Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Φυσικής

Κβαντομηχανική Ι — *Χειμερινό Εξάμηνο 2004*

Ασκήσεις IV: Αβεβαιότητα (ΙΙ), χρονική εξέλιξη (Ι).

1. Τη χρονική στιγμή $t=0$ η κυματοσυνάρτηση ενός σωματίου έχει τη μορφή

$$\psi(x,0) = N\exp[-(x-a)^2/\varepsilon]$$

(α) Δείξτε ότι μπορεί να γραφεί

$$\psi(x,0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x{}^2)^{1/4}}\exp\left[-\frac{(x-a)^2}{4\sigma_x{}^2}\right] \text{ όπου } \sigma_x^2 = (\Delta x)_0^2 \equiv \left\langle x^2\right\rangle_0 - \left\langle x\right\rangle_0^2 = \frac{\varepsilon}{4}$$

(β) Δείξτε ότι

$$\sigma_p^2 \equiv (\Delta p)_0^2 \equiv \left\langle p^2\right\rangle_0 - \left\langle p\right\rangle_0^2 = \hbar^2/4\sigma_x^2 = \hbar^2/\varepsilon$$

(γ) Δείξτε ότι

$$g(p) = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}}\exp\left(-\frac{p^2}{4\sigma_p^2} - \frac{i}{\hbar}pa\right)$$

(δ) Υποθέστε ότι μετά τη χρονική στιγμή $t=0$ το σωμάτιο αφήνεται ελεύθερο. Δείξτε ότι

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2(t))^{1/2}}\exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2\sigma_x^2(t)}\right] \text{ με } \sigma_x^2(t) = (\Delta x)_t^2 \equiv \left\langle x^2\right\rangle_t - \left\langle x\right\rangle_t^2 = \sigma_x^2 + \frac{t^2}{m^2}\sigma_p^2$$

Απ.:
Για την απάντησή σας μπορείτε να χρησιμοποιείστε τα ολοκληρώματα :

$$\int_0^\infty dx x^n \exp(-ax^m) = \frac{1}{m}a^{-\frac{n+1}{m}}\Gamma\left(\frac{n+1}{m}\right)$$

όπου (για $k \neq -1,-2,...$) : $\Gamma(k+1) = k\Gamma(k)$, $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$

και

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-ax^2 \pm ibx) = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\exp\left(-\frac{b^2}{4a}\right)$$

(η τελευταία σχέση ισχύει για $a>0$ αλλά μπορεί να επεκταθεί και για $a=\pm ic$, $c>0$)

Αποτελέσματα/λύσεις:

(α) Κανονικοποίηση:

$$|N|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{2(x-a)^2}{\varepsilon}\right] \underset{x=y+a}{=} |N|^2\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-2y^2/\varepsilon} = |N|^2\sqrt{\pi\varepsilon/2} = 1 \rightarrow |N| = (2/\pi\varepsilon)^{1/4}$$

Διασπορά θέσης:

$$\langle x\rangle_0=(2/\pi\varepsilon)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}dx x\exp[-\frac{2}{\varepsilon}(x-a)^2]=a$$

$$\langle x^2\rangle_0=(2/\pi\varepsilon)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}dx x^2\exp\left[-\frac{2}{\varepsilon}(x-a)^2\right]=(2/\pi\varepsilon)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}dy(y+a)^2e^{-2y^2/\varepsilon}=a^2+\frac{\varepsilon}{4}$$

$$\Rightarrow\sigma_x^2=(\Delta x)_0^2\equiv\langle x^2\rangle_0-\langle x\rangle_0^2=\frac{\varepsilon}{4}$$

(β) Διασπορά ορμής :

$$\langle p\rangle=(2/\pi\varepsilon)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[-(x-a)^2/\varepsilon\right]\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\exp\left[-(x-a)^2/\varepsilon\right]=0$$

$$\langle p^2\rangle=(2/\pi\varepsilon)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[-(x-a)^2/\varepsilon\right]\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\exp\left[-(x-a)^2/\varepsilon\right]=$$

$$=(2/\pi\varepsilon)^{1/2}\hbar^2\frac{2}{\varepsilon}\int_{-\infty}^{\infty}dy\,\mathrm{e}^{-2y^2/\varepsilon}\left(1-\frac{2}{\varepsilon}y^2\right)=\hbar^2\left(\frac{2}{\varepsilon}-\frac{1}{\varepsilon}\right)=\frac{\hbar^2}{\varepsilon}$$

$$\sigma_p^2=(\Delta p)_0^2\equiv\langle p^2\rangle_0-\langle p\rangle_0^2=\frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2}=\frac{\hbar^2}{\varepsilon}$$

$$\Rightarrow(\Delta x)_0^2(\Delta p)_0^2=\frac{\hbar^2}{4}$$

(γ) Πλάτος πιθανότητας να βρεθεί το σωμάτιο με ορμή $(p,p+dp)$:

$$g(p)=(2/\pi\varepsilon)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[-\frac{i}{\hbar}px-\frac{(x-a)^2}{\varepsilon}\right]=(2/\pi\varepsilon)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}pa}\int_{-\infty}^{\infty}dy\exp\left[-\frac{i}{\hbar}py-\frac{y^2}{\varepsilon}\right]=$$

$$=\left(\frac{\varepsilon}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}pa-\frac{\varepsilon p^2}{4\hbar^2}\right]=\frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}pa-\frac{p^2}{4\sigma_p^2}\right]$$

Μπορείτε να ελέγξετε ότι το αποτέλεσμα (β) μπορεί να παραχθεί από τη σχέση:

$$\langle p^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dp|g(p)|^2p^2.$$

(δ) **Χρονική εξέλιξη** :

Δείξτε πρώτα ότι $\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}g(p)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}t\frac{p^2}{2m}-\frac{i}{\hbar}px\right]$

[Ξεκινήστε από την προφανή σχέση $\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}g(p,t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)$ και αντικαταστήστε στην ελεύθερη εξίσωση Schrodinger . Θα οδηγηθείτε αμέσως στο συμπέρασμα ότι

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}g(p,t)=\frac{p^2}{2m}g(p,t)\Rightarrow g(p,t)=g(p,0)e^{-\frac{i}{\hbar}t\frac{p^2}{2m}}$$]

Επομένως

$$\psi(x,t)=\frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}pa}\int_{-\infty}^{\infty}dp\exp\left[-p^2(\frac{1}{4\sigma_p^2}+\frac{it}{2m})+\frac{i}{\hbar}px\right]$$

$$=\left(\frac{\sigma_x^2}{2\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{\Sigma_t}\exp\left[-\frac{(x-a)^2}{4\Sigma_t^2}\right]\quad \text{όπου } \Sigma_t^2=\sigma_x^2+\frac{i\hbar^2}{2m}t$$

και έτσι

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\left(\sigma_x^2+\frac{\sigma_p^2}{m^2}t^2\right)^{1/2}}\exp\left[-\frac{(x-a)^2}{2\left(\sigma_x^2+\frac{\sigma_p^2}{m^2}t^2\right)}\right]$$

Σχόλιο.

Το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή της θέσης, $\hat{X}\varphi_a(x)=a\varphi_a(x)$, μπορεί να λυθεί με δύο παρατηρήσεις.

Η πρώτη είναι ότι η δράση του εν λόγω τελεστή πάνω σε μια τυχαία συνάρτηση ορίζεται από την

$$\hat{X}f(x)=xf(x).$$

Η δεύτερη αφορά σε μια ιδιότητα της δ-συνάρτησης που μπορεί να αποδειχθεί εύκολα:

$$f(x)\delta(x-a)=f(a)\delta(x-a).$$

Με βάση τις παρατηρήσεις αυτές είναι εύκολο να διαπιστώσουμε ότι $\varphi_a(x)\sim\delta(x-a)$. Η "συνάρτηση" αυτή, προφανώς, δεν είναι κανονικοποιήσιμη και έτσι σκεφτόμαστε ότι μια αναπαράστασή της σαν την $\exp[-(x-a)^2/\varepsilon]$ μπορεί να μας βοηθήσει να περιγράψουμε ένα εντοπισμένο σωματίδιο.

Από τα αποτελέσματα της άσκησης διαπιστώσατε ότι όσο πιο εντοπισμένο θέλετε να είναι το σωματίδιο $(\varepsilon\sim(\Delta x)^2\to 0)$ τόσο πιο αβέβαιοι είστε για την ορμή του $((\Delta p)^2\sim\frac{1}{\varepsilon}\to\infty)$.

Παρατηρείστε εδώ ότι η διαπίστωση αυτή είναι άνευ σημασίας αν μιλάμε για σώματα μακροσκοπικών διαστάσεων.

Αξίζει επίσης να παρατηρήσετε ότι η χρονική εξέλιξη αναπόδραστα αυξάνει την αβεβαιότητα ως προς τη θέση του σωματιδίου και μάλιστα τόσο περισσότερο όσο πιο εντοπισμένο ήταν το σωμάτιο τη στιγμή $t=0$. Αν, για παράδειγμα, θεωρήσουμε ένα ηλεκτρόνιο ($m_e\sim10^{-27}gr$) το οποίο είναι εντοπισμένο σε μια περιοχή του μεγέθους του ατόμου του Υδρογόνου ($(\Delta x)_0\sim 1fm=10^{-13}cm$) μέσα σε τρείς ώρες ($t\sim10^4\sec$) η αβεβαιότητά μας ως προς τη θέση του θα είναι της τάξης μεγέθους της απόστασης Γης-Ηλίου ($(\Delta x)_t\sim10^8 km$)! Βέβαια, αν μιλάμε για σώματα μακροσκοπικών διαστάσεων (και αντίστοιχης μάζας) η ίδια ανάλυση θα σας δώσει αποτελέσματα άνευ πρακτικής σημασίας.

2. Η κατάσταση ενός σωματιδίου, σε μια ορισμένη χρονική στιγμή, περιγράφεται από την

$$\psi(x)=Nxe^{-x^2/\varepsilon}.$$

(α) Υπολογίστε τη διασπορά της θέσης Δx και της ορμής Δp

(Απ.: $N=(2^5/\pi\varepsilon^3)^{1/4}$, $\Delta x=\sqrt{3\varepsilon}/2$, $\Delta p=\hbar\sqrt{3/\varepsilon}$)

(β) Βρείτε την πυκνότητα πιθανότητας να έχει ορμή στο διάστημα $(p, p+dp)$.

(Απ.: $|g(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{\varepsilon}{\hbar}\right)^{1/2} \frac{\varepsilon p^2}{\hbar^2}\exp(-\frac{\varepsilon p^2}{2\hbar^2})$)

(γ) Ποιές είναι οι πιθανώτερες θέσεις και ποιές οι πιθανώτερες ορμές του σωματιδίου;

(Απ.: $x = \pm\sqrt{\frac{\varepsilon}{2}}$, $p = \pm\hbar\sqrt{\frac{2}{\varepsilon}}$)

3. Η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου , σε μια ορισμένη στιγμή, είναι :

$$\psi(x) = Ne^{-a|x|}$$

(α) Υπολογίστε την πυκνότητα πιθανότητας να έχει το σωμάτιο ορμή μεταξύ p και $p+dp$.

(Απ. : $|g(p)|^2 = \frac{2a^3}{\pi\hbar(a^2 + p^2/\hbar^2)^2}$)

(β) Βρείτε την πιθανότητα το σωμάτιο να έχει ορμή $|p| \le \hbar a$

(Απ.: $\mathrm{P}(|p| \le \hbar a) = \int_{-\hbar a}^{\hbar a} dp \frac{2a^3}{\pi\hbar(a^2 + p^2/\hbar^2)^2} = \frac{4}{\pi}\int_0^1 dx \frac{1}{(1+x^2)^2} = \underset{x=\tan\theta}{=} \frac{4}{\pi}\int_0^{\pi/4} d\theta \cos^2\theta = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}$)

(γ) Βρείτε τη διασπορά της θέσης και της ορμής του. (Απ.: $\Delta x = 1/a\sqrt{2}$, $\Delta p = \hbar a$)

4. Έστω τετραγωνικά ολοκληρώσιμη συνάρτηση $\psi(x)$. Γράψτε $\hat{p}' = \hat{p} - \langle\hat{p}\rangle$, $\hat{x}' = \hat{x} - \langle\hat{x}\rangle$ και $\varphi(x) = \hat{p}'\psi(x) - ia\hat{x}'\psi(x)$ (όπου α τυχαίος πραγματικός αριθμός).

Με αφετηρία την προφανή ανισότητα $\int_{-\infty}^{\infty} dx|\varphi(x)|^2 \ge 0$ δείξτε ότι $\Delta x \Delta p \ge \frac{\hbar}{2}$.

Απ.: $\int_{-\infty}^{\infty} dx|\varphi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\left[\hat{p}'^*\psi^*\hat{p}'\psi - ia\hat{p}'^*\psi^*\hat{x}'\psi + ia\hat{x}'^*\psi^*\hat{p}'\psi + a^2\hat{x}'^*\psi^*\hat{x}'\psi\right] =$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx\left[\psi^*\hat{p}'^2\psi + ia\psi^*[\hat{x}', \hat{p}']\psi + a^2\psi^*\hat{x}'^2\psi\right] = (\Delta p)^2 - a\hbar + a^2(\Delta x)^2 \ge 0$$

Η τελευταία σημαίνει ότι η διακρίνουσα του τριωνύμου πρέπει να είναι αρνητική ή μηδέν:

$$\hbar^2 - 4(\Delta p)^2(\Delta x)^2 \le 0 \quad \Rightarrow \quad (\Delta p)^2(\Delta x)^2 \ge \frac{\hbar^2}{4}$$

Σχόλια.

(1) Η ισότητα ισχύει προφανώς όταν $\hat{p}'\psi(x) - ia\hat{x}'\psi(x) = 0$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = -\frac{a}{\hbar}(x - x_0)\psi(x) + \frac{i}{\hbar}p_0\psi(x) \Rightarrow \psi(x) = A\exp\left[-a\frac{(x-x_0)^2}{2\hbar} + \frac{i}{\hbar}p_0 x\right]$$

Όπου γράψαμε $\langle\hat{x}\rangle = x_0$, $\langle\hat{p}\rangle = p_0$. Η κατάσταση αυτή είναι το λεγόμενο "κυματοπακέτο ελάχιστης αβεβαιότητας" και είναι αυτή που εξετάσαμε στο πρόβλημα 1 (με την επουσιώδη διαφορά εκεί θεωρήσαμε $p_0 = 0$).

(2) Είναι προφανές ότι μπορούμε να επεκτείνουμε την παραπάνω απόδειξη σε οποιουσδήποτε ερμιτιανούς τελεστές οι οποίοι δεν μετατίθενται $[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C}$.

Εδώ θα γράψουμε: $\hat{A}' = \hat{A} - \left\langle \hat{A} \right\rangle$, $\hat{B}' = \hat{B} - \left\langle \hat{B} \right\rangle$ και $\varphi(x) = \hat{A}'\psi(x) - ia\hat{B}'\psi(x)$, $a \in \mathbb{R}$

και θα επαναλάβουμε τον υπολογισμό για να καταλήξουμε στην

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\left\langle \hat{C} \right\rangle^2$$

5. Σε πρόβλημα που αφορούσε στο απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού φοιτητής ισχυρίστηκε ότι το γεγονός ότι η ενέργεια είναι κβαντισμένη σημαίνει ότι και η ορμή είναι κβαντισμένη :

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad \Rightarrow \quad p_n^2 = 2mE_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{L^2}.$$

Γιατί έκανε λάθος ; Υπάρχει κάποιο όριο στο οποίο ο φοιτητής θα μπορούσε να διασωθεί;

6. Σε προηγούμενη άσκηση είχαμε βρεί ότι σε απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού η πιθανότητα να έχει σωμάτιο με καθορισμένη ενέργεια, ορμή στην περιοχή $(p, p + dp)$ είναι :

$$\left|g(p)\right|^2 dp = \frac{4}{\pi\hbar L}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{\sin^2\left(\frac{n\pi}{2} - \frac{pL}{2\hbar}\right)}{[(n\pi / L)^2 - (p/\hbar)^2]^2}\, dp$$

(α) Δείξτε η πιθανότητα αυτή γίνεται μέγιστη στις τιμές $p_{\max} = \frac{\hbar\pi}{L} n$

(β) Παρατηρώντας ότι για $n \to \infty$ η παραπάνω πιθανότητα ουσιαστικά μηδενίζεται για $p \neq p_{\max}$, δικαιολογίστε τον Bohr που θεωρούσε ότι στο όριο των μεγάλων κβαντικών αριθμών μπορούσε να χρησιμοποιεί τις σχέσεις της κλασικής φυσικής και συνηγορήστε υπέρ του φοιτητή της προηγούμενης άσκησης.

(γ) Τι γίνεται με τις σχέσεις αβεβαιότητας στη συγκεκριμένη περίπτωση;

7. Κβαντομηχανική και ενέργεια…

(α) Στη Κβαντική Μηχανική δεν έχει νόημα να μιλάμε ξεχωριστά για "κινητική ενέργεια" και για "δυναμική ενέργεια" αλλά μόνο για την (συνολική) ενέργεια. Μπορείτε να καταλάβετε γιατί;

(β) Στην Κλασική Μηχανική δεν είναι δυνατό να είναι $E < V$ γιατί αυτό θα σήμαινε ότι $\frac{p^2}{2m} < 0$.

Στη Κβαντική Μηχανική παρόλο που ο τελεστής $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ είναι θετικά ορισμένος (όλες του οι ιδιοτιμές είναι θετικές ή μηδέν) εξετάζουμε θεωρητικά (και αξιοποιούμε πειραματικά) τη δυνατότητα $E < V$. Μπορείτε να καταλάβετε γιατί;