Danijel Zlatar

KVANTNA MEHANIKA, domača naloga:

ČASOVNI RAZVOJ VALOVNE FUNKCIJE

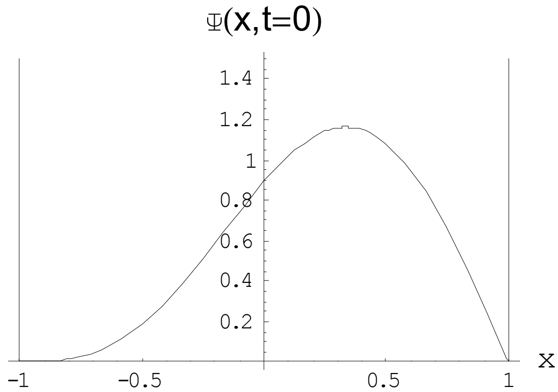
Ljubljana, marec 2003

NALOGA

Opazujemo elektron v neskončni potencialni jami širine 2a (med –a in a), ki ga ob času t = 0 opišemo z valovno funkcijo

$$\Psi(x, t=0) = A\left(\cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) + \frac{1}{2}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right),$$

kjer je A normalizacijska konstanta.



Slika 1: Začetna valovna funkcija, če širino jame 2a normiramo na 2.

- želimo izračunat valovno funkcijo elektrona ob poznejših časih
- ter časovno odvisnost povprečnega položaja in povprečne gibalne količine

TEORIJA, KI JE POTREBNA ZA RAZUMEVANJE NALOGE

Če rešujemo stacionarno Schrődingerjevo enačbo

$$H\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x),$$

kjer je H hameltonov operator, $\Psi_n(x)$ lastne funkcije operatorja in E_n

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2m(2a)^2}$$

lastne energije, potem lahko zapišemo rešitev stacionarne enačbe, kot linearna kombinacija lastnih funkcij:

$$\Psi(x, t=0) = \sum_n c_n \Psi_n(x),$$

kjer c_n izračunamo po formuli

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\Psi(x,t=0)dx\,.$$

V primeru neskončne potencialne jame so meje integriranja od –a do a.

Za časovni razvoj valovne funkcije moramo rešiti časovno odvisno Schrődingerjevo enačbo

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = H\Psi(x,t)\,.$$

Hitro se prepričamo, da je rešitev take diferencilane enačbe

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n\Psi_n(x)\cdot\exp(-\frac{iE_n}{\hbar}t)\,.$$

Pričakovano ali povprečno vrednost položaja izračunamo takole:

$$<x>= \int_{-a}^{a}\Psi^* x\Psi dx\,,$$

gibalne količine pa

$$<p>= \int_{-a}^{a}\Psi^*\hat{p}\Psi dx = \int_{-a}^{a}\Psi^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi dx\,.$$

NORMALIZACIJA ZAČETNE VALOVNE FUNKCIJE

Valovno funkcijo normaliziramo iz pogoja

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\Psi dx = 1\,.$$

$$\int_{-a}^{a}\Psi^*\Psi dx = 1 = A^2\int_{-a}^{a}(\cos\frac{\pi x}{2a}+\frac{1}{2}\sin\frac{\pi x}{a})^2 dx = A^2\int_{-a}^{a}\left[\cos^2\frac{\pi x}{2a}+\frac{1}{4}\sin^2\frac{\pi x}{a}+\cos\frac{\pi x}{2a}\sin\frac{\pi x}{a}\right]dx =$$

$$= A^2(\frac{1}{2}2a+\frac{1}{4}\frac{1}{2}2a+0) = A^2(a+\frac{a}{4}) = A^2\frac{5a}{4}$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{4}{5a}}$$

Integral zadnjega člena je nič, ker je produkt lihe funkcije (sinus) in sode (cosinus) liha funkcija, integral lihe funkcije v mejah med –a in a pa kot vemo je nič.

Razvoj začetnega stanja po lastnih funkcijah:

$$\Psi(x,t=0) = \sum_n c_n\Psi_n(x) = A(\cos\frac{\pi x}{2a}+\frac{1}{2}\sin\frac{\pi x}{a}) = 2\sqrt{\frac{1}{5a}}\cos\frac{\pi x}{2a}+\sqrt{\frac{1}{5a}}\sin\frac{\pi x}{a}$$

$$\Rightarrow \Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi x}{2a},\quad \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a},\quad c_1 = \frac{2}{\sqrt{5}}\ ,\quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}\,.$$

ČASOVNI RAZVOJ VALOVNE FUNKCIJE

Kot sem že v uvodu nakazal, se časovni razvoj valovne funkcije zapiše:

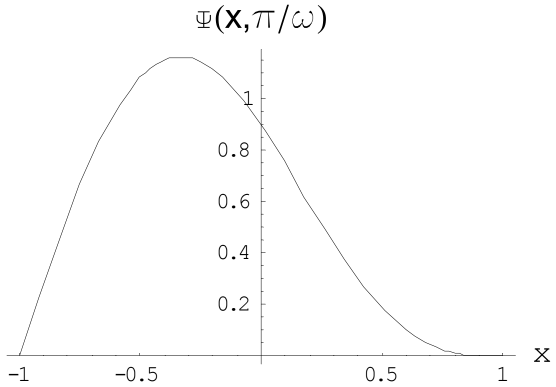
$$\Psi(x,t)=\sum_n c_n\Psi_n(x)\cdot\exp(-\frac{iE_n}{\hbar}t)=\frac{2}{\sqrt{5a}}\cos(\frac{\pi x}{2a})\cdot\exp(-\frac{iE_1}{\hbar}t)+\frac{1}{\sqrt{5a}}\sin(\frac{\pi x}{a})\cdot\exp(-\frac{iE_2}{\hbar}t)=$$

$$=\frac{2}{\sqrt{5a}}\cdot\exp(-\frac{iE_1}{\hbar}t)\cdot(\cos(\frac{\pi x}{2a})+\frac{1}{2}\sin(\frac{\pi x}{a})\cdot\exp(-i\omega t))$$

.

Pri tem smo zapisali

$$E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m(2a)^2},\quad E_2=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}=4E_1\ \text{ in }\ \omega=\frac{E_2-E_1}{\hbar}.$$



Slika 2: Valovna funkcija ob času $\omega t=\pi$.

PRIČAKOVANA VREDNOST POLOŽAJA

$$<x>=\int_{-a}^{a}\Psi^* x\Psi dx=\int_{-a}^{a}x\left[\frac{2}{\sqrt{5a}}\cos(\frac{\pi x}{2a})\cdot\exp(\frac{iE_1}{\hbar}t)+\frac{1}{\sqrt{5a}}\sin(\frac{\pi x}{a})\cdot\exp(\frac{iE_2}{\hbar}t)\right]\cdot$$

$$\cdot\left[\frac{2}{\sqrt{5a}}\cos(\frac{\pi x}{2a})\cdot\exp(-\frac{iE_1}{\hbar}t)+\frac{1}{\sqrt{5a}}\sin(\frac{\pi x}{a})\cdot\exp(-\frac{iE_2}{\hbar}t)\right]dx=$$

$$=\int_{-a}^{a}x\left[\frac{4}{5a}\cos^2(\frac{\pi x}{2a})+\frac{1}{5a}\sin^2(\frac{\pi x}{a})+\frac{2}{5a}\sin(\frac{\pi x}{a})\cos(\frac{\pi x}{2a})\left[\exp(\frac{it}{\hbar}(E_1-E_2))+\exp(\frac{it}{\hbar}(E_2-E_1))\right]\right]dx$$

Integrl kvadratnih členov pomnožen z x vrne nič. Če upoštevamo še zvezo za kompleksna števila

$$z+z^*=2\,\mathrm{Re}(z),$$

kjer je z^* konjugirano kompleksno število, potem ostane od zgornjega integrala:

$$2\,\mathrm{Re}(\exp(\frac{it}{\hbar}(E_2-E_1)))\cdot\frac{2}{5a}\int_{-a}^{a}x\sin(\frac{\pi x}{a})\cos(\frac{\pi x}{2a})dx\,.$$

Pretelovadtit moramo še tale integral. Tukaj ne mislim pisati vsak korak eksplicitno, ker menim, da bo uspel bralec mankajoče korake z lahkoto sam premagati. Najprej je potrebno sinus zapisati s polovičnim kotom, ter dobimo:

$$\int_{-a}^{a} 2x\sin(\frac{\pi x}{2a})\cos^2(\frac{\pi x}{2a})dx . \qquad (1)$$

S substitucijo $t = \frac{\pi x}{2a}$ prevedemo integral (1) na novo obliko

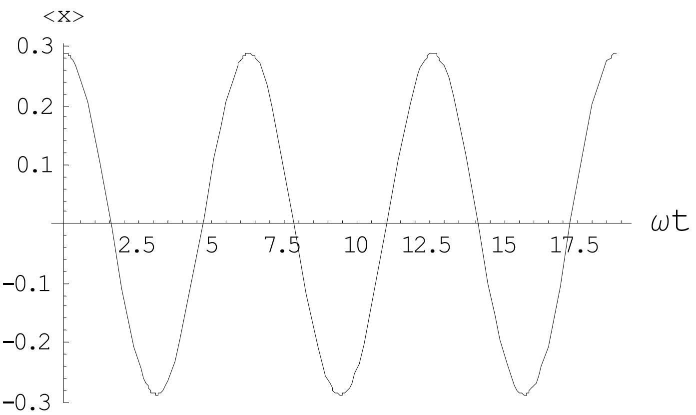
$$\frac{8a^2}{\pi^2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} t\sin(t)\cos^2(t)dt = \frac{8a^2}{\pi^2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} t\sin(t)(1-\sin^2(t))dt = \frac{8a^2}{\pi^2}\left[\int_{-\pi/2}^{\pi/2} t\sin(t)dt - \int_{-\pi/2}^{\pi/2} t\sin^3(t)dt\right]. \quad (2)$$

Integral (2) rešimo z integriranjem per partes. Pri tem upoštevamo, da je

$$\int \sin^3(t)dt = -\cos(t) + \frac{1}{3}\cos(t).$$

Z nekaj koraki dobimo za rezultat integrala (1) $\frac{32a^2}{9\pi^2}$. Končno lahko zapišemo končen rezultat.

$$< x > = \frac{4}{5a}\frac{32a^2}{9\pi^2}\mathrm{Re}(\exp(\frac{it}{\hbar}(E_2 - E_1))) = \frac{128a}{45\pi^2}\cos(\frac{t}{\hbar}(E_2 - E_1)) = \frac{128a}{45\pi^2}\cos(\omega t)$$



Slika 3: Pričakovana vrednost položaja v odvisnosti od časa.

PRIČAKOVANA VREDNOST GIBALNE KOLIČINE

$$< p > = \int_{-a}^{a}\Psi^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi dx = -i\hbar\int_{-a}^{a}\left[\frac{2}{\sqrt{5a}}\cos(\frac{\pi x}{2a})\exp(\frac{iE_1}{\hbar}t) + \frac{1}{\sqrt{5a}}\sin(\frac{\pi x}{a})\exp(\frac{iE_2}{\hbar}t)\right]\cdot$$

$$\cdot\left[-\frac{2}{\sqrt{5a}}\sin(\frac{\pi x}{2a})\frac{\pi}{2a}\exp(-\frac{iE_1}{\hbar}t) + \frac{1}{\sqrt{5a}}\cos(\frac{\pi x}{a})\exp(-\frac{iE_2}{\hbar}t)\right]dx =$$

$$= -i\hbar\int_{-a}^{a}\left[\frac{2\pi}{5a^2}\cos(\frac{\pi x}{2a})\cos(\frac{\pi x}{a})\exp(\frac{it}{\hbar}(E_1 - E_2)) - \frac{\pi}{5a^2}\sin(\frac{\pi x}{2a})\sin(\frac{\pi x}{a})\exp(\frac{it}{\hbar}(E_2 - E_1))\right]dx$$

Integrala ostalih dveh delov je nič. Reševanja se lotimo postopoma.

$$\frac{2\pi}{5a^2}\int_{-a}^{a}\cos(\frac{\pi x}{2a})\cos(\frac{\pi x}{a})dx = \frac{2\pi}{5a^2}\int_{-a}^{a}\cos(\frac{\pi x}{2a})\left[\cos^2(\frac{\pi x}{2a}) - \sin^2(\frac{\pi x}{2a})\right]dx \qquad (3)$$

S substitucijo $t = \frac{\pi x}{2a}$ prevedemo integral (3) v obliko:

$$\frac{4}{5a}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos(t)\left[\cos^2(t)-\sin^2(t)\right]dt = \frac{4}{5a}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos(t)\left[1-2\sin^2(t)\right]dt\,. \qquad (4)$$

Z malo telovadbe hitro pridemo do rezultata integrala (4), ki je $\frac{8}{15a}$. Podobne argumente uporabimo tudi za reševanje integrala

$$\frac{\pi}{5a^2}\int_{-a}^{a}\sin(\frac{\pi x}{2a})\sin(\frac{\pi x}{a})dx\,. \qquad (5)$$

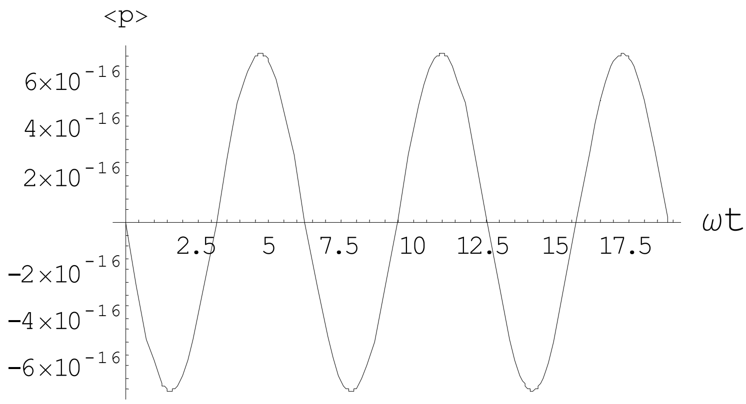
Hitro se prepričamo, da je rezultat tega integrala enak kot integrala (4), torej $\frac{8}{15a}$.

Končno lahko poiščemo rešitev za pričakovano vrednost gibalne količine. Pri tem bom upošteval znano zvezo

$$\exp(-ix)-\exp(ix) = -2i\sin(x)\,.$$

$$\langle p \rangle = -i\hbar\frac{8}{15a}\left[\exp(-\frac{it}{\hbar}(E_2-E_1))-\exp(\frac{it}{\hbar}(E_2-E_1))\right] = i\hbar\frac{8}{15a}2i\sin(\frac{t}{\hbar}(E_2-E_1)) =$$

$$= -\frac{16\hbar}{15a}\sin(\frac{t}{\hbar}(E_2-E_1)) = -\frac{16\hbar}{15a}\sin(\omega t)$$



Slika 4: Pričakovana vrednost gibalne količine v odvisnosti od časa.