

Rozdział 23

(U.2) Funkcje falowe i równanie Schrödingera

23.1 Równanie Kleina–Gordona

Przyjmijmy (na razie bez dowodu), że związki (2.23) pomiędzy operatorami a wielkościami fizycznymi rzeczywiście obowiązują. Spróbujemy więc, posługując się nimi, zbudować równanie falowe dla cząstki relatywistycznej o masie m – odpowiednik równania Schrödingera. Jak wiadomo, dla cząstki relatywistycznej energia i pęd są związane relacją

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (23.1)$$

Gdybyśmy tu podstawili operatory (2.23) to mielibyśmy kłopot polegający na tym, że nie bardzo wiadomo co to jest pierwiastek z operatora różniczkowego. Naturalnym wyjściem jest podniesienie relacji (23.1) do kwadratu: $E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$, gdzie teraz podstawiamy odpowiedniości (2.23). W ten sposób dostajemy równanie falowe o postaci

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\vec{r}, t) = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + m^2 c^4 \Psi(\vec{r}, t), \quad (23.2)$$

które łatwo przekształcamy do postaci

$$\left[\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \Psi(\vec{r}, t) = 0. \quad (23.3)$$

Równanie to jest znane jako równanie Kleina–Gordona i rzeczywiście występuje w relatywistycznej mechanice kwantowej (opisuje cząstkę bezspinową). Nie będziemy tu jednak zajmować się ani dyskusją ani zastosowaniami tego równania. Nasz wykład jest bowiem poświęcony tylko i wyłącznie nierelatywistycznej mechanice kwantowej, w której fundamentalną rolę pełni równanie Schrödingera.

23.2 Jednowymiarowe równanie Schrödingera

23.2.1 Ogólne omówienie

Jednowymiarowe równanie Schrödingera jest pewnym modelem matematycznym pozwalającym lepiej poznać i zrozumieć własności bardziej złożonych modeli odpowiadających bardziej realistycznym sytuacjom fizycznym. Co więcej, w wielu przypadkach stosując pewne techniki obliczeniowe, można zredukować zagadnienie do problemów jednowymiarowych. Dlatego też omówimy

niektóre cechy jednowymiarowego równania Schrödingera. Na podstawie (2.6) widzimy, że w rozważanym przypadku mamy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \Psi(x, t). \quad (23.4)$$

Równanie to opisuje więc cząstkę (bezsピンową) o masie m poruszającą się w polu o potencjale $V(x)$ (mówiąc ściślej, cząstkę o energii potencjalnej $V(x)$). Zakładamy tutaj, że $V(x)$ nie zależy jawnie od czasu. Będziemy tutaj szukać tzw. rozwiązań stacjonarnych, tj. rozwiązań o postaci (po. (2.49)–(2.53b))

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-\frac{iE}{\hbar} t\right), \quad (23.5)$$

więc o rozseparowanej części przestrzennej $\psi(x)$ i czasowej. Podstawiając (23.5) do (23.4) otrzymujemy

$$E \psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x), \quad (23.6)$$

gdzie zależny od czasu czynnik wykładniczy skraca się. Równanie typu (23.6) jest stacjonarnym równaniem Schrödingera. Jest to równanie typu zagadnienia własnego: pewien operator działając na funkcję $\psi(x)$ odtwarza tę funkcję pomnożoną przez czynnik E , który utożsamiamy z energią cząstki.

Rozwiązań równania (23.6) będziemy szukać w przestrzeni funkcji całkowalnych z kwadratem. W tym celu wygodnie jest zapisać to równanie w nieco innej postaci

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - U(x) \right] \psi(x) = \epsilon \psi(x) \quad (23.7)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenia

$$U(x) = \frac{2m}{\hbar} V(x), \quad \epsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (23.8)$$

Równanie (23.7) jest liniowym równaniem różniczkowym drugiego rzędu. Jego rozwiązania spełniać więc będą zasadę superpozycji, tj. kombinacja liniowa rozwiązań też będzie rozwiązaniem. Bez trudu można przeprowadzić matematyczną dyskusję własności tego równania w zależności od postaci funkcji $U(x)$ – energii potencjalnej i od relacji pomiędzy ϵ – energią całkowitą, a $U(x)$. Ten aspekt dyskusji jednak pominiemy. Będzie on omawiany przy rozwiązywaniu konkretnych przykładów.

Niech ψ_1 i ψ_2 będą dwoma różnymi rozwiązaniami równania (23.7). Twierdzimy, że ich wyznacznik Wrońskiego (tzw. wronskian), zdefiniowany jako funkcja zmiennej x :

$$W(x) = \psi_1'(x) \psi_2(x) - \psi_1(x) \psi_2'(x), \quad (23.9)$$

jest tożsamościowo równy stałej. Istotnie, różniczkując obie strony powyższej definicji

$$\begin{aligned} W'(x) &= \psi_1''(x) \psi_2(x) + \psi_1'(x) \psi_2'(x) - \psi_1'(x) \psi_2'(x) - \psi_1(x) \psi_2''(x) \\ &= \psi_1''(x) \psi_2(x) - \psi_1(x) \psi_2''(x) \\ &= [U\psi_1 + \epsilon\psi_1] \psi_2 - \psi_1 [U\psi_2 + \epsilon\psi_2] = 0, \end{aligned} \quad (23.10)$$

gdzie wykorzystaliśmy (23.7) do wyeliminowania drugich pochodnych. Ponieważ pochodna wronskianu $dW(x)/dx = 0$, to $W(x) = \text{const.}$. A zatem mamy

$$\psi_1'(x) \psi_2(x) - \psi_1(x) \psi_2'(x) \equiv \text{const.} \quad (23.11)$$

Funkcje całkowalne w kwadracie (a takich rozwiązań poszukujemy) znikają przy $|x| \rightarrow \infty$. Wobec tego stała występująca w (23.11) musi być równa zero. Wronskian dwóch różnych rozwiązań równania (23.7) jest więc równy zero. Odwołamy się teraz do twierdzenia z teorii równań różniczkowych, które mówi, że dwa rozwiązania równania różniczkowego których wronskian znika, są liniowo zależne. A więc $\psi_1(x) = \alpha \psi_2(x)$. Z drugiej strony wiemy, że dwie funkcje falowe różniące się o stały czynnik przedstawiają ten sam stan fizyczny (po normowaniu czynnik α przestaje odgrywać jakąkolwiek rolę). Wnioskujemy więc, że każdej dopuszczalnej wartości parametru ϵ w stacjonarnym równaniu Schrödingera odpowiada jedna funkcja falowa – jeden stan układu (cząstki).

23.2.2 $U(x)$ – funkcja parzysta

Założmy, że występująca w równaniu (23.7) funkcja $U(x)$ (energia potencjalna cząstki) jest funkcją parzystą

$$U(x) = U(-x). \quad (23.12)$$

Dwukrotna zmiana znaku współrzędnej x nie zmienia operatora różniczkowego d^2/dx^2 , więc zamieniając $x \rightarrow -x$ w równaniu (23.7), wobec założenia (23.12) dostajemy

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - U(x) \right] \psi(-x) = \epsilon \psi(-x), \quad (23.13)$$

skąd wnioskujemy, że jeśli $\psi(x)$ jest rozwiązaniem, to jest nim również $\psi(-x)$. Utwórzmy teraz kombinacje liniowe

$$\begin{aligned} \text{parzystą:} \quad \psi_+ &= \frac{1}{2}(\psi(x) + \psi(-x)) \\ \text{nieparzystą:} \quad \psi_- &= \frac{1}{2}(\psi(x) - \psi(-x)) \end{aligned} \quad (23.14)$$

Oczywiście obie kombinacje są liniowo niezależne. Co więcej, obie spełniają równanie (23.7). Istotnie, zarówno $\psi(x)$ jak i $\psi(-x)$ spełniają (23.7), a zatem

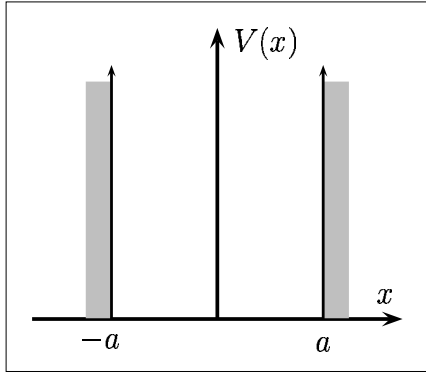
$$\begin{aligned} \left[\frac{d^2}{dx^2} - U(x) \right] \psi_{\pm}(x) &= \frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dx^2} - U(x) \right) (\psi(x) \pm \psi(-x)) \\ &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - U(x) \psi(x) \right) \pm \left(\frac{d^2 \psi(-x)}{dx^2} - U(x) \psi(-x) \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} (\epsilon \psi(x) \pm \epsilon \psi(-x)) \\ &= \epsilon \frac{1}{2} (\psi(x) \pm \psi(-x)) = \epsilon \psi_{\pm}(x), \end{aligned} \quad (23.15)$$

co chcieliśmy wykazać. Jeśli więc funkcja $\psi(x)$ jest rozwiązaniem równania Schrödingera (23.7), to również funkcje $\psi_{\pm}(x)$ są rozwiązaniami. Jednak równanie to może mieć tylko jedno rozwiązanie. Ponieważ $\psi_{\pm}(x)$ są liniowo niezależne (funkcja nie może być jednocześnie parzysta i nieparzysta) więc rozwiązanie $\psi(x)$ musi być proporcjonalne albo do $\psi_+(x)$ albo do $\psi_-(x)$, wtedy odpowiednio $\psi_-(x)$ albo $\psi_+(x)$ znika tożsamościowo. Oznacza to, że rozwiązanie równania

(23.7) przy parzystym potencjale $[U(x) = U(-x)]$ jest funkcją albo parzystą albo nieparzystą. Rozwiązania obu typów są dopuszczalne, więc klasa rozwiązań rozpada się na dwie podklasy: parzyste i nieparzyste funkcje falowe. Z taką właśnie sytuacją spotkamy się badając, na przykład, zagadnienie symetrycznej studni potencjału (np. $V(x) = -V_0$, dla $x \in [-a, a]$) i oscylatora harmonicznego ($V(x) \propto x^2$).

23.3 Jednowymiarowa, nieskończona studnia potencjału

23.3.1 Wprowadzenie



Rys. 23.1: Jednowymiarowa, nieskończona studnia potencjału.

Rozważmy jednowymiarowy model układu fizycznego, w którym swobodna cząstka (bezsponowa, o masie M) znajduje się w pudle o skończonej objętości. W jednym wymiarze odpowiada to założeniu, że energia potencjalna cząstki wynosi

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & |x| \geq a, \\ 0, & |x| < a. \end{cases} \quad (23.16)$$

Rysunek ilustruje tę sytuację – nieskończoną studnię potencjału. Odcinek $(-a, a) \subset \mathbb{R}$ modeluje ograniczoną objętość dostępną dla cząstki. Cząstka nie może mieć nieskończonej energii, więc jedynym sensownym rozwiązaniem równania Schrödingera dla $|x| \geq a$ jest $\psi(x) = 0$. Innymi słowy, prawdopodobieństwo znalezienia cząstki na zewnątrz jamy potencjału jest równe zero. Co więcej, energia cząstki jest skończona, czyli mniejsza niż maksymalna energia potencjalna. W nieskończonej studni mogą więc występować jedynie stany związane. Punkt wyjścia do obliczeń funkcji falowej cząstki jest następujący:

- musi w obszarze $|x| < a$ spełniać stacjonarne równanie Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x). \quad (23.17)$$

- znika poza obszarem $|x| < a$, tj. $\psi(x) = 0$, dla $|x| \geq a$.
- powinna być ciągła na granicach dostępnego obszaru, więc musi spełniać warunek

$$\psi(x = \pm a) = 0. \quad (23.18)$$

- musi być unormowana, to znaczy musi być

$$\int_{-a}^a dx |\psi(x)|^2 = 1. \quad (23.19)$$

Całka jest ograniczona do przedziału $(-a, a)$, bowiem poza nim funkcja falowa znika.

23.3.2 Rozwiązanie równania Schrödingera

Przystępując do rozwiązania równania (23.17) wygodnie jest najpierw zapisać je w postaci

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0, \quad (23.20)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie

$$k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} \in \mathbb{R}_+. \quad (23.21)$$

Równanie (23.20) jest równaniem różniczkowym typu oscylatora harmonicznego, więc od razu możemy wypisać jego rozwiązanie

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (23.22)$$

gdzie stałe (w ogólności zespolone) trzeba dalej określić. Aby to zrobić, wykorzystamy warunki brzegowe (23.18), do których podstawiamy rozwiązanie (23.22). W ten sposób otrzymujemy parę równań

$$A e^{ika} + B e^{-ika} = 0 \quad (23.23a)$$

$$A e^{-ika} + B e^{ika} = 0. \quad (23.23b)$$

Jest to jednorodny układ równań względem nieznanymi stałych A i B . Interesują nas wyłącznie rozwiązania nietrywialne. Warunkiem ich istnienia jest znikanie wyznacznika

$$\det \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ e^{-ika} & e^{ika} \end{pmatrix} = 0. \quad (23.24)$$

Warunek ten oznacza że $e^{2ika} - e^{-2ika} = 0$, lub równoważnie

$$\sin 2ka = 0, \quad (23.25)$$

co może być spełnione jedynie wtedy, gdy liczba k przyjmuje wartości

$$k = k_n = \frac{n\pi}{2a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (23.26)$$

Wielkość k jest z założenia dodatnia, więc liczby n przebiegają zbiór liczb naturalnych. Liczby k są związane z energią cząstki poprzez relację (23.21)) zatem energie E mogą także przyjmować jedynie określone wartości, takie że

$$k_n^2 = \frac{2ME_n}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{4a^2} \implies E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{8Ma^2}. \quad (23.27)$$

Otrzymaliśmy więc skwantowane poziomy energetyczne. Kwantowanie energii jest tutaj konsekwencją warunków brzegowych: cząstka nie może "wyjść" poza obszar $|x| < a$.

Zwróćmy uwagę, że "matematycznie" rzecz biorąc, warunek (23.25) może być spełniony również dla $k = 0$, co oznaczałoby, że energia cząstki $E = 0$. W fizyce klasycznej jest to możliwe – odpowiada cząstce spoczywającej. Antycypując nieco ciąg wykładu, stwierdzamy, że na gruncie mechaniki kwantowej rozwiązanie $E = 0$ jest niedopuszczalne, łamałoby bowiem zasadę nieoznaczoności. Dlatego też przypadek $n = 0$, odpowiadający $k = 0$, został opuszczony jako fizycznie niedozwolony.

23.3.3 Funkcje falowe

Wracamy teraz do obliczeń stałych A i B . Ponieważ dozwolone wartości k są numerowane liczbą naturalną, więc również stałe A, B powinny być odpowiednio indeksowane. Równania (23.23) są liniowo zależne (ich wyznacznik znika). Wystarczy więc zbadać jedno z nich. A więc mamy

$$A_n e^{ik_n a} + B_n e^{-ik_n a} = 0 \implies B_n = -A_n e^{2ik_n a}. \quad (23.28)$$

Biorąc teraz k_n według wzoru (23.26) otrzymujemy

$$B_n = -A_n e^{in\pi} = -A_n (-1)^n = A_n (-1)^{n+1}. \quad (23.29)$$

Wynikają stąd dwa przypadki: n nieparzyste oraz n parzyste.

- Dla n nieparzystego, z (23.29) mamy $A_n = B_n$. Odpowiednia funkcja falowa wynika więc z (23.22) i (23.26):

$$\begin{aligned} \psi_n^{(+)}(x) &= A_n e^{ik_n x} + A_n e^{-ik_n x} = 2A_n \cos(k_n x) \\ &= 2A_n \cos\left(\frac{n\pi}{2a} x\right), \end{aligned} \quad (23.30)$$

gdzie górny znak (+) przy funkcji ψ oznacza, że liczba n jest nieparzysta. Stałą A_n (do tej pory nie określoną) wyznaczamy z warunku normowania

$$\begin{aligned} 1 &= 4|A_n|^2 \int_{-a}^a dx \cos^2\left(\frac{n\pi}{2a} x\right) \\ &= 4|A_n|^2 \left[\frac{x}{2} + \frac{2a}{4n\pi} \sin\left(2 \frac{n\pi}{2a} x\right) \right]_{-a}^a = 4a|A_n|^2, \end{aligned} \quad (23.31)$$

gdzie całkę nieoznaczoną wzięliśmy z tablic. Z powyższego mamy $|A_n| = 1/2\sqrt{a}$, więc wybierając fazę stałej A_n równą zero, z (23.33) otrzymujemy unormowaną funkcję falową dla n nieparzystego

$$\psi_n^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{2a} x\right), \quad n \text{ nieparzyste.} \quad (23.32)$$

Zauważmy, że stała normalizacyjna a_N okazała się być niezależna od liczby kwantowej n (choć w ogólności wcale tak być nie musi).

- Dla n parzystego postępujemy zupełnie analogicznie. Z (23.29) mamy $B_n = -A_n$, więc

$$\begin{aligned} \psi_n^{(-)}(x) &= A_n e^{ik_n x} - A_n e^{-ik_n x} = 2iA_n \sin(k_n x) \\ &= 2iA \sin\left(\frac{n\pi}{2a} x\right), \end{aligned} \quad (23.33)$$

gdzie, tym razem, górny znak (−) przy ψ oznacza, że liczba n jest parzysta. Stałą A znów wyznaczamy z warunku normowania, który daje

$$1 = 4|A_n|^2 \int_{-a}^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{2a} x\right) = 4a|A_n|^2, \quad (23.34)$$

Ponownie $|A_n| = 1/2\sqrt{a}$ jest niezależne od n , zaś fazę stałej A znów bierzemy równą zero. Unormowaną funkcję falową dla n parzystego ma więc postać

$$\psi_n^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a} x\right), \quad n \text{ parzyste.} \quad (23.35)$$

Uwaga. Funkcje $\psi_n^{(+)}(x)$ (n nieparzyste) są opatrzone znakiem (+), bo cosinus jest funkcją parzystą. Natomiast sinus jest funkcją nieparzystą, stąd znak (−) przy funkcjach falowych dla n parzystego.

23.3.4 Podsumowanie

W naszym modelu energia potencjalna cząstki jest funkcją parzystą. Wobec tego mogliśmy oczekiwać, że zbiór funkcji falowych rozpadnie się na dwie klasy.

- Parzyste funkcje falowe

$$\psi_{n=2p-1}^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{(2p-1)\pi}{2a} x\right), \quad \text{gdzie } p = 1, 2, 3, \dots \quad (23.36)$$

- Nieparzyste funkcje falowe

$$\psi_{n=2p}^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{p\pi}{a} x\right), \quad \text{gdzie } p = 1, 2, 3, \dots \quad (23.37)$$

W obu przypadkach dozwolone energie dane są wzorem

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{8Ma^2}, \quad \text{gdzie } n = 2p-1 \text{ lub } n = 2p. \quad (23.38)$$

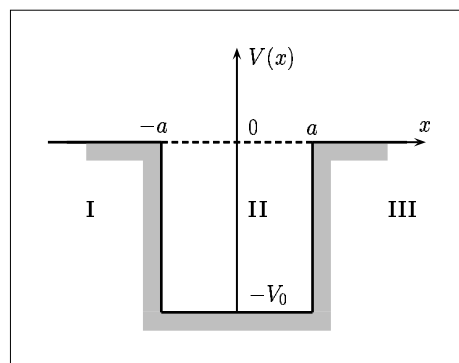
Na zakończenie zwróćmy uwagę, że wraz ze wzrostem a (jama poszerza się) różnice pomiędzy kolejnymi poziomami energetycznymi

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = (2n+1) \frac{\hbar^2 \pi^2}{8Ma^2}, \quad (23.39)$$

maleją, bowiem mianownik rośnie. W bardzo wielkim pudle, przynajmniej niżej leżące poziomy (niezbyt duże n) są bardzo blisko siebie.

23.4 Jednowymiarowa, skończona studnia potencjału

23.4.1 Wprowadzenie



Jednowymiarowa, lecz tym razem skończona jama potencjału jest bardzo uproszczonym modelem wielu sytuacji fizycznych (np. sił wiążących nukleony w jądrze atomowym). Oczywiście realne potencjały są ciągłe, co jednak sprawia, że rozwiązywanie odpowiedniego równania Schrödingera jest znacznie trudniejsze. Dlatego też porzucimy tu na zbadań przypadku, w którym energia potencjalna cząstki jest zadana wzorem

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dla } |x| > a, \\ -V_0, & \text{dla } |x| < a, \end{cases} \quad (23.40)$$

Rys. 23.2: Jednowymiarowa, skończona studnia potencjału.

przy czym parametr $V_0 > 0$, co ilustruje rysunek obok. Energia całkowita E cząstki jest sumą energii kinetycznej i potencjalnej. Zgodnie z dyskusją przeprowadzoną w rozdziale 2 (patrz (2.79)) dla energii $E < V_{max} = 0$ spodziewamy się, że w jamie występować będą stany związane o energiach tworzących zbiór dyskretny, zaś dla $E > 0$ będziemy mieć stany rozproszeniowe zachowujące się dla $|x| \gg a$ jak fale płaskie. Rozwiązywanie stacjonarnego równania Schrödingera w naturalny sposób "rozpada się" na dwie części.

23.4.2 Stany związane

Badamy najpierw sytuację, w której energia cząstki jest ujemna. Stacjonarne (jednowymiarowe) równanie Schrödingera trzeba, ze względu na postać $V(x)$, zapisać oddzielnie dla trzech obszarów

zaznaczonych na rysunku. I tak mamy

$$\text{obszary I i III } (|x| > a) : \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -|E| \psi(x), \quad (23.41a)$$

$$\text{obszar II } (|x| < a) : \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - V_0 \psi(x) = -|E| \psi(x). \quad (23.41b)$$

gdzie pisząc $E = -|E|$ uwzględniliśmy fakt, że energia cząstki jest ujemna. Wprowadzamy rzeczywiste i dodatnie wielkości pomocnicze

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|)}, \quad (23.42)$$

Za ich pomocą zapisujemy równania (23.41) w postaci

$$(|x| > a) : \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - \kappa^2 \psi(x) = 0, \quad (23.43a)$$

$$(|x| < a) : \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0. \quad (23.43b)$$

Rozwiązania tych równań są dobrze znane, są to bowiem równania różniczkowe typu oscylatora harmonicznego z tym, że (23.43a) odpowiada czysto urojonej częstości. Ich ogólne rozwiązania są następujące

$$(|x| > a) : \quad \psi(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}, \quad (23.44a)$$

$$(|x| < a) : \quad \psi(x) = A \cos kx + B \sin kx. \quad (23.44b)$$

W zasadzie wewnątrz jamy moglibyśmy równie dobrze napisać $\psi(x) = A_1 e^{-ikx} + B_1 e^{ikx}$. Szukamy jednak stanów związanych, a nie fal biegnących, dlatego wygodniej jest posłużyć się funkcjami trygonometrycznymi. Funkcje falowe muszą być normowalne (całkowalne w kwadracie). Wobec tego rozwiązania dla $|x| > a$ trzeba omówić oddzielnie. Dla $x < -a$ funkcja $e^{-\kappa x}$ jest rozbieżna, więc w tym obszarze musimy wziąć $C = 0$. Analogicznie, dla $x > a$ rozbieżna jest funkcja $e^{\kappa x}$, skąd $D = 0$. Wobec tego żądanie normowalności (które jest natury fizycznej, a nie matematycznej) sprawia, że funkcja falowa musi być postaci

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = De^{\kappa x}, & x < -a, \\ \psi_{II}(x) = A \cos kx + B \sin kx, & |x| < a, \\ \psi_{III}(x) = Ce^{-\kappa x}, & x > a, \end{cases} \quad (23.45)$$

Stałe A , B , C i D są na razie nieokreślone. Będziemy je wyznaczać na podstawie warunków ciągłości. W punkcie $x = -a$ funkcja falowa i jej pochodna muszą być ciągłe

$$\psi_I(x) \Big|_{x=-a} = \psi_{II}(x) \Big|_{x=-a} \quad \text{oraz} \quad \frac{d\psi_I(x)}{dx} \Big|_{x=-a} = \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \Big|_{x=-a} \quad (23.46)$$

Z relacji (23.45) wynika więc para równań

$$De^{-\kappa a} = A \cos ka - B \sin ka, \quad (23.47a)$$

$$\kappa De^{-\kappa a} = kA \sin ka + kB \cos ka. \quad (23.47b)$$

Analogicznie w punkcie $x = a$ musimy mieć

$$\psi_{II}(x) \Big|_{x=a} = \psi_{III}(x) \Big|_{x=a} \quad \text{oraz} \quad \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \Big|_{x=a} = \frac{d\psi_{III}(x)}{dx} \Big|_{x=a} \quad (23.48)$$

co, na mocy (23.45) prowadzi do równań

$$A \cos ka + B \sin ka = C e^{-\kappa a} \quad (23.49a)$$

$$-kA \sin ka + kB \cos ka = -\kappa C e^{-\kappa a}. \quad (23.49b)$$

Równania (23.47) i (23.49) stanowią układ 4 równań jednorodnych z niewiadomymi A , B , C i D . Można go rozwiązywać metodą Cramera, lecz prościej jest to zrobić bezpośrednio. Z równań (23.47) eliminujemy stałą D , zaś z (23.49) stałą C i dostajemy

$$kA \sin ka + kB \cos ka = \kappa A \cos ka - \kappa B \sin ka \quad (23.50a)$$

$$-kA \sin ka + kB \cos ka = -\kappa A \cos ka - \kappa B \sin ka \quad (23.50b)$$

Odejmując stronami te równania dostajemy

$$2kA \sin ka = 2\kappa A \cos ka \quad \xrightarrow{A \neq 0} \quad k \operatorname{tg} ka = \kappa. \quad (23.51)$$

Dodając stronami równania (23.50) otrzymujemy

$$2kB \cos ka = -2\kappa B \sin ka \quad \xrightarrow{B \neq 0} \quad k \operatorname{ctg} ka = -\kappa. \quad (23.52)$$

Warunki (23.51) i (23.52) nie mogą być spełnione jednocześnie, bowiem z ich wymnożenia stronami wynika $k^2 = -\kappa^2$, co jest sprzeczne, bo z założenia są to parametry dodatnie. Oznacza to, że stałe A i B nie mogą być jednocześnie różne od zera. Rozwiązania równania Schrödingera rozpadają się na dwie klasy

- $A \neq 0$ i $B = 0$, więc $\psi_{II}(x) = A \cos kx$, rozwiązania parzyste spełniające warunek (23.51);
- $A = 0$ i $B \neq 0$, czyli $\psi_{II}(x) = B \sin kx$, rozwiązania nieparzyste z warunkiem (23.52).

Wyniku tego można było z góry oczekiwać, bo energia potencjalna jest funkcją parzystą.

Warunki (23.51) i (23.52) zależą od wielkości pomocniczych k i κ , czyli od energii cząstki i parametrów V_0 , a określających kształt jamy. Wynikną z nich warunki kwantowania energii, które przedyskutujemy dalej, po omówieniu funkcji falowych.

Rozwiązania parzyste

Rozwiązania parzyste odpowiadają $A \neq 0$ i $B = 0$ przy warunku (23.51). W takim przypadku układ równań (23.47) i (23.49) redukuje się do

$$D e^{-\kappa a} = A \cos ka, \quad (23.53a)$$

$$A \cos ka = C e^{-\kappa a}, \quad (23.53b)$$

bowiem równania (23.47b) i (23.49b) sprowadzają się do warunku (23.51). Z równań (23.53) widzimy, że $C = D = e^{\kappa a} \cos ka$, zatem na podstawie (23.45) możemy od razu wypisać parzystą funkcję falową

$$\psi^{(+)}(x) = \begin{cases} \psi_I^{(+)}(x) = A \cos k a e^{\kappa(a+x)}, & x < -a, \\ \psi_{II}^{(+)}(x) = A \cos kx, & |x| < a, \\ \psi_{III}^{(+)}(x) = A \cos k a e^{\kappa(a-x)}, & x > a. \end{cases} \quad (23.54)$$

Funkcje te są istotnie parzyste i spełniają warunki ciągłości w punkcie $x = -a$. Pozostał/a stał/a A wyznaczmy z warunku normalizacji funkcji falowej

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{-a} dx |\psi_I^{(+)}(x)|^2 + \int_{-a}^a dx |\psi_{II}^{(+)}(x)|^2 + \int_a^{\infty} dx |\psi_{III}^{(+)}(x)|^2. \quad (23.55)$$

Podstawiając funkcje według wzoru (23.54) obliczamy niezbędne całki. Są one elementarne (można je wziąć z tablic całek) i w rezultacie otrzymujemy

$$1 = |A|^2 \left(\frac{1}{\varkappa} \cos^2 ka + a + \frac{1}{k} \sin ka \cos ka \right). \quad (23.56)$$

Z warunku (23.51) mamy $k \sin ka = \varkappa \cos ka$, co pozwala przekształcić ostatni składnik w (23.56)

$$1 = |A|^2 \left(\frac{1}{\varkappa} \cos^2 ka + a + \frac{1}{k} \sin ka \cdot \frac{k}{\varkappa} \sin ka \right) = |A|^2 \left(a + \frac{1}{\varkappa} \right). \quad (23.57)$$

Wybierając fazę stałej normalizacyjnej równą zero mamy w końcu

$$A = \sqrt{\frac{\varkappa}{a\varkappa + 1}}, \quad (23.58)$$

co możemy podstawić do wzoru (23.54) uzyskując końcową postać parzystych funkcji falowych, dla których zachodzi warunek (23.51).

Rozwiązania nieparzyste

Rozumowanie nasze będzie tu zupełnie analogicznie jak w przypadku rozwiązań parzystych, dlatego też przedstawimy je w skrócie. Tym razem mamy $A = 0$ i $B \neq 0$, przy czym spełniony być musi warunek (23.52). Z równań (23.47) i (23.49) mamy teraz

$$De^{-\varkappa a} = -B \sin ka = -Ce^{-\varkappa a}. \quad (23.59)$$

Wobec tego nieparzyste funkcje falowe wyrażają się wzorem

$$\psi^{(-)}(x) = \begin{cases} \psi_I^{(-)}(x) = -B \sin kae^{\varkappa(a+x)}, & x < -a, \\ \psi_{II}^{(-)}(x) = B \sin kx, & |x| < a, \\ \psi_{III}^{(-)}(x) = B \sin kae^{\varkappa(a-x)}. & x > a. \end{cases} \quad (23.60)$$

Nieparzystość i ciągłość w $x = a$ jest ewidentna. Normowanie znów przebiega tak samo, prowadząc do tego samego wyniku

$$B = \sqrt{\frac{\varkappa}{a\varkappa + 1}}, \quad (23.61)$$

co kończy obliczenia nieparzystych funkcji falowych.

Poziomy energetyczne

Znalezione parzyste i nieparzyste funkcje falowe zależą od parametrów \varkappa i k . Musimy zastanowić się, jakie są dopuszczalne wartości tych parametrów. Trzeba więc starannie przedyskutować warunki (23.51) i (23.52), które określają \varkappa i k , a co za tym idzie, energię całkowitą cząstki. Zapiszmy te relacje raz jeszcze

$$\text{rozv. parzyste : } ka \operatorname{tg} ka = \varkappa a, \quad (23.62a)$$

$$\text{rozv. nieparzyste : } ka \operatorname{ctg} ka = -\varkappa a, \quad (23.62b)$$

pamiętając, że spełniona jest albo pierwsza albo druga. Oba powyższe równania są równaniami przestępnymi, których nie da się rozwiązać analitycznie. Przeprowadzimy dyskusję jakościową posługując się metodą graficzną. W tym celu wprowadzimy bezwymiarowe i dodatnie zmienne

$$\xi = ka, \quad \eta = \varkappa a. \quad (23.63)$$

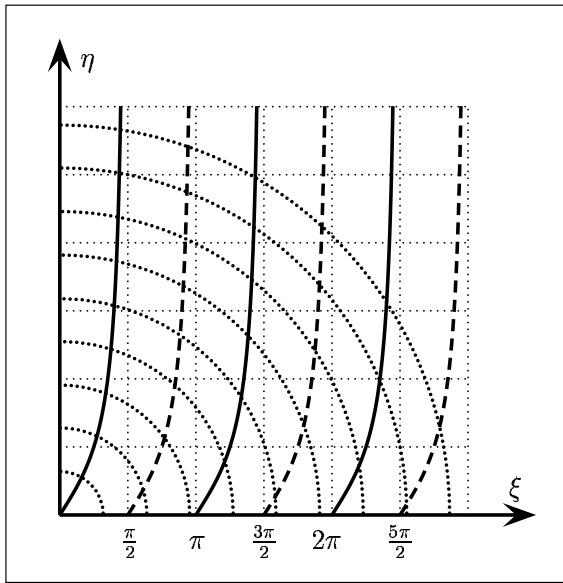
Zmienne te nie są niezależne. Z ich definicji i z relacji (23.42) wynika, że możliwe wartości ξ i η spełniają

$$\xi^2 + \eta^2 = k^2 a^2 + \kappa^2 a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2. \quad (23.64)$$

Rozwiązania równania Schrödingera sparametryzowane wartościami k i κ są więc ograniczone warunkiem (23.64). Z drugiej strony, warunki (23.62) możemy zapisać jako

$$\text{rozw. parzyste : } \eta = \xi \operatorname{tg} \xi, \quad (23.65a)$$

$$\text{rozw. nieparzyste : } \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi, \quad (23.65b)$$



Rys. 23.3: Graficzne wyznaczanie dozwolonych energii cząstki w jednowymiarowej skończonej studni potencjału. Ilustracja do dyskusji równań (23.66) i (23.67).

Innymi słowy, rozwiązania parzyste odpowiadają takim energiom E , że spełnione są jednocześnie warunki (23.64) i (23.65a). Natomiast rozwiązania nieparzyste istnieją dla energii E spełniających (23.64) oraz (23.65b). Interpretując to geometrycznie stwierdzamy, że energie odpowiadające

- parzystym funkcjom falowym są wyznaczone przez punkty na płaszczyźnie (ξ, η) leżące na krzywych

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \quad \text{i} \quad \eta = \xi \operatorname{tg} \xi. \quad (23.66)$$

- nieparzystym funkcjom falowym są wyznaczone przez punkty na płaszczyźnie (ξ, η) leżące na krzywych

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \quad \text{i} \quad \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi. \quad (23.67)$$

Rysunek stanowi graficzną ilustrację powyższej dyskusji. Linie ciągłe są wykresami funkcji $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$ (zmienne ξ i η są z założenia dodatnie). Linie przerywane to wykresy zależności $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$. Kropkowane okręgi mają promień równy liczbom całkowitym, a więc odpowiadają $2mV_0a^2/\hbar^2 = n$. Promień dowolnego takiego okręgu (nie zaznaczonego na rysunku) wynosi $R = \sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2}$. Z analizy rysunku wynikają następujące wnioski.

1. Dla dowolnej wartości iloczynu V_0a^2 istnieje co najmniej jeden poziom o parzystej funkcji falowej. Równania (23.66) (linia ciągła i kropkowana) mają co najmniej jedno rozwiązanie. Jeśli $V_0a^2 < \pi^2\hbar^2/(8m)$ to w jamie mamy tylko poziom parzysty – żadna krzywa przerywana nie przecina się z okręgiem o promieniu mniejszym niż $\pi/2$. W przypadku studni skończonej, odwrotnie niż w przypadku przypadku studni nieskończonej, mamy skończoną liczbę poziomów energetycznych. Okrąg o dowolnym promieniu przecina skończoną ilość tangensoid.

2. W przypadku studni scharakteryzowanej przez iloczyn $V_0 a^2$ taki, że

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \leq V_0 a^2 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}, \quad (23.68)$$

występuje w niej jeden poziom parzysty i jeden nieparzysty. Okrąg o promieniu mniejszym niż π przecina jedną krzywą ciągłą i jedną przerywaną. Równania (23.66) i (23.67) mają po jednym rozwiązaniu.

3. Dyskusję tą można kontynuować. Przy coraz większym iloczynie $V_0 a^2$ liczba możliwych poziomów rośnie. Okręgi mają coraz większy promień i przecinają coraz więcej linii krzywych zarówno ciągłych jak i przerywanych. Ilość rozwiązań równań (23.66) i (23.67) rośnie. Wraz ze wzrostem iloczynu $V_0 a^2$ w studni pojawiają się nowe poziomy, na przemian parzyste i nieparzyste.
4. Jeśli liczba $\sqrt{2mV_0 a^2/\hbar^2}$ jest duża, to odpowiedni okrąg ma duży promień i przecina wiele tangensoid. Liczba poziomów w studni jest duża. Wówczas, dla niezbyt dużych wartości zmiennej ξ tangensoidy są przecinane przez okrąg bardzo blisko punktów $\xi_n = n\pi/2$, gdzie n liczba naturalna (niezbyt duża). W takim przypadku możemy w przybliżeniu napisać

$$\begin{aligned} \xi^2 = k^2 a^2 &= \frac{2ma^2}{\hbar^2} (V_0 - |E|) \approx \frac{n^2 \pi^2}{4} \\ \Rightarrow E &= -|E| \approx E_n = -V_0 + \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \end{aligned} \quad (23.69)$$

Wnioskujemy więc, że struktura nisko leżących poziomów energetycznych w skończonej studni potencjalnej (takiej, że $V_0 \gg \hbar^2/2ma^2$) jest praktycznie identyczna ze strukturą poziomów występujących w jamie nieskończonej (por. (23.38)). Jest to zrozumiałe, bowiem cząstka o energii niewiele większej niż $-V_0$ (tuż ponad dnem głębokiej jamy) "słabo czuje", że jama jest faktycznie skończona. Parametr \varkappa jest stosunkowo duży i funkcja falowa cząstki poza jamą (tj. $\psi_I(x)$ oraz $\psi_{III}(x)$) bardzo szybko zanika. Sytuacja fizyczna jest bardzo zbliżona do przypadku studni o nieskończonej głębokości. Dlatego jama nieskończona jest nie tylko "ćwiczeniem rachunkowym", jest ona modelem (przybliżonym) głębokiej jamy skończonej.

Zwróćmy uwagę, że jamę charakteryzuje iloczyn $V_0 a^2$. Studnia wąska i głęboka ma własności podobne do studni płytkiej i szerokiej. Rozważamy tu stany związane o energiach $E < V_0$ więc w jamie płytkiej i szerokiej poziomy energetyczne są rozłożone bardzo gęsto, zaś w jamie wąskiej i głębokiej stosunkowo rzadko. Wybór jednego z tych modeli zależy od tego jakie zjawiska fizyczne chcemy opisywać. Na przykład jądro atomowe odpowiada raczej jamie głębokiej (siły jądrowe są mocne) i wąskiej (jądro ma małe rozmiary, bo siły jądrowe są krótkozasięgowe).

Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w studni

W mechanice klasycznej cząstka o energii mniejszej niż V_0 , z prawdopodobieństwem 1 (z pewnością) znajduje się wewnątrz studni, tj. w obszarze $|x| < a$. Jak wygląda sytuacja w mechanice kwantowej? Funkcja falowa poza studnią nie jest tożsamościowo równa zero. Wskazuje to, że prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obszarach I i III (patrz rysunek 23.2) jest różne od zera. Zbadajmy dokładniej P_S prawdopodobieństwo znalezienia cząstki wewnątrz studni. Zgodnie z probabilistyczną interpretacją funkcji falowej, szukane prawdopodobieństwo to

$$\begin{aligned} P_S^{(\pm)} &= \int_{-a}^a dx |\psi^{(\pm)}(x)|^2 = \int_{-a}^a dx |\psi_{II}^{(+)}(x)|^2 \\ &= \frac{\varkappa}{1 + a\varkappa} \int_{-a}^a dx \left\{ \begin{array}{l} \cos^2 ka \\ \sin^2 ka \end{array} \right\}, \end{aligned} \quad (23.70)$$

co wynika z podstawienia odpowiednich (parzystych i nieparzystych) funkcji falowych i stałej normalizacyjnej. Całki bierzemy z tablic i mamy

$$P_S^{(\pm)} = \frac{\varkappa}{1+a\varkappa} \left(\frac{x}{2} \pm \frac{\sin 2kx}{4k} \right) \Big|_{-a}^a = \frac{\varkappa}{1+a\varkappa} \left(a \pm \frac{\sin ka \cos ka}{k} \right). \quad (23.71)$$

Znaki w nawiasie odpowiadają typowi stanu związanego.

Dla rozwiązań parzystych obowiązuje warunek (23.51): $k \sin ka = \varkappa \cos ka$. Zatem z (23.71)

$$P_S^{(+)} = \frac{\varkappa}{1+a\varkappa} \left(a + \frac{\sin^2 ka}{\varkappa} \right). \quad (23.72)$$

Z elementarnej trygonometrii wynika, że

$$\frac{1}{\sin^2 ka} = 1 + \operatorname{ctg}^2 ka = 1 + \frac{k^2}{\varkappa^2} = \frac{k^2 + \varkappa^2}{\varkappa^2}, \quad (23.73)$$

gdzie w drugiej równości ponownie wykorzystaliśmy warunek (23.51). Wobec tego

$$P_S^{(+)} = \frac{\varkappa}{1+a\varkappa} \left(a + \frac{\varkappa}{k^2 + \varkappa^2} \right). \quad (23.74)$$

Wyrażenie to warto dalej przekształcić

$$\begin{aligned} P_S^{(+)} &= \frac{\varkappa}{1+a\varkappa} \cdot \frac{a\varkappa^2 + ak^2 + \varkappa}{k^2 + \varkappa^2} = \frac{\varkappa^2(1+a\varkappa) + a\varkappa k^2 + k^2 - k^2}{(1+a\varkappa)(k^2 + \varkappa^2)} \\ &= 1 - \frac{k^2}{(1+a\varkappa)(k^2 + \varkappa^2)} \end{aligned} \quad (23.75)$$

Zanim przejdziemy do dyskusji, obliczymy $P_S^{(-)}$ dla funkcji (stanów) nieparzystych. W tym wypadku z (23.71) mamy

$$P_S^{(-)} = \frac{\varkappa}{1+a\varkappa} \left(a - \frac{\sin^2 ka}{\varkappa} \right). \quad (23.76)$$

Dla stanów nieparzystych obowiązuje warunek (23.52): $k \cos ka = -\varkappa \sin ka$, więc

$$P_S^{(-)} = \frac{\varkappa}{1+a\varkappa} \left(a + \frac{\cos^2 ka}{\varkappa} \right). \quad (23.77)$$

Podobnie jak dla stanów parzystych, z (23.52) dostajemy

$$\frac{1}{\cos^2 ka} = 1 + \operatorname{tg}^2 ka = 1 + \frac{k^2}{\varkappa^2} = \frac{k^2 + \varkappa^2}{\varkappa^2}, \quad (23.78)$$

co prowadzi do prawdopodobieństwa

$$P_S^{(-)} = \frac{\varkappa}{1+a\varkappa} \left(a + \frac{\varkappa}{k^2 + \varkappa^2} \right), \quad (23.79)$$

tego samego co (23.74) dla stanów parzystych.

Wobec tego prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w jamie jest takie same dla stanów parzystych i nieparzystych. Możemy pominąć indeks rozróżniający stany i napisać

$$P_S = 1 - \frac{k^2}{(1+a\varkappa)(k^2 + \varkappa^2)} = 1 - \frac{\hbar(V_0 - |E|)}{V_0 \left(\hbar + a\sqrt{2m|E|} \right)}, \quad (23.80)$$

gdzie wykorzystaliśmy określenia (23.42). Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obrębie studni jest (inaczej niż w przypadku klasycznym) mniejsze od jedności.

Energia E cząstki związanej jest (przypominamy) ujemna. Jeśli E jest tylko nieco większa niż $-V_0$ (tzn. $|E| < V_0$ tylko nieznacznie) wówczas licznik ostatniego wyrażenia jest bliski zera. Dla energii tuż ponad dnem jamy $P_S \approx 1$, a więc rzeczywiście sytuacja jest zbliżona do przypadku jamy nieskończonej. Gdy energia cząstki rośnie (tzn. gdy $|E|$ maleje) prawdopodobieństwo P_S staje się coraz mniejsze. Dla cząstki o energii niewiele mniejszej od zera ($|E|$ małe) P_S zbliża się do zera. Wraz ze wzrostem E (spadkiem $|E|$) "chętniej" przebywa poza jamą, a więc wnika do obszarów I i III, gdzie funkcje falowe zanikają coraz wolniej (bowiem parametr κ staje się coraz mniejszy). Klasycznie rzecz biorąc jest to niemożliwe, obszary I i III są, dla cząstki klasycznej o energii $E < 0$, niedostępne. Zjawisko wnikania cząstki do obszaru klasycznie zabronionego jest efektem typowo kwantowo-mechanicznym. Cząstka może przeniknąć przez (klasycznie nieprzenikalną) barierę potencjału. Dzieje się tak na przykład, przy promieniotwórczych rozpadach jąder atomowych.

23.4.3 Stany rozproszeniowe

Współczynniki odbicia i transmisji

W tym przypadku energia całkowita cząstki $E > V_{max} = 0$ jest dodatnia. Najpierw, podobnie jak w przypadku stanów związanych, musimy zbudować odpowiednie (stacjonarne) równanie Schrödingera. Analogicznie jak poprzednio mamy

$$\text{obszary I i II } (|x| > a) : \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x), \quad (23.81a)$$

$$\text{obszar III } (|x| < a) : \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - V_0 \psi(x) = E \psi(x) \quad (23.81b)$$

Ponownie, choć nieco inaczej, wprowadzamy rzeczywiste i dodatnie parametry pomocnicze

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)}, \quad (23.82)$$

i zamiast równań (23.81) mamy teraz

$$(|x| > a) : \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = 0, \quad (23.83a)$$

$$(|x| < a) : \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + K^2 \psi(x) = 0. \quad (23.83b)$$

Oba równania są znanego typu i mają rozwiązania w postaci fal płaskich (stany rozproszeniowe)

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < -a, \\ \psi_{II}(x) = Ce^{iKx} + De^{-iKx}, & |x| < a, \\ \psi_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}, & x > a, \end{cases} \quad (23.84)$$

Natrafiamy tu na pierwszy problem związany z falami płaskimi. Warunki zszycia (ciągłości) funkcji falowych prowadzą do czterech równań (funkcje i pochodne, ciągłość w dwóch punktach). Funkcje (23.84) zaś (w najogólniejszej postaci) zawierają aż sześć stałych, więc co najmniej dwie z nich nie mogą być wyznaczone. Druga trudność to oczywiście nienormowalność fal płaskich. Aby jednak nie komplikować sobie życia pakietami falowymi pozostaniemy przy falach płaskich. Wykorzystamy za to możliwość interpretacji amplitud fal płaskich jako miary natężeń strumieni

cząstek (miary liczby cząstek nadbiegających w ciągu jednostki czasu). Przyjmujemy, że cząstki nadbiegają z $x = -\infty$, więc amplituda A określa natężenie strumienia cząstek padających, jest więc ona z góry zadana (uznajemy ją za znaną, choć na razie jej nie precyzujemy). Amplituda B (fala biegnąca z prawa na lewo w obszarze I) mierzy natężenie strumienia cząstek odbitych. Na prawo od studni (obszar III) mogą znajdować się jedynie cząstki przechodzące, które następnie oddalają się do $x = +\infty$. Nie ma (bo skąd) cząstek nadbiegających z prawa (z $x = +\infty$), zatem musi być $G = 0$. Wobec tych uwag, badana funkcja falowa ma postać zmodyfikowaną

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < -a, \\ \psi_{II}(x) = Ce^{iKx} + De^{-iKx}, & |x| < a, \\ \psi_{III}(x) = Fe^{ikx}, & x > a, \end{cases} \quad (23.85)$$

gdzie amplituda A jest znana, zaś B , C , D i E musimy obliczyć.

Amplitudy A , B i F są miarą strumieni cząstek, wobec tego wielkości

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad \text{oraz} \quad T = \frac{|F|^2}{|A|^2}, \quad (23.86)$$

przedstawiają odpowiednio stosunek liczby cząstek odbitych do liczby cząstek padających i stosunek liczby cząstek przechodzących do ilości cząstek padających. Współczynniki proporcjonalności wiążące moduły amplitud fal płaskich z natężeniem strumieni cząstek są nieistotne – i tak skracają się w definicjach współczynników R i T , które nazwiemy

- R – współczynnik odbicia (*ang. reflection*),
- T – współczynnik przejścia (transmisji) (*ang. transmission*).

Głównym celem naszych rozważań będzie obliczenie właśnie tych współczynników. Wybierając omówiony sposób opisu i koncentrując się na obliczeniach współczynników R i T tracimy probabilistyczną interpretację funkcji falowej. Funkcji nieunormowanych nie wolno nam interpretować jako amplitudy gęstości prawdopodobieństwa. Nie możemy więc, na przykład, całkować $|\psi_{II}(x)|^2$ w celu otrzymania prawdopodobieństwa znalezienia cząstki wewnątrz studni. Takie postępowanie (przy wybranej metodzie interpretacyjnej) byłoby bez sensu.

Obliczenia R i T

Przystępujemy więc do obliczeń amplitud B , i F w zależności od A . Współczynniki (amplitudy) C i D są nam niepotrzebne. Poszukiwane amplitudy znajdziemy zszywając funkcje (23.85) i ich pochodne w punktach $x = \pm a$. Konstruujemy więc odpowiednie równania.

1. Ciągłość w $x = -a$, tj. $\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a)$:

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{-iKa} + De^{iKa}, \quad (23.87)$$

2. Ciągłość pochodnych w $x = -a$, tj. $\psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a)$:

$$ikAe^{-ika} - ikBe^{ika} = iKCe^{-iKa} - iKDe^{iKa}. \quad (23.88)$$

3. Ciągłość w $x = a$, tj. $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$:

$$Ce^{iKa} + De^{-iKa} = Fe^{ika}, \quad (23.89)$$

4. Ciągłość pochodnych w $x = a$, tj. $\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$:

$$iKCe^{iKa} - iKDe^{-iKa} = ikFe^{ika} \quad (23.90)$$

Równania (23.87)–(23.90) stanowią układ równań, który mamy rozwiązać względem B i F . W zasadzie rozwiązanie układu czterech równań z czterema niewiadomymi nie stanowi problemu. Naszkicujemy jednak tok rozwiązania, aby uzyskane wyniki miały, jak najprostszą i możliwie wygodną do dyskusji, postać.

Najpierw badamy równania (23.89) i (23.90), aby obliczyć z nich (niepotrzebne nam) amplitudy C i D . Wygodnie jest pomnożyć przedtem równanie (23.89) przez K . Mamy wtedy parę równań

$$\begin{aligned} KCe^{iKa} + KDe^{-iKa} &= KF e^{ika}, \\ KCe^{iKa} - KDe^{-iKa} &= kF e^{ika}. \end{aligned} \quad (23.91)$$

Równania te dodajemy i odejmujemy stronami i wyliczamy amplitudy C i D . Wyniki są następujące

$$C = \frac{F}{2} \left(1 + \frac{k}{K}\right) e^{ika-iKa}, \quad D = \frac{F}{2} \left(1 - \frac{k}{K}\right) e^{ika+iKa}, \quad (23.92)$$

Kolejny etap rozwiązania omawianego układu równań polega na wykorzystaniu równań (23.87) i (23.88), do których podstawiamy obliczone amplitudy C i D dostając

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} + Be^{ika} &= \frac{F}{2} \left(1 + \frac{k}{K}\right) e^{ika-2iKa} + \frac{F}{2} \left(1 - \frac{k}{K}\right) e^{ika+2iKa}, \\ kAe^{-ika} - kB e^{ika} &= \frac{F}{2} (K+k) e^{ika-2iKa} - \frac{F}{2} (K-k) e^{ika+2iKa}, \end{aligned} \quad (23.93)$$

Proste przekształcenia polegające na zastąpieniu funkcji wykładniczych $e^{\pm 2ika}$ odpowiednimi funkcjami trygonometrycznymi prowadzą do układu

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} + Be^{ika} &= F e^{ika} \cos 2Ka - \frac{ik}{K} F e^{ika} \sin 2Ka, \\ Ae^{-ika} - B e^{ika} &= F e^{ika} \cos 2Ka - \frac{iK}{k} F e^{ika} \sin 2Ka. \end{aligned} \quad (23.94)$$

Dodając stronami równania (23.94) łatwo obliczamy amplitudę F w zależności od A

$$F = \frac{Ae^{-2ika}}{\cos 2Ka - \frac{i}{2} \left(\frac{K}{k} + \frac{k}{K}\right) \sin 2Ka}. \quad (23.95)$$

Odejmując stronami równania (23.94) wyliczamy B w zależności od F , które następnie wyrażamy poprzez (23.95). W ten sposób otrzymujemy

$$B = \frac{\frac{i}{2} \left(\frac{K}{k} - \frac{k}{K}\right) \sin 2Ka}{\cos 2Ka - \frac{i}{2} \left(\frac{K}{k} + \frac{k}{K}\right) \sin 2Ka} \cdot Ae^{-2ika}. \quad (23.96)$$

Układ (23.87)–(23.90) jest więc rozwiązany. Mając bowiem F możemy bez trudu z równań (23.92) obliczyć pozostałe amplitudy, to jest C i D .

Do znalezienia współczynników transmisji i odbicia potrzebujemy nie samych amplitud B i F , lecz ich modułów. Liczniki obu wyrażeń nie są kłopotliwe. Mianownik zaś wymaga pewnej

uwagi. Omówimy więc w skrócie sposób obliczenia

$$\begin{aligned}
 & \left| \cos 2Ka - \frac{i}{2} \left(\frac{K}{k} + \frac{k}{K} \right) \sin 2Ka \right|^2 \\
 &= \cos^2 2Ka + \frac{1}{4} \left(\frac{K^2 + k^2}{kK} \right)^2 \sin^2 2Ka \\
 &= \cos^2 2Ka + \left(1 + \frac{K^4 + k^4 - 2k^2 K^2}{4k^2 K^2} \right) \sin^2 2Ka \\
 &= 1 + \frac{1}{4} \left(\frac{K}{k} - \frac{k}{K} \right)^2 \sin^2 2Ka
 \end{aligned} \tag{23.97}$$

Obliczywszy kwadrat modułu mianownika wyrażeń (23.95) i (23.96) możemy wypisać kwadraty modułów amplitud B i F . Po podzieleniu ich przez $|A|^2$ otrzymamy współczynniki odbicia i transmisji

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{K}{k} - \frac{k}{K} \right)^2 \sin^2 2Ka}, \tag{23.98}$$

$$R = \frac{\frac{1}{4} \left(\frac{K}{k} - \frac{k}{K} \right)^2 \sin^2 2Ka}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{K}{k} - \frac{k}{K} \right)^2 \sin^2 2Ka}. \tag{23.99}$$

Współczynniki te, jak od razu widać, mają własność

$$R + T = 1, \tag{23.100}$$

która jest równoważna stwierdzeniu, że $|A|^2 = |B|^2 + |F|^2$. Jest to odzwierciedlenie warunku zachowania liczby cząstek. Liczba cząstek odbitych od studni (powracających w lewo) i przechodzących (oddalających się do $+\infty$) jest równa liczbie cząstek padających. Podkreślmy, że w sytuacji klasycznej wszystkie cząstki "pokonałyby" jamę potencjału i przeszły do $x = +\infty$. Sytuacja kwantowa jest więc istotnie różna od klasycznej.

Rezonanse

Obliczone współczynniki odbicia i transmisji mają jeszcze jedną ciekawą i ważną własność. Jeżeli spełniony jest warunek

$$\sin 2Ka = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad Ka = \frac{n\pi}{2}, \tag{23.101}$$

to wówczas ze wzorów (23.98) i (23.99) wynika, że $T = 1$ oraz $R = 0$. Sytuację taką, w której nie ma cząstek odbitych nazywamy *rezonansem*. W rezonansie wszystkie cząstki padające z $x = -\infty$ "mijają" studnię i oddalają się do $x = +\infty$. Warunek (23.101), po wstawieniu K według definicji (23.82), daje

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} = \frac{n\pi}{2a} \quad \Longrightarrow \quad E_n^{rez} = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \tag{23.102}$$

Energie rezonansowe, po odpowiednim przecechowaniu skali energii pokrywają się z energiami stanów związanych w nieskończonej studni potencjalnej.

23.4.4 Rozpraszanie niskoenergetyczne

Rozpraszanie niskoenergetyczne zachodzi wtedy, gdy (dodatnia) energia cząstek padających jest znacznie mniejsza niż głębokość studni potencjalnej. Przyjmijmy więc, że zachodzą nierówności

$$E \ll V_0, \quad \text{lub równoważnie} \quad \frac{E}{V_0} \ll 1. \quad (23.103)$$

Posługując się tym założeniem ponownie omówimy powyższe rezultaty. Zauważmy przede wszystkim, że w konsekwencji warunku (23.103) mamy

$$\frac{K}{k} = \sqrt{\frac{V_0 + E}{E}} \approx \sqrt{\frac{V_0}{E}} \gg 1, \quad \frac{k}{K} = \sqrt{\frac{E}{V_0 + E}} \approx \sqrt{\frac{E}{V_0}} \ll 1. \quad (23.104)$$

Wobec tego w wyrażeniach dla współczynników transmisji i odbicia możemy zaniedbać składnik k/K w porównaniu z K/k . A zatem, w przypadku rozpraszania niskoenergetycznego mamy

$$T = \frac{1}{1 + \frac{K^2}{4k^2} \sin^2 2Ka}, \quad R = \frac{\frac{K^2}{4k^2} \sin^2 2Ka}{1 + \frac{K^2}{4k^2} \sin^2 2Ka}. \quad (23.105)$$

Iloraz $K^2/k^2 \gg 1$, więc na ogół mianowniki powyższych formuł są duże. W szczególności, przy $E \rightarrow 0$, mamy $k^2 \rightarrow 0$, więc

$$T(E) \xrightarrow{E \rightarrow 0} 0, \quad R(E) \xrightarrow{E \rightarrow 0} 1. \quad (23.106)$$

Gdy energia cząstek padających rośnie wówczas pojawiają się rezonanse. Jeśli $2Ka = n\pi$, wówczas $T(E_n^{rez}) = 1$ oraz $R(E_n^{rez}) = 0$. Rezonanse te odpowiadają energiom o wartościach

$$E_n^{rez} = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, \quad (23.107)$$

co, w tym przypadku warto przedyskutować bardziej szczegółowo.

Energie – dyskusja dodatkowa

Dla wygody dalszej dyskusji wprowadzimy parametr pomocniczy v , taki że

$$v = \frac{2a}{\pi} \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \in \mathbb{R}_+ \quad \implies \quad V_0 = \frac{v^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \quad (23.108)$$

Energie rezonansowe (23.107) możemy więc zapisać jako

$$E_n^{rez} = (n^2 - v^2) \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \quad (23.109)$$

Rozważamy tu stany rozproszeniowe, dla cząstek o dodatnich energiach, oznacza to, że musi być spełniony warunek

$$n > v. \quad (23.110)$$

Z drugiej strony, mówimy tu o rozpraszaniu niskoenergetycznym, w którym $E \ll V_0$, co trzeba pogodzić z żądaniem (23.110). W szczególności, w rezonansie też musi być $E_n^{rez} \ll V_0$, co pociąga za sobą żądanie

$$(n^2 - v^2) \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \ll V_0 = v^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, \quad (23.111)$$

gdzie wykorzystaliśmy (23.108) i (23.109). Z (23.111) oczywiście wynika, że

$$n^2 \ll 2v^2 \quad \Rightarrow \quad n \ll \sqrt{2}v. \quad (23.112)$$

Ponieważ również obowiązuje relacja (23.110), więc możemy napisać $n = [v] + p$, gdzie $[v]$ oznacza część całkowitą (*entier*) liczby $v \in \mathbb{R}_+$, zaś $p = 1, 2, \dots$, jest liczbą naturalną. Przy takiej notacji, zamiast (23.112) mamy

$$[v] + p \ll \sqrt{2}v \quad \Rightarrow \quad p \ll v \left(\sqrt{2} - \frac{[v]}{v} \right). \quad (23.113)$$

Iloraz $[v]/v$ jest mniejszy od jedności, lecz rzędu jedności, a zatem możemy napisać

$$\frac{p}{v} \ll \sqrt{2} - 1. \quad (23.114)$$

Warunek (23.114) można łatwo spełnić, jeśli

- $\mathbb{R}_+ \ni v \gg 1$, czyli gdy v jest dużą dodatnią liczbą rzeczywistą;
- $p \in \mathbb{N}$, jest jedną z pierwszych kilku (kilkunastu) liczb naturalnych.

Z powyższej dyskusji wynikają następujące wnioski.

1. Głębokość jamy jest duża, gdy v jest dużą (dodatnią) liczbą rzeczywistą, co w zestawieniu z (23.108) oznacza, że

$$V_0 \gg \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \quad (23.115)$$

Nierówność ta mówi nam, co to znaczy, że głębokość jamy jest duża w porównaniu z energią cząstek padających.

2. W rezonansie $n = [v] + p$, gdzie p jest ograniczone do co najwyżej kilkunastu pierwszych liczb naturalnych.

W konsekwencji możemy wyprowadzić przybliżone wyrażenie dla energii rezonansowych. Na podstawie (23.109) mamy

$$E_n^{rez} = (n - v)(n + v) \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} = ([v] + p - v)([v] + p + v) \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \quad (23.116)$$

Zwróćmy uwagę, że teraz energie rezonansowe numeruje już liczba p . Ponieważ $p \ll v$, więc w przybliżeniu

$$E_p^{rez} = 2pv \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} = pv \frac{\pi^2 \hbar^2}{4ma^2}. \quad (23.117)$$

Podstawiając v z drugiej relacji (23.108) otrzymujemy energie rezonansowe jako

$$E_p^{rez} = p \frac{\pi \hbar}{a} \sqrt{\frac{V_0}{2m}}. \quad (23.118)$$

Stąd wynika, że pomiędzy dwoma kolejnymi rezonansami mamy odstęp energetyczny wynoszący

$$(\Delta E)^{rez} = E_{p+1}^{rez} - E_p^{rez} = \frac{\pi \hbar}{a} \sqrt{\frac{V_0}{2m}}. \quad (23.119)$$

Chcemy, aby nasze rozważania stosowały się przynajmniej dla kilku kolejnych rezonansów. Jednocześnie jednak mówimy o rozpraszaniu niskoenergetycznym. Energie przynajmniej kilku rezonansów muszą więc spełniać warunek $E \ll V_0$. Oznacza to, że odległości pomiędzy rezonansami także muszą być małe w porównaniu z V_0 . Powinien więc być spełniony dodatkowy warunek

$$\frac{\pi \hbar}{a} \sqrt{\frac{V_0}{2m}} \ll V_0 \quad \Rightarrow \quad V_0 a^2 \gg \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}, \quad (23.120)$$

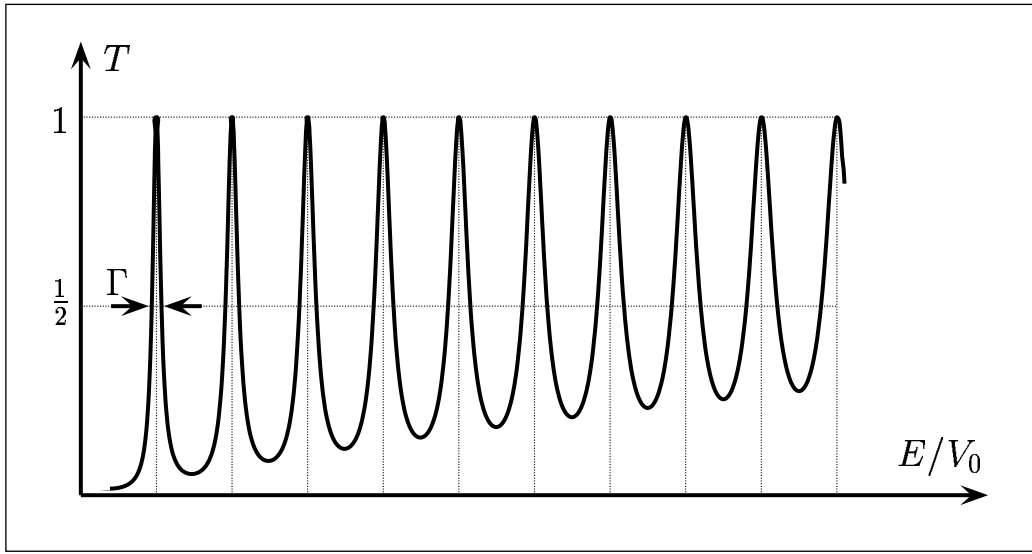
co jest zgodne z warunkiem (23.115) i potwierdza spójność naszych rozważań.

Zależność współczynnika transmisji od energii

Na mocy oznaczeń (23.82) współczynnik transmisji (23.105) możemy zapisać w postaci

$$T(E) = \frac{1}{1 + \frac{V_0 + E}{4E} \sin^2 \left[2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)} \right]}. \quad (23.121)$$

Jest on równy jedności w rezonansie, gdy argument sinusa jest wielokrotnością π . Poza rezonansami $T(E)$ dość szybko spada, bowiem mianownik ma wartość sporo większą od jedności. Współczynnik odbicia $R = 1 - T$ ma wtedy znaczącą wartość i większość cząstek padających ulega odbiciu, a stosunkowo niewiele przechodzi do $x = +\infty$. Jest to zasadniczo odmienne od analogicznej sytuacji klasycznej, w której wszystkie cząstki przechodziłyby do $x = +\infty$.



Rys. 23.4: Zależność współczynnika transmisji $T = T(E)$ od energii ($E > 0$) cząstek padających dla rozpraszania niskoenergetycznego. Wykres przedstawia zależność przybliżoną. W okolicach $E = 0$ współczynnik transmisji powinien dążyć do zera. Wartość E/V_0 przebiega zakres od około 0.001 do 0.1. Inne parametry zostały tak dobrane, aby zapewnić przejrzystość rysunku.

Zbadajmy dokładniej zachowanie $T(E)$. Jeszcze raz obliczmy odległość (w funkcji energii) pomiędzy dwoma kolejnymi rezonansami. Argumenty sinusa w (23.121) muszą różnić się o π . Zatem

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E_{p+1}^{rez})} - \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E_p^{rez})} = \frac{\pi}{2a}, \quad (23.122)$$

co zapisujemy w postaci równoważnej

$$\sqrt{1 + \frac{E_{p+1}^{rez}}{V_0}} - \sqrt{1 + \frac{E_p^{rez}}{V_0}} = \frac{\pi \hbar}{2a} \sqrt{\frac{1}{2mV_0}}. \quad (23.123)$$

Ponieważ badamy rozpraszanie niskoenergetyczne ($E/V_0 \ll 1$), więc możemy pierwiastki po lewej rozwinąć w szeregi, ograniczając się do wyrazów pierwszego rzędu. W ten sposób otrzymujemy

$$\left(1 + \frac{E_{p+1}^{rez}}{2V_0}\right) - \left(1 + \frac{E_p^{rez}}{2V_0}\right) \approx \frac{\pi \hbar}{2a} \sqrt{\frac{1}{2mV_0}}. \quad (23.124)$$

Wynika stąd, że odległość pomiędzy rezonansami wynosi

$$(\Delta E)^{rez} = E_{p+1}^{rez} - E_p^{rez} \approx \frac{\pi \hbar}{a} \sqrt{\frac{V_0}{2m}}, \quad (23.125)$$

co jest w pełni zgodne z oszacowaniem (23.119).

Szerokość rezonansów

Wykres zależności $T = T(E)$ sugeruje, że rezonanse są wąskie w porównaniu z odległościami pomiędzy nimi. Przeprowadźmy więc oszacowanie szerokości rezonansów, która na rysunku została oznaczona przez Γ . Wprowadźmy w tym celu pomocniczą funkcję

$$f(E) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{V_0 + E}{E}} \sin \left[2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)} \right], \quad (23.126)$$

za pomocą której współczynnik transmisji zapisujemy w postaci

$$T(E) = \frac{1}{1 + f^2(E)}. \quad (23.127)$$

W rezonansie wartość funkcji pomocniczej wynosi

$$f(E_p^{rez}) = 0, \quad (23.128)$$

bowiem argument sinusa jest wtedy wielokrotnością π . Dalszą dyskusję $T(E)$ prowadzimy rozwijając funkcję $f(E)$ w szereg Taylora dla energii $E = E_p^{rez} + \Delta E$, przy czym ograniczymy się do wyrazów pierwszego rzędu

$$f(E_p^{rez} + \Delta E) = f(E_p^{rez}) + \Delta E \cdot \left. \frac{df(E)}{dE} \right|_{E=E_p^{rez}}. \quad (23.129)$$

W rezonansie pierwszy składnik znika i możemy $T(E)$ przybliżyć wzorem

$$T(E_p^{rez} + \Delta E) \approx \frac{1}{1 + \left(\Delta E \cdot \left. \frac{df(E)}{dE} \right|_{E=E_p^{rez}} \right)^2}. \quad (23.130)$$

Współczynnik transmisji poza rezonansem spada do wartości $\frac{1}{2}$, jeśli

$$\left| \Delta E \cdot \left. \frac{df(E)}{dE} \right|_{E=E_p^{rez}} \right| = 1, \quad (23.131)$$

co pozwoli nam obliczyć ΔE , a następnie szerokość rezonansu $\Gamma = 2\Delta E$. Na podstawie (23.126) obliczmy pochodną występującą w (23.131). Otrzymujemy

$$\begin{aligned} \left. \frac{df(E)}{dE} \right|_{E=E_p^{rez}} &= \frac{d}{dE} \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{V_0 + E}{E}} \sin \left[2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)} \right] \right\}_{E=E_p^{rez}} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{1 + V_0/E}} \left(-\frac{V_0}{E^2} \right) \sin \left[2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)} \right] \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{V_0 + E}{E}} \cos \left[2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)} \right] \right. \\ &\quad \left. \cdot 2a \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(V_0 + E)}} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \right\}_{E=E_p^{rez}}. \end{aligned} \quad (23.132)$$

Pierwszy składnik znika, bowiem w rezonansie argument sinusa jest wielokrotnością π . Jednocześnie cosinus tegoż argumentu wynosi ± 1 . Zatem po uproszczeniu dostajemy

$$\begin{aligned} \left. \frac{df(E)}{dE} \right|_{E=E_p^{rez}} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{V_0 + E}{E}} \cdot (\pm 1) \cdot \frac{2ma}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(V_0 + E)}} \Big|_{E=E_p^{rez}} \\ &= \pm \frac{a}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E_p^{rez}}}. \end{aligned} \quad (23.133)$$

Wstawiając moduł obliczonej pochodnej do (23.131) wyliczamy ΔE i dostajemy

$$\Delta E = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{2E_p^{rez}}{m}} = \frac{\hbar^2}{ma} \sqrt{\frac{2mE_p^{rez}}{\hbar^2}} = \frac{\hbar^2}{ma} k_p^{rez}. \quad (23.134)$$

Szerokość rezonansu wynosi więc

$$\Gamma_p = 2\Delta E = \frac{2\hbar}{a} \sqrt{\frac{2E_p^{rez}}{m}} = \frac{2\hbar^2}{ma} k_p^{rez}, \quad (23.135)$$

gdzie możemy podstawić energię E_p^{rez} według wzoru (23.118). Szerokość rezonansów rośnie więc wraz z energią, co przynajmniej jakościowo widać na rysunku 23.4. Zauważmy, że stosunek szerokości rezonansów do odległości między nimi wynosi

$$\frac{\Gamma_p}{(\Delta E)^{rez}} = \frac{2\hbar}{a} \sqrt{\frac{2E_p^{rez}}{m}} \cdot \frac{a}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m}{V_0}} = \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{E_p^{rez}}{V_0}} \ll 1, \quad (23.136)$$

bowiem rozważamy tu rozpraszanie niskoenergetyczne. Widzimy, że rezonanse są rzeczywiście znacznie węższe niż odległości między nimi.

23.5 Cząstka swobodna i pakiet falowy

Ponownie rozważymy problem jednowymiarowy (uogólnienie do trzech wymiarów nie jest trudne). Omawiamy cząstkę (bezsponową, o masie m) swobodną, nie oddziałującą z niczym. Jej energia potencjalna $V(x) = 0$. W rozdziale 2 omawialiśmy ruch takiej cząstki, której odpowiada funkcja falowa (dla ustalenia uwagi biegnąca z lewa na prawo) o postaci fali płaskiej

$$\psi(x, t) = C e^{ikx - i\omega t}, \quad (23.137)$$

spełniająca pełne (jednowymiarowe) równanie Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t). \quad (23.138)$$

przy czym energia $E = \hbar\omega$ i pęd $p = \hbar k$ są związane warunkiem

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (23.139)$$

Fale płaskie są jednak nienormowalne. Jednym ze sposobów ominięcia tej trudności jest rozwiązanie pakietów falowych.

23.5.1 Pakiet falowy

Ogólna dyskusja pakietu jednowymiarowego

Kłopot z normowaniem fali płaskiej wynika stąd, że fala taka rozciąga się w całej przestrzeni. Pakiet falowy, rozumiany intuicyjnie, to taka superpozycja fal płaskich, która jest ograniczona (zlokalizowana) przestrzennie. Superpozycji takiej dokonamy, zauważając, że w fali płaskiej (23.137) liczba k (a zatem i $\omega(k) = \hbar k^2/2m$) pełni rolę parametru. Ogólne rozwiązanie równania Schrödingera (równania liniowego, dla którego suma rozwiązań jest też rozwiązaniem) może być więc przedstawione pakietem falowym o postaci

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) e^{ikx - i\omega t}, \quad (23.140)$$

gdzie funkcja $C(k)$ zastępuje stałą C z równania (23.137). Podstawiając ten pakiet do równania Schrödingera (23.138) stwierdzamy, że pakiet spełnia je pod warunkiem, że dla każdego $k \in \mathbb{R}$ spełniony jest warunek

$$\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 0. \quad (23.141)$$

Jest to znany nam już związek dyspersyjny, który oczywiście uznajemy za nadal obowiązujący.

Ze wzoru (23.140) wynika, że w chwili początkowej $t = t_0 = 0$ mamy

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) e^{ikx}, \quad (23.142)$$

a więc funkcja $C(k)$ jest transformatą Fouriera początkowej funkcji falowej. Na mocy teorii transformacji Fouriera możemy więc napisać

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, 0) e^{-ikx}. \quad (23.143)$$

Pakiet falowy wprowadziliśmy po to, aby uniknąć problemów z normalizacją, na które natknęliśmy się przy falach płaskich. Chcemy więc, aby $\psi(x, t)$ dana w (23.140) była "porządną" funkcją falową. Chcemy więc, aby całka

$$I[\psi] = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2, \quad (23.144)$$

była skończona. Zbadajmy, jak całka $I[\psi]$ wiąże się z funkcją $C(k)$ określającą pakiet. Do (23.144) wstawiamy dwukrotnie pakiet (23.140)

$$\begin{aligned} I[\psi] &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dk C^*(k) e^{-ikx + i\omega(k)t} \int_{-\infty}^{\infty} dk' C(k') e^{ik'x - i\omega(k')t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dk' C^*(k) C(k') e^{i[\omega(k) - \omega(k')]t} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(k' - k)x}. \end{aligned} \quad (23.145)$$

Całka po dx produkuje (jak wiadomo z teorii dystrybucji) $2\pi\delta(k' - k)$. W rezultacie, całka po dk' staje się trywialna i otrzymujemy

$$I[\psi] = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dk |C(k)|^2. \quad (23.146)$$

A zatem widzimy, że pakiet falowy $\psi(x, t)$ jest normowalną funkcją falową, jeśli tylko jego profil $C(k)$ jest funkcją całkowlaną w kwadracie. Co więcej, warunek (23.146) jest spełniony dla dowolnej chwili czasu (prawa strona nie zależy od t , więc i lewa też nie). Wystarczy więc, że pakiet początkowy $\psi(x, 0)$ będzie normowalny.

Nie ma przeszkód, aby dalej prowadzić ogólne i abstrakcyjne rozwiązania. Lepiej jednak omówić konkretny przykład, tzw. pakiet gaussowski.

23.5.2 Pakiet gaussowski

Jak już powiedzieliśmy, pakiet falowy kojarzymy z obiektem dobrze zlokalizowanym przestrzennie. Załóżmy, że w chwili początkowej $t_0 = 0$, cząstka została tak przygotowana, że jej funkcja falowa miała postać

$$\psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x\right). \quad (23.147)$$

Stałą A wyznaczamy z warunku normowania do jedności

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, 0)|^2 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) \\ &= |A|^2 a\sqrt{\pi} \implies A = \left(\frac{1}{a^2\pi}\right)^{1/4}, \end{aligned} \quad (23.148)$$

gdzie fazę liczby A przyjęliśmy równą zero. Tak przygotowana funkcja falowa

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x\right), \quad (23.149)$$

odpowiada gęstości prawdopodobieństwa

$$\rho(x, 0) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right). \quad (23.150)$$

Jest to oczywiście profil gaussowski o maksimum w punkcie $x = 0$ i o szerokości

$$\Delta x = a. \quad (23.151)$$

Profil gaussowski szybko zanika gdy $|x|$ rośnie. Możemy więc uznać, że początkowy pakiet falowy $\psi(x, 0)$ jest rzeczywiście dobrze zlokalizowany w otoczeniu $x = 0$. Obliczmy jeszcze gęstość prądu prawdopodobieństwa dla chwili początkowej

$$\begin{aligned} J(x, 0) &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(x, 0) \frac{\partial \psi(x, 0)}{\partial x} - \psi(x, 0) \frac{\partial \psi^*(x, 0)}{\partial x} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} 2ik_0 |A|^2 \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) = \frac{\hbar k_0}{m} \rho(x, 0). \end{aligned} \quad (23.152)$$

Możemy więc powiedzieć, że "chmura" prawdopodobieństwa (w chwili $t_0 = 0$) porusza się z prędkością

$$v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}, \quad (23.153)$$

gdzie $p_0 = \hbar k_0$ kojarzymy ze (średnim) pędem cząstki (czy może lepiej z odpowiednikiem klasycznego pędu cząstki, trzeba bowiem zachować daleko posuniętą ostrożność przy doszukiwaniu się analogii klasycznych). Nieco wyprzedzając tok wykładu, możemy powiedzieć, że wartość oczekiwana pędu cząstki (w chwili $t_0 = 0$) dana jest całką

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, 0) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, 0), \quad (23.154)$$

która po obliczeniach daje $\langle p \rangle = \hbar k_0$, potwierdzając tym samym powyższy wniosek. Sens fizyczny i sposoby obliczeń wartości oczekiwanych dla różnych wielkości fizycznych omówimy później.

Poprzestaniemy tu na stwierdzeniu, że bardziej formalna analiza potwierdza, że średni pęd cząstki opisywanej pakietem falowym $\psi(x, 0)$ wynosi $\langle p \rangle = p_0 = \hbar k_0$. Podkreślmy jednak, że $\langle p \rangle$ jest wartością oczekiwaną (średnią) pędu cząstki, a to nie jest to samo co pęd rozumiany w sensie mechaniki klasycznej.

Znając już podstawowe własności pakietu obliczymy jego profil $C(k)$. Na podstawie formuł (23.143) i (23.147) otrzymujemy więc

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{a^2\pi} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x \right]. \quad (23.155)$$

Całka tu występująca jest znana z tablic, a mianowicie wynosi

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\alpha y^2 + \beta y} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right). \quad (23.156)$$

A zatem, po dopasowaniu oznaczeń dostajemy

$$C(k) = \left(\frac{a^2}{4\pi^3} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{1}{2} a^2 (k_0 - k)^2 \right], \quad \left(\frac{a^2}{4\pi^3} \right)^{1/4} = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}}. \quad (23.157)$$

Pęd cząstki związany jest z liczbą (wektorem falowym) wzorem $p = \hbar k$, więc profil $C(k)$, a ściślej

$$|C(k)|^2 = \left(\frac{a^2}{4\pi^3} \right)^{1/2} \exp \left[-a^2 (k_0 - k)^2 \right], \quad (23.158)$$

możemy interpretować jako rozkład prawdopodobieństwa tego, że (w chwili początkowej $t_0 = 0$) pęd cząstki wynosi $p = \hbar k$. Dlatego właśnie, mówiąc o ruchu pakietu z prędkością v_0 przypominaliśmy o ostrożności. Nie ma przeszkód w przypisaniu prędkości pakietowi (jego centrum), ale to wcale nie to samo co pęd cząstki, którego rozkład prawdopodobieństwa opisuje profil (23.157). Maksimum rozkładu przypada w $k = k_{max} = k_0$ i odpowiada wartości średniej pędu, jakiej oczekujemy na podstawie powyższych rozważań. Rozmycie pędu (szerokość profilu $|C(k)|^2$) wynosi

$$\Delta p = \hbar \Delta k = \frac{\hbar}{a}. \quad (23.159)$$

Zwróćmy uwagę, że stąd i z (23.151) wynika

$$\Delta x \Delta p = \hbar \Delta k \Delta x = \hbar, \quad (23.160)$$

co stanowi intuicyjne (nieściśle) wyprowadzenie zasady nieoznaczoności położenie–pęd. Nie możemy jednocześnie określić położenia i pędu cząstki z dowolną dokładnością. Zasada nieoznaczoności (23.160) orzeka, że określając jedną z tych wielkości (np. położenie przez zwięzanie pakietu, czyli przez zmniejszanie parametru a) powodujemy automatyczne zwiększenie rozmycia drugiej z nich (np. Δp rośnie wtedy jak $1/a$). I na odwrót, poszerzając pakiet (a maleje) zwiększamy Δx , czyli możemy powiedzieć, że położenie cząstki się rozmywa – staje się coraz bardziej nieokreślone – cząstka się delokalizuje. Natomiast rozmycie pędu będzie maleć, pęd cząstki będzie coraz lepiej określony. W granicy $a \rightarrow \infty$, pakiet falowy przechodzi w falę płaską, cząstka ma dobrze określony pęd, lecz jednocześnie $\Delta x \rightarrow \infty$ – przestajemy cokolwiek wiedzieć o położeniu cząstki. Fakty te nie mają nic wspólnego z dokładnością przyrządów pomiarowych. Jest własność natury, zasadniczo różniąca świat mechaniki kwantowej od świata klasycznego. Nadmienimy jeszcze, że ściśle wyprowadzenie zasady nieoznaczoności będzie przedmiotem oddzielnych rozważań.

23.5.3 Ewolucja pakietu gaussowskiego

Mamy więc w ręku wszystkie dane, aby zbadać ewolucję pakietu falowego w czasie. Wynika ona z formuły (23.140), do której wstawiamy $C(k)$ według (23.157) oraz $\omega(k)$. A zatem, dla $t > 0$ otrzymujemy

$$\psi(x, t) = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp \left[-\frac{a^2}{2} (k - k_0)^2 + ikx - \frac{i\hbar k^2}{2m} t \right]. \quad (23.161)$$

Obliczenie tej całki i doprowadzenie jej do czytelnej postaci, choć koncepcyjnie proste, są dość żmudne i wymagają wielu przekształceń. Uporządkujemy najpierw wykładnik

$$\begin{aligned} w &= -\frac{a^2}{2} (k^2 - 2kk_0 + k_0^2) + ikx - \frac{i\hbar t}{2m} k^2 \\ &= -k^2 \left(\frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m} \right) + k(a^2 k_0 + ix) - \frac{k_0^2 a^2}{2} \\ &= -\alpha k^2 + \beta k - \frac{1}{2} k_0^2 a^2, \end{aligned} \quad (23.162)$$

gdzie wprowadziliśmy oczywiste tymczasowe oznaczenia. Z (23.161) mamy teraz

$$\psi(x, t) = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} k_0^2 a^2 \right) \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\alpha k^2 + \beta k}, \quad (23.163)$$

a to jest całka postaci (23.156). Wobec tego (w/g oznaczeń z (23.162)) mamy

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} k_0^2 a^2 \right) \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right) \\ &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\pi}{\frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m}} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} k_0^2 a^2 + \frac{(a^2 k_0 + ix)^2}{4 \left(\frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m} \right)} \right] \\ &= \frac{A}{\sqrt{1 + i\sigma t}} \exp \left[-\frac{1}{2} k_0^2 a^2 + \frac{(a^2 k_0 + ix)^2}{2a^2(1 + i\sigma t)} \right], \end{aligned} \quad (23.164)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie

$$\sigma = \frac{\hbar}{ma^2}. \quad (23.165)$$

Trzeba znów uporządkować wykładnik w eksponencie wyrażenia (23.164).

$$\begin{aligned} w' &= -\frac{1}{2} k_0^2 a^2 + \frac{k_0^2 a^4 + 2ik_0 x a^2 - x^2}{2a^2(1 + i\sigma t)} \\ &= \frac{-x^2 + 2ik_0 x a^2 - i\sigma t k_0^2 a^4}{2a^2(1 + i\sigma t)}. \end{aligned} \quad (23.166)$$

W liczniku można dodać i odjąć ten sam składnik.

$$\begin{aligned} w' &= \frac{-x^2 + ik_0 x (2a^2 + 2a^2 i\sigma t) - ik_0 x \cdot 2a^2 i\sigma t - i\sigma t k_0^2 a^4}{2a^2(1 + i\sigma t)} \\ &= ik_0 x + \frac{-x^2 + 2k_0 x a^2 \sigma t - i\sigma t k_0^2 a^4}{2a^2(1 + i\sigma t)} \end{aligned} \quad (23.167)$$

I dalej, znów dodajemy i odejmujemy w liczniku

$$\begin{aligned}
 w' &= ik_0x + \frac{-x^2 + 2k_0xa^2\sigma t - k_0^2a^4\sigma^2t^2 + k_0^2a^4\sigma^2t^2 - i\sigma tk_0^2a^4}{2a^2(1+i\sigma t)} \\
 &= ik_0x + \frac{-(x - k_0a^2\sigma t)^2 - i\sigma tk_0^2a^4 - k_0^2a^4(i\sigma t)^2}{2a^2(1+i\sigma t)} \\
 &= ik_0x - \frac{(x - k_0a^2\sigma t)^2}{2a^2(1+i\sigma t)} - \frac{1}{2}i\sigma tk_0^2a^2.
 \end{aligned} \tag{23.168}$$

Porównując ten wynik z poprzednio wprowadzonymi oznaczeniami, zauważamy, że

$$\begin{aligned}
 k_0a^2\sigma &= k_0a^2\frac{\hbar}{ma^2} = \frac{\hbar k_0}{m} = v_0, \\
 \frac{1}{2}\sigma k_0^2a^2 &= \frac{1}{2}v_0k_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m} = \omega_0.
 \end{aligned} \tag{23.169}$$

Wreszcie doprowadzamy wykładnik z równania (23.164) do postaci końcowej

$$w' = ik_0x - i\omega_0t - \frac{(x - v_0t)^2}{2a^2(1+i\sigma t)}, \tag{23.170}$$

którą podstawiamy do wyjściowej formuły. A zatem, pakiet falowy dla chwil $t > 0$ dany jest wzorem

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1+i\sigma t}} e^{ik_0x - i\omega_0t} \exp\left[-\frac{(x - v_0t)^2}{2a^2(1+i\sigma t)}\right]. \tag{23.171}$$

Można jeszcze pozbyć się "zespóloności" z współczynnika normalizacyjnego. W tym celu zapiszmy liczbę zespoloną w postaci wykładniczej

$$1 + i\sigma t = \sqrt{1 + \sigma^2 t^2} e^{2i\theta(t)}, \quad \text{gdzie} \quad \text{tg } 2\theta(t) = \sigma t = \frac{\hbar t}{ma^2}. \tag{23.172}$$

Uwzględniając wartość współczynnika A z (23.148) zapisujemy nasz pakiet jako

$$\psi(x, t) = \left(\frac{1}{a^2\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{-i\theta(t)}}{(1 + \sigma^2 t^2)^{1/4}} e^{ik_0x - i\omega_0t} \exp\left[-\frac{(x - v_0t)^2}{2a^2(1+i\sigma t)}\right], \tag{23.173}$$

co stanowi finalną postać ewoluującej w czasie funkcji falowej – pakietu falowego.

Własności ewoluującego pakietu gaussowskiego

Mając już gotową postać pakietu falowego możemy obliczyć gęstość prawdopodobieństwa w funkcji czasu. Z (23.173) od razu dostajemy

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2 (1 + \sigma^2 t^2)}} \exp\left[-\frac{(x - v_0t)^2}{a^2(1 + \sigma^2 t^2)}\right]. \tag{23.174}$$

Zbadajmy normowanie pakietu dla dowolnej chwili czasu, tj. spełnienie warunku

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2 (1 + \sigma^2 t^2)}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{(x - v_0t)^2}{a^2(1 + \sigma^2 t^2)}\right]. \tag{23.175}$$

Zamiana zmiennych $y = x - v_0t$ i oznaczenie $a^2(1 + \sigma^2 t^2) = b^2$ sprowadza powyższy warunek do całki

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) = \frac{1}{b\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(-\frac{y^2}{b^2}\right), \tag{23.176}$$

co na mocy (23.156) daje

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) = \frac{1}{b\sqrt{\pi}} \sqrt{\pi b^2} = 1, \quad (23.177)$$

a więc pakiet falowy raz unormowany pozostaje zawsze unormowany. Ewolucja zgodna z równaniem Schrödingera nie zmienia normowania funkcji falowej.

Aby dalej omówić własności pakietu falowego obliczymy gęstość prądu prawdopodobieństwa. Potrzebujemy do tego pochodnej $\partial \psi(x, t)/\partial x$. Pakiet jest opisany funkcją wykładniczą, więc różniczkowanie jest proste. Z (23.173) otrzymujemy

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = \psi(x, t) \left(ik_0 - \frac{x - v_0 t}{a^2(1 + i\sigma t)} \right). \quad (23.178)$$

Obliczenie prądu prawdopodobieństwa jest więc proste

$$\begin{aligned} J(x, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} - \psi(x, t) \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} |\psi(x, t)|^2 \left[\left(ik_0 - \frac{x - v_0 t}{a^2(1 + i\sigma t)} \right) - \left(-ik_0 - \frac{x - v_0 t}{a^2(1 - i\sigma t)} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} |\psi(x, t)|^2 \left[2ik_0 + 2i \operatorname{Im} \left(\frac{x - v_0 t}{a^2(1 - i\sigma t)} \right) \right] \end{aligned} \quad (23.179)$$

Proste przekształcenia liczb zespolonych prowadzą do

$$\begin{aligned} J(x, t) &= \frac{\hbar k_0}{m} |\psi(x, t)|^2 \left[1 + \frac{(x - v_0 t)\sigma t}{k_0 a^2(1 + \sigma^2 t^2)} \right] \\ &= \frac{\hbar k_0}{m} |\psi(x, t)|^2 \left[1 + \frac{(x - v_0 t)k_0 \sigma^2 t}{1 + \sigma^2 t^2} \right], \end{aligned} \quad (23.180)$$

bowiem $\sigma = \hbar/ma^2$.

23.5.4 Dyskusja

Pakiet falowy wyobrażamy sobie jako swego rodzaju "chmurę" gęstości prawdopodobieństwa daną wzorem (23.174), tj.

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2(1 + \sigma^2 t^2)}} \exp \left[-\frac{(x - v_0 t)^2}{a^2(1 + \sigma^2 t^2)} \right]. \quad (23.181)$$

Wyobrażamy sobie, że chmura ta porusza się wraz z cząstką. Istotnie, powyższa formuła upoważnia do takiego intuicyjnego spojrzenia, bowiem maksimum rozkładu

$$x_{max} = v_0 t = \frac{\hbar k_0}{m} t, \quad (23.182)$$

przesuwa się z prędkością $v_0 = p_0/m$, czyli z taką jakiej byśmy oczekiwali dla cząstki o pędzie p_0 . Przypominamy jednak, że $\rho(x, t)$ mówi o tym jaka jest gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w otoczeniu punktu x , a nie o tym gdzie znajduje się cząstka. Co więcej, ze wzoru (23.181) widzimy, że rozkład prawdopodobieństwa przygotowany jako gaussowski, pozostaje takim dla wszystkich innych chwil czasu. Jego szerokość wynosi

$$a' = a \sqrt{1 + \sigma^2 t^2} = a \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar}{ma^2} \right)^2 t^2}, \quad (23.183)$$

a więc rośnie wraz z upływem czasu. Mówimy, że pakiet ulega rozmyciu – poszerza się (choć cały czas pozostaje unormowany). Ruch pakietu nie jest więc prosty, co jeszcze lepiej widać z wyrażenia (23.180) dla prądu prawdopodobieństwa. Oznaczmy $x = x_{max} + y$, gdzie y ujemne odpowiada "tyłowi" pakietu, zaś y dodatnie jego "przodowi". Biorąc pod uwagę (23.182), z (23.180) otrzymujemy

$$J(x_{max} + y, t) = \frac{\hbar k_0}{m} \rho(x_{max} + y, t) \left(1 + \frac{y \sigma t}{k_0 a^2 (1 + \sigma^2 t^2)} \right). \quad (23.184)$$

Wynika stąd, że dla centrum pakietu (gdzie $y = 0$) mamy

$$J(x_{max}, t) = \frac{\hbar k_0}{m} \rho(x_{max}, t). \quad (23.185)$$

co dodatkowo "uprawomocnia" nasz wniosek, że centrum pakietu porusza się z klasyczną prędkością $v_0 = p_0/m = \hbar k_0/m$.

Dyskusja części pakietu "z tyłu" ($y < 0$) i "z przodu" ($y > 0$) jest trudniejsza, bowiem w (23.184) zależność od y siedzi zarówno w gęstości ρ , jak i w nawiasie. Nietrudno widzieć, że część tylna pakietu ($y < 0$) porusza się wolniej, bowiem zarówno $\rho(x, t)$ jest mniejsze niż $\rho(x_{max}, t)$, jak i wyrażenie w nawiasie jest mniejsze od jedności. Podobny wniosek dotyczy i przodu pakietu, choć trudniej go wykazać. Rzecz w tym, że $\rho(x, t)$ szybko maleje, gdy tylko oddalamy się od maksimum – centrum pakietu.

Rozmywanie się pakietu jest o tyle efektem oczywistym, że w chwili początkowej rozmycie pędu wynosiło $\Delta p = \hbar/a$. A więc w skład początkowego pakietu wchodziły fale opowiadające pędem mniejszym niż $p_0 = \hbar k$, jak i większym. Wraz z upływem czasu, te pierwsze "zostają w tyle", a drugie "wyprzedzają" pakiet, który w rezultacie musi się poszerzać – ulegać rozmyciu.
