

UNIVERSITETET I OSLO
Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Hjemmeeksamen i: FYS2140 Kvantefysikk

Dato: Mandag 18.mars kl. 09.00 til mandag 25.mars kl. 14.00 2024

Oppgavesettet er på: Totalt 7 sider, hvorav de 2 første sidene er informasjon om hjemmeeksamen

Tillatte hjelpemidler: Se neste side

Kontroller at oppgavesettet er komplett før du begynner å besvare spørsmålene.

Viktig info:

- Elektronisk innlevering via **Inspira** med frist mandag 25. mars 2024 kl. 14:00. Leveringsfristen er absolutt. Hjemmeeksamen teller 20% av karakteren i FYS2140. Ikke skriv navnet ditt på besvarelsen, innleveringen skal skje anonymt via Inspira.
- Innleveringen (pdf) må ha god kontrast. Hvis du har skriftlig levering, må håndskriften være tydelig lesbar på pdf-dokumentet.
- Vi ønsker klare og tydelige svar. Besvarelsen skal være pent og oversiktlig ført inn. Husk å bruke fornuftige enheter i utregningene.
- Ettersom dette er en hjemmeeksamen, har dere full anledning til å samarbeide, og til å bruke forelesningsnotater og annen faglitteratur for å finne fram til nødvendig informasjon. Man har også full anledning til å bruke GPT som hjelpemiddel. Svarene må likevel skrives med egne ord. Det lønner seg å være kritisk til GPT, da tjenesten ofte feiler på denne type oppgaver. Den innleverte besvarelsen skal være individuell, og vi forbeholder oss retten til å trekke ut noen av dere til en muntlig redegjørelse for besvarelsen deres senere.
- Dersom ChatGPT, GPT UiO etc. brukes i arbeidet med oppgaven, skal dere legge ved kommandoene dere skrev til språkmodellen på slutten av innleveringen.
- Noen av deloppgavene kan (bør) løses numerisk. Vi legger vekt på en kvalitativ beskrivelse av resultatene, men inkluderer relevante plott og programkode i pdf-filen.
- Inspira tar bare ett dokument. Det er derfor viktig at alt materiale lastes opp **i én pdf-fil** inklusive eventuelle programkoder og annet som kan legges i slutten av pdf'en.
- Lykke til!

Oppgave 1 Lek med begreper

- a) Comptoneffekten ble observert med røntgenstråler. Ville Compton klart å observere effekten (endring i bølgelengde) med synlig lys også? Grunngi svaret ditt.

Svar: Nei. Det gjelder eksperimentelt å kunne se forandring i bølgelengde for det spredte fotonet $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0$. Hvis $\Delta\lambda$ er veldig mye mindre enn Comptonbølgelengden λ_C , vil det være eksperimentelt umulig å se forandring i bølgelengde. For Røntgenstråling (bølgelengder i området 0.01 nm til 10 nm) er $(\lambda_C/\lambda_0) \approx 0.08$ som er observerbart mens for synlig lys (rundt 400-750 nm) er forholdet alt for lite, $\approx 10^{-6}$. Dette vil bli tilnærmet umulig å observere eksperimentelt.

- b) Hvilke av størrelsene Ψ og $|\Psi|^2$ er målbare? Hvordan kan man eventuelt måle størrelsen?
- A. Ingen av dem
 - B. Ψ
 - C. $|\Psi|^2$
 - D. Begge

Svar: Alternativ C er riktig. Bølgefunksjonen Ψ kan ikke måles. Derimot er det mulig å måle sannsynlighetstettheten, $|\Psi|^2$, hvis vi preparerer et flere partikler i samme initialtilstand, og måler posisjonen til hver av partiklene. Ved flere målinger på likt preparerte system, kan man finne sannsynlighetstettheten av partikkelens posisjon, som beskrives ved $|\Psi|^2$. Dobbeltpalteeksperimentet er et eksempel på hvordan man kan måle posisjonsfordelinger til kvantemekaniske objekter, som f.eks. fotoner og elektroner.

- c) Hvilke(n) påstand(er) stemmer? Begrunn svaret. En planbølge ...
- A. er normerbar
 - B. er en løsning av Schrödingerlikningen for fri partikkel
 - C. representerer en tilstand med definert bevegelsesmengde

Svar: Alternativ A stemmer ikke, mens alternativ B og C er riktige. A. Planbølgen er definert ved $\Psi(x) = Ae^{ikx}$. Ettersom $|\Psi|^2 = |A|^2$ er konstant, vil normeringsintegralet $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx$ gå mot uendelig, altså divergere. Planbølgen er derfor ikke normerbar. Påstand A er derfor feil.

B. Løsningen på Schrödingerligningen (ser her på TUSL, men argumentet gjelder for TASL også) for fri partikkel, altså med $V(x) = 0$, er på formen $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$. Planbølgen er derfor en løsning av SL uten potensial (fri partikkel), og Påstand B stemmer.

C. Planbølgen $\Psi(x) = Ae^{ikx}$ har et bestemt og veldefinert bølgetall k som gir definert bevegelsesmengde $p = \hbar k$.

d) Anta at tilstanden til en partikkel er gitt ved

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \phi(k) \exp(ikx) dk, \quad (1)$$

hvor $\phi(k)$ er en Gaussisk funksjon med senterverdi k_0 og standardavvik Δk . Hva kan du si om partikkelens bevegelsesmengde og standardavviket til bevegelsesmengden? Vet vi noe om posisjonen og standardavviket til posisjonen i denne tilstanden?

Svar:

Vi vet fra de Broglie at bevegelsesmengden er proporsjonal med bølgetallet med \hbar som proporsjonalitetskonstant, altså $p = \hbar k$. Dette impliserer at forventningsverdien til bevegelsesmengden er gitt av $\langle p \rangle = \hbar k_0$ og $\Delta p = \hbar \Delta k$.

Vi vet at Fouriertransformen til en bølgepakke i bevegelsesmengdebasis gir oss bølgepakken i posisjonsbasis: $\Psi(x, t) = F[\phi(k)]$. Siden Fouriertransformen gjør Gaussiske funksjoner til Gaussiske funksjoner, vet vi at Ψ også er av Gaussisk form. Videre vet vi Fouriertransformen av Gaussiske funksjoner inverterer standardavvik med følgende proporsjonalitet:

$$\sqrt{2}\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}\Delta k}, \quad (2)$$

som betyr at

$$\Delta x = \frac{1}{2\Delta k} = \frac{\hbar}{2\Delta p} \Rightarrow \Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (3)$$

Her ser vi dermed at en gaussisk bølgepakke har minst mulig uskarphet mellom posisjon og bevegelsesmengde, bestemt av Heisenbergs nedre grense $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$.

Vi kan videre bruke Ehrenfests teorem for å studere forventningsverdien til posisjon:

$$\langle p \rangle = \hbar k_0 = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}. \quad (4)$$

Vi tar nå $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\hbar k_0}{m}$ og integrerer med hensyn på t . Da får vi

$$\langle x \rangle = \frac{\hbar k_0}{m} t + x_0. \quad (5)$$

Her ser vi at å integrere gir oss en frihetsgrad, x_0 , som er forventingsverdien $\langle x \rangle$ ved tidspunkt $t = 0$. Denne verdien endrer ikke dynamikken til systemet, men bestemmer hvor sentrum av bølgepakken befinner seg ved tidspunkt $t = 0$ og er dermed bestemt av startbetingelsene til systemet.

Tilstanden $\Psi(x, t)$ kan tolkes som en bølgepakke som beveger seg i tid og rom. Vi får til slutt, ved å kun analysere den Gaussiske bølgepakken, at $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$. Det betyr at den Gaussiske bølgepakken oppfyller minstekravet i Heisenbergs uskarphetsrelasjon (se f.eks. Seksjon 3.5.2 i Griffiths, 3.utgave).

- e) Tenk på en partikkel med energi E som beveger seg i et potensiale $V(x)$. Hva er sant i en region der $E < V(x)$ om partikkelen er klassisk, og om partikkelen er kvantemekanisk? Forklar hvordan du tenker og diskutér svaralternativene.
- A. Partikkelen kan aldri være i denne regionen
 - B. Partikkelen kan være der, men er "fanget"
 - C. Partikkel kan være der, og kan "slippe unna" til uendeligheten

Svar: Denne oppgaven kan tolkes på litt ulike måter. Her vil det være viktig å presisere hvordan man forstår oppgaven når man svarer. I vårt forslag til løsning under, har vi tolket "et potensiale $V(x)$ " som et utstrakt potensiallandskap som varierer. Vi har også tolket "en partikkel med energi E som beveger seg i et potensiale" ganske generelt. Her vil et elektron som f. eks. er bundet i en uendelig brønn, eller ved et hydrogenatom, også kunne bevege seg, men være fanget i potensialet.

Klassisk: A. Partikkelen kan ikke være i området fordi den ville hatt negativ kinetisk energi som er umulig i klassisk fysikk. Dermed er påstand A den eneste som stemmer – en klassisk partikkel vil aldri kunne finne seg i et område der $E < V(x)$.

Kvantemekanisk: Her kan man argumentere for at både påstand A, B og C stemmer, avhengig av formen på potensialet som partikkelen befinner seg i. De tre mulighetene vi betrakter for det kvantemekaniske tilfellet er skissert i Fig. 1. Potensialene $V(x)$ som beskriver eksempler på de tre alternativene, er representert som heltrukkede kurver mens partikkelens energi E er stiplet.

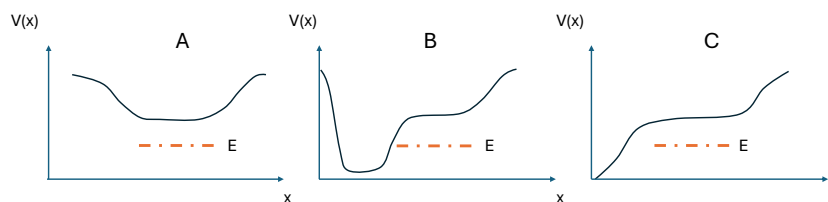
A. Vi ser at hvis potensialet aldri blir lavere enn energien, som skissert for tilfelle A i Fig. 1, så kan ikke partikkelen være noe sted ($\psi = 0$). Man kan argumentere for at langt unna vil kanskje potensialet $V(x) < E$, og dermed kan en bitteliten andel av bølgefunksjonen strekke seg inn

i regionen der $E < V(x)$, men sannsynligheten for dette vil for alle praktiske hensyn være lik null.

I de to andre tilfellene vil partikkelen kunne gå mot venstre, og vi får henholdsvis en bundet (B.) eller en spredningstilstand til uendeligheten (C.).

B. Denne påstanden vil kunne stemme for et potensiale med form som en potensialbrønn, som for eksempel harmonisk oscillator, hydrogenatomet, eller skissen for tilfelle B i Fig. 1. Partikkelen vil være i en bundet tilstand men bølgefunksjonen vil også strekke seg inn i "potensialveggen", med utstrekning avhengig av forskjellen mellom E og V .

C. Denne påstanden vil stemme for f.eks. en potensialbarriere eller et potensiale på formen illustrert for tilfelle C i Fig. 1. Partikkelen kan trenge inn i området der $E < V$ men vil også kunne slippe unna til uendeligheten.



Figur 1: Eksempler på de kvantemekaniske alternativene A., B. og C.

f) Gitt 1D-potensialet i Fig. 2 hvor en partikkel sendes inn fra venstre mot høyre med tilhørende bølgefunksjon Ae^{ikx} og energi E bestemt av:

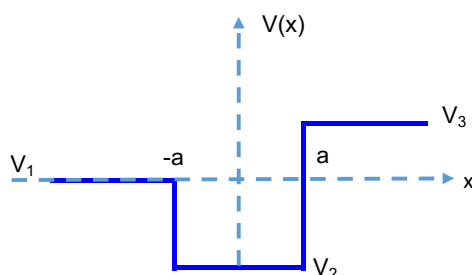
- A. $V_1 < E < V_3$
- B. $E > V_3$

Skissér den reelle delen av bølgefunksjonen ($\mathcal{R}(\psi)$) i x -retning i de to tilfellene. Diskuter kvalitativt hvilke transmisjons- og refleksjonskoeffisienter som du forventer.

Svar:

Skisse av de to bølgefunksjonene er gitt i Fig. 3 hvor bølgetallet avhenger av den kinetiske energien $K = E - V$.

I både tilfelle A og B vil partikkelen først støte på den første barrieren i $x = -a$. Her finnes det en (liten) sannsynlighet for at partikkelen reflekteres.



Figur 2: Én-dimensjonalt potensial.

Bølgefunksjonen:

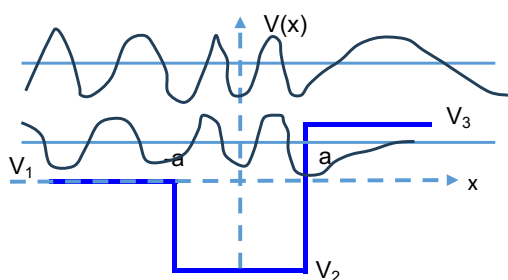
A. Når partikkelen passerer $x = -a$ vil det forekomme en endring i bølgelengde (til kortere bølgelengder). Vi ser også en reduksjon i amplitude. Bølgefunksjonen antar en eksponentielt avtagende form når den entrer barrieren V_3 .

B. Samme oppførsel i regionene V_1 og V_3 . Når partikkelen passerer barrieren i $x = a$ vil bølgelengden øke og amplituden gå opp.

R og T:

A. Her vil partikkelen møte en barriere ved $x = +a$ og bli reflektert, selvom det er noe sannsynlighet for at partikkelen trenger inn i området $x > a$. Resultatet blir nesten total refleksjon $R \approx 1$ og liten transmisjon $T \approx 0$. (Etter lang tid vil partikkelen være langt ute til venstre med negativ x .)

B. Her vil partikkelen oppleve refleksjon ved $x = -a$ og a samtidig som en del vil gå videre mot høyre. Dermed vil både T og R ha en ikke ubetydelig verdi som adderes til $T + R = 1$. Hvis E er veldig stor vil $T > R$, og hvis E er like over V_3 vil mye reflekteres med $R > T$.



Figur 3: De to bølgefunksjonene for tilfellene A. og B.

g) $\Psi_1(x, t)$ og $\Psi_2(x, t)$ er to forskjellige løsninger av den tidsavhengige

Schrödingerlikningen (TASL). Er

$$\Psi_{\text{sum}}(x, t) = a\Psi_1(x, t) + b\Psi_2(x, t) \quad (6)$$

også en løsning av TASL? Forklar svaret ditt.

- A. Ja, alltid
- B. Nei, aldri
- C. Avhenger av Ψ_1 og Ψ_2
- D. Avhenger av koeffisientene a og b

Hva skjer med svaret ditt dersom $\Psi_1(x, t)$ og $\Psi_2(x, t)$ er to *normerte* løsninger av TASL?

Svar: A. Vi har

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi_{\text{sum}}(x, t) &= a\hat{H}\Psi_1(x, t) + b\hat{H}\Psi_2(x, t) \\ &= ai\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_1(x, t) + bi\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_2(x, t) \\ &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(a\Psi_1(x, t) + b\Psi_2(x, t)) \\ &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\text{sum}}(x, t), \end{aligned} \quad (7)$$

som viser at $\Psi_{\text{sum}}(x, t)$ er løsning av TASL. Svaret endres ikke hvis bølgefunksjonene er normaliserte.

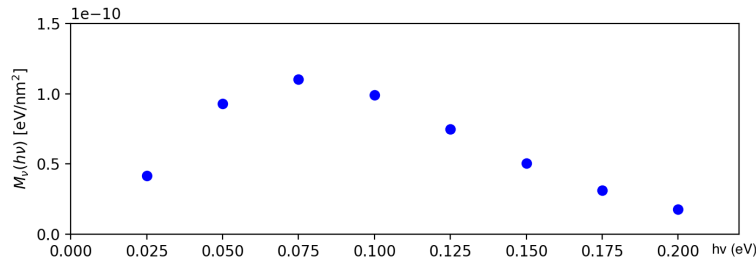
Oppgave 2 Sort-legeme stråling – en lek med T , ν og λ

En student i kvantefysikk synes læreren ser febersyk ut og vil gjerne måle kroppstemperaturen hans. I stedet for å kjøpe et termometer på apoteket, konstruerer studenten et sinnrikt apparat for å måle lærerens sort-legeme stråling.

Tabell 1 og Fig. 4 viser de åtte datapunktene av $M_\nu(h\nu)$ -fordelingen som ble målt. Studenten har vært ekstra nøye med å finne hvilken $h\nu$ som gir maksimal $M_\nu(h\nu)$, nemlig energien $(h\nu)_{\text{max}} = 0.0753$ eV.

Tabell 1: Datapunkter målt av studenten.

$h\nu$ [eV]	0.025	0.050	0.075	0.100	0.125	0.150	0.175	0.200
M_ν [10^{-11} eV/nm ²]	4.15	9.31	11.04	9.92	7.47	5.05	3.10	1.78



Figur 4: Lærerens kroppsstråling som funksjon av $h\nu$.

- a) Finn middelværdien (forventningsverdien) $\langle h\nu \rangle$ og standardavviket $\sigma_{h\nu}$ for fordelingen M_ν når du vektet fotonenergiene med $w_i = M_\nu^i / \sum_{i=1}^8 M_\nu^i$.

Svar: Middelværdien blir $\langle h\nu \rangle = 0.096$ eV og standardavviket blir $\sigma_{h\nu} = 0.045$ eV. (Kandidaten får også full pott om fotonenergien er vektet med fotonintensiteten $M_\nu/h\nu$ i stedet for M_ν .)

- b) Diskutér om $\langle h\nu \rangle$ og $\sigma_{h\nu}$ -verdiene stemmer rimelig overens med M_ν fordelingen i Fig. 4.

Svar: Verdien for $\langle h\nu \rangle$ ser fornuftig ut da den ligger noe høyere enn $(h\nu)_{\max}$. Dette skyldes at fordelingen er skjev med en høyenergetisk hale. Standardavviket på $\sigma_{h\nu} = 0.045$ eV er omtrent halvparten av bredden på fordelingen, som synes rimelig.

- c) Finn hvilken bølgelengde som tilsvarer fotoner med energi $(h\nu)_{\max} = 0.0753$ eV.

Svar: Bølgelengden blir $\lambda = c/\nu = hc/h\nu = 1240 \text{ nm eV}/0.0753 \text{ eV} = 16467 \text{ nm} = 16.5 \mu\text{m}$.

- d) Innsett bølgelengden fra c) i Wiens forskyvningslov, og vurder lærerens helsemessige tilstand.

Svar: Wiens forskyvningslov gir

$$T = 2.897 \cdot 10^{-3} \text{ Km} / \lambda = 2.897 \cdot 10^{-3} \text{ Km} / 16467 \text{ nm} = 176 \text{ K}.$$

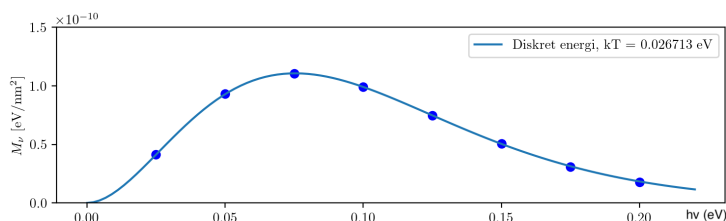
Læreren er sterkt underkjølt med -97 °C og er sannsynligvis allerede død.

- e) Siden noe må være galt med tankegangen vår i oppgave d), vil vi undersøke videre. Plott den teoretiske fordelingen $M_\nu(h\nu)$ (Likn. (1.25) i kompendiet) for et legeme med temperatur 37 °C.

Svar: Den absolutte temperatur er $T = 273 + 37 \text{ K} = 310 \text{ K}$ som gir $k_B T = 0.0267 \text{ eV}$, hvor Boltzmanns konstant er $k_B = 8.6173 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$. Verdien for $k_B T$ settes inn i uttrykket (kompendiet Likn. (1.25)):

$$M_\nu(T) = \frac{2\pi}{h^2 c^2} \frac{(h\nu)^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (8)$$

som kan plottes med f.eks. Python. Den teoretiske fordelingen og de eksperimentelle målepunktene er vist i Fig. 5.



Figur 5: Målte verdier (datapunkter) og teoretisk fordeling (kurve) som funksjon av $h\nu$.

- f) Er studentens datapunkter forenlige med den teoretiske fordelingen for temperatur $37 \text{ }^\circ\text{C}$? Hvorfor får vi motstridende resultat i oppgave d)?

Svar: Datapunktene er forenlige med den teoretiske fordelingen M_ν for temperatur $37 \text{ }^\circ\text{C}$ (som gir at læreren er feberfri). Dette betyr at framgangsmåten i d) og det tilhørende resultatet er feilaktige. Man kan ikke uten videre regne ut λ_{\max} fra $h\nu_{\max}$ og sette verdien inn i Wiens forskyvningslov. Dette skyldes at M_λ -fordelingen har en helt annen form enn M_ν og topppunktene på fordelingene følger ikke relasjonen $\lambda_{\max}\nu_{\max} = c$.

- g) I kompendiet ble Wiens forskyvningslov og bestemmelse av λ_{\max} utledet ved å forlange $dM_\lambda/d\lambda = 0$. I analogi med denne utledningen, sett $dM_\nu(h\nu)/d(h\nu) = 0$ og finn en relasjon mellom $(h\nu)_{\max}$ og T . Her vil du måtte løse en likning numerisk (for eksempel ved hjelp av fsolve() i Python) eller ved grafisk metode. Vis at den nye relasjonen blir

$$(h\nu)_{\max}/T = 2.431 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}, \quad (9)$$

hvor $(h\nu)_{\max}$ er verdien ved maksimal M_ν .

Svar: La $x = h\nu/k_B T$. Ved kravet $dM_\nu(h\nu)/d(h\nu) = 0$, må likningen

$$3 - \frac{x e^x}{e^x - 1} = 0 \quad (10)$$

løses. Her kan funksjonen `fsolve()` i Python brukes med bibliotek `scipy.optimize`, som gir $x = 2.82144$. Dermed blir $T = h\nu/xk_B = 310$ K og $(h\nu)_{\max}/T = xk_B = 2.82144 \cdot 8.61733 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K} = 2.431 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$.

- h) Finn temperaturen ved hjelp av den nye relasjonen i g) og vurder om læreren er feberfri?

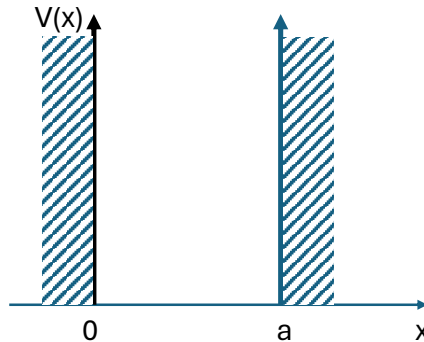
Svar: Studenten fant maksimal M_ν for energien $(h\nu)_{\max} = 0.0753 \text{ eV}$. Vi innsetter og får: $T = (h\nu)_{\max}/2.431 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K} = 0.0753/2.431 \cdot 10^{-4} \text{ K} = 310$ K. Lærerens kroppstemperatur er 37°C , og han er dermed friskmeldt.

Oppgave 3 Partikkel i uendelig dyp potensialbrønn

En partikkel beveger seg fritt bortsett fra ved de to endene ($x = 0$ og $x = a$) hvor en uendelig kraft hindrer partikkelen fra å forsvinne. Potensialbrønnen kan beskrives som

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{ellers} \end{cases} . \quad (11)$$

og er illustrert i Fig. 6.



Figur 6: Uendelig kassebrønn-potensial.

- a) Vis at den tidsuavhengige Schrödingerlikningen (TUSL) i denne potensialbrønnen kan skrives på formen

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad (12)$$

og definér k .

Svar: Den tidsuavhengige SL (TUSL) kan skrives som

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (13)$$

hvor $V(x) = 0$ og $E > 0$ gjelder i kassebrønn-potensialet. Dermed kan vi forenkle TUSL slik at

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) = -k^2\psi(x), \quad (14)$$

hvor $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ er en reell størrelse.

- b) Vis at de romlige grensebetingelsene bare tillater sinus-løsning av TUSL.

Svar: Både en sinus- og en cosinus-løsning tilfredstiller TUSL, og generelt er derfor

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx). \quad (15)$$

Ved å studere randbetingelsene, kan A og B bestemmes. Kontinuitet av bølgefunksjonen utenfor brønnen må være lik den rett innenfor brønnen som gir at $\psi(0) = \psi(a) = 0$. Vi ser at $\psi(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = B = 0$ og dermed er $\psi(x) = A \sin(kx)$.

- c) Finn energieigenverdiene E_n hvor $n = 1, 2, 3 \dots$

Svar: Ved grensen $x = a$ må bølgefunksjonen være $A \sin(ka) = 0$. Dette krever at $ka = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \pm 3\pi, \pm 4\pi \dots$ som koker ned til $k_n = n\pi/a$, der $n = 1, 2, 3, \dots$. Definisjonen av k gir dermed energieigenverdiene

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (16)$$

- d) Finn energieigenfunksjonene $\psi_n(x)$ i potensialbrønnen og sørg for at de er normerte. Denne type funksjoner er også ortogonale. Beskriv på kompakt form hva ψ_m og ψ_n oppfyller hvis bølgefunksjonene er ortonormerte.

Svar: Normeringsintegralet blir:

$$\int_0^a A^* \sin(k_n x) A \sin(k_n x) = |A|^2 a/2 = 1. \quad (17)$$

Velger reell verdi og får $A = \sqrt{2/a}$. Den normerte bølgefunksjon blir

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right). \quad (18)$$

Ortonormerte bølgefunksjoner adlyder

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_m dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases} . \quad (19)$$

- e) Argumentér for (uten å regne) hva forventningsverdiene $\langle x \rangle_n$ og $\langle p \rangle_n$ er for tilstanden $\psi_n(x)$. Tilfredsstill disse forventningsverdiene Ehrenfests teorem?

Svar: Vi har et symmetrisk potensial omkring $x = a/2$. Det er derfor naturlig at partikkelen befinner seg like mye til venstre som til høyre for senteret $x = a/2$. Forventningsverdien av posisjonen blir derfor $\langle x \rangle_n = a/2$. Analogt er det naturlig at partikkelen har samme hastigheter mot venstre som mot høyre siden potensialet er symmetrisk. Ettersom $p = mv$, vil p vektor peke like mye til begge sider og gir forventningsverdi $\langle p \rangle_n = 0$. Ehrenfests teorem gir at de kvantemekaniske forventningsverdiene følger den klassiske bevegelsen av de tilsvarende fysiske størrelsene. Som et eksempel, kan vi her sette $\langle p \rangle_n = m \frac{d\langle x \rangle_n}{dt}$ som er tilfredstilt siden $\langle x \rangle_n$ er en konstant og $\langle p \rangle_n = 0$.

Vi går nå over til å studere den tidsavhengige Schrödingerlikningen (TASL). Partikkelens bølgefunksjon ved tiden $t = 0$ er beskrevet som en sum av bølgefunksjonene til energieigenverdiene E_2 og E_3 :

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{5}} (2\psi_2(x) - \psi_3(x)) . \quad (20)$$

- f) Bruk informasjonen om ψ_n fra oppgave d) og vis at $\Psi(x, t = 0)$ er normert.

Svar: Ettersom bølgefunksjonene er 0 utenfor området $[0 - a]$, blir normeringsintegralet

$$\begin{aligned} & \int_0^a \Psi^*(x, t = 0) \cdot \Psi(x, t = 0) dx & (21) \\ &= \frac{1}{5} \int_0^a (2\psi_2^*(x) - \psi_3^*(x)) \cdot (2\psi_2(x) - \psi_3(x)) dx \\ &= \frac{1}{5} \int_0^a (4|\psi_2(x)|^2 - 2\psi_2^*(x)\psi_3(x) - 2\psi_3^*(x)\psi_2(x) + |\psi_3(x)|^2) dx \\ &= \frac{1}{5} (4 \cdot 1 - 2 \cdot 0 - 2 \cdot 0 + 1 \cdot 1) \\ &= 1, \end{aligned}$$

som viser at $\Psi(x, t = 0)$ er normert.

- g) Hva er sannsynligheten for å måle energieigenverdien E_2 eller E_3 ved én måling?

Svar: Sannsynligheten for å måle en energi i en egenstilstand gis av kvadratet av koeffisienten foran egentilstanden, hvor koeffisientene i vårt tilfelle er $c_2 = 2/\sqrt{5}$ og $c_3 = 1/\sqrt{5}$. Dermed blir det 80% sannsynlig å måle E_2 og 20% sannsynlig å måle E_3 .

- h) La $\omega \equiv \omega_1 = E_1/\hbar = \pi^2\hbar/2ma^2$, hvor E_1 er energieigenverdien for ψ_1 . Ta utgangspunkt i Likn. (20) og skriv ned $\Psi(x, t)$ ved tiden t , uttrykt ved hjelp av vinkelhastigheten ω .

Svar: Vi har at $\omega_2 = 4\omega$ og $\omega_3 = 9\omega$ som gir:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{5}} \left(2\psi_2(x)e^{-i4\omega t} - \psi_3(x)e^{-i9\omega t} \right) \quad (22)$$

- i) Vis at forventningsverdien av posisjonen som funksjon av tid blir

$$\langle x(t) \rangle = \frac{a}{2} \left[1 + \frac{384}{125\pi^2} \cos(5\omega t) \right]. \quad (23)$$

Du får bruk for to typer integraler som vi oppgir her:

$$\begin{aligned} \frac{2}{a} \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx &= \frac{a}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \\ \frac{2}{a} \int_0^a x \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx &= -\frac{48a}{25\pi^2}. \end{aligned} \quad (24)$$

Svar: Forventningsverdien av posisjonen blir:

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \int_0^a \Psi^*(x, t)x\Psi(x, t)dx \\ &= \frac{1}{5} \frac{2}{a} \int_0^a x \left[\left(2 \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{i4\omega t} - \sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right)e^{i9\omega t} \right) \right. \\ &\quad \left. \left(2 \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{-i4\omega t} - \sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right)e^{-i9\omega t} \right) \right] dx \\ &= \frac{1}{5} \frac{2}{a} \int_0^a x \left[4 \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \right. \\ &\quad \left. - 2 \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right) (e^{-i5\omega t} + e^{i5\omega t}) \right] dx \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned}
& + \sin^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right) dx \\
& = \frac{1}{5} \left[\frac{4a}{2} + \frac{192}{25} \frac{a}{\pi^2} \cos(5\omega t) + \frac{a}{2} \right] \\
& = \frac{a}{2} \left[1 + \frac{384}{125\pi^2} \cos(5\omega t) \right].
\end{aligned}$$

- j) Bruk Ehrenfests teorem og finn forventningsverdien av bevegelsesmengden $\langle p(t) \rangle$ som funksjon av tiden.

Svar: Ehrenfests teorem gir

$$\begin{aligned}
\langle p(t) \rangle & = m \frac{d\langle x(t) \rangle}{dt} & (26) \\
& = m \frac{d}{dt} \frac{a}{2} \left[1 + \frac{384}{125\pi^2} \cos(5\omega t) \right] \\
& = -\frac{192}{25\pi^2} m a \omega \sin(5\omega t) \\
& = -\frac{96\hbar}{25a} \sin(5\omega t).
\end{aligned}$$

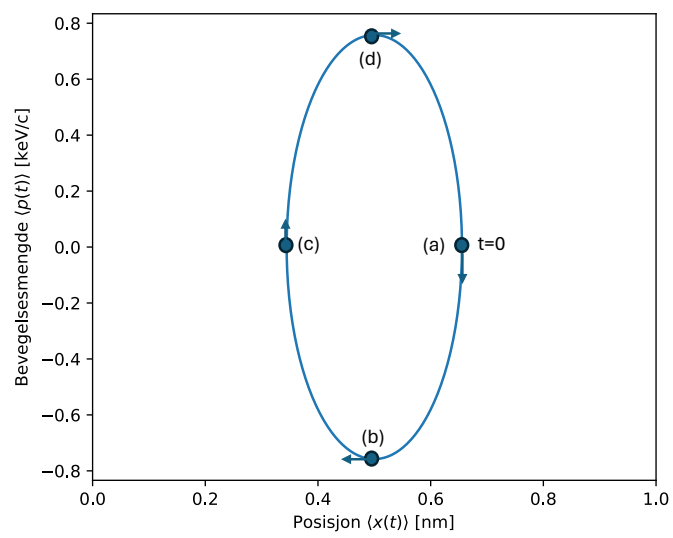
- k) La $a = 1$ nm og $m = 0.511$ MeV/ c^2 og plott punktene $(\langle x(t) \rangle, \langle p(t) \rangle)$ for et helt omløp fra tiden $t = 0$ til $t = 2\pi/5\omega$. Forklar hva som skjer i løpet av et slikt omløp.

Svar: Vi skriver de uttrykkene vi trenger i kodingen på praktisk form:

$$\begin{aligned}
\langle x(t) \rangle & = \frac{a}{2} \left[1 + \frac{384}{125\pi^2} \cos(5\omega t) \right] \\
& = (0.5000 + 0.1556 \cos(5\omega t)) \text{ nm}, \\
\langle p(t) \rangle & = -0.758 \sin(5\omega t) \text{ keV}/c, \\
\omega & = \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2} = 0.57176 \text{ fs}^{-1},
\end{aligned}$$

og et helt omløp er $T = 2\pi/5\omega = 2.1978$ fs.

Figur 7 viser at bevegelsesmengden er maksimal midt i brønnen og lik 0 lengst til venstre og lengst til høyre. Punkt (a) viser at $\langle x \rangle$ er lengst til høyre i kassepotensialet og $\langle p \rangle = 0$ ved $t = 0$. Så vil $\langle p \rangle$ være maksimal mot venstre når $\langle x \rangle = 0.5$ nm (punkt (b)). Ved punkt (c) kommer $\langle x \rangle$ så langt til venstre i kassa som mulig og $\langle p \rangle = 0$. Deretter blir $\langle p \rangle$ maksimal med retning mot høyre når $\langle x \rangle = 0.5$ nm (punkt (d)). Omløpet er fullført etter tiden $T = 2.2$ fs, og vi er ved punktet (a) igjen. Python-scriptet er listet i Fig. 8.



Figur 7: Sammenheng mellom forventningsverdien av posisjon og bevegelsesmengde. Retningen er *med* klokka for økende tid t .


```

# Middelvei av x, <x(t)> og middelvei av p, <p(t)>
# <x(t)> i nanometer og <p(t)> i keV/c
# 20.02.2024
# ACL & MG
# Siste versjon: 20.02.2024

# Importerer nyttige Python-bibliotek
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

T = 1.0*2.1978 # Omløpstid i femtosekunder
omega = 0.57176 # Egenfrekvens i fs-1
dt = 0.001 # tidsintervall i femtosekunder

# Antall elementer i vektorene
n = int(np.ceil(T/dt))

t = np.zeros(n)
x = np.zeros(n)
p = np.zeros(n)

for i in range (0,n-1):
    x[i] = 0.5 + 0.1556*np.cos(5*omega*t[i]) #funksjonen for <x(t)>
    p[i] = -0.758*np.sin(5*omega*t[i]) #funksjonen for <p(t)>
    t[i+1] = t[i] + dt #her inkrementerer vi tiden

# Plotting
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, figsize=(6, 5))
ax.plot(x[ :i], p[ :i])
ax.set_xlabel(r"Posisjon $\left< x (t) \right>$ [nm]")
ax.set_ylabel(r"Bevegelsesmengde $\left< p (t) \right>$ [keV/c]")
plt.xlim(0, 1)
plt.savefig('x_ave_vs_p_ave.pdf')
fig.tight_layout()
plt.show()

```

Figur 8: Python-script for plott av sammenhengen mellom forventningsverdien av posisjon og bevegelsesmengde.