Domača naloga pri kvantni mehaniki
Ehrenfestov teorem

Miha Nemevšek

15. marec 2002

1 Opis naloge

Naša naloga je, da pokažemo,da velja Ehrenfestov teorem, torej da je:

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = \langle -\frac{\partial V}{\partial x}\rangle = \langle F\rangle \tag{1}$$

za delec v simetrični potencialni jami, ki ga opišemo z valovno funkcijo:

$$\Psi(x) = \frac{2}{\sqrt{5a}}[\cos\frac{\pi x}{2a} + \frac{1}{2}\sin\frac{2\pi x}{2a}]$$

2 Reševanje naloge

Povprečno gibalno količino smo izračunali že pri prejšnji nalogi z integralom:

$$\langle p\rangle = \int_{-a}^{a}\Psi^*\hat{p}\Psi dx; \qquad \hat{p} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

in dobili rezultat:

$$\langle p\rangle = -\frac{16\hbar}{15a}sin(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}\ t) \tag{2}$$

Preverili smo že prvo Hamiltonovo enačbo, torej da velja : $\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt}$, sedaj pa nas zanima ali velja tudi enačba 1.
Najprej izračunajmo levo stran enačbe, torej odvajamo 2 po času :

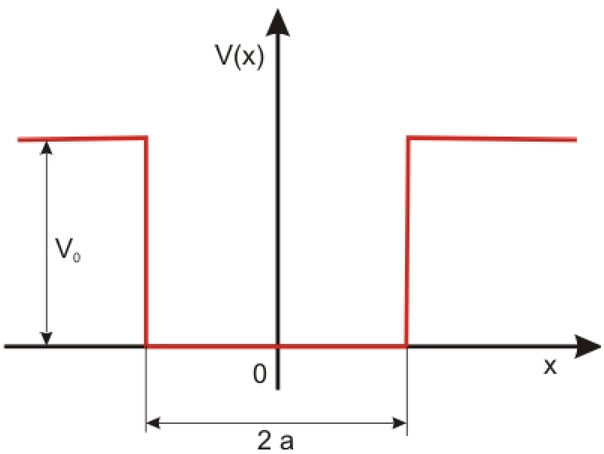
$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\frac{16\hbar}{15a}\frac{E_2 - E_1}{\hbar}\cos(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}\ t) = -\frac{2\pi^2\hbar^2}{5ma^3}\cos(\frac{3\pi^2\hbar}{8ma^2}\ t) \tag{3}$$

kjer smo upoštevali že prej izračunane lastne energije neskončne potencialne jame :

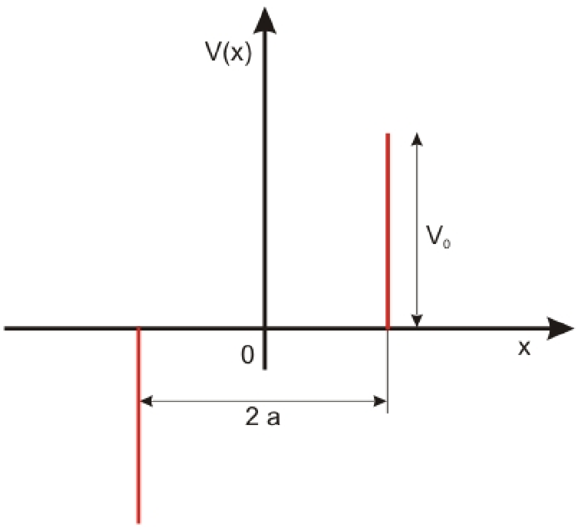
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} \Rightarrow E_2 - E_1 = \frac{3\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

Sedaj pa moramo izračunati še desno stran enačbe, torej $\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\rangle$, kar pa ne bo tako enostavno kot je bil prejšnji račun.

Najprej privzamemo, da je potencial končen, torej, da imamo opravka s škatlo (Slika 1).



Slika 1: Potencialna jama s končno višino



Slika 2: in njen odvod

Odvod takšnega potenciala sta delta funkciji pri a in -a (Slika 2), ki ga zapišemo kot:

$$\frac{\partial V}{\partial x} = V_0(\delta(x-a) - \delta(x+a))$$

$$\begin{aligned}\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\rangle &= \langle \Psi^* | -\frac{\partial V}{\partial x} |\Psi\rangle \\ &= \int \Psi^*(x)(-\frac{\partial V}{\partial x})\Psi(x)\, dx \\ &= -V_0[\int \Psi^*(x)\Psi(x)\delta(x-a)dx - \int \Psi^*(x)\Psi(x)\delta(x+a)dx] \\ &= V_0[\Psi^*(-a)\Psi(-a) - \Psi^*(a)\Psi(a)] \qquad (4)\end{aligned}$$

Sedaj moramo le na novo napisati valovne funkcije za potencial s končno višino. Ker je le-ta simetričen so funkcije sode ali lihe. Za osnovno stanje zapišemo :

$$\Psi_1(x) = \begin{cases} A\cos kx & \text{; -a< x < a,} \\ B\exp\left(-q(x-a)\right) & \text{; sicer.} \end{cases}$$

Kjer sta :

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad in \quad q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

In upoštevamo robni pogoj in zveznost pri x = a :

$$A\cos ka = B \tag{5}$$

$$kA\sin ka = Bq \tag{6}$$

Enačbi zdelimo ter dobimo transcendentno enačbo:

$$k\tan ka = q \tag{7}$$

Podobno kot smo to storili že prej, rečemo:

$$ka \sim \frac{\pi}{2} + \varepsilon$$

in nesemo v enačbo 7.

$$\begin{aligned} q &= k\,\frac{\cos\varepsilon}{\sin(-\varepsilon)} \\ &= k\,\frac{1-\frac{\varepsilon^2}{2}}{-\varepsilon} \\ &\sim \frac{k}{-\varepsilon} \end{aligned}$$

Tu smo zanemarili člen s kvadratom. Sedaj zapišemo :

$$\begin{aligned} \varepsilon &\sim -\frac{k}{q} \\ &= -\frac{\frac{\pi}{2}+\varepsilon}{q\cdot a} \\ &\sim -\frac{\pi}{2q\cdot a} \end{aligned}$$

Pogledamo izraz za q in zapišemo q_0, ko je potencial zelo velik in je torej $E \ll V_0$

$$q_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

V limiti, ko večamo rob potenciala v neskončnost, bo q enak q_0 in ga vstavimo v enačbo za ε:

$$\varepsilon = -\frac{\pi}{2q_0 \cdot a}$$

Z muko pridobljeni ε nesemo v enačbo za k, ki ga potem nesemo v enačbo 5 in dobimo željeni izraz za B:

$$A\cos\left(\frac{\pi}{2}(1 - \frac{1}{q_0 \cdot a})\right) = A\sin\frac{\pi}{2q_0 \cdot a} \sim A\frac{\pi}{2q_0 \cdot a} = B$$

B nesemo v enačbo za Ψ_1 in upoštevamo, da je $A \sim \frac{1}{\sqrt{a}}$, kakor za neskončno potencialno jamo :

$$\Psi(a) = \Psi(-a) = \frac{1}{\sqrt{a}}\frac{\pi}{2q_0 \cdot a}$$

Funkcija $\Psi(x,t)$ je sestavljena iz osnovnega in prvega vzbujenega stanja, zato naredimo podobno še za 1. vzbujeno stanje. Vemo, da mora biti funkcija liha znotraj intervala, zunaj pa eksponentno pada kot prej:

$$\Psi_2(x) = \begin{cases} A'\sin kx & \text{; -a< x < a,} \\ B'\exp\left(-q(x-a)\right) & \text{; sicer.} \end{cases}$$

Kakor prej, upoštevamo robna pogoja pri a in dobimo transcendentno enačbo:

$$\frac{1}{k}\tan ka = -\frac{1}{q}$$

Nastavimo rešitev :

$$ka = \pi + \varepsilon$$

sledi

$$\frac{1}{k}\varepsilon = -\frac{1}{q}$$

Tako dobimo rešitev za ε

$$\varepsilon = -\frac{\pi + \varepsilon}{a \cdot q_0}$$

zanemarimo ε v števcu ulomka in vstavimo v enačbo za Ψ_2, da dobimo $\Psi_2(a)$, kjer spet upoštevamo, da se potencial ne razlikuje dosti od tistega z neskončno višino, in je torej $A' = \frac{1}{\sqrt{a}}$:

$$\Psi_2(a) = A' \sin(\pi + \varepsilon) = A' \frac{\pi}{a \cdot q_0} = \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{\pi}{a \cdot q_0}$$

Sedaj imamo tudi izraza za prvo vzbujeno stanje v točkah a in -a:

$$\begin{aligned}
\Psi_2(a) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{\pi}{a \cdot q_0} \\
\Psi_2(-a) &= -\frac{\pi}{a^{\frac{3}{2}} \cdot q_0}
\end{aligned}$$

Sedaj lahko naredimo časovni razvoj:

$$\Psi(x,t) = \frac{2}{\sqrt{5}} \Psi_1(x) \exp(-i \frac{E_1}{\hbar}\ t) + \frac{1}{\sqrt{5}} \Psi_2(x) \exp(-i \frac{E_2}{\hbar}\ t)$$

Zanimajo pa nas seveda le vrednosti v $\pm a$:

$$\Psi(\pm a, t) = \frac{2}{\sqrt{5}} \frac{\pi}{a^{\frac{3}{2}} 2 q_0} \exp(-i \frac{E_1}{\hbar}\ t) \pm \frac{\pi}{\sqrt{5} a^{\frac{3}{2}} q_0} \exp(-i \frac{E_2}{\hbar}\ t)$$

Naračunane vrednosti sedaj lahko vstavimo v enačbo 4, in dobimo povprečno vrednost odvoda potenciala:

$$\begin{aligned}
\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle &= -2V_0 (\frac{\pi^2}{5a^3 {q_0}^2} \exp(-i \frac{E_1 - E_2}{\hbar}\ t) + \frac{\pi^2}{5a^3 {q_0}^2} \exp(-i \frac{E_2 - E_1}{\hbar}\ t)) \\
&= -4V_0 \frac{\pi^2}{5a^3 {q_0}^2} \cos(\frac{E_1 - E_2}{\hbar}\ t) \\
&= -4V_0 \frac{\pi^2 \hbar^2}{5a^3 2 m V_0} \cos(\frac{E_1 - E_2}{\hbar}\ t)
\end{aligned}$$

Kot vidimo, se V_0 pokrajša. Če pa še vstavimo izraza za E_1 in E_2, pa dobimo izraz,

$$\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle = -\frac{2\pi^2 \hbar^2}{5 m a^3} \cos(\frac{3\pi^2 \hbar}{8 m a^2}\ t)$$

ki je enak tistemu na levi strani (enačba 3).