtheid gegeven door de golffunctie (1). In figuur 2 zien we dat de kwantum-



Figuur 2: *Waarschijnlijkheidsdichtheid voor de grondtoestand van een kwantummechanische harmonische oscillator (figuur (a)) en waarschijnlijkheidsdichtheid voor de $n = 10$ toestand van de harmonische oscillator (figuur (b)).*

mechanische waarschijnlijkheidsdichtheid voor de grondtoestand van een harmonische oscillator een maximum heeft bij $x = 0$, terwijl de klassieke waarschijnlijkheidsdichtheid daar juist een minimum heeft. Verder zien we dat de kwantummechanische waarschijnlijkheidsdichtheid voor de $n = 10$ toestand van de harmonische oscillator een gemiddelde verdeling heeft, die overeen lijkt te komen met die van de klassieke harmonische oscillator gegeven in figuur 1b.

Opgave 5: Normaliseer de golffunctie van opgave 1 door de waarde van de willekeurige constante A te bepalen, zodanig dat de totale waarschijnlijkheid het deeltje ergens aan te treffen gelijk wordt aan een.

Oplossing: We normeren de golffunctie door de totale waarschijnlijkheid op 1 te stellen,

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1. \tag{20}$$

De waarschijnlijkheidsdichtheid is uitgerekend in opgave 3 en we vinden

$$\Psi(x,t)^*\Psi(x,t) = A^2 e^{-ax^2} \quad \text{met} \quad a = \frac{\sqrt{Cm}}{\hbar}. \tag{21}$$

Derhalve dienen we de volgende integraal te bepalen,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t)^*\Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-ax^2} dx = 1. \tag{22}$$

Teneinde de normalisatie te bepalen, definiëren we de grootheid

$$J = \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx \tag{23}$$

en evalueren het kwadraat van J als een oppervlakte integraal,

$$J^2 = \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx \cdot \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy = \int \int_{\text{eerste kwadrant}} e^{-(x^2+y^2)} dx dy. \tag{24}$$

We transformeren de integratie variabelen naar poolcoördinaten en verkrijgen

$$J^2 = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr = \frac{\pi}{2} \left| \frac{e^{-r^2}}{-2} \right|_0^{\infty} = \frac{\pi}{4}. \tag{25}$$

Het resultaat is

$$J = \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \tag{26}$$

We kunnen onze originele integraal herschrijven als

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-ax^2} dx = 1 \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{A^2}. \tag{27}$$

Vervolgens herdefiniëren we de variabele x door gebruik te maken van $c^2 = a$ en dus $c = \sqrt{a}$. We vinden

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2x^2} dx = \frac{1}{A^2} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} e^{-c^2x^2} dcx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{a}}{A^2}. \tag{28}$$

Tenslotte merken we op dat de integrand een even functie is en schrijven

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = 2\int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{a}}{A^2} = 2J. \tag{29}$$

Gebruikmakend van vergelijking (26) vinden we

$$\frac{\sqrt{a}}{A^2} = 2J = \sqrt{\pi}. \tag{30}$$

We krijgen hiermee het eindresultaat

$$A^2 = \sqrt{\frac{a}{\pi}} = \sqrt[4]{\frac{Cm}{\hbar^2\pi^2}}. \tag{31}$$

Opgave 6: Bepaal de verwachtingswaarde $< x >$ voor een deeltje in de laagste energietoestand van een harmonische oscillator door gebruik te maken van de golffunctie en waarschijnlijkheidsdichtheid berekend in de vorige opgaven.

Oplossing: De verwachtingswaarde $< x >$ volgt uit

$$< x > = < \Psi|x|\Psi > = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) dx. \tag{32}$$

We zien direct dat het tijdafhankelijke deel wegvalt en schrijven met behulp van vergelijking (10)

$$< x > = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-ax^2} dx. \tag{33}$$

Het resultaat van deze integraal is gelijk aan nul, want we integreren over het product van een oneven (x) en een even (e^{-ax^2}) functie. Derhalve is $< x > = 0$.

Opgave 7: Beschouw een deeltje met mass m dat zich vrij kan bewegen langs de x-as tussen posities $x = -a/2$ en $x = +a/2$, maar waarbij het strikt verboden is dat het deeltje zich buiten dit interval bevindt. De golffunctie van het deeltje kan geschreven worden als $\Psi(x,t) = A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar}$ binnen het interval en is gelijk aan nul erbuiten. Bepaal de energie van de laagste energietoestand.

Oplossing: De opgave heeft betrekking op een deeltje in een oneindige rechthoekige put potentiaal. We hebben dit onderwerp besproken in paragraaf 3.3 van het dictaat (bladzijde 40 - 42). De golffunctie van de laagste energietoestand met $n = 1$ luidt

$$\Psi(x,t) = A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} \tag{34}$$

en de bijbehorende energie is gelijk aan

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \tag{35}$$

Opgave 8: Maak gebruik van de golffunctie uit opgave 7 en bereken de verwachtingswaarden voor x, p, x^2 en p^2.

Oplossing: Allereerst bepalen we de normering van de golffunctie. Hiertoe berekenen we de integraal

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) dx &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} A \cos \frac{\pi x}{a} e^{+iEt/\hbar} A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} dx \\
&= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} A^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx \\
&= \frac{A^2}{2} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left(1 + \cos \frac{2\pi x}{a}\right) dx \\
&= \frac{A^2}{2} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left(1 + \cos \frac{2\pi x}{a}\right) dx \\
&= \frac{A^2}{2} \left| x + \underbrace{\frac{a}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{a}}_{=0} \right|_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \\
&= \frac{aA^2}{2} = 1
\end{aligned} \tag{36}$$

en dus

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad \text{en} \quad A^2 = \frac{2}{a}. \tag{37}$$

De verwachtingswaarde van x wordt gegeven door de integraal

$$< x >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \frac{2}{a} x \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx. \tag{38}$$

Deze integraal is gelijk aan nul, omdat de integrand oneven is (product van oneven en even functies). We vinden dus $< x >= 0$.

De verwachtingswaarde van p kan slechts worden uitgerekend als we de impulsoperator kennen. Hiervoor geldt $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$. De verwachtingswaarde wordt gegeven door de integraal

$$< p >= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \frac{2}{a} \frac{\hbar}{i} \left(-\frac{\pi}{a}\right) \cos \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi x}{a} dx. \tag{39}$$

Deze integraal is ook gelijk aan nul, omdat de integrand weer oneven is (product van even en oneven functies). We vinden dus $< p >= 0$.

De verwachtingswaarde van x^2 is ongelijk aan nul en kan worden gevonden met behulp van een tabellenboek voor standaard integralen. We vinden

$$\begin{aligned} < x^2 > &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \frac{2}{a} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{2}{a} \frac{a^3}{\pi^3} \left(\frac{\pi^3}{24} - \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{a^2}{12\pi^2} \left(\pi^2 - 6\right). \end{aligned} \tag{40}$$

De berekening van $< p^2 >$ is eenvoudiger, omdat we de Schrödingervergelijking kunnen gebruiken. Er geldt

$$\begin{aligned} < p^2 > &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi dx \\ &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \Psi^* \left(2mi\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi dx = 2mE_1 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \Psi^* \Psi dx = 2mE_1. \end{aligned} \tag{41}$$

We kunnen de onzekerheden in x en p uitrekenen en vinden

$$(\Delta x)^2 =< x^2 > - < x >^2 = \frac{a^2}{\pi^2} \frac{\pi^2 - 6}{12} \tag{42}$$

en

$$(\Delta p)^2 =< p^2 > - < p >^2 = 2mE_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2}. \tag{43}$$

Het product van de onzekerheden wordt nu

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} \hbar \approx 0.57\hbar, \tag{44}$$

een resultaat dat iets groter is dan Heisenbergs ondergrens $\hbar/2$.