Øving 1

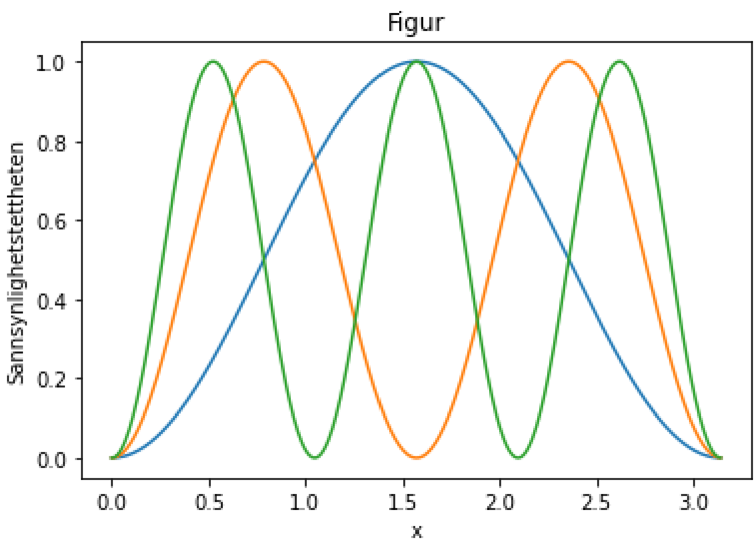
1) En bølgefunksjon er definert som:

$$\psi(x) = \begin{cases} sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & \text{if } 0 < x < L. \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

a) La $L = \pi$ og plott $|\psi(x)|^2$ for $n = 1, 2, 3$

In [1]:

```
# YOUR CODE HERE
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
L = np.pi

x = x = np.arange(0, L, 0.01)
for n in range(1,4):
    f = (np.sin(n*x*np.pi/L))**2
    plt.plot(x, f)
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('Sannsynlighetstettheten')
plt.title('Figur')
plt.show()
```



b) Beregn:

$$\int_0^L |\psi^2(x)| dx$$

og basert på Borns fortolkning, forklar hvorfor dette ikke er en fullverdig bølgefunksjon. Hva må gjøres for at $\psi(x)$ blir en fullverdig bølgefunksjon?

$$|\psi^2(x)| = sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Skal beregne integralet:

$$\int_0^L sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx$$

, bruker substutisjonen

$$u = \frac{n\pi x}{L}$$

får at svaret blir

$$\frac{L}{2}$$

.

Det er ikke en fullverdig bølgefunksjon fordi integralet ikke ble 1. Den må normaliseres for at dette skal gå. Det kan gjøres ved å gange inn

$$\sqrt{\frac{2}{L}}$$

2) Skriv opp kravet som må tilfredstilles for at en operator $\hat{\Omega}$ kan kalles hermitesk. Formuler kravet med både integral- og braket-notasjon.

En operator er hermitesk dersom den tilfredsstiller:

$$\left\langle \psi|\hat{\Omega}|\phi \right\rangle = \left\langle \phi|\hat{\Omega}|\psi \right\rangle^*$$

eller:

$$\int \psi^* \left(\hat{\Omega}\phi\right) d\tau = \int \phi\left(\hat{\Omega}\psi\right)^* d\tau$$

3) Vis at $\hat{x}$ og $\hat{p}_x$ er hermiteske operatorer. Du kan anta at funksjonene du bruker i definisjonen av hermitisitet går til null når $x \rightarrow \pm\infty$.

$\hat{x} = x, \hat{p_x} = -i\hbar\frac{d}{dx}$

$\hat{x}$ er en reell operator. Dermed vil $\hat{x}^* = x$

$$\int \phi^*(\hat{x}\psi)dx = \int \phi^*(x\psi)dx = \int (x\phi)^*\psi dx = \int \psi(x\phi)^* dx$$

Dermed er $\hat{x}$ en hermitisk operator

$\hat{p_x}^* = i\hbar\frac{d}{dx}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(\hat{p_x}\psi)dx = -\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* i\hbar\frac{d\psi}{dx}dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*\frac{d\psi}{dx}dx$$

Ved delvis integrasjon blir dette:

$$-i\hbar\left([\phi^*\psi]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi\frac{d\phi^*}{dx}dx\right)$$

Ved å anta at funksjonene går mot null når $x \to \pm\infty$ vil uttrykket i klammeparantesen bli 0. Da står vi igjen med:

$$i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} \psi\frac{d\phi^*}{dx}dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi i\hbar\frac{d\phi^*}{dx}dx$$

Ved å konjugere $\hat{p_x}$ baklengs, vi dette være lik:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi\left(-i\hbar\frac{d\phi}{dx}\right)^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi\left(\hat{p_x}\phi\right)^* dx$$

Dermed er:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(\hat{p_x}\psi)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi\left(\hat{p_x}\phi\right)^* dx$$

og $\hat{p_x}$ er en hermitisk operator.

4) Vi er ofte interessert i egenverdilikningen til en hermitesk operator:

$$\hat{\Omega}\,\phi_n = \omega_n\,\phi_n, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

> **a)** Hvilke størrelser kalles egenverdien og egenfunksjonen i likningen? Hvilke verdier av Ω er det mulig å måle i et eksperiment?

ϕ er egenfunksjon. ω er egenverdien.

I et eksperiment kan man kun måle egenverdiene til Ω

> **b)** Gitt en vilkårlig bølgefunksjon ψ (en superposisjon av egenfunksjonene ϕ_n), hvordan kan vi uttrykke sannsynligheten for at resultatet blir ω_k i en måling av Ω?

Sannsynligheten for at resultatet blir ω_k kan uttrykkes ved kvadratet av kvotienten. Altså $|c_k|^2$

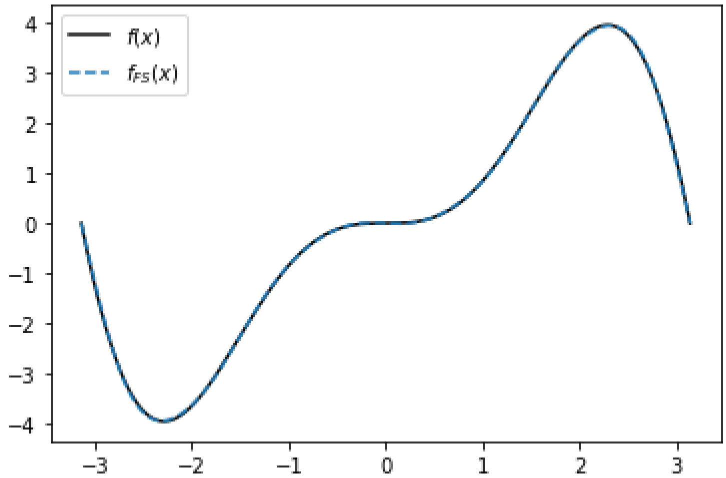
c) Funksjonene $\cos(n\pi x/L)$ og $\sin(n\pi x/L)$ er egenfunksjoner av operatoren $\frac{d^2}{dx^2}$. I kodecellen under er funksjonen $f(x) = x^2 sin(x)$ prøvd tilpasset med lineær kombinasjon av k sin og cos funksjoner (Fourier transformasjon),

$$f_{FS}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + B_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$

Se hvilken effekt det har og endre k. Hva heter egenskapen som gjør at disse funksjonene kan benyttes til å tilpasse en tilfeldig valgt funksjon ($x^2 \sin(x)$ i dette tilfellet)? Kan $g(x) = \sum_n B_n \sin(\frac{n\pi}{L}x)$ beskrive en tilfeldig valgt funksjon? Hvis ikke, gi ett eksempel.

In [1]:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

k = 6
L = np.pi

#Define domain
dx = 0.001
x = L * np.arange(-1,1+dx,dx)


# Define any function
def f(x):
    return x**2 * np.sin(x)


# Compute Fourier series (FS) from n=0 to n=k
def fourier(x, y, k):
    f_FS = np.zeros_like(x)
    A = np.zeros(k+1)
    B = np.zeros(k+1)
    for i in range(0,k+1):
        A[i] = np.sum(y * np.cos(np.pi*i*x/L)) * dx
        B[i] = np.sum(y * np.sin(np.pi*i*x/L)) * dx
        f_FS += A[i] * np.cos(np.pi*i*x/L) + B[i] * np.sin(np.pi*i*x/L)
    return f_FS


fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(x, f(x), color='k', label='$f(x)$')
ax.plot(x, fourier(x, f(x), k), '--', label='$f_{FS}(x)$')
ax.legend()
plt.show()
```



Jo større k, jo nærmere kommer tilpasningen.

Egenskap: sinus og cosinus danner en komplett base.

Man kan ikke beskrive alle funksjoner med bare sinus. f(x)=1 er ikke mulig å beskrive, siden sinus er 0 i 0.

> **d)** Vis at usikkerheten $\Delta\Omega$ er null dersom bølgefunksjonen er en egenfunksjon av Ω.
> Usikkerheten $\Delta\Omega$ er definert som:

$$\Delta\Omega = \sqrt{\left\langle \left(\hat{\Omega} - \langle\Omega\rangle\right)^2 \right\rangle}$$

Usikkerheten er definert som: (Vi lar ψ være normalisert)

$$(\Delta\Omega)^2 = \left\langle (\hat{\Omega} - \langle\Omega\rangle)^2 \right\rangle$$

Vi lar ω være egenverdien til $\hat{\Omega}$.

Uttrykket blir dermed:

$$\left\langle (\hat{\Omega} - \omega)^2 \right\rangle = \left\langle \hat{\Omega}^2 - 2\hat{\Omega}\omega + \omega^2 \right\rangle = \left\langle \Psi|\hat{\Omega}^2|\Psi \right\rangle - \left\langle \Psi|2\hat{\Omega}\omega|\Psi \right\rangle + \left\langle \Psi|\hat{\omega}^2|\Psi \right\rangle$$

Ettersom bølgefunksjonen er en egenfunksjon til Ω, blir uttrykket: $\omega^2 - 2\omega^2 + \omega^2 = 0$, og siden rota av 0 er 0 er usikkerheten også lik 0

> **e)** Forklar resultatet i d) med den generaliserte Born-fortolkningen.

Ved en egenfunksjon er sannsynligheten for å få egenverdien alltid 1, altså vil usikkerheten være 0.

5) Hva er definisjonen på kommutatoren $\left[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2\right]$ mellom $\hat{\Omega}_1$ og $\hat{\Omega}_2$?

$$\left[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2\right] = \hat{\Omega}_1\hat{\Omega}_2 - \hat{\Omega}_2\hat{\Omega}_1$$

6) Vis at $\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] = i\hbar$ ved å la kommutatoren virke på en vilkårlig funksjon $\phi(x)$.

$\hat{x} = x, \hat{p_x} = -i\hbar \frac{d}{dx}$

$\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] \phi(x) = \hat{x}\hat{p}_x\phi(x) - \hat{p}_x\hat{x}\phi(x) = -xi\hbar\frac{d\phi(x)}{dx} + i\hbar\frac{d(x\phi(x))}{dx}$

$= i\hbar\left(-x\frac{d\phi(x)}{dx} + \left(\phi(x) + x\frac{d\phi(x)}{dx}\right)\right) = i\hbar\phi(x)$

Dermed er:

$\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] \phi(x) = i\hbar\phi(x)$

slik at:

$\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] = i\hbar$ Q.E.D.

7) Utled $\Delta x\, \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$ fra det generelle uttrykket for Heisenbergs usikkerhetsprinsipp:

$$\Delta\Omega_1\, \Delta\Omega_2 \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \left[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2\right] \right\rangle\right|$$

Lar $\Delta\Omega_1 = \Delta\hat{x}$ og $\Delta\Omega_2 = \Delta\hat{p}_x$

Fra 6) har vi at:

$\left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] = i\hbar$

Altså vil uttrykket for usikkerheten bli:

$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}_x \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] \right\rangle\right|$

Ved å sette inn resultatet fra 6), ettersom $i\hbar$ er konstant, vil forventningsverdien være konstanten:

$\frac{1}{2}\left|\left\langle \left[\hat{x}, \hat{p}_x\right] \right\rangle\right| = \frac{1}{2}|\langle i\hbar\rangle| = \frac{1}{2}|i\hbar| = \frac{1}{2}\hbar$

Dermed er:

$\Delta\hat{x}\Delta\hat{p}_x \geq \frac{1}{2}\hbar$

8) Hva mener vi når vi sier at to operatorer kommuterer? La oss anta at vi har to kommuterende operatorer, $\hat{A}$ og $\hat{B}$. Vis at dersom:

$$\hat{A}\,\psi_n = a_n\,\psi_n, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

så er $\phi_n = \hat{B}\,\psi_n$ også en egenfunksjon av $\hat{A}$ for alle n. Dersom egenverdiene er forskjellige ($a_1 \neq a_2 \neq \ldots$), kan man vise at egenfunksjonene er unike opp til en konstant. Med andre ord er $\phi_1 = b_1\psi_1, \phi_2 = b_2\psi_2, \ldots$ for et sett konstanter $b_1, b_2, \ldots$. Vis at $\hat{A}$ og $\hat{B}$ har identiske egenfunksjoner. Kan observablene A og B kan ha veldefinerte verdier på samme tid?

Svar på tekstspørsmål: At to operatorer kommuterer vil matematisk si at det finnes en funksjon som er egenfunksjon til begge operatorene. Praktisk sett betyr det at de to fysiske størrelsene operatorene representerer er målbare samtidig. Altså kan begge operatorene ha veldefinerte verdier på samme tid.

Siden $\hat{A}$ og $\hat{B}$ kommuterer, vet vi at:

$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$ og at $\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi$

For alle n, er $\phi = \hat{B}\psi$

Følger det at:

$\hat{A}\phi = \hat{A}\hat{B}\psi$

Videre beregninger, og bruk av at det er oppgitt at ψ er en egenfunsksjon til $\hat{A}$ gir:

$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}\omega\psi = \omega\hat{B}\phi = \omega\phi$

Hvilket medfører at:

$\hat{A}\phi_n = \omega_n\phi_n$, n=1,2,3...

Dermed er ϕ_n en egenfunksjon av $\hat{A}$ for alle n.