

Øving 2

1) Bølgefunksjonen $\psi_n(x)$ for en partikkel in en boks er gitt ved:

$$\psi_n(x) = C \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Normer $\psi_n(x)$ (finn C) og forklar hvorfor dette gjøres.

Bølgefunksjonen må normeres på grunn av Borns tolkning. Den sier at sannsynlighet for å finne partikkelens posisjon ved en gitt tid er gitt ved å t normkvadratet av funksjonen. Det gir ingen mening om summen av sannsynlighetene for de ulike tilstandene blir mer eller mindre enn 1. Ettersom "totalen" ikke blir 100% sjanse. Derfor normaliseres funksjonen slik at dette blir oppfylt.

Bølgefunksjonen er normert dersom $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \int_0^L |\psi^2(x)| dx = 1$

Ettersom bølgefunksjonen er reell (antar at C er reell), blir dette:

$$\begin{aligned} \int_0^L C^2 \sin^2\left(\frac{\pi n x}{L}\right) dx &= 1 \\ C^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi n x}{L}\right) dx &= 1 \end{aligned}$$

Bruker substitusjonen $u = \frac{\pi n x}{L}$, på integralet:

$$C^2 \frac{L}{\pi n} \int_0^{\pi n} \sin^2(u) du = 1$$

Finner løsningen v.h.a. Rottmann:

$$\begin{aligned} C^2 \frac{L}{\pi n} \left[\frac{u}{2} - \frac{1}{2} \sin(u) \cos(u) \right]_0^{\pi n} &= 1 \\ C^2 \frac{L}{\pi n} \left(\frac{\pi n}{2} \right) &= 1 \\ C^2 \frac{L}{2} &= 1 \\ C^2 &= \frac{2}{L} \\ C &= \sqrt{\frac{2}{L}} \end{aligned}$$

Dermed blir den normerte bølgefunksjonen:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

2) I kodecellen under plottes ψ_n og ψ_n^2 for n verdiene spesifisert i `n_list`. Bruk kodecellen til å visualisere $\psi_n(x)$ for forskjellige n og bestem hvilket forhold det er mellom n og antall nodalplan.

In [3]:

```

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

def psi(x, n, L):
    # Particle in a box of length L
    return np.sqrt(2/L) * np.sin(n*x * np.pi/L)

n_list = [1,2,3]
L = 1
x = np.linspace(0, L, 100)

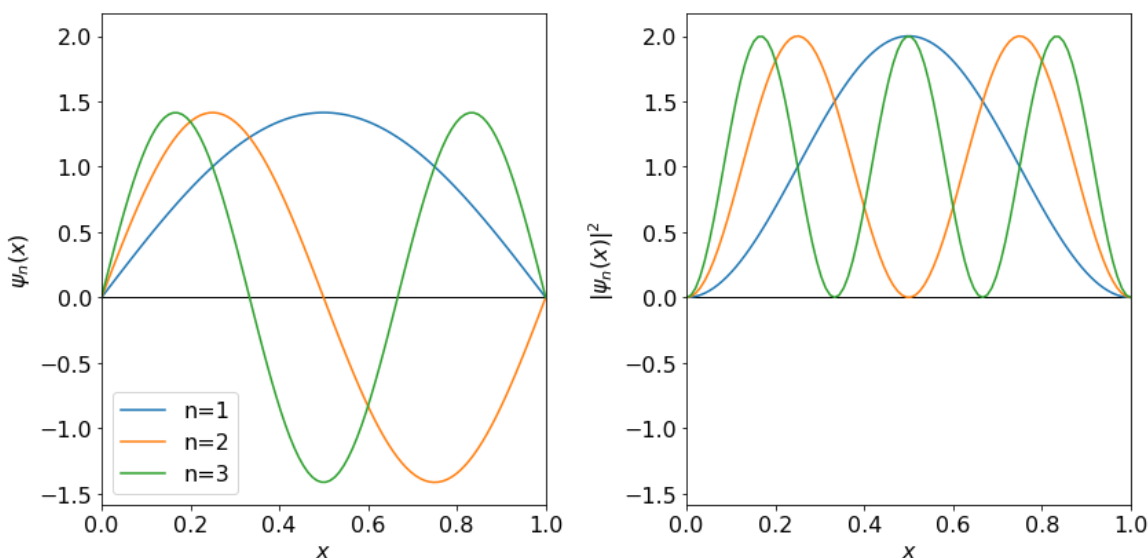
#Plotting psi and psi squared
mpl.rcParams['font.size'] = 16

fig = plt.figure(figsize=(12, 6))
ax1 = plt.subplot(1, 2, 1)
plt.axhline(y=0, color='black', linewidth=1)
for n in n_list:
    plt.plot(x, psi(x, n, L), label = 'n={}'.format(n))
plt.legend()
plt.xlabel('$x$')
plt.ylabel('$\psi_n(x)$')
plt.xlim(0,L)

ax2 = plt.subplot(1, 2, 2, sharex=ax1, sharey=ax1)
plt.axhline(y=0, color='black', linewidth=1)
for n in n_list:
    plt.plot(x, psi(x, n, L)**2)
plt.xlabel('$x$')
plt.ylabel('$|\psi_n(x)|^2$')

plt.tight_layout()
plt.show()

```



Antall nodalplan er gitt ved: $n-1$

3) Bruk koden nedenfor til å bestemme sannsynligheten for å finne partikkelen mellom $\frac{1}{4}L$ og $\frac{3}{4}L$ og $0.499L$ og $0.501L$, for bølgefunksjonen med $n = 1$ og $n = 2$?

In [6]:

```
from scipy.integrate import quad

lower_limit = 0.499 * L
upper_limit = 0.501 * L
n_list = [1,2]

def psi2(x,n,L):
    return psi(x,n,L)**2

for n in n_list:
    integral, error = quad(psi2, lower_limit, upper_limit, args=(n,L))
    print('The probability of finding the particle between {} L and {} L for n = {} is: {:.2e}'.format(lower_limit, upper_limit, n, integral))
```

```
The probability of finding the particle between 0.499 L and 0.501 L
for n = 1 is: 4.00e-03
The probability of finding the particle between 0.499 L and 0.501 L
for n = 2 is: 5.26e-08
```

Mellom $\frac{1}{4}L$ og $\frac{3}{4}L$, er sannsynligheten ved $n = 1$ lik 81.8%, ved $n = 2$ er sannsynligheten 50%

Mellom $0.499L$ og $0.501L$, er sannsynligheten ved $n = 1$ lik 0.4%, ved $n = 2$ er sannsynligheten 0.00000526%

4) Man kan måle partikkelens posisjon x og bevegelsesmengde p_x , og disse størrelsene har tilhørende operatorer, $\hat{x}$ og $\hat{p}_x$, definert ved

$$\hat{x}\phi(x) = x\phi(x), \quad \hat{p}_x\phi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x),$$

der $\phi(x)$ er en vilkårlig funksjon.

Anta at vi preparerer partikkelen i tilstanden ψ_n og måler dens posisjon og bevegelsesmengde fem tusen ganger. En god tilnærming av gjennomsnittet til den observerte posisjonen og bevegelsesmengden er da git ved forventningsverdiene $\langle\hat{x}\rangle$ og $\langle\hat{p}_x\rangle$:

$$\langle\hat{x}\rangle = \int_0^L \psi_n(x)^* \hat{x} \psi_n(x) dx, \quad \langle\hat{p}_x\rangle = \int_0^L \psi_n(x)^* \hat{p}_x \psi_n(x) dx.$$

Vis at for en partikkel i tilstand ψ_2 gjelder

$$\langle\hat{x}\rangle = \frac{L}{2}, \quad \langle\hat{p}_x\rangle = 0,$$

Antar den ferdig normerte bølgefunksjonen fra oppgave 1:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

For $n=2$:

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi 2x}{L}\right)$$

Lar operatoren virke i integralet:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= \int_0^L \psi_2(x)^* \hat{x} \psi_2(x) dx \\ &= \int_0^L \psi_2(x)^* x \psi_2(x) dx \\ &= \int_0^L |\psi_2(x)|^2 x dx \end{aligned}$$

Setter inn bølgefunksjonen. Den er reell, så man trenger ikke tenke på konjugering.

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

Bruker samme substitusjon som i 1:

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{L} \int_0^{2\pi} \sin^2(u) \frac{uL}{2\pi} \frac{L}{2\pi} du \\ &= \frac{L}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} \sin^2(u) u du \\ &= \frac{L}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} u - \cos(2u) u du \end{aligned}$$

Ved bruk av Rottmann:

$$\begin{aligned} &= \frac{L}{4\pi^2} \left[\frac{u^2}{2} - \left(\frac{1}{4} \cos(2u) \frac{u}{2} \sin(2u) \right) \right]_0^{2\pi} \\ &= \frac{L}{4\pi^2} (2\pi^2) \\ &= \frac{L}{2} \end{aligned}$$

Dermed er det vist at $\langle \hat{x} \rangle = \frac{L}{2}$

Vil vise at $\langle \hat{p}_x \rangle = 0$

Går frem på samme måte som for $\langle x \rangle$:

$$\begin{aligned}\langle \hat{p}_x \rangle &= \int_0^L \psi_2(x)^* \hat{p}_x \psi_2(x) dx \\ &= \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi 2x}{L}\right) \hat{p}_x \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi 2x}{L}\right) dx \\ &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{\pi 2x}{L}\right) \hat{p}_x \sin\left(\frac{\pi 2x}{L}\right) dx \\ &= -\frac{4\pi}{L^2} i\hbar \int_0^L \sin\left(\frac{\pi 2x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi 2x}{L}\right) dx\end{aligned}$$

Substituerer $u = \sin\left(\frac{\pi 2x}{L}\right)$:

$$\begin{aligned}&= -\frac{2}{L} i\hbar \int_{\sin(0)}^{\sin(2\pi)} u du \\ &= -\frac{2}{L} i\hbar \int_0^0 u du \\ &= 0\end{aligned}$$

Dermed er det vist at $\langle \hat{p}_x \rangle = 0$

5) Forventningsverdien for posisjon $\langle X \rangle$ for partikkel i boks fra oppgave 4 for ψ_2 vil være ved $0.5L$. Forklar hvordan dette kan stemme selv når ψ_2 har et nodalplan ved $x = 0.5L$.

Det er fordi forventningsverdien er mer som et snitt av de mulige posisjonene til partikkelen. Forventningsverdien sier ikke at partikkelen noen gang vil befinne seg ved $x = 0.5L$, men heller at dersom man gjør mange nok målinger, vil gjennomsnittet av dem være $0.5L$. Dermed er det ikke nødvendig at partikkelen befinner seg i nodalplanet noen gang.

I tillegg vil forventningverdien alltid være i midten av boksen, ihvertfall med den bølgefunksjonen som har blitt brukt i dette oppgavesettet.

6) I definisjonene på $\langle \hat{x} \rangle$ og $\langle \hat{p}_x \rangle$ har vi brukt at $\psi_n(x)$ er en normalisert bølgefunksjon. Gi definisjonene på $\langle \hat{x} \rangle$ og $\langle \hat{p}_x \rangle$ for en ikke normalisert bølgefunksjon $\tilde{\psi}(x)$.

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle &= \frac{\langle \tilde{\psi}(x) | \hat{x} | \tilde{\psi}(x) \rangle}{\langle \tilde{\psi}(x) | \tilde{\psi}(x) \rangle} \\ \langle \hat{p}_x \rangle &= \frac{\langle \tilde{\psi}(x) | \hat{p}_x | \tilde{\psi}(x) \rangle}{\langle \tilde{\psi}(x) | \tilde{\psi}(x) \rangle}\end{aligned}$$

7) En funksjon ϕ er en egenfunksjon av en operator $\hat{\Omega}$ dersom $\hat{\Omega}\phi(x) = \omega\phi(x)$, der ω er et tall kalt egenverdien. Hvis dette er tilfellet sier vi at tilstanden ϕ har den bestemte verdien ω for den observerbare størrelsen Ω (en måling av Ω vil alltid gi verdien ω).

a) Kan vi si at partikkelen i boks ψ_2 har en bestemt posisjon og/eller bevegelsesmengde?
(Hint: sjekk om ψ_2 er en egenfunksjon av $\hat{x}$ og $\hat{p}_x$.)

$$\hat{x}\psi_2(x) = x\psi_2(x)$$

Ettersom x er en variabel, er ikke $\psi_2(x)$ en egenfunksjon av $\hat{x}$

$$\hat{p}_x\psi_2(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi_2(x) = -i\hbar \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{\pi 2x}{L}\right) = -i\hbar \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\pi 2}{L} \cos\left(\frac{\pi 2x}{L}\right)$$

Heller ikke her får vi en egenfunksjon.

Det er dermed ikke mulig å si at partikkelen har en bestemt posisjons og/eller bevegelsesmengde i boksen. Det er kun mulig å vite noe om disse verdiene ved et gitt tidspunkt ved å måle dem.

b) Hvordan kan man forstå resultatet $\langle \hat{p}_x \rangle = 0$ når partikkelen ikke er i ro (med andre ord, ikke har en bestemt bevegelsesmengde lik null)?

Dette er fordi bevegelsesmengde blir definert i en retning. Dette medfører at partikkelen vil bevege seg like mye både i positiv og negativ retning. Dermed vil forventningsverdien for bevegelsesmengden bli 0. Selv om partikkelen er i bevegelse.

8) I cellen under kan dere spesifisere verdier for n , som en liste, og lengden for to bokser (L_1 og L_2). Energinivåene for tilstandene i de to boksene blir plottet. Hvilken effekt har endring av boksens lengde på energien og hvordan kan dette forklare ikke kvantisert-energi for makroskopiske objekter?

In [11]:

```

from matplotlib.pyplot import cm

def energy(n,L):
    # Energy (eV) for particle in box of length L
    m=1
    h=2*np.pi
    hartree2eV = 27.2114
    return (n*h)**2/(8*m*L**2) * hartree2eV

#Specifying parameters for the wavefunction
n_list = np.array([1,2,3,4])
L1 = 20
L2 = 30

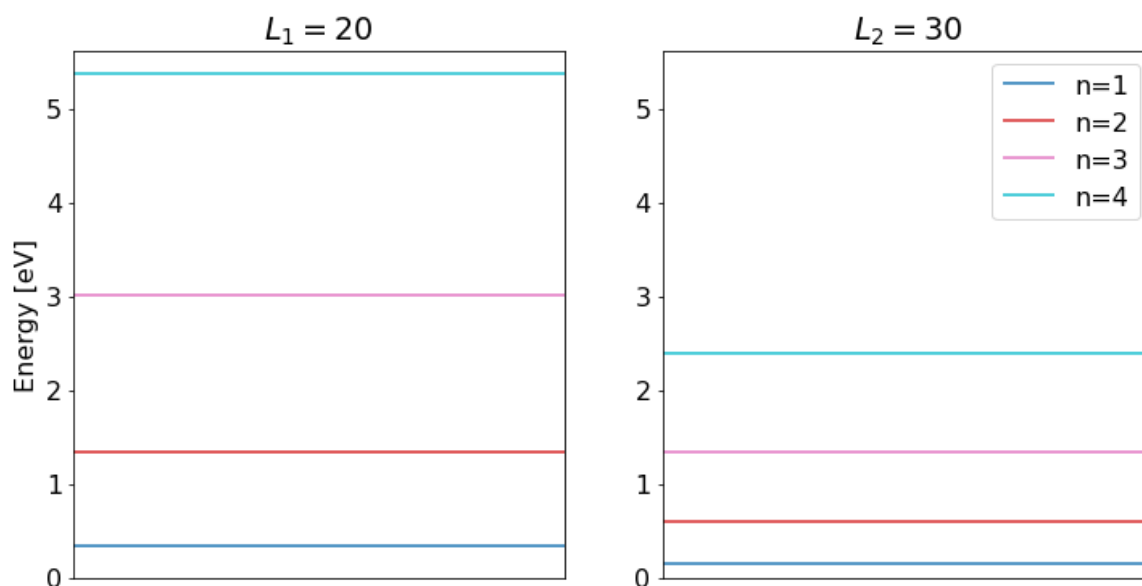
# Plot energy levels
color = cm.tab10(np.linspace(0,1,len(n_list)))

fig = plt.figure(figsize=(12, 6))
ax1 = plt.subplot(1, 2, 1)
for n in n_list:
    plt.hlines(energy(n, L1), 1, 2, colors=color[n-1])
plt.ylabel('Energy [eV]')
plt.title('$L_1={}$'.format(L1))
plt.xlim(1,2)
plt.ylim(bottom=0)
plt.xticks([])

ax2 = plt.subplot(1, 2, 2, sharex=ax1, sharey=ax1)
for n in n_list:
    plt.hlines(energy(n, L2), 1, 2, colors=color[n-1], label='n={}'.format(n))
plt.title('$L_2={}$'.format(L2))
plt.legend()

plt.show()

```



Jo lengre boksen er, jo mindre er energiforskjellene mellom de kvantiserte nivåene n . For makroskopiske objekter vil L være veldig stor. Dermed vil energiforskjellen mellom ulike n bli tilnærmet 0, slik at de ikke lenger oppleves som kvantiserte.