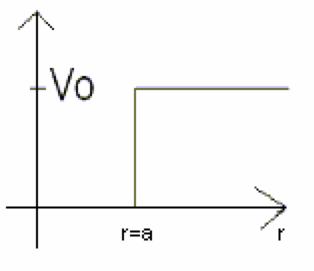
Vezana stanja v 3D

Miha Pelko

Naloga:

Za delec v tridemenzionalni krogelni potencialni jami z globino V_0 in polmerom a poišči pogoj za obstoj vezanega stanja.

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & za \;\; r \geq a \\ 0 & za \;\; r < a \end{cases}$$



1. Nastavek:

Za krogelne simetrične potenciale lahko pišemo valovno funkcijo kot

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \;\; , \tag{1.1}$$

kjer mora u zadoščati modificirani 1D Schroedingerjevi enačbi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} + V(r)u(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}u(r) = Eu(r) \tag{1.2}$$

z robnim pogojem u(0) = 0. Zakaj?

2. Nakaz upravičenosti robnega pogoja:

Za l = 0 (torej m= 0) integriramo obe strani Sroedingerjeve enačbe po majhni kroglici okrog izhodišča: lim($r_0 \rightarrow 0$).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(r)\Psi = E\Psi \quad \Big| \int_0^{r_0} d\vec{r} \tag{2.1}$$

Ker je $Y_{0,0}$ konstanta sledi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{r_0} \nabla^2\left(\frac{u(r)}{r}\right) r^2 dr = \int_0^{r_0} (E - V(r))u(r) r dr \; . \tag{2.2}$$

Če naprej u(r) zapišemo kot r^a dobimo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{r_0}\alpha(\alpha-1)r^{\alpha-1}dr=\int_0^{r_0}(E-V(r))r^{\alpha+1}dr\,, \tag{2.3}$$

Iz česar sledi, da mora veljati $a > 0$ (da se izognemo divergenci), kar nam potrjuje naš robni pogoj.

3. Iskanje pogoja za vezano stanje:

Sedaj se vprašamo pri kateri vrednosti l najprej pričakujemo vezano stanje.
Če zopet pogledamo enačbo za u (1.2), lahko vidimo, da se netipični člen z l-ji da pospraviti k potencialu. To poveča vrednost novega potenciala:

$$V_2(r)=V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\geq V(r)\,, \tag{3.1}$$

kjer enačaj velja pri l = 0. Kasneje bomo dokazali, da je energija osnovnega stanja najnižja pri najnižji vrednosti potenciala V_2 (ki je pri l = 0). Takrat je verjetnost da imamo vezano stanje seveda najvišja

Rešiti moramo torej enačbo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(r)+V(r)\Psi=E\Psi\,. \tag{3.2}$$

Pri pogoju u(0) = 0 ta enačba natančno določa lihim rešitvam potencialne jame, ki smo jih srečali pri prvi vaji v tem semestru (Končna potencialna jama I – Luka Snoj). Tam smo ugotovili, da mora za vezano stanje te enačbe veljati:

$$V_0>\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma} \tag{3.3}$$

4. Dokaz da je energija osnovnega stanja najnižja pri najnižji vrednosti potenciala :

Imamo dva potenciala $V_1(\vec{r})$ in $V_2(\vec{r})$ za katera za vsak r velja $V_1(\vec{r})\leq V_2(\vec{r})$.
Pokazati moramo, da iz tega sledi da je energija osnovnega stanja pri drugem potencialu ($E_2^{(0)}$) manjša od tiste pri prvem potencialu ($E_1^{(0)}$).

$$E_2^{(0)}=\left\langle\Psi_2^{(0)}\middle|H_2\middle|\Psi_2^{(0)}\right\rangle=^{(0)}_2=\left\langle\Psi_2^{(0)}\middle|H_2+V_2-V\middle|\Psi_2^{(0)}\right\rangle>\left\langle\Psi_2^{(0)}\middle|H_1\middle|\Psi_2^{(0)}\right\rangle$$

Če razvijemo osnovno lastno funkcijo za drugi potencial po lastnih funkcijah za prvi potencial,

$$\Psi_2^{(0)}=\sum_k c_k\Psi_1^{(k)}\,,$$

dobimo:

$$\left\langle \Psi_2^{(0)} \middle| H_1 \middle| \Psi_2^{(0)} \right\rangle = \left\langle \sum_k c_k \Psi_1^{(k)} \middle| H_1 \middle| \sum_k c_k \Psi_1^{(k)} \right\rangle = \sum_k \left| c_k \right|^2 E_1^{(k)} > \sum_k \left| c_k \right|^2 E_1^{(0)} = E_1^{(0)},$$

in torej $E_1^{(0)} < E_2^{(0)}$.