Prosti kvantni delec v eni dimenziji

Na delec, ki se giblje v konstantnem potencialu, ne deluje nobena sila in pravimo, da je delec prost. Potencial je vedno nedoločen do konstante, zato lahko rečemo, da je potencial, v katerem se delec giblje, kar enak vrednosti 0.

Za velika telesa oziroma klasične delce pravimo, da se v tem primeru gibljejo premo enakomerno ali mirujejo, ker tako pravi prvi Newtonov zakon. Koordinato x delca lahko vedno točno izračunamo kot

$$x = x_0 + vt.$$

Njegova hitrost pa je konstantna in jo lahko izračunamo, če poznamo celotno energijo delca, ki je enaka kar kinetični energiji

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

Gibalna količina je kar enaka produktu mase in hitrosti. Položaj delca in njegovo gibalno količino v vsakem trenutku natančno poznamo.

Opis gibanja kvantnih delcev pa dobimo z rešitvijo gibalne enačbe za kvantne delce, to je Schrödingerjeve enačbe. Za enodimenzionalno gibanje jo zapišemo kot

$$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}.$$

Najprej rešimo stacionarno verzijo

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

$\hat{H}$ je operator celotne energije ali Hamiltonov operator, ki ima za enodimenzionalno gibanje naslednjo obliko

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x).$$

Potencial delca je konstanten in enak vrednosti 0, tako da se stacionarna Schrödingerjeva enačba poenostavi na

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

Ko celo enačbo pomnožimo z (-2m) in delimo s $\hbar^2$, se enačba zapiše na naslednji način

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=0.$$

Sedaj uvedemo novo spremenljivko $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$ in dobimo

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

Enačba ima dve rešitvi (sinuse in kosinuse ali eksponentni funkciji) in krajevni del celotne funkcije lahko zapišemo kot

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Obe rešitvi imate enako energijo $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, prva ustreza gibanju delcev v smeri pozitivnih x-ov in druga v smeri negativnih. Energija ima lahko katerokoli pozitivno vrednost in za prosti delec ni kvantizirana (seveda če govorimo o translaciji kot gibanju). Operator gibalne količine ($\widehat{p_x}$) komutira s Hamiltonovim operatorjem, zato lahko istočasno natančno poznamo energijo in gibalno količino in s tem hitrost delcev. Operator položaja ($\hat{x}$) pa ne komutira, tako da položaja delca ne moremo poznati, če poznamo energijo. Ker delec ni vezan, valovna funkcija ni kvadratno integrabilna in je ne moremo normalizirati. Konstanti A in B lahko določimo, če poznamo gostoto toka delcev v pozitivni in negativni smeri.

Recimo, da imamo curek delcev, ki se giblje v smeri pozitivnih x-ov. Valovna funkcija je ima sedaj naslednjo obliko $\psi(x) = Ae^{ikx}$. Če dodamo še časovno odvisnost dobimo $\Psi(x,t) = Ae^{ikx}e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$. Ta oblika funkcije je enaka obliki, ki jo imamo za ravne valove v klasični mehaniki. Verjetnostna gostota je pri vseh vrednostih x konstantna

$$\rho = \Psi^*\Psi = A^*e^{-ikx}e^{i\frac{Et}{\hbar}}Ae^{ikx}e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = |A|^2.$$

To pomeni, da lahko kvantni delec najdemo kjerkoli na x osi z enako verjetnostjo. Gostota toka delcev pa je definirana kot

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*\right).$$

Za gibanje v x smeri imamo samo komponento x, ki je enaka

$$j_x = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\frac{d\Psi}{dx} - \Psi\frac{d\Psi^*}{dx}\right).$$

Za funkcijo, ki opisuje gibanje v smeri pozitivnih x, dobimo, da je gostota toka delcev enaka

$$j_x = |A|^2\frac{\hbar k}{m}.$$

Vidimo, da je ta gostota kar enaka produktu hitrosti ($\hbar k$ je gibalna količina, hitrost pa je kvocient gibalne količine in mase) in gostote kot smo vajeni iz Newtonove mehanike. Če poznamo gostoto toka delcev, ki jo oddaja izvir, lahko vedno določimo konstanto A in potem poznamo valovno funkcijo.

Pri izračunu nedoločenosti gibalne količine dobimo, da je le ta enaka 0. To pomeni, da natančno poznamo gibalno količino delcev, nedoločenost položaja pa nima zgornje meje, kar sledi iz Heisenbergove neenakosti

$$\Delta x\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \rightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x}.$$

Isto dobimo tudi, če izračunamo nedoločenost položaja neposredno

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}.$$

Za pričakovano verjetnost koordinate dobimo 0 ($\langle \hat{x} \rangle = \lim_{z\to\infty} \int_{-z}^{z} x\rho dx = 0$, ker je pod integralom liha funkcija), za pričakovano verjetnost kvadrata koordinate pa integral nima zgornje meje (rečemo, da je neskončno velik). Nedoločenost koordinate pa tudi nima zgornje meje.

Glavna razlika med prostim klasičnim in kvantnim delcem je, da pri klasičnem delcu poznamo vedno položaj in hitrost (seveda v okviru eksperimentalne napake), pri kvantnem delcu pa natančno poznamo hitrost, položaj je pa povsem nedoločen.