VEZANA STANJA V 3D

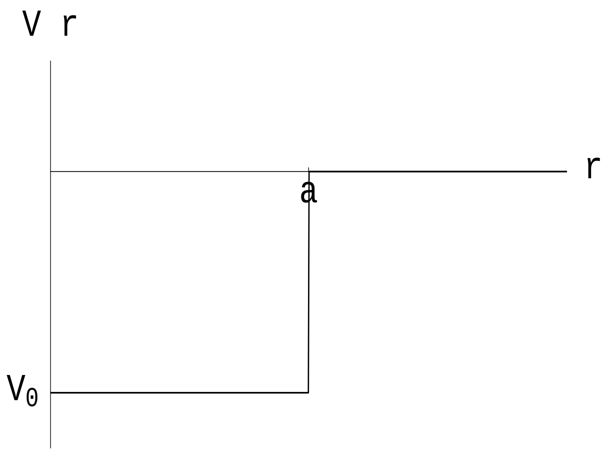
Cimprič Darjan

27. maj 2004

1 Naloga

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

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{za } r < a \\ 0 & \text{sicer} \end{cases}$$



Slika 1: Centralno simetričen potencial.

2 Rešitev

Za reševanje Schrödingerjeve lahko vzamemo nastavek, kjer ločimo odvisnost valovne funkcije na radialni del $R_{nl}(r)$ in kotni del $Y_{lm}(\theta, \phi)$:

$$\Psi(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

Tako dobimo enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r})R_{nl}(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}R_{nl}(r)+V(r)R_{nl}(r)=ER_{nl}(r) \quad ,$$

ki je odvisna le od r. R_{nl} zapišimo drugače

$$R_{nl}(r)=\frac{u_{nl}(r)}{r}$$

in vstavimo v zgornjo enačbo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u_{nl}(r)}{\partial r^2}+\Big(V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\Big)u_{nl}(r)=Eu_{nl}(r)$$

Tako mora u_{nl} zadoščati tej enačbi in robnemu pogoju $u_{nl}(r=0)=0$. Robni pogoj mora veljati, da se izognemo divergenci, ko gre $r \to 0$. To pokažemo z integriranjem Schrödingerjeve enačbe za $l=0$ (torej tudi $m=0$), po majhni kroglici okoli izhodišča.

2.1 Robni pogoj

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{r_o}\nabla^2(\frac{u(r)}{r}Y_{00})r^2dr=\int_0^{r_o}\Big(E-V(r)\Big)u(r)Y_{00}rdr$$

Vemo, da je Y_{00} konstanta, $u(r)$ pa zapišemo kot r^α:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^{r_o}\alpha(\alpha-1)r^{\alpha-1}dr=\int_0^{r_o}\Big(E-V(r)\Big)r^{\alpha+1}dr$$

Sledi torej, da mora biti $\alpha > 0$, da se izognemo divergenci. To pa potrjuje robni pogoj $u(r=0)=0$.

2.2 Pogoj za obstoj vezanih stanj

Za r manjši od širine potencialne jame a lahko zapišemo enačbo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u_{nl}}{\partial r^2} + \Big(-V_0 + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_{V_c}\Big)u_{nl} = Eu_{nl}\ ,\ r < a$$

Če obstaja vezano stanje, bo najverjetneje obstajalo v primeru, ko je $l = 0$, saj je takrat potencial najnižji ($V_c = 0$), s tem pa je tudi energija najnižja. Pokažimo:

$$H_0|\Psi >= E_0|\Psi > \text{ pri } l = 0$$

$$(H_0 + V_c)|\Psi_c >= E_c|\Psi_c > \text{ za } l > 0$$

Torej velja:

$$E_c =< \Psi_c|H_c|\Psi_c >=< \Psi_c|H_0 + V_c|\Psi_c >$$

in

$$< \Psi_c|V_c|\Psi_c >= \int \Psi_c^* V_c \Psi_c r^2 dr \ > 0$$

Sledi:

$$E_c \ > \ < \Psi_c|H_0|\Psi_c >= \sum_n \sum_m c_n^* c_m < m|H_0|n >= \sum_n c_n^* c_n E_n$$

Ker pa velja $E_n \geq E_0$ zapišemo:

$$E_c \ > \ E_0 \sum_n c_n^* c_n = E_0$$

Vezano stanje imamo pri E_0, torej $l = 0$. V nadaljevanju gledamo samo vezana stanja:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u_{nl}}{\partial r^2} + \Big(-V_0\Big)u_{nl} = Eu_{nl}$$

Rešitve te enačbe pri danem potencialu so:

1. $u_{nl}^{I}(r) = A \sin kr + B \cos kr$
2. $u_{nl}^{II}(r) = C\mathrm{e}^{-k'r}$

in robni pogoji:

$$u_{nl}^{I}(r=a)=u_{nl}^{II}(r=a)$$
$$u_{nl}'^{\,I}(r=a)=u_{nl}'^{\,II}(r=a)$$
$$u_{nl}^{I}(r=0)=0$$

Enačbe smo srečali pri končni potencialni jami. Vidimo, da zaradi zadnjega robnega pogoja izključimo še sode rešitve (torej $C=0$). Zapišimo še vrednosti k in k':

$$k=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$
$$k'=\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

Torej je pogoj za vezano stanje enak kot pri nalogi za končno potencialno jamo:

$$V_0 \;>\; \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

2.3 Primer $l \neq 0$

Če pa $l \neq 0$ sledi iz enačbe

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)R_{nl}(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}R_{nl}(r)-V_0R_{nl}(r)=ER_{nl}(r)\ ;\ r<a$$

da je rešitev linearna kombinacija sfernih Besslovih in Neumannovih funkcij ter sfernih Hanklovih funkcij.

$$R_{nl}^{I}=Aj_{nl}(kr)+Bn_{nl}(kr)$$
$$R_{nl}^{II}=Ch_{nl}^{(1)}(iqr)+Dh_{nl}^{(2)}(iqr)$$

kjer:

$$k=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$
$$k'=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\ ,\ \text{ker } E<0 \Rightarrow k'=iq$$
$$q=\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

In še robni pogoji:

$$R_{nl}^{I}(r=a) = R_{nl}^{II}(r=a)$$

$$R'^{\,I}_{nl}(r=a) = R'^{\,II}_{nl}(r=a)$$

Ker pa mora veljati, da je rešitev ne divergira, ko $r \to 0$ ali $r \to \infty$, sta konstanti B in D enaki 0. S pomočjo robnih pogojev pa dobimo enačbo oblike:

$$\frac{j_l(ka)}{k\ j_l'(ka)} = \frac{h_l(iqa)}{iq\ h_l'(iqa)}$$