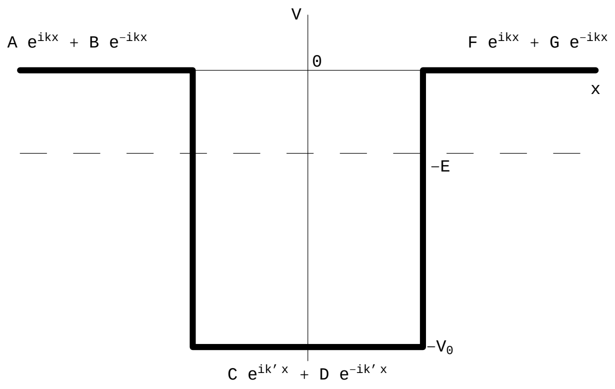
1 Enačba za energije vezanih stanj

Pogoj za vezana stanja je:

$$M_{11} = 0. \tag{1}$$

Torej poglejmo, kako izgleda!

$$M_{11} = \frac{1}{4}\left[\left(1+\frac{k}{n'}\right)\left(1+\frac{k'}{k}\right)e^{2ia(k-k')} + \left(1-\frac{k}{k'}\right)\left(1-\frac{k'}{k}\right)\right]e^{2ia(k+k')} = 0$$



Slika 1: Potencialna jama z nastavki za valovne funkcije

Vidimo, da je

$$\begin{aligned}
k &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E)} = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} = iq && (2)\\
k' &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(-E+V_0)} && (3)\\
k'^2 + q^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(-E+V_0) + \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 = k_0^2 \\
q^2 &= k_0^2 - k'^2 && (4)
\end{aligned}$$

Ker mora iti funkcija $\psi(\pm\infty) \to 0$, morata biti koeficienta A in G enaka nič. Pri tem upoaštevaj, da je $k = iq (q \in \mathbb{R})$ in je torej ψ na levi strani potencialne jame enak $\psi = Ae^{-qx} + Be^{qx}$. Na tej strani gre $x \to -\infty$, torej mora biti $A = 0$. Podobno sklepaj za desno stran!

Pa se lotimo vezanih stanj! Spomnimo se pogoja (1), in računajmo!

$$\begin{aligned}
0 &= e^{2ika}\left[\left(2+\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}\right)e^{-2ik'a} + \left(2-\left(\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}\right)\right)e^{2ik'a}\right]\\
0 &= \left(2+\left(\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}\right)\right)(\cos(2ak') + i\sin(2ak')) + \left(2-\left(\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}\right)\right)(\cos(2qk') + i\sin(2ak'))\\
0 &= 4\cos(2ak') - 2\left(\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}\right)i\sin(2ak')\\
2\cos(2ak') &= \left(\frac{k'}{iq}+\frac{iq}{k'}\right)i\sin(2ak')\\
2 &= \left(\frac{k'}{q}-\frac{q}{k'}\right)\tan(2ak')\\
2 &= \left(\frac{k'}{q}-\frac{q}{k'}\right)\frac{2\tan(k'a)}{1-\tan^2(k'a)}\\
1-\tan^2(k'a) &= \left(\frac{k'}{q}-\frac{q}{k'}\right)\tan(k'a)\\
0 &= \tan^2(k'a) + \left(\frac{k'}{q}-\frac{q}{k'}\right)\tan(k'a) - 1
\end{aligned}$$

Rešujemo torej kvadratno enačbo za funkcijo tan . Zapišimo rešitve!

$$\tan(k'a) = \frac{-\left(\frac{k'}{q} - \frac{q}{k'}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{k'}{q} - \frac{q}{k'}\right)^2 + 4}}{2}.$$

Poglejmo si samo izraz pod korenom!

$$\left(\frac{k'}{q} - \frac{q}{k'}\right) + 4 = \left(\frac{k'^2 - q^2}{qk'}\right)^2 + 4 = \frac{k'^4 - 2k'^2q^2 + q^4 + 4q^2k'^2}{q^2k'^2} = \left(\frac{k'^2 + q^2}{qk'}\right)^2 = \left(\frac{k'}{q} + \frac{q}{k'}\right)^2$$

Torej morajo možne lastne energije zadoščati enačbi:

$$\tan(k'a) = \frac{\frac{q}{k'} - \frac{k'}{q} \pm \left(\frac{k'}{q} + \frac{q}{k'}\right)}{2}$$

Očitno imamo dve možni rešitvi – liha in soda stanja, kot bomo videli.

- SODA stanja.

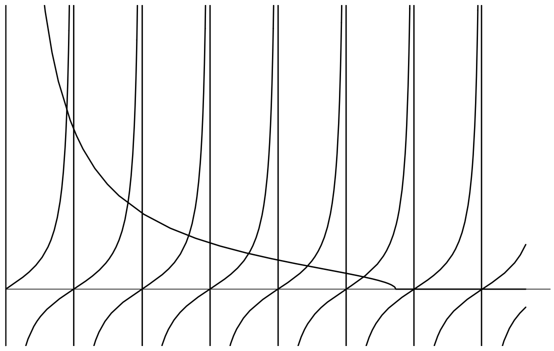
$$\tan(k'a) = \frac{q}{k'} \tag{5}$$

$$\tan(k'a) = \frac{\sqrt{(k_0a)^2 - (k'a)^2}}{k'a}$$

- LIHA stanja.

$$\tan(k'a) = -\frac{k'}{q} \tag{6}$$

$$-\text{ctan}('a) = \frac{\sqrt{(k_0a)^2 - (k'a)^2}}{k'a}$$



Slika 2: Grafična rešitev za energije vezanih stanj. Možne energije so določene s presečišči funkcij. Točka, kjer je funkcija $\frac{\sqrt{(k_0a)^2-(k'a)^2}}{k'a} = 0$, je k_0a.

Presečišča s funkcjo tan predstavljajo sode rešitve (valovne funkcije teh vezanih stanj so sode). Poudariti velja, da vedno obstaja vsaj ena soda rešitev (presečišče). To se vidi tako, da pošljemo mejo $k_0a \to 0$, pa bo še vedno obstajalo vsaj presečišče s prvo pozitivno vejo funkcije tan . Ob tem povejmo še to, kar bomo kasneje rabili. Če posljemo $V_0 \to \infty$ (kar je enakovredno $k_0a \to \infty$, se graf funkcije $\frac{\sqrt{(k_0a)^2-(k'a)^2}}{k'a}$ vedno bolj dviguje in presečišča so vedno bližje večkratnikom $\frac{\pi}{2}$.

2 Valovne funkcije vezanih stanj

Sedaj se bomo zanimali za funkcije vezanih stanj. Najprej si pogejmo, kako sta povezana oba eksponentna repa.

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

Ker je $A = G = 0$, sledi:

$$B = M_{21}F.$$

Poglejmo, kaj je element matrike M_{21}!

$$\begin{aligned}
M_{21} &= \frac{1}{4}\left[\left(1+\frac{k}{k'}\right)\left(1-\frac{k'}{k}\right)e^{-2ik'a}+\left(1+\frac{k'}{k}\right)\left(1-\frac{k}{k'}\right)e^{2ik'a}\right]=\frac{1}{4}\left(\frac{k'}{k}-\frac{k}{k'}\right)\left(e^{2ik'a}-e^{-2ik'a}\right)= \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{k'}{k}-\frac{k}{k'}\right)\sinh(2ik'a)=\frac{1}{2}\left(\frac{k'}{iq}-\frac{iq}{k'}\right)i\sin(2k'a)=\frac{1}{2}\left(\frac{k'}{q}+\frac{q}{k'}\right)\sin(2k'a)=M_{21}
\end{aligned}$$

- Najprej upoštevajmo enačbo (5). Tako dobimo:

$$M_{21} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\tan(k'a)}+\tan(k'a)\right)\sin(2k'a)=\frac{1}{2}\left(\frac{\cos^2(k'a)+\sin^2(k'a)}{\cos(k'a)\sin(k'a)}\right)\sin(2k'a)=1$$

  Tako smo ugotovili, da sta eksponentna repa na obeh straneh jame enaka (imata enak predznak).

- Sedaj pa upoštevajmo enačbo (6).

$$M_{21} = \frac{1}{2}\left(-\tan(k'a)-\frac{1}{\tan(k'a)}\right)\sin(k'a)=-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\tan(k'a)}+\tan(k'a)\right)\sin(2k'a)=-1$$

  Torej sta repa po velikosti enaka, samo njun predznak je različen.

Sedaj pa nas zanima še oblika valovnih funkcij v jami. Zato si osvežimo spomin in poglejmo, kako so povezani koeficienti funkcije v jami s tistimi za jamo!

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(a) & M_{12}(a) \\ M_{21}(a) & M_{22}(a) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

a v oklepaju nam pove samo mejo, pri kateri dana matrika velja. Ker je $G = 0$ sledi:

$$\begin{aligned}
C &= M_{11}(a)F \\
D &= M_{21}(a)F
\end{aligned}$$

Spomnimo se, da je:

$$\begin{aligned}
M_{11}(a) &= \frac{1}{2}\left(1+\frac{k}{k'}\right)e^{i(k-k')a} \\
M_{21}(a) &= \frac{1}{2}\left(1-\frac{k}{k'}\right)e^{i(k+k')a}
\end{aligned}$$

2.1 Soda stanja

Najprej spet upoštevamo enačbo (5) in pogledamo, kako lahko preoblikujemo oba elementa matrike.

$$\begin{aligned}
M_{11}(a) &= \frac{1}{2}\left(1+\frac{iq}{k'}\right)e^{i(iq-k')a}=\frac{1}{2}(1+i\tan(k'a))e^{-qa-ik'a}= \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{\cos(k'a)+i\sin(k'a)}{\cos(k'a)}\right)e^{-qa}e^{-ik'a}=\frac{1}{2}\frac{e^{-qa}}{\cos(k'a)}
\end{aligned}$$

Po enakem postopku dobimo še drugi element, ki ga rabimo:

$$M_{21}(a)=\frac{1}{2}\frac{e^{-qa}}{\cos(k'a)}.$$

Zapišimo še celotno valovno funkcijo v potencialni jami!

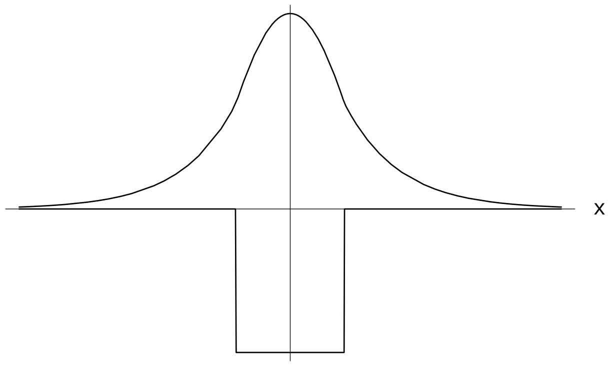
$$\begin{aligned}
\psi &= Ce^{ik'x}+De^{-ik'x}=\frac{1}{2}\frac{e^{-qa}}{\cos(k'a)}Fe^{ik'x}+\frac{1}{2}\frac{e^{-qa}}{\cos(k'a)}Fe^{-ik'x}= \\
&= \frac{1}{2}\frac{e^{-qa}}{\cos(k'a)}F[\cos(k'x)+i\sin(k'x)+\cos(k'x)-i\sin(k'x)]=\frac{e^{-qa}}{\cos(k'a)}F\cos(k'x) \qquad (7)
\end{aligned}$$

2.2 Liha stanja

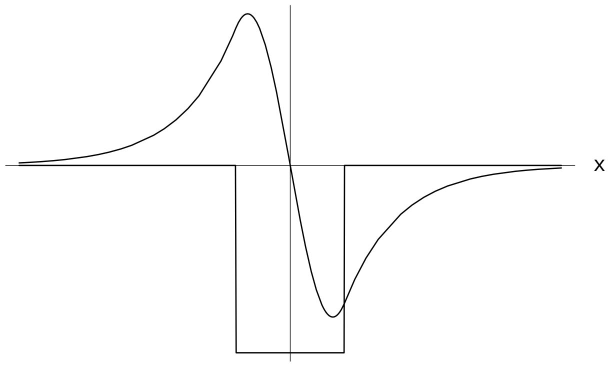
Sedaj pa upoštevamo enačbo (6). Po skoraj identičnem postopku kot prej tudi sedaj izračunamo oba elementa matrike $M_{11}(a)$ in $M_{21}(a)$ ter valovno funkcijo.

$$\begin{aligned} M_{11}(a) &= -\frac{1}{2}i\frac{e^{-qa}}{\sin(k'a)} \\ M_{21}(a) &= \frac{1}{2}i\frac{e^{-qa}}{\sin(k'a)} \\ \psi &= \frac{e^{-qa}}{\sin(k'a)}F\sin(k'x) \end{aligned}$$

Torej so valovne funkcije vezanih stanj funkcije $\sin(k'x)$ in $\cos(k'x)$ torej lihe oz. sode. Po sklepu iz podnaloge o energijah vezanih stanj vidimo, da obstaja vsaj ena soda valovna funkcija, za liho pa ni nujno, da obstaja.



Slika 3: Tako izgledajo sode valovne funkcije, od katerih vsaj najnižja vedno obstaja. Funkcija ni gausovka, kot bi morda rekli na prvi pogled; repa sta eksponentna, sredinski del pa je cosinusen.



Slika 4: Lihe valovne funkcije. Repa sta spet eksponentna, sredinski del pa je tokrat sinusen.

3 Dokaz, da ima valovna funkcija na robovih jame vozle

Preostal nam je le še tretji del naloge. Da bi tega rešili, moramo najprej funkcijo normalizirati.

3.1 Sode valovne funkcije

Zopet se najprej lotimo sodih funkcij. Celotna funkcija za sode rešitve izgleda tako:

$$\psi = Fe^{qx} + F\underbrace{\frac{e^{-qa}}{\cos(k'a)}}_{=K}\cos(k'x) + Fe^{-qx}.$$

Sedaj pa funkcijo normirajmo! Pri tem upoštevajmo, da je funkcija simetrična glede na y os in je torej dovolj, če jo normiramo samo za pozitivne x.

$$\begin{aligned}
1 &= 2F^2\left(\int_0^a K^2\cos^2(k\text{'}x)\mathrm{d}x+\int_a^\infty e^{-2qx}\mathrm{d}x\right)=2F^2\left(K^2\left[\frac{1}{2}x+\frac{1}{4k^2}\sin(2k\text{'}x)\right]\Big|_0^a-\frac{1}{2q}e^{-2qx}\Big|_a^\infty\right)= \\
&= F^2\left(K^2\left[a+\frac{1}{2k\text{'}}\sin(2k\text{'}a)\right]+\frac{1}{q}e^{2qa}\right)= \\
&= F^2\left[\frac{1}{q}e^{-2qa}+\left(\frac{e^{-qa}}{\cos(k\text{'}a)}\right)^2a+\frac{1}{2k\text{'}a}\left(\frac{e^{-qa}}{\cos(k\text{'}a)}\right)^2 2\sin(k\text{'}a)\cos(k\text{'}a)\right]= \\
&= F^2e^{-2qa}\left(\frac{a}{qa}+\frac{a}{\cos^2(k\text{'}a)}+\frac{a\tan(k\text{'}a)}{k\text{'}a}\right)=a\,\psi^2(a)\left[\frac{1}{qa}+\frac{1}{\cos^2(k\text{'}a)}+\frac{\tan(k\text{'}a)}{k\text{'}a}\right]
\end{aligned}$$

Spomnimo se namreč, da je funkcija (7) na meji a takale:

$$\psi(a)=F^2e^{-2qa}.$$

Torej pojde valovna funkcija proti nič pri $\pm a$ natanko tedaj, ko pojde konstanta F z večanjem globine potenciala proti nič. Da pa se bo to zgodilo mora iti oklepaj proti ∞. Prečešimo oklepaj člen za členom! Pred tem pa se še spomnimo, da se z večajnem globine jame presečišča krivulj za enačbo (5) vedno bolj bližajo $\frac{n\pi}{2}$. Torej lahko postavimo:

$$k\text{'}a=\frac{n\pi}{2}-x \tag{8}$$

Poglejmo najprej prvi člen! Spomnimo se, kako izgleda koeficient k_0 in zveze (4)!

$$qa=\sqrt{(k_0a)^2-(k\text{'}a)^2}=k_0a\sqrt{1-\frac{(\frac{n\pi}{2})^2}{(k_0a)^2}}$$

Ko gre $k_0a\to\infty$ gre $x\to 0$ in torej $\frac{1}{qa}\to 0$.

Poglejmo sedaj drugi člen!

$$\frac{1}{\cos(k\text{'}a)}=\frac{1}{\sin^2x}\doteq\frac{1}{\left(x-\frac{x^3}{3!}+\cdots\right)^2}=\frac{1}{x^2\left(1-\frac{x^2}{3!}+\cdots\right)^2}\doteq\frac{1}{x^2}\left(1+\frac{2x^2}{3!}\right)\approx\frac{1}{x^2}$$

Tako nam je ostal samo še zadnji člen. Pa ga poglejmo!

$$\frac{\tan(k\text{'}a)}{k\text{'}a}=\frac{1}{k\text{'}a}\frac{1}{\mathrm{ctan}(k\text{'}a)}\doteq\frac{1}{\frac{n\pi}{2}-x}\frac{1}{x}\doteq\frac{2}{n\pi}\left(1+\frac{2x}{n\pi}\right)\frac{1}{x}=\frac{2}{n\pi x}+\frac{4}{n\pi}\approx\frac{2}{4\pi x}$$

Pri izvajanju upoštevaj se razvoj funkcije $\mathrm{ctan}(k\text{'}a)$ okoli ničle (ta razvoj poznamo, ne poznamo pa razvoja funkcije tan okoli ∞, zato raje izberemo ctan kot tan):

$$\mathrm{ctan}(k\text{'}a)=\frac{\cos(\frac{n\pi}{2}-x)}{\sin(\frac{n\pi}{2}-x)}=\frac{\pm\sin x}{\pm\cos x}\doteq\frac{x-\frac{x^3}{3!}}{1-\frac{x^2}{2!}}\doteq\left(x-\frac{x^3}{3!}\right)\left(1+\frac{x^2}{2}\right)=x+\frac{x^3}{2}-\frac{x^3}{6}-\cdots\approx x$$

Torej lahko na kratko zapišemo, čemu je enak samo oklepaj:

$$[\quad]\doteq 0+\frac{1}{x^2}+\frac{2}{n\pi x}\approx\frac{1}{x^2}$$

Da bi dobili še končni izraz za valovno funkcijo, bomo pogledali, kaj je pravzaprav x! Spomnimo se, da smo ugotovili, da je $\frac{1}{\mathrm{ctan}}=\tan(k\text{'}x)\approx\frac{1}{x}$ in da velja enačba (5). Če sedaj to enačbo nekoliko preoblikujemo, dobimo:

$$\tan(k\text{'}a)=\sqrt{\left(\frac{k_0a}{\frac{n\pi}{2}-x}\right)^2-1}\approx\frac{2k_0a}{n\pi}$$

Pri zadnjem upoštevaj, da je $x\ll 1$ in ga torej zanemarimo v primeri s $\frac{n\pi}{2}$. Isto naredimo z 1, ker gre $k_0\to\infty$. Torej je po enačbi (5):

$$\begin{aligned}
\frac{1}{x} &\approx \frac{2k_0a}{n\pi} \\
x &\approx \frac{n\pi}{2k_0a}
\end{aligned}$$

Torej nam je normalizacija dala, da je valovna funkcija sorazmerna z:

$$\begin{aligned}
1 &\approx a\psi^2(a)\left(\frac{2k_0 a}{n\pi}\right)^2 \\
\sqrt{a}\psi(a) &\approx \frac{n\pi}{2k_0 a} \\
\sqrt{a}\psi(a) &\propto \frac{1}{\sqrt{V_0 a^2}}
\end{aligned}$$

Torej gre res valovna funkcija na robu jame proti 0, ko gre potencial proti ∞.

3.2 Lihe valovne funkcije

Poglejmo sedaj še normalizacijo lihih funkcij! Če se spomnimo grafa, ki nam določa energije vezanih stanj za lihe funkcije vidimo, da so le te pri vrednostih $k'a = n\pi - x$. Zopet se najprej spomnimo enačbe (6) in tega, da je liha funkcija v jami takšna:

$$\psi(a) = Fe^{-qa}.$$

Sicer pa je celotna liha funkcija takšna:

$$\psi = Fe^{qx} - F\frac{e^{-qa}}{\sin(k'a)}\sin(k'x) - Fe^{-qx}.$$

Ko izvedemo normalizacijo lahko zopet upoštevamo, da je funkcija sicer liha, vendar itak računamo integral kvadrata in je torej dovolj, če integriramo le po pozitivnih x in rezultat pomnožimo z 2. Ko normalizacijo izvedemo, dobimo na koncu:

$$1 = a\,\psi^2(a)\left(\frac{1}{qa} + \frac{1}{\sin^2(k'a)} - \frac{\mathrm{ctan}(k'a)}{k'a}\right),$$

torej podobno kot prej. Zopet je treba razvijati okoli $k'a = \frac{n}{\pi}$, ker pa imamo v tem primeru enačbo (6) s funkcijo ctan, jo moramo prevesti na funkcijo tan, ki jo potemtakem razvijamo okoli ničle. Spet dobimo, da se celoten oklepaj obnaša kot $\frac{1}{x^2}$, le x je v tem primeru drugačen. Podobno kot za izračun prejšnjega x dobimo (pomni enačbo (6)!):

$$\begin{aligned}
-\mathrm{ctan}(n\pi - x) &\approx \frac{1}{x} \\
\frac{1}{x} &\doteq \sqrt{\left(\frac{k_0}{n\pi - x}\right)} \approx \frac{k_0 a}{n\pi} \\
x &\approx \frac{n\pi}{k_0 a}
\end{aligned}$$

Ko upoštevamo še tako dobljeni x ugotovimo, da je tudi valovna funkcija za liha stanja na meji a sorazmerna z:

$$\sqrt{a}\psi(a) \approx \frac{n\pi}{k_0 a}.$$

Ko torej večamo globino potencialne jamo, gre tudi ta funkcija proti nič na robu jame.