Vezana stanja v 3-D

Blaž Zupančič

25. april 2001

Pokaži, da lahko problem delca v tridimenzionalnem krogelnosimetričnem potencialu preslikamo na enodimenzionalen problem s spremenjenim potencialom. Delec bomo opisali z valovno funkcijo v krogelnih koordinatah $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R_l(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$. Za radialni del valovne funkcije velja naslednja Schrödingerjeva enačba

$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)\right]R(r)=ER(r)\,. \tag{1}$$

Za poenostavitev potrebujemo nastavek $R(r)=\frac{u(r)}{r}$, ki ga bomo najprej posebej odvajali in potem vstavili v enačbo (1).

1. $\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{u}{r}\right)=\frac{u'r-u}{r^2}$
2. $\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(\frac{u}{r}\right)=\frac{(u''r+u'-u')r^2-(u'r-u)(2r)}{r^4}=\frac{u''r^3-2u'r^2+2ur}{r^4}=\frac{u''}{r}-2\frac{u'}{r^2}+2\frac{u}{r^3}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''+\frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1)u+(V(r)-E)u=0 \tag{2}$$

Dobili smo enodimenzionalno Schrödingerjevo enačbo, ki se od navadne razlikuje le po srednjem *centrifugalnem* členu. To pa je bila tudi naša naloga.

Izpelji robne pogoje za „enodimenzionalno" valovno funkcijo. Imamo dva robna pogoja. Prvi velja, ko gre $r\to 0$, in drugi, ko gre $r\to\infty$.

V točki $r=0$ ima liha funkcija ničlo, soda pa pa je lahko različna od nič. Za sode funkcije v okolici $r=0$ tako velja približek $u(r)\approx u_0\neq 0$ in $\psi(r,\vartheta,\varphi)\approx\frac{u_0}{r}Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$. To bomo sedaj vstavili v Schrödingerjevo enačbo in jo integrirali po majhnem krogu z radijem r_0.

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi &= (E-V(r))\psi\\
-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{r_0}\nabla^2\psi dr &= \int_0^{r_0}(E-V(r))dr\\
Au_0 &= 0\,;\ A=konst.
\end{aligned}$$

Zadnja enačba seveda ni pravilna in sledi, da sode funkcije niso pravilne rešitve naše enačbe. Integrala pa sta bolj podrobno poračunana tu:

- $-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{r_0}\nabla^2\psi dr=-\frac{\hbar^2}{2m}\oint_{(S)}\nabla\psi dS=-\frac{\hbar^2}{2m}\oint_{(S)}-\frac{u_0}{r^2}Y_{lm}(\vartheta,\varphi)r^2d\Omega=\frac{\hbar^2}{2m}\oint_{(S)}u_0Y_{lm}(\vartheta,\varphi)d\Omega\propto u_0$
- $\lim_{r_0\to 0}\int_0^{r_0}(E-V(r))dr=0$; če potencial pada maksimalno z $\frac{1}{r}$ ($V\propto\frac{1}{r^n};n\leq 1$)

Valovna funkcija mora biti normirana.

$$1=\int|\psi(r,\vartheta,\varphi)|^2r^2drd\varphi d(\cos\vartheta)=\int_0^\infty|R(r)|^2r^2dr=\int_0^\infty\left|\frac{u(r)}{r}\right|^2r^2dr=\int_0^\infty|u(r)|^2dr$$

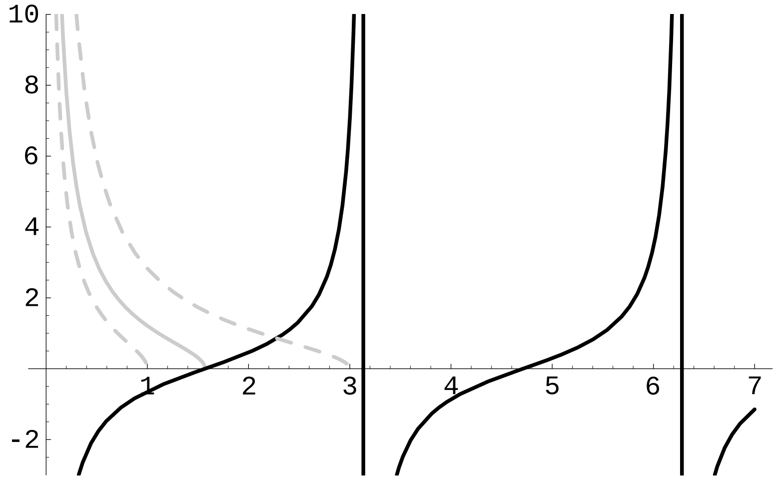
Da zadnji izraz velja, ko gre $r\to\infty$, mora veljati

$$u(r)\propto\frac{1}{r^{\frac{1}{2}+\delta}};\ \delta>0.$$

Tako smo dobili oba robna pogoja za enodimenzionalno valovno funkcijo:

1. sode funkcije niso pravilne rešitve
2. veljati mora $u(r)\propto\frac{1}{r^{\frac{1}{2}+\delta}}$; $\delta>0$.

Za delec v tridimenzionalni krogelnosimetrični potencialni jami z globino V_0 in polmerom a poišči pogoj za obstoj vezanega stanja. Imamo torej potencial $V(r) = -V_0\Theta(a-r)$ in enodimenzionalno enačbo (2). Če si podrobno ogledamo centrifugalni člen vidimo, da nam pri $l > 0$ da nek efektivni potencial, ki je pozitiven. Ker pa bi radi dobili vezana stanja in rabimo čim globlji potencial, nam je ta člen v napoto in se ga znebimo z $l = 0$ (vzeti moramo torej osnovno stanje). Zatem si dodobra ogledamo domačo nalogo Mihe Mežnarja: Vezana stanja v 1-D II in upoštevamo prvi robni pogoj. Iščemo torej rešitev enačbe $-\frac{1}{\tan x} = \frac{\sqrt{(k_0a)^2-x^2}}{x}$. Prvo najdemo pri $k_0a = x = \frac{\pi}{2}$, kjer je $k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 = \frac{\pi^2}{4a^2} \Rightarrow V_0 \geq \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$ (glej sliko 1).



Slika 1: Iskanje prve rešitve za liha vezana stanja.

Za isti potencial (kot pri prejšnji nalogi) poišči enačbo, ki določa energije delca za poljuben l Tokrat bomo uporabili prvotno Schrödingerjevo enačbo (1). Ugotovimo, da je to Besselova sferna diferencialna enačba, ki ima za $0 < r \leq a$ rešitev $R(r) = Aj_l(\widetilde{k}r) + Bn_l(\widetilde{k}r)$ in za $r > a$ rešitev $R(r) = Ch_l^{(1)}(kr) + Dh_l^{(2)}(kr)$. V rešitvi smo uporabili sferne Besselove (j_l) in sferne Neumannove (n_l) funkcije ter linearne kombinacije le-teh, znane pod imenom Hanklove funkcije ($h_l^{(1)} = j_l + in_l$, $h_l^{(2)} = j_l - in_l$).[1] Ker vemo, da so Neumannove funkcije pri $r = 0$ singularne mora biti $B = 0$. Dalje ugotovimo, da nam tudi druga Hanklova funkcija pobegne v neskončnost, ko gre $r \to \infty$. Asimptotska vrsta namreč pove

$$\begin{aligned}
h_l^{(2)}(\xi) &\asymp \frac{i}{\xi}e^{-i(\xi-\frac{l\pi}{2})} \\
h_l^{(2)}(kr) = h_l^{(2)}(iqr) &= \frac{i}{iqr}e^{-i(iqr-\frac{l\pi}{2})} \\
h_l^{(2)}(iqr) &= \frac{1}{qr}e^{qr+i\frac{l\pi}{2}}
\end{aligned}$$

kar pa pri $r \to \infty$ divergira. Ostanejo nam samo še robni pogoji

1. $Aj_l(\widetilde{k}a) = Ch_l^{(1)}(iqa)$ (zveznost funkcije)
2. $\widetilde{k}A\frac{dj_l(\xi)}{d\xi}\Big|_{\xi=\widetilde{k}a} = iqC\frac{dh_l^{(1)}(\xi)}{d\xi}\Big|_{\xi=iqa}$ (zveznost odvodov)

Sedaj lahko enačbi zdelimo, da nam odpadejo konstante, in izraz malo polepšamo. Dalje pa se ga za splošni l ne da rešiti.

$$\begin{aligned}
\widetilde{k}\frac{j_l'(\xi)}{j_l(\xi)}\Big|_{\xi=\widetilde{k}a} &= iq\frac{h_l^{(1)'}(\xi)}{h_l^{(1)}(\xi)}\Big|_{\xi=iqa} \\
\widetilde{k}\,\frac{d(\ln j_l(\xi))}{d\xi}\Big|_{\xi=\widetilde{k}a} &= iq\,\frac{d(\ln h_l^{(1)}(\xi))}{d\xi}\Big|_{\xi=iqa}
\end{aligned}$$

[1] Več o tem si lahko preberete v knjigi: Kuščer I.,Kodre A., Matematika v fiziki in tehniki, 1994 (str. 336 spodaj)