

1. Harmonisen värähtelijän poikkeaman odotusarvo

Ensimmäisissä harjoituksessa ja myöhemmin kursilla nähdään, että jos x on CO-molekyylin atomien poikkeama tasapainoasemasta, silloin alimman värähdystilan normitettu aaltofunktio on muotoa:

$$\psi(x) = (\alpha\pi^{1/2})^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

Laske atomien keskimääräinen poikkeama tasapainoasemasta. Käykö saamasi tulos järkeen?

Ratkaisu:

Mitä tehtävässä pitäisi tehdä?

Odotusarvon suurelle Ω , jota vastaa operaattori $\hat{\Omega}$, saadaan aina laskettua yhtälöllä

$$\langle \Omega \rangle = \int_{\tau} \psi^* \hat{\Omega} \psi d\tau,$$

missä ψ on tilan *normitettu* aaltofunktio. Odotusarvo kertoo mittaustulosten keskiarvon, jos sama kvanttimekaaninen mittausta suurelle määrälle identtisiä systeemejä.

Tehtävässä halutaan laskea odotusarvo poikkeamalle tasapainoasemasta eli x :n odotusarvo $\langle \hat{x} \rangle$ annetulle aaltofunktiolle. Tavallisen paikkaoperaattorin tapaan poikkeamaa vastaava operaattori on $\hat{x} = x$. Ratkaisemiseksi on siis integroitava odotusarvon määritelmää annettua aaltofunktiota

$$\psi(x) = (\alpha\pi^{1/2})^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

hyödyntäen.

Odotusarvointegraalin laskeminen:

Sijoitetaan edellä mainitut aaltofunktio ja operaattori paikalleen integraaliin:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle &= \int_{\tau} \psi^* x \psi d\tau \\ \langle \hat{x} \rangle &= \frac{1}{\alpha\pi^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}} dx \end{aligned}$$

Integraalissa e^y on ulkofunktio ja $y = -\frac{x^2}{\alpha^2}$ on sisäfunktio. Lasketaan integraali suoraan **muokkaamalla ulkofunktion eteen sisäfunktion derivaatta:**

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{\alpha\pi^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{2x}{\alpha^2} \right) \left(-\frac{\alpha^2}{2} \right) e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}} dx$$

Lasketaan integraali auki:

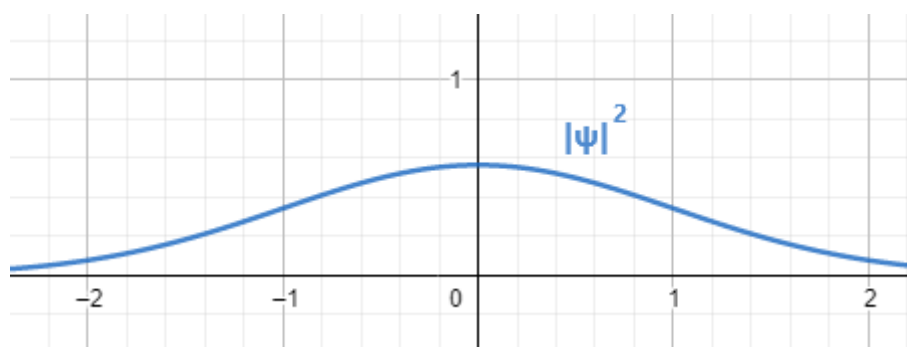
$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{\alpha\pi^{1/2}} \left(-\frac{\alpha^2}{2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}} dx$$

Kun $x \rightarrow \pm\infty$, funktio $e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}}$ lähestyy nollaa, ts. $e^{-\frac{x^2}{\alpha^2}} \rightarrow 0$. Niinpä integraali tuottaa arvon nolla sekä ylä- että alarajalla:

$$\langle \hat{x} \rangle = 0 - 0 = 0$$

Lopputuloksen tulkinta ja mielekkyys:

Tuloksen mukaan odotusarvo värähtelevän CO-molekyylin sidospituudelle on sidoksen tasapainopituus eli pituus, jossa poikkeama tasapainoasemasta on nolla. Tämä vaikuttaa järkevältä. Mielekkyyttä voidaan arvioida myös piirtämällä todennäköisyystiheyden kuvaaja. Se näyttää tältä:



Kuten havaitaan, on se symmetrinen nollan ympärillä, joten on järkevää, että odotusarvo on nolla.