KVANTNA MEHANIKA I

Časovni razvoj sestavljene funkcije delca v potencialu

Klemen Kenda, matematično-fizkalna smer

Datum: 21.6.2002

1 Uvod

Izpeljujemo časovni razvoj sestavljene funkcije v potencialu naslednje oblike:

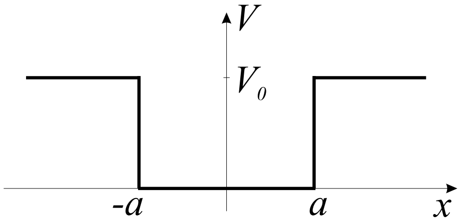
$$V = \begin{cases} V_0, & x < 0 \\ 0, & -a < x < a \\ V_0, & x > 2a \end{cases} \tag{1}$$

Valovne funckije smo že izpeljali v drugi nalogi pri vajah v letu 2001/02 (Andrej Tomeljak - Vezana stanja v 1D II), in sicer uporabimo predpostavko da je $E \ll V_0$. Prav tako smo se s časovnim razvojem že ukvarjali (Miha Kadunc - Časovni razvoj valovne funkcije I).

Preden si pogledamo že znane ugotovitve, se lotimo reševanja problema končne potencialne jame.

2 Lastne funkcije in energije delca v končni potencialni jami

Oglejmo si najprej skico našega potenciala.



Slika 1: Končna potencialna jama.

Na podlagi dosedanjih izkušenj lahko kaj hitro zapišemo pričakovane valovne funkcije na posameznih področjih (označimo jih z L - leva stran, D - desna stran, J - jama).

$$\psi_L(x) = Ce^{k_0 x} \tag{2}$$
$$\psi_J(x) = A\sin(k_i x) + B\cos(k_i x) \tag{3}$$
$$\psi_D(x) = De^{-k_0 x} \tag{4}$$

Na podlagi že znanih dejstev glede obnašanja funkcije na končnih potencialnih skokih lahko zapišemo tudi pravila za zveznost valovne funkcije in njenih prvih odvodov:

$$\psi_L(-a) = \psi_J(-a) \tag{5}$$
$$\psi_J(a) = \psi_D(a) \tag{6}$$
$$\psi'_L(-a) = \psi'_J(-a) \tag{7}$$
$$\psi'_J(a) = \psi'_D(-a) \tag{8}$$

Ob reševanju sistema naletimo na 2 primera možnih rešitev - simetrične in asimetrične valovne funkcije. Za prve dobimo:

$$A = 0 \tag{9}$$
$$C = D \tag{10}$$
$$B = C\frac{k_0}{k_i}e^{-ak_0}\csc(ak_i) \tag{11}$$
$$\frac{k_0}{k_i} = \tan(ak_i) \tag{12}$$

Pri asimetričnih valovnih funkcijah so rešitve takšne:

$$B = 0 \tag{13}$$
$$C = -D \tag{14}$$
$$A = C\frac{k_0}{k_i}e^{-ak_0}\sec(ak_i) \tag{15}$$
$$\frac{k_0}{k_i} = \cot(ak_i) \tag{16}$$

Že od začetka se seveda zavedano, da sta k_0 in k_i oblike:

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \tag{17}$$
$$k_i = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n)}}{\hbar} \tag{18}$$

Za iskanje lastnih energij simetrilčnih valovnih funkcij tako rešujemo naslednjo transcendentno enačbo, pri tem pa ne bo nič narobe, če vse parametre nastavimo na 1 ($\hbar$, a in m):

$$\frac{\sqrt{8ma^2 - \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8ma^2} + V_0}}{\hbar n \pi} = \tan\left(\frac{n\pi}{2}\right) \tag{19}$$

Podobno je pri asimetričnih funkcijah, le da tam rešujemo naslednjo enačbo:

$$\frac{\sqrt{8ma^2 - \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8ma^2} + V_0}}{\hbar n \pi} = -\cot\left(\frac{n\pi}{2}\right) \tag{20}$$

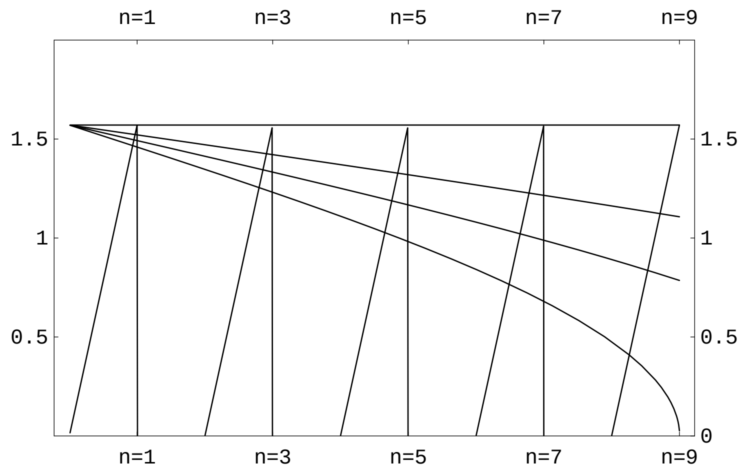
Numerično lahko torej izračunamo vrednosti lastnih energij.

3 Razvoj po lastnih funkcijah in časovni razvoj

3.1 Splošno

Zapis valovne funkcije po lastnih funkcijah:

$$\psi(x, 0) = \sum c_n \psi_n(x) \tag{21}$$



Slika 2: Reševanje transcendentne enačbe za simetrično valovno funkcijo. Periodična funkcija na grafu je arctan desne strani enačbe, ostale funkcijo pa predstavljajo *arctan* leve strani za različne potenciale - od spodaj navzgor si sledijo potenciali 100, 200, 500 in ∞.

Izračun koeficientov:

$$c_n = \int_{\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx \tag{22}$$

Časovni razvoj:

$$\psi(x,t) = \sum c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{23}$$

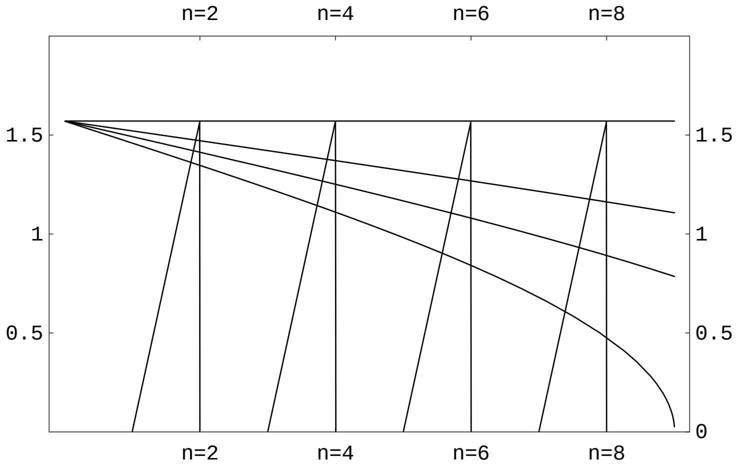
Skušpaj z rešitvami iz razdelka 2 smo sedaj opremljeni z orodjem in potrebščinami za reševanje naše konkretne naloge. Veselo na delo!

3.2 Razvoj valovne funkcije na konkretnem primeru

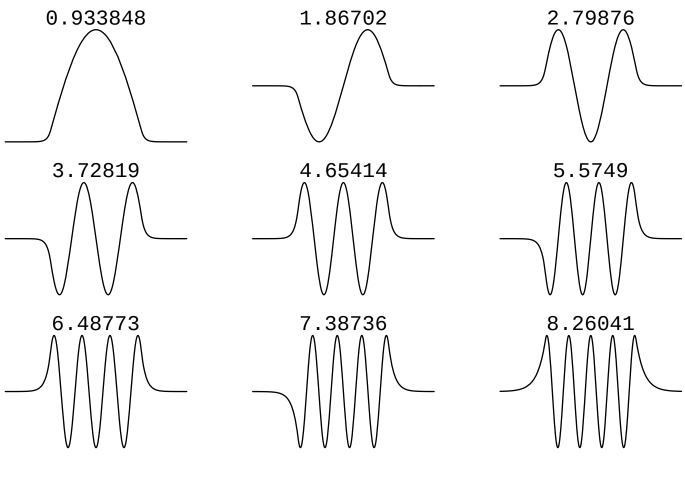
Časovni razvoj valovne funkcije sem si pogledal na podobnem primeru kot smo ga naredili za neskončno potencialno jamo. Valovno funkcijo sem sestavil iz simetrične in asimetrične lastne funkcije najnižjega reda. Pri tem sem obe lastni funkciji enako obtežil: $C_1 = C_2$.

$$\psi(x) = C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x) \tag{24}$$

Nadaljevanje dela je bilo bolj tehnične narave, rezultat pa je viden na pripeti animirani GIF datoteki.



Slika 3: Reševanje transcendentne enačbe za asimetrično valovno funkcijo. Periodična funkcija na grafu je arctan desne strani enačbe, ostale funkcijo pa predstavljajo *arctan* leve strani za različne potenciale - od spodaj navzgor si zopet sledijo potenciali 100, 200, 500 in ∞.



Slika 4: Valovne funkcije končne potencialne jame ($V_0 = 100$). n narašča od leve prodi desni in od vrha navzdol. Nad posamezno valovno funkcijo je izpisana vrednost lastne energije.