

Usikkerhet og uskarphetsrelasjoner

[PCH 4.5 ; DFG 1.6, 3.4 ; IØ 2.3.c og øving 1 og 4]

Standardavvik i målbar størrelse x :

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}$$

R M D S : Root Mean Square Deviation

Forenkling:

$$\begin{aligned} \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle &= \langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \\ &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}}$$

For to målbare fysiske størrelser A og B er

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|} \quad (\text{PCH 4.35})$$

Dvs, to størrelser som har operatører som ikke kommuterer, kan ikke ha skarpe verdier samtidig.

Her er

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \int \Psi^* (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \Psi \, dx$$

og det følger fra definisjonen av en forventningsverdi at

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle A \rangle$$

Beviset av 4.35 utnytter 2.8 og starter med at (49)

$$\int |\tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi|^2 dx \geq 0$$

Her er $\tilde{A} = \hat{A} - \langle A \rangle$ og $\tilde{B} = \hat{B} - \langle B \rangle$ slik at

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \tilde{A}^2 \rangle$$

$$(\Delta B)^2 = \dots \text{tilsvarende} \dots = \langle \tilde{B}^2 \rangle$$

og α er en reell, inntil videre vilkårlig, konstant.

$$0 \leq \int \{ \tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi \}^* \{ \tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi \} dx$$

$$= \int \underbrace{(\tilde{A}\Psi)^*}_{\tilde{A}\Psi} \tilde{A}\Psi dx + \alpha^2 \int \underbrace{(\tilde{B}\Psi)^*}_{\tilde{B}\Psi} \tilde{B}\Psi dx$$

$$+ i\alpha \left\{ \int \underbrace{(\tilde{A}\Psi)^*}_{\tilde{A}\Psi} \tilde{B}\Psi dx - \int \underbrace{(\tilde{B}\Psi)^*}_{\tilde{B}\Psi} \tilde{A}\Psi dx \right\}$$

$$= \langle \tilde{A}^2 \rangle + \alpha^2 \langle \tilde{B}^2 \rangle + i\alpha \langle \tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A} \rangle$$

$$= (\Delta A)^2 + \alpha^2 (\Delta B)^2 + i\alpha \langle [\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle$$

Her er

$$[\tilde{A}, \tilde{B}] = (\hat{A} - \langle A \rangle)(\hat{B} - \langle B \rangle) - (\hat{B} - \langle B \rangle)(\hat{A} - \langle A \rangle) = [\hat{A}, \hat{B}]$$

da alle ledd med minst en $\langle A \rangle$ eller $\langle B \rangle$ kansellerer. Dvs:

$$(\Delta A)^2 + \alpha^2 (\Delta B)^2 + i\alpha \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \geq 0$$

Mult. med $(\Delta B)^2$ gir nå

$$(\Delta A \cdot \Delta B)^2 \geq -\alpha^2 (\Delta B)^4 - i\alpha (\Delta B)^2 \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$$

som skal gjelde for vilkårlig α , og dermed også for den verdi av α som gir maksimal verdi på høyre side.

Finner max. av høyre side:

$$\frac{d}{d\alpha} \left\{ -\alpha^2 (\Delta B)^4 - i\alpha (\Delta B)^2 \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right\} = 0$$

$$\Rightarrow -2\alpha (\Delta B)^2 - i \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \alpha = -\frac{i}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle / (\Delta B)^2$$

Innsetting i ulikheten gir

$$\begin{aligned} (\Delta A \Delta B)^2 &\geq -\left\{ -\frac{i}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle / (\Delta B)^2 \right\}^2 \cdot (\Delta B)^4 \\ &\quad - i \left\{ -\frac{i}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle / (\Delta B)^2 \right\} \cdot (\Delta B)^2 \cdot \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \\ &= \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2} \right) = -\frac{1}{4} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 \end{aligned}$$

og endelig

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$$

Eks: Posisjon og impuls

Med $A=x$ og $B=p$, dvs $\hat{A}=x$ og $\hat{B}=\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$, er

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [x, \hat{p}] = i\hbar, \text{ dvs } \Delta A \cdot \Delta B = \Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2.$$

Hva slags bølgefunksjon Ψ gir $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$?

Da må likheten $\tilde{A}\Psi + i\alpha \tilde{B}\Psi = 0$ gjelde, med $\tilde{A} = x - \langle x \rangle$, $\tilde{B} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \langle p \rangle$, og med

$$\alpha = -\frac{i}{2} \langle [x, \hat{p}] \rangle / (\Delta p)^2 = \hbar/2(\Delta p)^2 = \Delta x \Delta p / (\Delta p)^2 = \Delta x / \Delta p$$

Med $t=0$ er $\Psi = \Psi(x, 0) = \Psi(x)$, og vi kan sette

$$\tilde{B} = \tilde{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \langle p \rangle. \text{ Ligningen for } \Psi \text{ blir:}$$

$$(x - \langle x \rangle) \Psi + i \frac{\Delta x}{\Delta p} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \langle p \rangle \right) \Psi = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d\Psi}{dx} = - \frac{\Delta p}{\hbar \Delta x} (x - \langle x \rangle) \Psi + \frac{i \langle p \rangle}{\hbar} \Psi$$

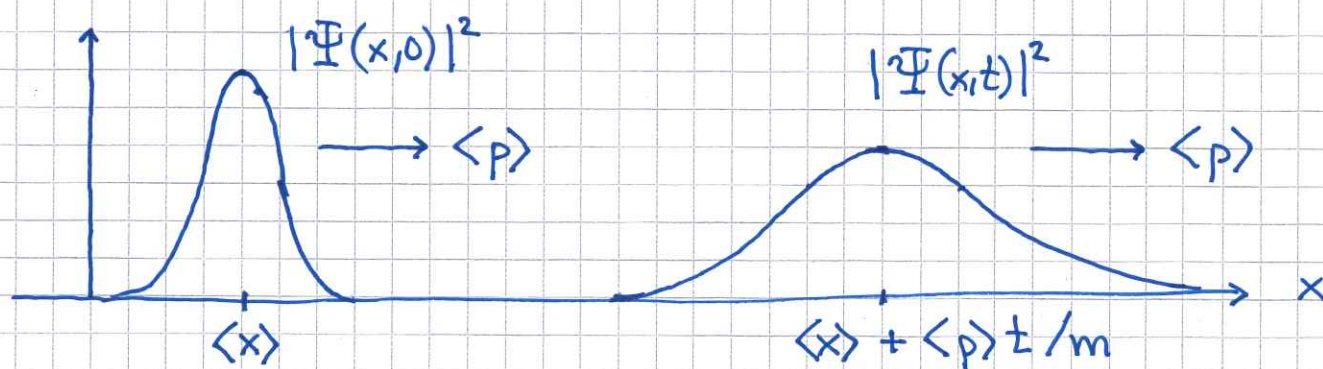
$$= \left\{ - \frac{x - \langle x \rangle}{2 (\Delta x)^2} + \frac{i \langle p \rangle}{\hbar} \right\} \Psi$$

$$\Rightarrow \Psi(x) = C \cdot \exp \left\{ - \left(\frac{x - \langle x \rangle}{2 \Delta x} \right)^2 + i \langle p \rangle x / \hbar \right\}$$

dvs en gaussisk bølgepakke, med tyngdepunkt i posisjon $\langle x \rangle$ og midlere impuls $\langle p \rangle$.

Tidsutviklingen, dvs $\Psi(x, t)$ for $t > 0$, vil avhenge av hvordan potensialet $V(x)$ ser ut.

En fri partikkel ($V=0$) vil seile avgårde med uendret midlere impuls $\langle p \rangle$, men Ψ blir bredere pga dispersjon:



Hvis partikkelen befinner seg i et harmonisk oscillator - potensial, $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$, med (f.eks.) $\langle p \rangle = 0$ og $\langle x \rangle \neq 0$ ved $t=0$, vil den svinge fram og tilbake, uten at Ψ brer seg utover, dvs temmelig likt en klassisk harmonisk oscillator! Dette kalles en koherent tilstand. (PCH kap 3.5.5)

Forventningsverdiens tidsutvikling

[PCH 4.3 ; DFG 3.4.3 ; IØ 4.3]

Vi ser kun på operatoren $\hat{F}$ som ikke avhenger eksplisitt av tiden t , dvs $\partial \hat{F} / \partial t = 0$. Dermed:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \langle F \rangle &= \frac{d}{dt} \left\{ \int \Psi^* \hat{F} \Psi dx \right\} \\
 &= \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{F} \Psi dx + \int \Psi^* \hat{F} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx \\
 &\stackrel{\text{s.L.}}{=} \int \left(\frac{\hat{H} \Psi}{i\hbar} \right)^* \hat{F} \Psi dx + \int \Psi^* \hat{F} \frac{\hat{H} \Psi}{i\hbar} dx \\
 &\stackrel{\text{PCH 2.8}}{=} \int \frac{i}{\hbar} \Psi^* \hat{H} \hat{F} \Psi dx - \int \frac{i}{\hbar} \Psi^* \hat{F} \hat{H} \Psi dx \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{F}] \rangle
 \end{aligned}$$

Det betyr at $\langle F \rangle$ er en bevægelseskonstant dersom $\hat{F}$ kommuterer med Hamiltonoperatoren $\hat{H}$.

Eks: Når er $\langle p \rangle$ konstant?

Løsn: Hvis V avhenger av x , er $[\hat{H}, \hat{p}] = [V, \hat{p}] \neq 0$, og $d\langle p \rangle / dt \neq 0$. Som ventet: Kraften $-dV/dx$ fører til at $\langle p \rangle$ endres (jf N2).

Men hvis V er konstant, er $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$ og $\langle p \rangle$ er konstant. Også som forventet!

Ehrenfests teorem

[PCH 4.4 ; DFG 1.5, 4.1 ; IØ 4.4]

Klassiske bevegelsesligninger er:

$$\frac{dx}{dt} = v = \frac{p}{m} ; \quad \frac{dp}{dt} = F = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Ehrenfests teorem slår fast at tilsvarende ligninger gjelder for $\langle x \rangle$ og $\langle p \rangle$ i QM:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, x] \rangle \quad \underline{[V, x] = 0} \quad \frac{i}{2m\hbar} \langle [\hat{p}^2, x] \rangle$$

$$\begin{aligned} [\hat{p}^2, x] &= \hat{p}\hat{p}x - x\hat{p}\hat{p} = \hat{p}\hat{p}x - \hat{p}x\hat{p} + \hat{p}x\hat{p} - x\hat{p}\hat{p} \\ &= \hat{p}[\hat{p}, x] + [\hat{p}, x]\hat{p} = -2i\hbar\hat{p} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \underline{\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \langle \hat{p} \rangle / m = \underline{\langle p \rangle / m}}$$

$$\underline{\frac{d\langle p \rangle}{dt}} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle \quad \underline{[\hat{K}, \hat{p}] = 0} \quad \frac{i}{\hbar} \langle [V, \hat{p}] \rangle \stackrel{(5.44)}{=} \underline{-\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle}$$

$$3D: \frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m} ; \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle$$

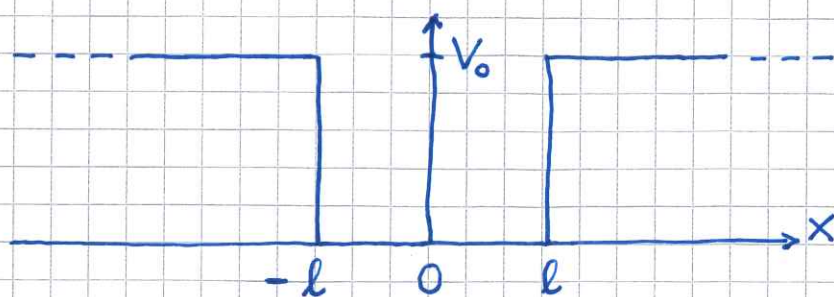
Innsetting av $\langle p \rangle = m d\langle x \rangle / dt$ i lign. for $\langle p \rangle$ gir

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = -\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = \langle F \rangle$$

Vi ser på noen eksempler i 1D, med anvendelser.

Endelig potensialbrønn [PCH 3.3; DFG 2.6; IØ 3.2]

(54)



$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; |x| < l \\ V_0 & ; |x| \geq l \end{cases}$$

TUSL: $\Psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \Psi(x)$

$$= \begin{cases} -k^2 \Psi(x) & ; |x| < l & ; k^2 = 2mE/\hbar^2 \\ \kappa^2 \Psi(x) & ; |x| \geq l & ; \kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2 \end{cases}$$

Bundne tilstander, $E < V_0$:

$$\Psi(x) = \begin{cases} A e^{\kappa x} & ; x \leq -l \\ C \sin kx + D \cos kx & ; |x| < l \\ B e^{-\kappa x} & ; x \geq l \end{cases}$$

(Må ha $|\Psi| \rightarrow 0$ når $|x| \rightarrow \infty$)

Normering av Ψ samt kontinuitet av Ψ og Ψ' i $x = \pm l$ gir 5 lign. som fastlegger A, B, C, D og energien E .

Symmetrisk $V(x) \Rightarrow$ symm. $|\Psi|^2 \rightarrow$ symm. (S) og antisymm. (AS) $\Psi(x)$

$\Rightarrow D \cos kx$ (S) og $C \sin kx$ (AS) hver for seg

Symm. $\Psi(x)$, $A=B$. Kont. Ψ og Ψ' i $x=\pm l$ gir

$$A e^{-\kappa l} = D \cos(-kl) = D \cos kl \quad (1)$$

$$\kappa A e^{-\kappa l} = -k D \sin(-kl) = k D \sin kl \quad (2)$$

$$(2)/(1) \Rightarrow \kappa = k \tan kl \Rightarrow \tan kl = \kappa/k$$

Antisymm. $\Psi(x)$, $A=-B$. Kont. Ψ og Ψ' i $x=\pm l$ gir

$$A e^{-\kappa l} = C \sin(-kl) = -C \sin kl \quad (3)$$

$$\kappa A e^{-\kappa l} = k C \cos(-kl) = k C \cos kl \quad (4)$$

$$(3)/(4) \Rightarrow \kappa^{-1} = -k^{-1} \tan kl \Rightarrow \tan kl = -\kappa/k$$

Gir de tillatte energiene for bundne tilstander:

$$\tan \frac{\sqrt{2mE'} l}{\hbar} = \begin{cases} \sqrt{\frac{V_0 - E'}{E}} & ; \text{symm. } \Psi \\ -\sqrt{\frac{E'}{V_0 - E}} & ; \text{antisymm. } \Psi \end{cases}$$

Grensetilfellet $V_0 \rightarrow \infty$ (evt. $V_0 \gg E$) tilsvarer partikkel i boks:

$$\tan \frac{\sqrt{2mE'} l}{\hbar} = \begin{cases} \infty & (S) \\ 0 & (AS) \end{cases} \Rightarrow \frac{\sqrt{2mE'} l}{\hbar} = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \dots & (S) \\ \pi, 2\pi, \dots & (AS) \end{cases}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2}{2m l^2} \cdot \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 \stackrel{2l=L}{=} \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m L^2} \quad (n=1, 2, 3, 4, \dots)$$

Men generelt ikke mulig å finne analytisk løsning for E_n . Må beregnes numerisk.

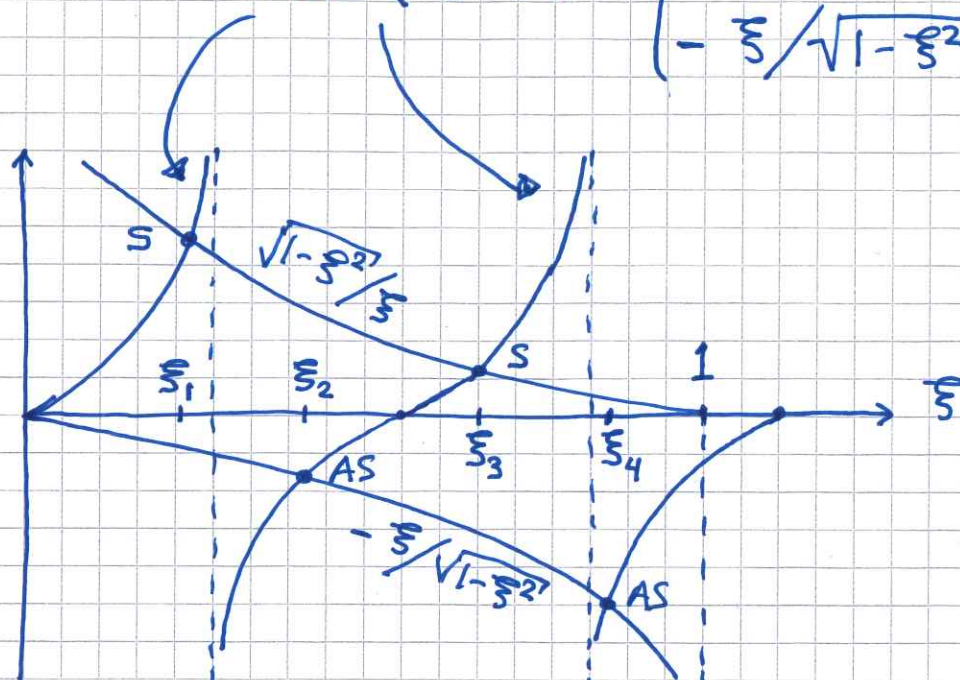
Her gjør vi det grafisk!

Introduer $\xi = \sqrt{E/V_0}$ ($0 < \xi < 1$) og

(56)

$$k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar :$$

$$\tan(k_0 l \xi) = \begin{cases} \sqrt{1-\xi^2}/\xi & (S) \\ -\xi/\sqrt{1-\xi^2} & (AS) \end{cases}$$



Her:

4 bundne tilstander

- Minst 1 bundet tilstand: $\sqrt{1-\xi^2}/\xi$ må kryссе $\tan(k_0 l \xi)$ minst 1 gang.
- N bundne tilst. hvis $(N-1)\frac{\pi}{2} < k_0 l < N\frac{\pi}{2}$, dvs
 $N < 2k_0 l/\pi + 1 < N+1$, dvs
 $N = 1 + \text{heltallsverdien av } 2\sqrt{2mV_0} l / \pi \hbar$
- $|\psi|^2 > 0$ for $|x| > l$ også når $E < V_0$.

Partikkelen kan befinne seg i det klassisk forbudte området. Men $\psi(x)$ avtar eksponentielt med økende $|x|$, $\psi(x) \sim \exp(-\kappa|x|)$, med inntrengningsdybde $1/\kappa = \hbar/\sqrt{2m(V_0-E)}$, dvs

$$\left| \frac{\psi(l + 1/\kappa)}{\psi(l)} \right| = \frac{1}{e}$$

Ubundne tilstander, $E > V_0$:

(57)

TUSL har nå løsninger på formen

$\Psi(x) = a \sin Kx + b \cos Kx$, med $K = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$,
for $|x| > l$. Da kan kontinuerlig Ψ og Ψ' i
 $x = \pm l$ oppnås for alle mulige $E > V_0$.

Med andre ord, vi har her et kontinuum av
ubundne tilstander.

