Superpozice základního a prvního excitovaného stavu

Nejprve si napíšeme vlnovou funkci pro základní a první excitovaný stav a dosadíme za energii:

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

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi x}{l}e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi x}{l}e^{\frac{\pi^2\hbar t}{i2ml^2}}$$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{2\pi x}{l}e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}} = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{2\pi x}{l}e^{\frac{4\pi^2\hbar t}{i2ml^2}}$$

Superpozice pro t = 0

$$\psi = C_1\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi x}{l} + C_2\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{2\pi x}{l}$$

Koeficienty C_1 a C_2 mohou být obecně libovolná komplexní čísla, ale jelikož jsme lineární kombinací ztratili normovanost vlnové funkce, zvolíme je tak, abychom získali opět normovanou vlnovou funkci, aby se nám později snáze počítala střední hodnota v tomto stavu.

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle C_1\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l} + C_2\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}|C_1\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l} + C_2\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}\rangle =$$

$$= |C_1|^2\langle\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l}|\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l}\rangle + C_1^*C_2\langle\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l}|\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}\rangle + C_2^*C_1\langle\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l}|\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}\rangle +$$
$$|C_2|^2\langle\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}|\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}\rangle = 1$$

Smíšené členy se nám vynulují, protože to jsou vlastní funkce hamiltoniánu příslušející různým vlastním číslům, a tedy jsou na sebe kolmé, což dává nulový jejich skalární součin. Zbylé dva skalární součiny nám dají jedničku, jelikož je to normovaný základní resp. první excitovaný stav. Zbyde nám tedy podmínka:

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$$

A tedy takováto volba koeficientů nám dá výše uvedenou vlnovou funkci normovanou. Následující výpočty budu provádět pro obecné koeficienty splňující tuto podmínku, pokud by se vám to zdálo příliš abstraktní, dají se výpočty provést i s konkrétním dosazením, např. při volbě $C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ se výpočty hezky upraví.

Chceme-li vlnovou funkci v obecném čase t, přidáme pouze příslušné časové členy:

$$\psi = C_1\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{\pi x}{l}e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} + C_2\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{2\pi x}{l}e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}}$$

Tato vlnová funkce samozřejmě zachovává normování:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle C_1\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l}e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} + C_2\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}}|C_1\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l}e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} + C_2\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}}\rangle =$$

$$= |C_1|^2 e^{-\frac{E_1 t}{i\hbar}}e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}}\langle\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l}|\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{\pi x}{l}\rangle + |C_2|^2 e^{-\frac{E_2 t}{i\hbar}}e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}}\langle\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}|\sqrt{\tfrac{2}{l}}\sin\tfrac{2\pi x}{l}\rangle = 1$$

Smíšené členy v posledním kroku jsou opět položeny rovny nule, stejně tak zbývající skalární součiny jsou rovny jedné jako výše. Navíc nám zde ze skalárního součinu vyskočily dvě exponenciály, z nichž jedna je se záporným znaménkem, protože z první části skalárního součinu vytýkáme konstanty komplexně sdružené. Z toho důvodu se nám tedy obě exponenciály pokrátí a získáme opět stejnou podmínku:

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$$

Pravděpodobnost naměření energie E_1:

Tuto pravděpodobnost zjistíme z koeficientů před jednotlivými vlnovými funkcemi. Pokud budeme uvažovat nejobecnější případ, kde vlnová funkce není normovaná, pak bude mít pravděpodobnost naměření E_1 tvar:

$$P(E_1, t = 0) = \frac{|C_1|^2 \frac{2}{l}}{|C_1|^2 \frac{2}{l} + |C_1|^2 \frac{2}{l}} = \frac{|C_1|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}$$

Vyšlo to tedy přesně, jak jsme očekávali, že pokud je funkce normovaná, určí nám pravděpodobnost druhá mocnina velikosti koeficientu C_1.

Počítáme-li to v libovolném jiném čase t, přibude ve vzorci ještě druhá mocnina z exponenciály:

$$P(E_1, t) = \frac{|C_1|^2 \frac{2}{l} \left| e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} \right|^2}{|C_1|^2 \frac{2}{l} \left| e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} \right|^2 + |C_1|^2 \frac{2}{l} \left| e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}} \right|^2} = \frac{|C_1|^2}{|C_1|^2 + |C_2|^2}$$

Přesně jak jsme očekávali, nám vyšla stejná hodnota i pro libovolný čas, protože stejně jako výše se nám tam objeví druhá mocnina z velikosti exponenciály, což je vlastně exponenciála krát exponenciála komplexně sdružená, což nám dá jedničku.

Časová střední hodnota souřadnice ve stavu ψ

Počítáme-li časovou střední hodnotu, pouze dosadíme do vzorce:

$$\langle \psi | \hat{x} \psi \rangle = \langle C_1 \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{\pi x}{l} e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} + C_2 \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{2\pi x}{l} e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}} | x C_1 \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{\pi x}{l} e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} + x C_2 \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{2\pi x}{l} e^{\frac{E_2 t}{i\hbar}} \rangle =$$

$$= |C_1|^2 \frac{2}{l} \langle \sin\frac{\pi x}{l} | x \sin\frac{\pi x}{l} \rangle + |C_2|^2 \frac{2}{l} \langle \sin\frac{2\pi x}{l} | x \sin\frac{2\pi x}{l} \rangle$$

Stejně jako výše zmizely křížové členy a exponenciály a jediné co musíme teď spočítat, jsou integrály typu:

$$\int x sin^2 ax \, dx$$

Který stačí jen zadat do Wolframu Alpha a dostaneme výsledek, ale uvedu zde i řešení, jak se dá spočítat přes per partes.

$$\int x sin^2 ax \, dx = \left| \begin{matrix} u = x, & u' = 1 \\ v' = \sin^2 ax, v = \frac{x}{2} - \frac{\cos ax \sin ax}{2a} \end{matrix} \right| = \frac{x^2}{2} - \frac{x \sin ax \cos ax}{2a} - \int \frac{x}{2} - \frac{\sin ax \cos ax}{2a} dx$$

Kde jsme ještě museli vypočítat pomocný integrál:

$$\int \sin^2 ax\,dx = \int (1-\cos^2 ax)dx = \begin{vmatrix} u = \cos ax\,, u' = -\mathrm{a}\sin ax \\ v' = \cos ax\,, v = \dfrac{1}{a}\sin ax \end{vmatrix}$$
$$= x - \frac{1}{a}\cos ax \sin ax - \int \sin^2 ax\,dx$$

Tím dostaneme rovnici, kde je v neznámou integrál:

$$2\int \sin^2 ax = x - \frac{1}{a}\cos ax \sin ax$$

A podělením dvojkou najdeme řešení hledaného integrálu. Abychom mohli napsat výsledné řešení, tak potřebujeme ještě spočítat jeden integrál, který budeme počítat stejným způsobem:

$$\int \sin ax \cos ax\,dx = \begin{vmatrix} u = \cos ax\,, u' = -a\sin ax \\ v' = \sin ax\,, v = -\dfrac{1}{a}\cos ax \end{vmatrix} = -\frac{1}{a}\cos^2 ax - \int \sin ax \cos ax\,dx$$

$$\int \sin ax \cos ax\,dx = -\frac{1}{2a}\cos^2 ax$$

Teď už stačí jen dosadit a získáme celkové řešení integrálu:

$$\int xsin^2 ax\,dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x\sin ax \cos ax}{2a} - \frac{\cos^2 ax}{4a^2}$$

Teď už si jenom dosadíme za *a* příslušné konstanty a dosadíme meze:

$$\langle\psi|\hat{x}\psi\rangle = |C_1|^2 \frac{2}{l}\int_0^l x\sin^2\frac{\pi x}{l}dx + |C_2|^2\frac{2}{l}\int_0^l x\sin^2\frac{2\pi x}{l}dx =$$
$$= |C_1|^2\frac{2}{l}\left[\frac{x^2}{4} - \frac{xl\sin\frac{\pi x}{l}\cos\frac{\pi x}{l}}{2\pi} - \frac{l^2\cos^2\frac{\pi x}{l}}{4\pi^2}\right]_0^l + |C_2|^2\frac{2}{l}\left[\frac{x^2}{4} - \frac{xl\sin\frac{2\pi x}{l}\cos\frac{2\pi x}{l}}{4\pi} - \frac{l^2\cos^2\frac{2\pi x}{l}}{16\pi^2}\right]_0^l$$

Teď, když dosadíme meze, dostaneme:

$$\langle\psi|\hat{x}\psi\rangle = \frac{2}{l}\left[|C_1|^2\left(\frac{l^2}{4} - \frac{l^2}{4\pi^2} + \frac{l^2}{4\pi^2}\right) + |C_2|^2\left(\frac{l^2}{4} - \frac{l^2}{16\pi^2} + \frac{l^2}{16\pi^2}\right)\right] = \frac{2}{l}\left(|C_1|^2\frac{l^2}{4} + |C_2|^2\frac{l^2}{4}\right)$$
$$= \frac{l}{2}(|C_1|^2 + |C_2|^2)$$

Využijeme-li dříve spočtenou normovací podmínku, dostaneme:

$$\langle\psi|\hat{x}\psi\rangle = \frac{l}{2}$$

To samé dostaneme, i pokud nemáme normovanou vlnovou funkci, jelikož bychom tuto střední hodnotu museli ještě podělit její normou, čímž opět získáme výsledek jako polovinu šířky potenciálové jámy. To je výsledek, který jsme i očekávali, jelikož výsledná vlnová funkce pro nekonečnou potenciálovou jámu je symetrická podle středu jámy.