Dinamica del pacchetto d'onda Gaussiano

Supponiamo di avere un sistema descritto da una funzione d'onda normalizzata

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)^{\frac{1}{4}}}\, e^{-\frac{x^2}{4\Delta x^2}}$$

per cui si trova che la densità di probabilità di trovare la particella in x è una distribuzione Gaussiana

$$\rho(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)^{\frac{1}{2}}}\, e^{-\frac{x^2}{2\Delta x^2}} \tag{1}$$

La $\psi(p)$, ampiezza di probabilità di trovare la particella con impulso p, risulta essere

$$\begin{aligned}\langle p|\psi\rangle &= \psi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{\frac{\imath px}{\hbar}}\, \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)^{\frac{1}{4}}}\, e^{-\frac{x^2}{4\Delta x^2}} = \left(\frac{8\pi\Delta x^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2\Delta x^2}{\hbar^2}}\end{aligned}$$

in cui abbiamo sostituito l'espressione della funzione d'onda per gli autostati dell'impulso $\psi_p(x) = \langle x|p\rangle$ e abbiamo utilizzato la formula

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{b^2/4a} \tag{2}$$

Per studiare l'evoluzione temporale di questo sistema, cerchiamo i coefficienti c_E per rappresentare lo stato del sistema $|\psi\rangle$ nella base degli autostati $|E\rangle$: $c_E = \langle E|\psi\rangle$. Al tempo t, ricordando che per una particella libera gli autostati di $\hat{H}$ sono gli stessi di $\hat{p}$, avremo:

$$c_E(t) = c_p(t) = c_p(0)e^{-\frac{\imath E(p)t}{\hbar}} = \psi(p)e^{-\frac{\imath p^2 t}{2m\hbar}}$$

La funzione d'onda dello stato del sistema ad un generico tempo t si potrà scrivere come:

$$\psi(x,t) = \langle x|\psi\rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle_t$$

sostituendo allora l'espressione della funzione d'onda per gli autostati dell'impulso e l'espressione dei coefficienti dello sviluppo dello stato nella base degli autostati dell'impulso $c_p(t) = \langle p|\psi\rangle_t$, otteniamo l'integrale

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{\frac{\imath px}{\hbar}} \left(\frac{8\pi\Delta x^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{p^2\Delta x^2}{\hbar^2}}\, e^{-\frac{\imath p^2 t}{2m\hbar}}$$

Per risolvere l'integrale ci avvaliamo della formula (2) ponendo $a = \frac{\Delta x^2}{\hbar^2} + \frac{\imath t}{2m\hbar}$ e $b = \frac{\imath x}{\hbar}$. Otteniamo allora, per l'evoluzione temporale del pacchetto Gaussiano, l'espressione

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \sqrt{\frac{\pi}{2\pi\hbar}}\left(\frac{8\pi\Delta x^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{\frac{\Delta x^2}{\hbar^2}+\frac{\imath t}{2m\hbar}}} exp\left(-\frac{x^2}{4\hbar^2(\frac{\Delta x^2}{\hbar^2}+\frac{\imath t}{2m\hbar})}\right) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2\pi\hbar}}\left(\frac{8\pi\Delta x^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{\frac{\Delta x^2}{\hbar^2}+\frac{\imath t}{2m\hbar}}} exp\left(-\frac{x^2(\frac{\Delta x^2}{\hbar^2}-\frac{\imath t}{2m\hbar})}{4\hbar^2(\frac{\Delta x^4}{\hbar^4}+\frac{t^2}{(2m\hbar)^2})}\right),\end{aligned}$$

dove $\Delta x^4 = (\Delta x^2)^2$. La probabilità di trovare la particella in una posizione x al tempo t, risulta essere

$$|\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{\Delta x^2}{2\pi(\Delta x^4 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2})}\right)^{\frac{1}{2}} exp\left(-\frac{x^2\Delta x^2}{2(\Delta x^4+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2})}\right)$$

che rappresenta un distribuzione Gaussiana con varianza che cresce nel tempo:

$$\Delta x^2(t) = \Delta x^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2\Delta x^2}$$

Per scrivere meglio l'ultima espressione, calcoliamo

$$\langle p^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, p^2|\psi(p)|^2 = \frac{\hbar^2}{4\Delta x^2}$$

risultato ottenuto sfruttando la formula $\int_{\infty}^{\infty} dx\, x^2\, e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\pi}/2\alpha^{-3/2}$. Potremo scrivere allora che la varianza del pacchetto Gaussiano varia nel tempo secondo la legge:

$$\Delta x^2(t) = \Delta x^2 + \frac{\langle p^2\rangle}{m^2}t^2 = \Delta x^2 + \langle v^2\rangle t^2$$

dove $\langle v^2\rangle$ è la velocità quadratica media del pacchetto d'onda, con cui, a tempi lunghi, si allarga la Gaussiana.

Nell'esempio considerato la particella libera si trova al tempo iniziale in uno stato descritto da una distribuzione di probabilità Gaussiana, che non è un'autostato dell'energia: l'impulso iniziale della particella ha una distribuzione di probabilità gaussiana con varianza $\Delta p^2 = \frac{\hbar^2}{4\Delta x^2}$, dunque avrà in generale una velocità iniziale non nulla. Con il passare del tempo la particella, pur conservando la sua energia, si sposterà, portandosi in uno stato diverso da quello iniziale, che abbiamo espresso tramite la funzione d'onda $\psi(x,t)$. La probabilità di trovare la particella sarà allora descritta da una gaussiana che si allarga nel tempo con velocità quadratica media $\langle v^2\rangle$: con il passare del tempo sarà sempre più probabile trovare la particella in un punto qualsiasi dello spazio. Viceversa, il valor medio dell'energia

$$\frac{\langle\psi|\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{1}{2m}\frac{\langle\psi|\hat{p}^2|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2}$$

è costante nel tempo.

Esercizio

Sia $f(x)$ una funzione periodica di periodo L cosi' definita:

$$f(x) = \begin{cases} a & \text{se} \quad -\frac{L}{4} < x < \frac{L}{4} \\ \\ 0 & \text{se} \quad -\frac{L}{2} < x < -\frac{L}{4} \ \text{ o } \ \frac{L}{4} < x < \frac{L}{2} \end{cases}$$

Svilupparla in serie di Fourier e verificare che l'armonica dominante e' il coseno di periodo L.

Svolgimento

Poiche' $f(x)$ e' una funzione pari, nel suo sviluppo in serie di Fourier si avranno solo i termini con il coseno:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(\frac{2n\pi}{L}x)$$

Per trovare il valore dei coefficienti A_n, proiettiamo la funzione $f(x)$ sulle rispettive basi $\sqrt{\frac{2}{L}} \cos(\frac{2n\pi}{L}x)$:

$$A_n = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(\frac{2n\pi}{L}x) dx$$

Osservando la forma di $f(x)$, ci aspettiamo che l'armonica dominante si abbia per un periodo del coseno pari alla larghezza L dell'onda quadra, cioe' per $n = 1$. Calcoliamo l'espressione dei coefficienti A_n per $n > 0$:

$$A_n = \int_{-\frac{L}{4}}^{\frac{L}{4}} a \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(\frac{2n\pi}{L}x) dx = \frac{a}{\pi} \sqrt{2L} \frac{1}{n} \sin n \frac{\pi}{2}$$

da cui

$$A_n = \begin{cases} 0 & \text{se} \quad n \quad \text{è pari} \\ \\ \frac{a}{\pi}\sqrt{2L}\frac{1}{n} & \text{se} \quad n = 1, 5, 9... \\ \\ -\frac{a}{\pi}\sqrt{2L}\frac{1}{n} & \text{se} \quad n = 3, 7, 11... \end{cases}$$

Effettivamente il massimo coefficiente si ha per $n = 1$.

Esercizio d'esonero del 19/11/2003

Si consideri una particella libera di muoversi in un segmento di lunghezza L (x v$\in [-L/2, L/2]$) e descritta dalla funzione d'onda:

$$\psi(x) = A\,x\left(x^2 - \frac{L^2}{4}\right) \qquad \text{per} \quad |x| < \frac{L}{2}.$$

1. Calcolare il coefficiente A affinchè la funzione d'onda sia normalizzata.
2. Calcolare l'evoluzione temporale della funzione d'onda e l'energia media dello stato descritto da $\psi(x,t)$.
3. Calcolare la probabilità associata a ciascuno dei possibili risultati di una misura di energia (per il calcolo degli integrali si ricorda che $\int x^n e^{\imath kx} dx = \frac{1}{\imath^n}\frac{d^n}{dk^n}\int e^{\imath kx} dx$).
4. Dire quale valore dell'energia ha probabilità massima.
5. Calcolare l'errore che si commette nella stima dell'energia media approssimando lo stato $\psi(x)$ con l'autofunzione corrispondente all'autovalore più probabile.
6. Calcolare l'impulso medio dello stato descritto da $\psi(x)$.

Soluzioni stazionarie per la buca di potenziale tra $-L/2$ e $L/2$

Dobbiamo risolvere l'equazione agli autovalori

$$\hat{\mathcal{H}}\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

con

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(\hat{x})$$

e inoltre

$$\begin{aligned} U(x) &= 0 \quad -L/2 \geq x \geq +L/2 \\ U(x) &= \infty \quad x < -L/2 \quad x > +L/2\,. \end{aligned}$$

Semplicemente con una translazione della soluzione della buca di potenziale tra 0 e L otteniamo

$$\begin{aligned} \psi_p^n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{(2n+1)\,\pi\,x}{L} \quad E_p^n = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar\pi(2n+1)}{L}\right)^2 \\ \psi_d^n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{(2n)\,\pi\,x}{L} \quad E_d^n = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar\pi(2n)}{L}\right)^2 \end{aligned}$$

Soluzione

1. Per normalizzare la funzione d'onda scriviamo:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \psi^*(x)\psi(x)\, dx = 1$$

da cui

$$|A|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} x^2(x^2 - \frac{L^2}{4})^2\, dx = |A|^2 \frac{L^7}{840}$$

dunque dovrà essere $A = \sqrt{840/L^7} e^{\imath\phi}$, in cui la fase potrà essere messa a zero senza perdita di generalità.

2. Notiamo che la funzione d'onda $\psi(x)$, che descrive lo stato del sistema, è dispari: dunque gli autostati dell'energia in cui posso decomporre lo stato dovranno avere la stessa parità della $\psi(x)$. Risolvendo l'equazione di Schrödinger stazionaria, sceglieremo allora le soluzioni normalizzate:

$$\psi_d^n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) \qquad \text{con} \quad k_n = \frac{2n\pi}{L}$$

Per scrivere l'evoluzione temporale della $\psi(x)$, calcoliamo i coefficienti della decomposizione dello stato $|\psi\rangle$ nella base degli autostati dell'hamiltoniana $|E_n\rangle$:

$$c_n = \langle E_n|\psi\rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \langle E_n|x\rangle\langle x|\psi\rangle dx = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} (\psi_d^n(x))^*\, \psi(x) dx$$

Sostituendo, dovremo calcolare gli integrali:

$$c_n = \sqrt{\frac{840}{L^7}} \sqrt{\frac{2}{L}} \left[\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} x^3 \sin(k_n x) dx - \frac{L^2}{4} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} x \sin(k_n x) dx \right]$$

Avvalendoci della formula suggerita dal testo, avremo, per il primo integrale:

$$\begin{aligned} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} x^3 \sin(k_n x) dx &= Im\left[\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} x^3 e^{\imath k_n x} dx \right] = Im\left[\imath \frac{d^3}{dk^3} \left(\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} e^{\imath k_n x} dx \right) \right] \\ &= \frac{d^3}{dk^3} \left[\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \cos(k_n x) dx \right] = \frac{d^3}{dk^3} \left[\frac{2}{k_n} \sin\left(k_n \frac{L}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

svolgendo la derivata, si ottiene:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} x^3 \sin(k_n x) dx = 2\left[\left(\frac{3}{4}\frac{L^2}{k_n^2} - \frac{6}{k_n^4} \right) \sin\left(k_n \frac{L}{2}\right) + \left(\frac{3L}{k_n^3} - \frac{L^3}{8k_n} \right) \cos\left(k_n \frac{L}{2}\right) \right]$$

Analogamente, per il secondo integrale si avrà:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} x\sin(k_n x)dx = Im\left[-\imath\frac{d}{dk}\left(\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} e^{\imath k_n x}dx\right)\right] = -\frac{d}{dk}\left(\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \cos(k_n x)dx\right)$$

$$= 2\left[\frac{1}{k_n^2}\sin\left(k_n\frac{L}{2}\right) - \frac{L}{2k_n}\cos\left(k_n\frac{L}{2}\right)\right]$$

Sommando i due termini calcolati, per i coefficienti della decomposizione dello stato $|\psi\rangle$ nella base degli autostati dell'hamiltoniana risulta:

$$c_n = \sqrt{1680}\frac{2}{L^4}\left[\frac{3L}{k_n^3}\cos\left(k_n\frac{L}{2}\right) + \left(\frac{L^2}{2k_n^2} - \frac{6}{k_n^4}\right)\sin\left(k_n\frac{L}{2}\right)\right]$$

ricordando che $k_n = 2n\pi/L$, rimane:

$$c_n = (-1)^n\frac{3}{4\pi^3}\sqrt{1680}\frac{1}{n^3}$$

Il coefficiente trovato rappresenta la proiezione dello stato del sistema sul generico autostato di energia $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{2\pi^2\hbar^2 n^2}{mL^2}$. L'evoluzione temporale del sistema sarà rappresentata da:

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-\frac{\imath E_n t}{\hbar}}\psi_n(x)$$

$$= \frac{3\sqrt{1680}}{4\pi^3}\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_n(-1)^n\frac{1}{n^3}\sin\frac{2n\pi x}{L}\, exp\left(-\frac{\imath 2\pi^2\hbar}{mL^2}n^2 t\right)$$

Per calcolare l'energia media dovremo calcolare:

$$E = \frac{{}_t\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle_t}{{}_t\langle\psi|\psi\rangle_t} = \frac{{}_0\langle\psi|e^{\frac{\imath\hat{H}t}{\hbar}}\hat{H}e^{-\frac{\imath\hat{H}t}{\hbar}}|\psi\rangle_0}{{}_0\langle\psi|\psi\rangle_0}$$

poichè l'esponenziale, che è una funzione dell'hamiltoniana, commuta con l'hamiltoniana stessa, il calcolo dell'energia media ad un generico tempo t si riduce al calcolo dell'energia media all'istante iniziale (effettivamente l'energia media del sistema si dovrà conservare nel tempo). Ricordando che la funzione d'onda è normalizzata ed introducendo l'operatore identità avremo:

$$E = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} {}_0\langle\psi|x\rangle\hat{H}\langle x|\psi\rangle_0\, dx = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \psi^*(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m^2}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x)dx$$

$$= -\frac{840}{L^7}\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}}\left(6x^4 - \frac{3}{2}L^2x^2\right)dx = 21\frac{\hbar^2}{mL^2}$$

3. La probabilità di misurare l'energia E_n è data dal modulo quadro di c_n:

$$P(E_n) = |c_n|^2 = \frac{9 \ 1680}{16\pi^6} \frac{1}{n^6}$$

4. La misura di energia più probabile si ha per $n = 1$, per cui $P(E_1) = 945/\pi^6 = 0.98$ e il valore dell'energia è

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$$

5. Se approssimiamo lo stato $\psi(x)$ con l'autofunzione corrispondente all'energia più probabile E_1, commetteremo un errore, nella stima dell'energia, di

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{E - E_1}{E} = \frac{(21 - 2\pi^2)}{21} = 0.06$$

6. Calcoliamo l'impulso medio dello stato $\psi(x)$:

$$\bar{p} = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \psi^*(x) \left(-\imath\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx = 0$$

   poichè derivando ottengo una funzione pari in x, che moltiplicata per la funzione dispari $\psi^*(x)$ dà ancora una funzione dispari.