

MK 5/1

Konrad Proca¹

¹Affiliation not available

March 20, 2018

Zadanie 5

Niech:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp(i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{x})c(\mathbf{k})d\mathbf{k}$$

Pokazać, że pędkość przemieszczania się $|\psi|$ (prędkość grupowa) jest określona wzorem:

$$\mathbf{v} = \nabla_k \omega(\mathbf{k})$$

Wyliczyć ψ dla:

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m}$$

Rozwiązanie

Związek między ω a ∇ możemy zobaczyć, rozwijając $\omega(\mathbf{k})$ w szereg wokół punktu $\mathbf{k}_0$:

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{\omega(\mathbf{k}_0)(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^0}{0!} + \frac{\nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^1}{1!} + \dots \sim \omega(\mathbf{k}_0) + \nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$$

Możemy wstawić to przybliżenie $\omega(\mathbf{k})$ do wzoru na ψ :

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp(i(\omega(\mathbf{k}_0) + \nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0))t - i\mathbf{k}\mathbf{x})c(\mathbf{k})d\mathbf{k}$$

ale teraz mamy mnożenie $\nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}$ i $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$, więc ∇_k pojawi nam się w wyrażeniu więcej niż raz, a niekoniecznie tego chcemy. Zrobimy więc podstawienie:

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$$

z którego wynikają:

$$\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0$$

i istotne:

$$d\mathbf{k} = d\Delta\mathbf{k}$$

bo:

$$d\mathbf{k}_0 = 0$$

ponieważ $\mathbf{k}_0$ jest stałą.

Dostajemy:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp(i(\omega(\mathbf{k}_0) + \nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \Delta\mathbf{k})t - i(\Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)\mathbf{x})c(\Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)d\Delta\mathbf{k}$$

Zauważmy, że w wyrażeniu $\nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}$ nie musieliśmy podstawiać $\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0$, dlatego że tam liczymy po prostu pochodną ewaluowaną w punkcie $\mathbf{k}_0$, więc nazwa zmiennej nie ma znaczenia.

Przekształcając:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp(i\omega(\mathbf{k}_0)t + \nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} i\Delta\mathbf{k}t - i\Delta\mathbf{k}\mathbf{x} - i\mathbf{k}_0\mathbf{x})c(\Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)d\Delta\mathbf{k}$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp(i\omega(\mathbf{k}_0)t - i\mathbf{k}_0\mathbf{x}) \exp(\nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} i\Delta\mathbf{k}t - i\Delta\mathbf{k}\mathbf{x})c(\Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)d\Delta\mathbf{k}$$

Wyrażenie $\exp(i\omega(\mathbf{k}_0)t - i\mathbf{k}_0\mathbf{x})$ możemy wyciągnąć przed całkę, ponieważ nie zależy od $\Delta\mathbf{k}$:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp(i\omega(\mathbf{k}_0)t - i\mathbf{k}_0\mathbf{x}) \int \exp(\nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} i\Delta\mathbf{k}t - i\Delta\mathbf{k}\mathbf{x})c(\Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)d\Delta\mathbf{k}$$

Przesuńmy teraz tę funkcję w przestrzeni o $\Delta\mathbf{x}$, czyli obliczmy:

$$\psi(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t) = \exp(i\omega(\mathbf{k}_0)t - i\mathbf{k}_0(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x})) \int \exp(\nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} i\Delta\mathbf{k}t - i\Delta\mathbf{k}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}))c(\Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)d\Delta\mathbf{k}$$

Jeśli teraz założymy, że $\Delta\mathbf{x} = \mathbf{v}t = \nabla_k \omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} t$, to:

$$\psi(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t) = \exp(i\omega(\mathbf{k}_0)t - i\mathbf{k}_0(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x})) \int \exp(-i\Delta\mathbf{k}\mathbf{x})c(\Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)d\Delta\mathbf{k}$$

$$\psi(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t) = \exp(i\omega(\mathbf{k}_0)t - i\mathbf{k}_0\Delta\mathbf{x}) \exp(-i\mathbf{k}_0\mathbf{x}) \int \exp(-i\Delta\mathbf{k}\mathbf{x})c(\Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)d\Delta\mathbf{k}$$

Ale z drugiej strony, jeśli obliczymy ψ przed przesunięciem, ale w momencie $t = 0$:

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = \exp(-i\mathbf{k}_0\mathbf{x}) \int \exp(-i\Delta\mathbf{k}\mathbf{x})c(\Delta\mathbf{k} + \mathbf{k}_0)d\Delta\mathbf{k}$$

Zatem

$$\psi(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t) = \exp(i(\omega(\mathbf{k}_0)t - \mathbf{k}_0\Delta\mathbf{x}))\psi(\mathbf{x}, 0) = \exp(it(\omega(\mathbf{k}_0) - \mathbf{k}_0\nabla_k\omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}))\psi(\mathbf{x}, 0)$$

Jeśli chodzi o wyrażenie $\exp(i(\omega(\mathbf{k}_0)t - \mathbf{k}_0\Delta\mathbf{x}))$, to **w ogólności nie wiem, jak wyzerować wykładnik albo gdzieś zrobiłem błąd**. Ale dla $\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}$ możemy wyliczyć:

$$\Delta\mathbf{x} = \mathbf{v}t = \nabla_k\omega(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}t = \frac{\hbar\nabla_k(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}}{2m}t = \frac{\hbar[2k_x, 2k_y, 2k_z]|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}}{2m}t = \frac{\hbar 2\mathbf{k}_0}{2m}t = \frac{\hbar\mathbf{k}_0}{m}t$$

Zatem:

$$\exp(i(\omega(\mathbf{k}_0)t - \mathbf{k}_0\Delta\mathbf{x})) = \exp(i(\frac{\hbar\mathbf{k}_0^2}{2m}t - \mathbf{k}_0\frac{\hbar\mathbf{k}_0}{m}t))$$

czyli wykładnik wyzerowałby się, gdyby nie ta nieszczęsna **dwójka w mianowniku** lub jej brak w drugim **wyrazie** i wtedy moglibyśmy napisać:

$$\psi(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, 0)$$

Czyli fala po czasie t wygląda po prostu tak samo, tylko jest przesunięta o $\Delta\mathbf{x}$

Druga część zadania tyczy się wyliczenia ψ właśnie dla $\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}$

Wstawiając jednocześnie $c(\mathbf{k}) = 1$ zakładam, że nie wpływa to negatywnie na zbieżność całki (?):

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp(i\frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}t - i\mathbf{k}\mathbf{x})d\mathbf{k} = \int \exp(i\frac{\hbar(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m}t - i(k_x x + k_y y + k_z z))dk_x dk_y dk_z$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp(i\frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}t - i\mathbf{k}\mathbf{x})d\mathbf{k} = \int \exp(i\frac{\hbar k_x^2}{2m}t - ik_x x) \exp(i\frac{\hbar k_y^2}{2m}t - ik_y y) \exp(i\frac{\hbar k_z^2}{2m}t - ik_z z) dk_x dk_y dk_z$$

Ale ponieważ mamy do czynienia z rozdzielonymi zmiennymi:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp(i\frac{\hbar k_x^2}{2m}t - ik_x x)dk_x \int \exp(i\frac{\hbar k_y^2}{2m}t - ik_y y)dk_y \int \exp(i\frac{\hbar k_z^2}{2m}t - ik_z z)dk_z$$

To możemy to rozpisnąć jako iloczyn trzech takich samych całek. Policzmy jedną z nich, np.:

$$\int \exp(i\frac{\hbar k_x^2}{2m}t - ik_x x)dk_x$$

Podstawiając $\alpha = -i\frac{\hbar t}{2m}$, $\beta = ix$ i $x = k_x$ obliczymy coś bardziej ogólnego, to znaczy całkę:

$$\int \exp(-\alpha x^2 - \beta x)dx$$

Ponieważ:

$$-\alpha \left(x - \frac{\beta}{2\alpha} \right)^2 = -\alpha \left(x^2 - 2 \frac{\beta x}{2\alpha} + \frac{\beta^2}{4\alpha^2} \right) = -\alpha x^2 - \beta x + \frac{\beta^2}{4\alpha}$$

Więc:

$$\int \exp(-\alpha x^2 - \beta x + \frac{\beta^2}{4\alpha}) dx = \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right) \int \exp(-\alpha x^2 - \beta x) dx = \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right) \int \exp \left(-\alpha \left(x - \frac{\beta}{2\alpha} \right)^2 \right) dx$$

Korzystając ze wzoru Gaussa:

$$\int \exp(-ay^2) dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

i ignorując fakt, że stosuje się go bezpośrednio tylko do liczb rzeczywistych, możemy zrobić podstawienie:

$$y = \left(x - \frac{\beta}{2\alpha} \right) \\ dy = dx$$

Wtedy:

$$\int \exp(-\alpha x^2 - \beta x) dx = \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right) \int \exp \left(-\alpha \left(x - \frac{\beta}{2\alpha} \right)^2 \right) dx = \exp \left(\frac{\beta^2}{4\alpha} \right) \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

dlatego że przy całkowaniu od $-\infty$ do ∞ przesunięcie o stałą nie zmienia granic całkowania

Wracając do oryginalnego równania przed podstawieniami $\alpha = -i \frac{\hbar t}{2m}$, $\beta = i x$ i $x = k_x$:

$$\int \exp(i \frac{\hbar k_x^2}{2m} t - i k_x x) dk_x = \int \exp(i \frac{\hbar t}{2m} k_x^2 - i x k_x) dk_x = \exp \left(\frac{(ix)^2}{4(-i \frac{\hbar t}{2m})} \right) \sqrt{\frac{\pi}{-i \frac{\hbar t}{2m}}} = \exp \left(\frac{-imx^2}{2\hbar t} \right) \sqrt{\frac{2i\pi m}{\hbar t}}$$

Wracając znowu do iloczynu całek:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp(i \frac{\hbar k_x^2}{2m} t - i k_x x) dk_x \int \exp(i \frac{\hbar k_y^2}{2m} t - i k_y y) dk_y \int \exp(i \frac{\hbar k_z^2}{2m} t - i k_z z) dk_z$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp \left(\frac{-imx^2}{2\hbar t} \right) \sqrt{\frac{2i\pi m}{\hbar t}} \exp \left(\frac{-imy^2}{2\hbar t} \right) \sqrt{\frac{2i\pi m}{\hbar t}} \exp \left(\frac{-imz^2}{2\hbar t} \right) \sqrt{\frac{2i\pi m}{\hbar t}}$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp \left(\frac{-im(x^2 + y^2 + z^2)}{2\hbar t} \right) \left(\frac{2i\pi m}{\hbar t} \right)^{\frac{3}{2}} = \exp \left(\frac{-im\mathbf{x}^2}{2\hbar t} \right) \left(\frac{2i\pi m}{\hbar t} \right)^{\frac{3}{2}}$$