

Hemtal 2: Kvantmekanik

Senaste inlämningsdatum: 2011-03-23

1. En stråle av elektroner med kinetisk energi $E = 0.4 \text{ eV}$ infaller från $x < 0$ mot ett potentialsteg vid $x = 0$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 = 0.2 \text{ eV} & x > 0 \end{cases}$$

- (a) Bestäm transmissionskoefficienten, som ges av

$$T = \frac{|C|^2 v_{\text{trans}}}{|A|^2 v_{\text{ink}}}$$

där A är amplituden hos inkommande vågfunktion, C amplituden hos transmitterad vågfunktion, v_{ink} är hastighet hos inkommande elektroner, och v_{trans} hastigheten hos transmitterade elektroner.

- (b) Bestäm även transmissionskoefficienten hos protoner med samma energi.

2. Tillståndet hos en harmonisk oscillator ges vid tiden $t = 0$ av

$$\psi(x) = \frac{1}{2} \psi_0(x) + \frac{\sqrt{3}}{2} \psi_1(x)$$

där $\psi_0(x)$ är grundtillståndet och $\psi_1(x)$ är första exciterade tillståndet.

- (a) Vilka möjliga värden kan en mätning av energin i detta tillstånd ge och med vilka sannolikheter fås dessa värden?
(b) Bestäm väntevärdet och osäkerheten i energin vid $t = 0$.
(c) Bestäm väntevärdet hos positionen och rörelsemängden vid tiden t .
(d) Bestäm väntevärdet hos potentiella energin och kinetiska energin vid tiden t .

Att studera vidare: En sådan kvantmekanisk oscillator har nyligen tillverkats. Detta har utsetts till 2010 års viktigaste vetenskapliga genombrott. Läs om detta

<http://www.nature.com/nature/journal/v464/n7289/abs/nature08967.html>

http://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_machine

<http://www.sciencemag.org/content/330/6011/1604.full>

LÖSNINGSFÖRSLAG

1. Lösningen till Schrödinger-ekvationen är

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ik'x} & x > 0 \end{cases}$$

där

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V_0 \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Kontinuitetsvillkor:

$$A + B = C$$

$$kA - kB = k'C$$

$$\Rightarrow 2kA = (k + k')C \Rightarrow \frac{C}{A} = \frac{2}{1 + k'/k}$$

Hastigheten ges av $mv = p = \hbar k \Rightarrow v = \hbar k / m$

Transmissionskoefficienten är

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 \frac{v'}{v} = \frac{4}{(1 + k'/k)^2} \frac{k'}{k} = \frac{4}{(1 + \sqrt{E - V_0} / \sqrt{E})^2} \frac{\sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E}} = \frac{4\sqrt{1 - V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2}$$

Med $E = 4 \text{ eV}$, $V_0 = 2 \text{ eV}$ fås

$$T = \frac{4\sqrt{1 - 1/2}}{(1 + \sqrt{1 - 1/2})^2} = 0.97$$

Samma svar fås för protoner eftersom massan inte ingår i slututtrycket.

(2p)

2. Tillståndet är

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= c_0\psi_0(x,t) + c_1\psi_1(x,t) = \frac{1}{2}\psi_0(x)e^{iE_0t/\hbar} + \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_1(x)e^{iE_1t/\hbar} \\ \psi_0(x) &= \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-x^2/2a^2}, \quad \psi_1(x) = \left(\frac{1}{2a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \frac{2x}{a} e^{-x^2/2a^2} \\ E_0 &= \frac{1}{2}\hbar\omega, \quad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega, \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega}\end{aligned}$$

(a) En mätning av energin ger energieigenvärdet $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ med sannolikheten $|c_0|^2 = 1/4$, och $E_1 = (1 + \frac{1}{2})\hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\omega$ med sannolikheten $|c_1|^2 = 3/4$. Inga andra värden kan fås.

(2p)

(b)

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= |c_0|^2 E_0 + |c_1|^2 E_1 = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{3}{4} \cdot \frac{3}{2} \hbar\omega = \frac{5}{4} \hbar\omega \\ \langle E^2 \rangle &= |c_0|^2 E_0^2 + |c_1|^2 E_1^2 = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{4} (\hbar\omega)^2 + \frac{3}{4} \cdot \frac{9}{4} (\hbar\omega)^2 = \frac{7}{4} (\hbar\omega)^2 \\ \Delta E &= \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \sqrt{\frac{7}{4} - \left(\frac{5}{4}\right)^2} \hbar\omega = \frac{\sqrt{3}}{4} \hbar\omega\end{aligned}$$

(2p)

(c) Positionsväntevärdet vid tiden t:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x |c_0\psi_0(x,t) + c_1\psi_1(x,t)|^2 dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(xc_0^2\psi_0^2(x) + xc_1^2\psi_1^2(x) + c_0c_1x\psi_0(x)\psi_1(x) \underbrace{(e^{i(E_0-E_1)t/\hbar} + e^{-i(E_0-E_1)t/\hbar})}_{=2\cos\omega t} \right) dx\end{aligned}$$

De två första termerna ger noll eftersom integranderna är udda. Sista termen ger

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= 2c_0c_1 \cos\omega t \int_{-\infty}^{\infty} x\psi_0\psi_1 dx = \\ &= 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} \cos\omega t \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{1}{2a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} xe^{-x^2/2a^2} \frac{2x}{a} e^{-x^2/2a^2} dx = \\ &= \frac{\sqrt{3/2}}{\sqrt{\pi}} \cos\omega t \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{x}{a}\right)^2 e^{-x^2/a^2} dx\end{aligned}$$

Man ska undvika att integrera funktioner på denna form. Byt i stället till en dimensionslös integrationsvariabel:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \frac{\sqrt{3/2}}{\sqrt{\pi}} \cos\omega t \cdot a \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{x}{a}\right)^2 e^{-x^2/a^2} d\left(\frac{x}{a}\right) = \\ &= \frac{\sqrt{3/2}}{\sqrt{\pi}} \cos\omega t \cdot a \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \frac{\sqrt{3/2}}{\sqrt{\pi}} a \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cos\omega t = \\ &= \sqrt{\frac{3}{8}} a \cos\omega t = \sqrt{\frac{3\hbar}{8m\omega}} \cos\omega t\end{aligned}$$

Rörelsemängdsväntevärdet:

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,t)^* p \psi(x,t) dx = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} (c_0^2 \psi_0(x) p \psi_0(x) + c_1^2 \psi_1(x) p \psi_1(x) + c_0 c_1 e^{-i(E_1 - E_0)t/\hbar} \psi_0(x) p \psi_1(x) + \\
 &+ c_0 c_1 e^{i(E_1 - E_0)t/\hbar} \psi_1(x) p \psi_0(x)) dx = \\
 &= 0 + 0 + \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{-i\hbar}{\sqrt{2a}\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{-i\omega t} e^{-x^2/2a^2} \frac{d}{dx} \frac{2x}{a} e^{-x^2/2a^2} + e^{i\omega t} \frac{2x}{a} e^{-x^2/2a^2} \frac{d}{dx} e^{-x^2/2a^2} \right) dx = \\
 &= \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{-i\hbar}{\sqrt{2a}\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{-i\omega t} \frac{2}{a} \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right) e^{-x^2/a^2} - e^{i\omega t} \frac{2}{a} \frac{x^2}{a^2} e^{-x^2/a^2} \right) dx = \\
 &= \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{-i\hbar}{\sqrt{2a}\sqrt{\pi}} \cdot 2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{-i\omega t} \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right) e^{-x^2/a^2} - e^{i\omega t} \frac{x^2}{a^2} e^{-x^2/a^2} \right) d \frac{x}{a} = \\
 &= \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{-i\hbar}{\sqrt{2a}\sqrt{\pi}} \cdot 2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{-i\omega t} (1 - y^2) e^{-y^2} - e^{i\omega t} y^2 e^{-y^2} \right) dy = \\
 &= \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{-i\hbar}{\sqrt{2a}\sqrt{\pi}} \cdot 2 \left(e^{-i\omega t} \left(\sqrt{\pi} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) - e^{i\omega t} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) = \\
 &= -\frac{\sqrt{3}}{4} \frac{\hbar}{\sqrt{2a}} \cdot 2 \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i} = -\sqrt{\frac{3}{8}} \frac{\hbar}{a} \sin \omega t = -\sqrt{\frac{3\hbar m \omega}{8}} \sin \omega t \quad (2p)
 \end{aligned}$$

Kommentarer: 1. Alternativt kan man lösa problemet med Ehrenfests teorem:

$\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle$. 2. I bundna stationära tillstånd blir $\langle p \rangle = 0$. Detta är inte nödvändigtvis

sant i bundna icke-stationära tillstånd, eftersom systemet där kan utföra en oscillerande rörelse. För att tillståndet ska vara bundet måste dock tidsmedelvärdet av $\langle p \rangle = 0$.

(e) Potentiella energin:

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |c_0 \psi_0(x,t) + c_1 \psi_1(x,t)|^2 dx = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(x^2 c_0^2 \psi_0^2(x) + x^2 c_1^2 \psi_1^2(x) + c_0 c_1 \underbrace{x^2 \psi_0(x) \psi_1(x)}_{\text{udda, ger }=0} (e^{i(E_0 - E_1)t/\hbar} + e^{-i(E_0 - E_1)t/\hbar}) \right) dx = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{4} \cdot \frac{1}{a\sqrt{\pi}} x^2 e^{-x^2/a^2} + \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{2a\sqrt{\pi}} \cdot \frac{4x^4}{a^2} e^{-x^2/a^2} \right) dx = \\
 &= \frac{a^2}{4\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy + \frac{3a^2}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y^4 e^{-y^2} dy = \frac{a^2}{4\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} + \frac{3a^2}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{3\sqrt{\pi}}{4} = \frac{5}{4} a^2 \\
 \Rightarrow \langle V \rangle &= \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{5}{8} m \omega^2 a^2 = \frac{5}{8} \hbar \omega
 \end{aligned}$$

Kinetiska energin:

$$\langle KE \rangle = \langle E \rangle - \langle V \rangle = \left(\frac{5}{4} - \frac{5}{8} \right) \hbar \omega = \frac{5}{8} \hbar \omega \quad (2p)$$

Kommentar: Detta problem är mycket enklare med stegoperatormetoder som introduceras i kommande kvantkurser.