

Vaje iz Kvantne mehanike I

Verjetnosti v potencialni jami

2.3.2005

Matjaž Božič

V neskončni potencialni jami širine $0 < x < a$ imamo začetno stanje:

$$\begin{aligned} \phi(x, t=0) &\rightarrow C \sin[2\pi x/a]^2; x < a/2 \\ &\rightarrow 0; x > a/2 \end{aligned}$$

Zanima nas verjetnost, da se delec nahaja v 1., 2., 3., ... vzbujenem stanju in kdaj je verjetnost, da je delec v desni polovici jame $x > a/2$ največja. Lastne funkcije so

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin[\pi n x / a]$$

Najprej normirajmo funkcijo ϕ .

$$C^2 \int_0^{a/2} \sin[2\pi x/a] dx = 1, \text{ torej } C = \frac{4}{\sqrt{3a}}.$$

Za razvoj po lastnih stanjih se splača uvesti nove brezdimenzijske spremenljivke:

$$u = \frac{\pi}{a} x \text{ in } \tau = \frac{h\pi}{4ma^2} t \text{ (za časovni razvoj).}$$

Izraene s takimi spremenljivkami imajo lastne funkcije in začetno stanje obliko:

$$\begin{aligned} \text{Psi}[n_, u_] &:= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin[nu] \\ \text{Phi}[u_] &:= \frac{4}{\sqrt{3\pi}} \sin[2u]^2 \end{aligned}$$

Jama pa ni več široka a ampak π .

Sedaj lahko izračunamo koeficiente razvoja po lastnih stanjih:

$$\text{koef}[n_] := \text{Integrate}[\text{Psi}[n, u] \text{Phi}[u], \{u, 0, \pi/2\}, \text{Assumptions} \rightarrow \{n \in \text{Integers}\}]$$

Table[koef[n], {n, 1, 11}]

$$\left\{ \frac{32\sqrt{\frac{2}{3}}}{15\pi}, \frac{8\sqrt{\frac{2}{3}}}{3\pi}, \frac{32\sqrt{\frac{2}{3}}}{21\pi}, 0, -\frac{32\sqrt{\frac{2}{3}}}{45\pi}, \right. \\ \left. -\frac{8\sqrt{\frac{2}{3}}}{15\pi}, -\frac{32\sqrt{\frac{2}{3}}}{231\pi}, 0, -\frac{32\sqrt{\frac{2}{3}}}{585\pi}, -\frac{8\sqrt{\frac{2}{3}}}{105\pi}, -\frac{32\sqrt{\frac{2}{3}}}{1155\pi} \right\}$$

Verjetnost, da se delec nahaja v n-tem lastnem stanju, je kar enaka kvadratu n-tega koeficienta.

```
Table[N[koef[n]^2], {n, 1, 11}]
{0.307416, 0.480337, 0.156845, 0., 0.0341573, 0.0192135,
0.00129624, 0., 0.000202114, 0.000392112, 0.0000518495}
```

Vidimo, da so najbolj zasedena prva tri stanja. Stanja z višjo energijo so zastopana v približno petih odstotkih. Zato lahko približno upoštevamo, da je delec sestavljen samo iz prvih treh stanj. Tako si precej olajšamo računanje. Sedaj lahko zapišemo časovni razvoj naše funkcije.

```
phi3[u_, τ_] =
  koef[1] Psi[1, u] Exp[-i τ] + koef[2] Psi[2, u] Exp[-4 i τ] + koef[3] Psi[3, u] Exp[-9 i τ];
```

In, kar nas še bolj zanima, časovno odvisno verjetnostno gostoto:

```
rho3[x_, t_] :=
  (32 / Pi)^2 * (1/3) * ((Psi[1, x] / 15)^2 + (Psi[2, x] / 12)^2 + (Psi[3, x] / 21)^2 +
  2 (Psi[1, x] Psi[2, x] / (15 * 12)) Cos[3 t] +
  2 (Psi[2, x] Psi[3, x] / (12 * 21)) Cos[5 t] +
  2 (Psi[1, x] Psi[3, x] / (15 * 21)) Cos[8 t])
```

Gibanje delca v jami lahko torej opišemo s tremi različnimi frekvencami (členi s Cos). Vidimo, da je gibanje periodično; po času $\tau = 2\pi$ se delec vrne v začetno stanje. Torej je pričakovati, da bo po času $\tau = \pi$ verjetnost, da bo delec v desni polovici jame največja. Prva dva člena v verjetnostni gostoti imata ob tem času hkrati minimum. Poleg tega sta prvo in tretje lastno stanje pravokotna na intervalu od $\pi/2$ do π , tako da tretji člen tam odpade. Prva dva pa imata ob času $\tau = \pi/5$ oziroma $\tau = \pi/3$ še vsak svoj minimum. Pričakovati je da bo tudi med tema časoma delec večinoma v desni polovici.

Še malo risanja.

Časovni razvoj valovne funkcije (glista, ki leze sem pa tja):

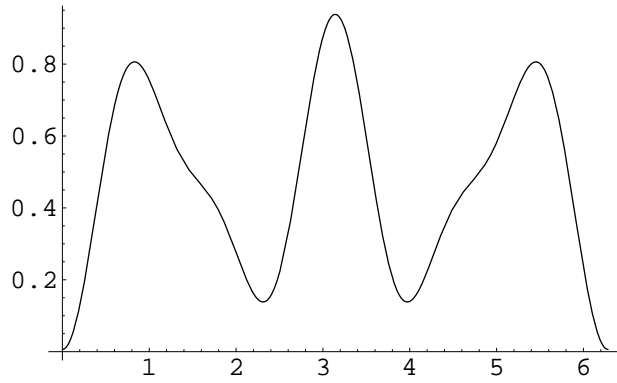
```
Table[Plot[Re[phi3[x, t]], {x, 0, Pi}, PlotRange -> {-1.3, 1.3}], {t, 0, 1.98 Pi, 0.02 Pi}]
```

Časovni razvoj verjetnostne gostote:

```
Table[Plot[rho3[x, t], {x, 0, Pi}, PlotRange -> {0, 1.3}], {t, 0, 1.98 Pi, 0.02 Pi}]
```

Verjetnost, da je delec v desni polovici v odvisnosti od časa:

```
Plot[NIntegrate[rho3[x, t], {x, Pi/2, Pi}], {t, 0, 2 Pi}]
```



In še točne vrednosti za pol periode:

```
Table[NIntegrate[rho3[x, t], {x, Pi/2, Pi}], {t, 0, Pi, 0.05 Pi}]
{0.0063299, 0.082825, 0.280576, 0.520121, 0.712885, 0.801789, 0.782513,
0.695615, 0.596392, 0.521534, 0.472299, 0.423064, 0.348206, 0.248983,
0.162085, 0.142809, 0.231714, 0.424478, 0.664022, 0.861773, 0.938268}
```

V eni periodi je delec ob treh časih večinoma na desni strani jame. V seznamu se vidi, da je ob času $\tau \sim \text{Pi} / 4$, torej

$t \sim \frac{m a^2}{h}$ delec z $\sim 80\%$ verjetnostjo na desni strani jame. Ob

času $t = \frac{4 m a^2}{h}$ pa je zaradi simetrije ta verjetnost 100% .

Še malo bolj točni računi. Pri razvoju upoštevamo prvih 6 stanj. Stanj z višjo energijo je samo še 0.3% .

```
phi6[u_, tau_] = koef[1] Psi[1, u] Exp[-i tau] +
  koef[2] Psi[2, u] Exp[-4 i tau] + koef[3] Psi[3, u] Exp[-9 i tau] +
  koef[5] Psi[5, u] Exp[-25 i tau] + koef[6] Psi[6, u] Exp[-36 i tau];

rho6[x_, t_] := (32/Pi)^2 * (2/3) * ((Psi[1, x]/15)^2 + (Psi[2, x]/12)^2 +
  (Psi[3, x]/21)^2 + (Psi[5, x]/45)^2 + (Psi[6, x]/60)^2
  + 2 (Psi[1, x] Psi[2, x] / (15 * 12)) Cos[3 t]
  + 2 (Psi[2, x] Psi[3, x] / (12 * 21)) Cos[5 t]
  + 2 (Psi[1, x] Psi[3, x] / (15 * 21)) Cos[8 t]
  + 2 (Psi[5, x] Psi[6, x] / (45 * 60)) Cos[11 t]
  - 2 (Psi[3, x] Psi[5, x] / (21 * 45)) Cos[16 t]
  - 2 (Psi[2, x] Psi[5, x] / (12 * 45)) Cos[21 t]
  - 2 (Psi[1, x] Psi[5, x] / (15 * 45)) Cos[24 t]
  - 2 (Psi[3, x] Psi[6, x] / (21 * 60)) Cos[27 t]
  - 2 (Psi[2, x] Psi[6, x] / (12 * 60)) Cos[32 t]
  - 2 (Psi[1, x] Psi[6, x] / (15 * 60)) Cos[35 t])
```

Valovna funkcija:

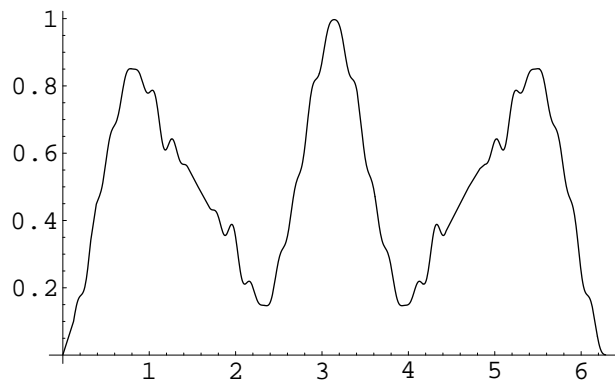
```
Table[Plot[Re[phi6[x, t]], {x, 0, Pi}, PlotRange -> {-1.5, 1.5}], {t, 0, 1.98 Pi, 0.02 Pi}]
```

Časovni razvoj verjetnostne gostote:

```
Table[Plot[rho6[x, t], {x, 0, Pi}, PlotRange -> {0, 1.75}], {t, 0, 1.98 Pi, 0.02 Pi}]
```

Verjetnost v desni polovici:

```
Plot[NIntegrate[rho6[x, t], {x, Pi/2, Pi}], {t, 0, 2 Pi}]
```



- Graphics -

```
Table[NIntegrate[rho6[x, t], {x, Pi/2, Pi}], {t, 0, Pi, 0.05 Pi}]
```

```
{0.000934041, 0.146548, 0.31854, 0.525365, 0.700635, 0.851159, 0.795755,  
0.727791, 0.642121, 0.566244, 0.498985, 0.431725, 0.355848, 0.270178,  
0.202215, 0.14681, 0.297334, 0.472604, 0.679429, 0.851421, 0.997035}
```

Točnejša vrednost za verjetnost ob času $\tau \sim \pi/4$ oziroma $\tau \sim 7\pi/4$ je torej 85%.