Kvantna mehanika

Barbara Horvat

27.03.2004

Časovni razvoj valovnega paketa

NAVODILO

Elektron je ob času $t = 0$ v stanju z valovno funkcijo $\Psi = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-<x>)^2}{4\sigma^2}} e^{ik_0 x}$ in se giblje v prostoru s konstantnim potencialom. Zanimata nas časovni razvoj valovne funkcije in kako se s časom spreminja verjetnostna gostota.

VEMO

- $k_0 = \frac{<p>}{hbar}$
- zaradi zveznosti (Gaußov paket) gre $\sum$ v $\int$

REŠITEV

a *Časovni razvoj valovne funkcije*

Časovni razvoj valovne funkcije zapišemo z $\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k(x,0) e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} dk$ kjer $\Psi_k(x,o)$ predstavlja člen valovne funkcije $\Psi(x,0)$ razvit po lastnih funkcijah (ravnih valovih) e^{ikx} in E_k ustrezne lastne energije $E_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$.

Torej:

$$\Psi_k(x,0) = a(k) e^{ikx}$$

$$\Psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k(x,0) dk = \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} dk$$

V slednji enačbi prepoznamo Fourierovo transformacijo, tako da lahko $a(k)$ izračunamo kar z uporabo antiFouriera:

$$a(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-<x>)^2}{4\sigma^2}} e^{i(k_0-k)x} dx$$

Sedaj vstavimo $< x >= 0$ (to lahko vedno naredimo).

$$a(k) = \frac{1}{2\pi\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2} + i(k_0-k)x} dx$$

Eksponent damo na popolni kvadrat.

$$a(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x-\frac{b}{2a})^2+\frac{b^2}{4a}} dx$$

Vpeljemo novo spremenljivko $u = x - \frac{b}{2a}$ $(du = dx)$.

$$a(k) = e^{\frac{b^2}{4a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-au^2} du$$

Upoštevamo, da je $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-au^2} du = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$.

$$a(k) = \sqrt[4]{\frac{\pi^2 16\sigma^4}{16\pi^4 2\pi\sigma^2}} e^{-(k_0-k)^2\sigma^2} = \sqrt[4]{\frac{\sigma^2}{2\pi^3}} e^{-(k_0-k)^2\sigma^2}$$

Sedaj imamo vse za izračun valovne funkcije.

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx} e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} dk$$

Vstavimo $E_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$ in prej izračunan $a(k)$.

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt[4]{\frac{\sigma^2}{2\pi^3}} e^{-(k_0-k)^2\sigma^2} e^{ikx} e^{-i\frac{\hbar^2 k^2}{\hbar 2m}t} dk = \\
&= e^{-k_o^2\sigma^2} \sqrt[4]{\frac{\sigma^2}{2\pi^3}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{k^2(-\sigma^2 - i\frac{\hbar}{2m}t) + k(2\sigma^2 k_0 + ix)} dk = \\
&= \sqrt[4]{\frac{\sigma^2}{2\pi^3}} \sqrt{\frac{\pi}{\sigma^2 + i\frac{\hbar}{2m}t}} e^{-k_0^2\sigma^2} e^{\frac{(2\sigma^2 k_0 + ix)^2}{4(\sigma^2 + i\frac{\hbar}{2m}t)}} = \\
&= \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}\sqrt{1 + i\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t}} e^{-k_0\sigma^2} e^{\frac{(k_0\sigma^2 + i\frac{x}{2})^2}{(\sigma^2 + i\frac{\hbar}{2m}t)}}
\end{aligned}$$

b *Spreminjanje verjetnostne gostote s časom*

Verjetnostno gostoto izračunamo kot kvadrat absolutne vrednosti valovne funkcije oz. zanima nas $|\Psi(x,t)|^2$.

Tako moramo izračunati:

$$|Ae^B|^2 = (a_1^2 + a_2^2) e^{2b_1}$$

kjer je: $A = a_1 + a_2$ in $B = b_1 + b_2$

Torej:

$$|A|^2 = a_1^2 + a_2^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{\sqrt{1+i\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t}} \frac{1}{\sqrt{1-i\frac{\hbar}{2m\sigma^2}t}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{\sqrt{1+\frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^4}t}}$$

in:

$$\begin{aligned}
2b_1 = 2\Re(B) &= \Re(-2k_0^2\sigma^2 + 2\frac{(\sigma^2 k_0 + i\frac{x}{2})^2}{\sigma^2 + i\frac{\hbar}{2m}t}) = \\
&= -2k_0^2\sigma^2 + 2\Re(\frac{(\sigma^4 k_0^2 - \frac{x^2}{4} + ix\sigma^2 k_0)(\sigma^2 - i\frac{\hbar}{2m}t)}{\sigma^4 + \frac{\hbar^2}{4m^2}t^2}) = \\
&= -2k_0^2\sigma^2 + 2\frac{\sigma^6 k_0^2 - \sigma^2\frac{x^2}{4} + x\sigma^2 k_0\frac{\hbar}{2m}t}{\sigma^4(1+\frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^4}t^2)} = \\
&= \frac{-2k_0^2\sigma^4(1+\frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^4}t^2) + 2\sigma^4 k_0^2 - \frac{x^2}{2} + 2xk_0\frac{\hbar}{2m}t}{\sigma^2(1+\frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^4}t^2)} = \\
&= \frac{-2k_0^2\sigma^4\frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^4}t^2) - \frac{x^2}{2} + 2xk_0\frac{\hbar}{2m}t}{\sigma^2(1+\frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^4}t^2)} = \\
&= \frac{-k_0^2\frac{\hbar^2}{m^2}t^2 - x^2 + 2k_0\frac{\hbar}{m}tx}{2\sigma^2(1+\frac{\hbar^2}{2m^2\sigma^4})} = \\
&= = \frac{-(x - k_0\frac{\hbar}{m}t)^2}{2\sigma^2(1+\frac{\hbar^2}{2m^2\sigma^4})}
\end{aligned}$$

V zgornjih dveh izrazih upoštevamo še:

$$\sigma(t) = \sigma\sqrt{1+\frac{\hbar^2}{4m^2\sigma^4}t^2}$$

$$v = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{<p>}{m}$$

Sedaj izraza zapišemo še enkrat:

$$|A|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}}$$

$$2b_1 = -\frac{(x-vt)^2}{2\sigma^2(t)}$$

Končni izraz za časovni razvoj valovne funkcije:

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

Končni izraz za časovni razvoj verjetnostne gostote je tako:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2 e^{2b_1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}} e^{-\frac{(x-vt)^2}{2\sigma^2(t)}}$$