Valovni paket II

Miha Devetak

31. marec 2003

1 Naloga

Elektron je ob času t=0 v stanju z valovno funkcijo

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x}.$$

Izračunaj časovni razvoj valovne funkcije, če se elektron giblje v prostoru, kjer je potencial konstanten. Kako se s časom spreminja verjetnostna gostota?

2 Reševanje

Najprej si ogledamo verjetnostno gostoto ob času t=0:

$$\rho(x) = \langle\psi|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt[2]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

To je Gaussova verjetnostna porazdelitev z $\langle x\rangle = 0$ in disperzijo σ. Izračunajmo še $\langle p\rangle$.

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{-ik_0 x} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x}\right) dx = \hbar k_0$$

Opomba: Tukaj in v nadaljevanju smo uporabili integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt[2]{\pi}$$

Prav tako ne bomo pisali več mej, saj so vsi integrali mišljeni po celotnem območju.
Časovni razvoj naredimo tako, da najprej $\psi(x)$ razvijemo po lastnih funkcijah

$$\psi_k = e^{ikx}$$

in jih nato pomnožimo z odgovarjajočimi časovnimi deli, ki so

$$e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t},$$

kjer so E_k lastne energije

$$E_k = \frac{k^2\hbar^2}{2m}.$$

Lastne enrgije morajo zadostiti stacionarni Schröodingerjevi enačbi:

$$\widehat{H}\psi = E\psi,$$

kjer si lahko izberemo potencial kar enako nič, ker so pomembne zgolj razlike energije in ne njene absolutne vrednosti.

Razvoj $\psi(x)$ po lastnih funkcijah:

$$\psi(x) = \sum_k c_k \psi_k dk = \int c(k) e^{ikx} dk$$

$$\int \psi_k \psi_{k'} dk = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(k-k')} dk = \delta(k' - k)$$

$$\int \psi_k(x)\psi_k(x')dx = \frac{1}{2\pi} \int e^{ik(x-x')} dx = \delta(x' - x)$$

$$\psi(x,0) = \int \psi(x',0)\delta(x-x')dx = \frac{1}{2\pi} \int \psi(x',0) \int e^{ik(x-x')} dk dx =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ikx} dk \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x',0) e^{ik'x} dk$$

Vsoto smemo spremeniti v integral, ker so valovna števila zaradi zveznosti energije tudi sama zvezna. Tukaj vidimo, da struktura zapisa ustreza Fourierovi transformaciji:

$$c(k) = \langle \psi_k | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ikx} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x} dx$$

Eksponent prevedemo na popolni kvadrat:

$$\frac{x^2}{4\sigma^2} + i(k-k_0)x = \left(\frac{x}{2\sigma} + i(k-k_0)\sigma\right)^2 + (k-k_0)^2\sigma^2,$$

in uvedemo novo spremenljivko:

$$r = \frac{x}{2\sigma} + i(k-k_0)\sigma,$$

$$dr = \frac{dx}{2\sigma}.$$

Tako se integral prevede na obliko:

$$c(k) = \frac{2\sigma}{2\pi\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-(k-k_0)^2\sigma^2} \int e^{-r^2} dr$$

Torej dobimo c(k):

$$c(k) = \frac{\sigma}{\sqrt[2]{\pi}\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-(k-k_0)^2\sigma^2}$$

Zdaj imamo vse potrebno za časovni razvoj funkcije:

$$\psi(x,t) = \int c(k)\psi_k e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} dk = \frac{\sigma}{\sqrt[2]{\pi}\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \int e^{-(k-k_0)^2\sigma^2} e^{ikx} e^{-i\frac{k^2\hbar^2}{2m\hbar}t} dk$$

Eksponent spet spravimo na popolni kvadrat:

$$(k-k_0)^2\sigma^2 - ikx + i\frac{k^2\hbar t}{2m} = (\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m})(k^2 + k\frac{-2k_0\sigma^2 - ix}{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}} + \frac{{k_0}^2\sigma^2}{(\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m})^2}) =$$

$$= (\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m})(k - \frac{k_0\sigma^2 + i\frac{x}{2}}{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}})^2 - \frac{(k_0\sigma^2 + i\frac{x}{2})^2}{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}} + {k_0}^2\sigma^2$$

Uvedemo novo spremenljivko u:

$$u = \sqrt{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}}(k - \frac{k_0\sigma^2 + i\frac{x}{2}}{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}})$$

$$du = \sqrt{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}} dk$$

Tako se naš razvoj prepiše v:

$$\psi(x,t) = \frac{\sigma}{\sqrt[2]{\pi}\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}\sqrt[2]{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}}} e^{\frac{(k_0\sigma^2 + i\frac{x}{2})^2}{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}} - {k_0}^2\sigma^2} \int e^{-u^2} du.$$

In po integraciji dobimo rešitev za časovni razvoj valovne funkcije:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}\sqrt[2]{1 + i\frac{\hbar t}{2m\sigma}}} e^{\frac{(k_0\sigma^2 + i\frac{x}{2})^2}{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}} - {k_0}^2\sigma^2}.$$

Sedaj si lahko ogledamo še časovni razvoj verjetnostne gostote:

$$\rho(x,t) = \psi^*\psi = \alpha^* e^{\beta^*} \alpha e^{\beta} = \alpha^*\alpha e^{\beta^* + \beta} = \alpha^*\alpha e^{2Re(\beta)}.$$

Od tod sledi (z nekoliko računarije):

$$\alpha^*\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma\sqrt{(\frac{\hbar t}{2m\sigma})^2 + 1}},$$

$$2Re\beta = -\frac{x^2\sigma^2 + 2x\sigma^2\frac{k_0\hbar}{m}t + \sigma^2(\frac{k_0\hbar}{m})^2 t^2}{2(\sigma^4 + (\frac{\hbar t}{2m\sigma})^2)} = -\frac{(x - \frac{k_0\hbar}{m}t)^2}{2\sigma^2(1 + (\frac{\hbar t}{2m\sigma})^2)}.$$

In če uporabimo še zvezo za hitrost in vpeljemo časovno odvisno disperzijo:

$$v = \frac{k_0\hbar}{m},$$

$$\sigma(t) = \sigma\sqrt{(1 + (\frac{\hbar t}{2m\sigma})^2)},$$

dobimo verjetnostno gostoto zapisano v obliki:

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} e^{-\frac{(x-vt)^2}{2\sigma(t)^2}}.$$

3 Rešitev

Torej smo naračunali časovni razvoj Gaussove valovne funkcije in verjetnostne gostote.

Valovna funkcija:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}\sqrt[2]{1 + i\frac{\hbar t}{2m\sigma}}} e^{\frac{(k_0\sigma^2 + i\frac{x}{2})^2}{\sigma^2 + i\frac{\hbar t}{2m}} - {k_0}^2\sigma^2}.$$

Verjetnostna gostota:

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} e^{-\frac{(x-vt)^2}{2\sigma(t)^2}}.$$