Kvantna Mehanika: Domača naloga

Pričakovane vrednosti v potencialni jami

Primož Skale

2. Marec 2005

Poišči, kako se s časom spreminjajo pričakovane vrednosti koordinate, gibalne količine in energije za stanje v neskončni potencialni jami širine a, ki ga ob času $t = 0$ zapišemo kot $\psi(x, t = 0) = C[\psi_n(x) + \psi_{n+1}(x)]$, kjer je $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\pi nx/a)$. Primerjaj rezultate s pričakovanimi rezultati v klasični mehaniki.

Zapišemo lahko $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\pi nx/a)\exp(-iE_nt/\hbar)$ in $\psi_{n+1} = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\pi(n+1)x/a)\exp(-iE_{n+1}t/\hbar)$. Funkcijo $\psi(x,t)$ moramo najprej normirati, da dobimo konstanto A.

$$\begin{aligned}
\int_0^a |\psi(x,0)|^2 \mathrm{d}x &= \int_0^a (A^2\psi_n^2 + 2A\psi_n\psi_{n+1} + A^2\psi_{n+1}^2)\mathrm{d}x = A^2\int_0^a (\psi_n^2 + \psi_{n+1}^2)\mathrm{d}x = \\
&= \frac{2A^2}{a}\int_0^a \sin^2(\pi nx/a)\sin^2(\pi(n+1)x/a)\mathrm{d}x^1 = \\
&= \frac{2aA^2}{\pi na}\Big(-\frac{\sin(2\pi n)}{4} + \frac{\pi n}{2}\Big) + \frac{2A^2}{a(\pi n/a + \pi/a)}\Big(-\frac{\sin(2\pi(n+1))}{4} + \frac{\pi(n+1)}{2}\Big) = \\
&= 2A^2 = 1 \longrightarrow A = \sqrt{\frac{1}{2}} \qquad (1)
\end{aligned}$$

Tako dobi funkcija $\psi(x, t = 0)$ novo podobo:

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{1}{2}}\Big(\psi_n(x) + \psi_{n+1}(x)\Big)$$

1 Pričakovana vrednost koordinate

Za izračun pričakovane vrednosti koordinate bomo uporabili časovno odvisni valovn funkciji, kot smo jih definirali zgoraj.

$$\begin{aligned}
< x > (t) &= \int_0^a \psi(x,t)x\psi^*(x,t)\mathrm{d}x = \\
&= \int_0^a \Big(\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a)\exp(-iE_n/\hbar) + \\
&+ \sqrt{2/a}\sin((n+1)\pi x/a)\exp(-iE_{n+1}t/\hbar)\Big)x\Big(\sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a)\exp(iE_n/\hbar) +
\end{aligned}$$

$$+\sqrt{2/a}\sin((n+1)\pi x/a)\exp(iE_{n+1}t/\hbar)\Big)\mathrm{d}x =$$
$$= \frac{1}{18}a\Big(4 - 2\cdot\frac{32n(n+1)}{(\pi+2n\pi)^2}\cdot\cos\Big(\frac{E_n - E_{n+1}}{\hbar}t\Big)\Big) \tag{2}$$

V tej enačbi vidimo, da prvi člen prinese klasično koordinato ($a/2$), drugi člen pa popravek k kvantni pričakovani vrednosti. Če zadnji člen povprečimo po času dobimo vrednost 0.

2 Povprečna gibalna količina

Operator gibalne količine je

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

Tega sedaj uporabimo za izračun povprečne gibalne količine:

$$< p > (t) = \int_0^a \psi^*(x,t)\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big)\psi(x,t)\mathrm{d}x =$$
$$= -i\hbar\sqrt{1/2}\int_0^a \psi(x,t)\Big(\sqrt{2/a}\cos(n\pi x/a)(n\pi/a)\exp(-iE_nt/\hbar) +$$
$$+\sqrt{2/a}\cos((n+1)\pi x/a)((n+1)\pi/a)\exp(-iE_{n+1}t/\hbar)\Big)\mathrm{d}x =$$
$$= i\hbar n\pi/a^2\int_0^a \sin(n\pi x/a)\cos(n\pi x/a)\mathrm{d}x +$$
$$+ i\hbar(n+1)\pi/a^2\int_0^a \sin((n+1)\pi x/a)\cos((n+1)\pi x/a) +$$
$$+ i\hbar\frac{n\pi}{a^2}\exp(i(E_{n+1}-E_n)t/\hbar)\int_0^a \sin((n+1)\pi x/a)\cos(n\pi x/a)\mathrm{d}x +$$
$$+ i\hbar\frac{(n+1)\pi}{a^2}\exp(i(E_n-E_{n+1})t/\hbar)\int_0^a \sin(n\pi x/a)\cos((n+1)\pi x/a)\mathrm{d}x =$$
$$= -\frac{4\hbar n(n+1)}{a(1+2n)}\sin\Big(\frac{E_{n+1}-E_n}{\hbar}t\Big) \tag{3}$$

Tuki tukaj vidimo, da če sinus povprečimo po času dobimo 0. In taka je tudi vrednost povprečne gibalne količine v klasični mehaniki, saj gre elektron pol časa na levo in pol časa na desno. Tako se oba prispevka odštejeta.

3 Povprečna energija

Operator kinetične energije

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

. Vendar pa bomo v tem primeru rešitev samo simbolično pokazali (torej v splošnem primeru):

$$< E >= \int \Psi^*\hat{H}\Psi\mathrm{d}x =$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\int \Big(\psi_n^* \exp(iE_n t/\hbar) + \psi_{n+1}^* \exp(iE_{n+1} t/\hbar)\Big)\hat{H}\,\cdot \\
&\cdot \Big(\psi_n \exp(-iE_n t/\hbar) + \psi_{n+1} \exp(-iE_{n+1} t/\hbar)\Big)\mathrm{d}x = \\
&= \frac{1}{2}\int (E_n \psi_n^* \psi_n + E_{n+1}\psi_{n+1}^*\psi_{n+1})\mathrm{d}x = \frac{1}{2}(E_n + E_{n+1}) \qquad (4)
\end{aligned}
$$

Kar najprej opazimo je, da povprečna ali pričakovana vrednost energije elektrona v neskončni potencialni jami ni odvisna od časa.

Poglejmo si sedaj še, da ta pridobljeni rezultat ustreza energiji v klasični mehaniki. Vemo

$$E_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$E_{n+1} = \frac{\pi^2 (n+1)^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Obe enačbi odštejemo in dobimo:

$$
\begin{aligned}
E_{n+1} - E_n &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n^2 - (n+1)^2) = \\
&= 2n\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \omega, \qquad (5)
\end{aligned}
$$

kjer konstanti člen zanemarimo. Iz tega izrazimo n in dobimo

$$n = \frac{\omega m a^2}{\hbar^2 \pi^2}.$$

To vstavimo nazaj v E_n in upoštevamo še klasično frekvenco $\frac{v}{2a}$, jo pretvorimo v $\omega = \frac{\pi v}{a}$ in za E_n dobimo:

$$E = \frac{mv^2}{2}.$$

To je pa ravno tista energija, ki smo jo iskali.