Kvantna mehanika - 1.ura vaj, 10.3.2004
Neskončna potencialna jama

21. marec 2004

1 Uvod

Zanimamo se za obnašanje delca v neskončni potencialni jami. Takšen potencial je zgolj idealizacija, saj so potenciali lahko v resnici lahko le zelo globoki, ne pa ravno neskončni. Ta privzetek ima za posledico to, da je odvod valovne funkcije na območju skoka nezvezen, kar je v nasprotju z resničnimi lastnostmi. Včasih je taka idealizacija zaradi enostavnejšega računa upravičena.
Obravnavamo le stanja, kjer je energija manjša od potenciala, torej vezano stanje.
Območje razdelim na 1. del za x<0 in 2. del za x>0.
Za valovno funkcijo je splošen nastavek:

$$1.)\psi = Ae^{kx} + Be^{-kx}$$

in

$$2.)\psi = Ce^{(kx)} + De^{(-kx)},$$

vendar pa iz pogoja, da mora biti valovna funkcija taka, da se da normirati, takoj sledi, da je B=C=0, ostali konstanti in k pa določimo iz zahtev:

- valovna funkcija mora biti zvezna:

  Problem se pojavlja le v točki 0:

  $$\psi(0_-) = A = \psi(0_+) = C \Rightarrow A = C$$

- normalizacija: Verjetnost, da se delec nahaja nekje v celem prostoru, mora biti enaka 1, zato mora biti izpolnjen pogoj:

  $$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2\int_0^{\infty} A^2 e^{-2kx} dx = 1,$$

  torej je:

  $$A = \sqrt{k}, \tag{1}$$

ter končno:

$$\psi = \sqrt{k} e^{-k|x|} \tag{2}$$

- Skok odvoda
  Valovna funkcija mora zadoščati stacionarni Schroedingerjevi enačbi:

  $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi, \tag{3}$$

  kjer je v našem primeru potencial

  $$V(x) = -\lambda\delta(x).$$

  (3) se tako prevede na obliko:

  $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \lambda\delta(x)\psi = E\psi, | \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx$$

  od koder z integracijo po majhnem intervalu okoli 0 takoj sledi pogoj za skok odvoda:

  $$\frac{\partial\psi(0_+)}{\partial x} - \frac{\partial\psi(0_-)}{\partial x} = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0), \tag{4}$$

  po drugi strani pa je:

  $$\frac{\partial\psi(0_+)}{\partial x} - \frac{\partial\psi(0_-)}{\partial x} = -2Ak,$$

  torej:

  $$k = \frac{\lambda m}{\hbar^2}. \tag{5}$$

2 Energija vezanega stanja

Energijo dobimo iz Schroedingerjeve enačbe (3), ter upoštevanjem izpeljanega pogoja za skok odvoda v 0; (3) se prevede na obliko:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi,$$

pri čemer skok potenciala upoštevamo že v val. funkciji.
Torej je energija vezanega stanja po (5):

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\lambda^2 m}{2\hbar} \tag{6}$$

3 Preverjanje Heisenbergovega načela nedoločenosti

Načelo nedoločenosti se glasi:

$$\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{7}$$

Nedoločenost koordinate δx je predstavljena kot standardni odklon σ, kot smo ga definirali pri verjetnostnem računu:

$$\delta x = \sqrt{< x^2 > - < x >^2}. \tag{8}$$

Ta definicija je posem v skladu s tem, da je $|\psi(x)|^2$ v resnici verjetnostna gostota, ψ pa največja informacija, ki jo o delcu lahko podamo. Nasprotno v našo intuitivno predstavo torej ne moremo podati, kje se delec nahaja, dobimo lahko le verjetnost, da je v nekem intervalu, kar pa pri operiranju z matematičnimi orodji v bistvu ni moteče.
Izračunajmo najprej $< x >^2$:
velja:

$$< x > = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 x dx = 0,$$

saj integriramo liho funkcijo. Za $< x^2 >$ pa je:

$$< x^2 > = 2 \int_0^{\infty} |\psi(x)|^2 x^2 dx = 2 \int_0^{\infty} k e^{-2kx} x^2 dx,$$

kar lahko hitro prevedem na Γ funkcijo[1] z uvedbo nove spremenljivke:

- u=2kx
- du=2kdx.

Tako je:

$$< x^2 > = (\frac{1}{2k})^2 \int_0^{\infty} u^2 e^{-u} du = {}^2 = \frac{1}{2k^2}.$$

Za nedoločenost koordinate po (8) tako velja:

$$\delta x = \frac{1}{\sqrt{2}k}. \tag{9}$$

Podobno se lotimo tudi nedoločenosti gibalne količine:

$$\delta p = \sqrt{< \hat{p}^2 > - < \hat{p} >^2}, \tag{10}$$

[1]definicija je:

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$$

[2]če je n celo število, velja: $\Gamma(n) = (n-1)!$, torej v našem primeru $\Gamma(3) = (2)!$.

kjer je $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.
Izračunajmo $< \hat{p} >$; formalno je:

$$< \hat{p} >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})\psi(x)dx = 0,$$

ker imamo spet integral lihe funkcije.
Za $< \hat{p^2} >$ pa velja:

$$< \hat{p^2} >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})^2\psi(x)dx.$$

Posebej izračunamo drugi odvod valovne funkcije:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\sqrt{k}e^{-k|x|}) = \sqrt{k}\frac{\partial}{\partial x}(ke^{-k|x|}sign(x)) = {}^3 = \sqrt{k}(k^2e^{-k|x|}sign^2(x) - k^2e^{-k|x|}2\delta(x)),$$

pri čemer upoštevam, da je velikost skoka funkcije sign enaka 2.
Tako je:

$$< \hat{p^2} >= 2\int_0^{\infty} k^3\hbar^2 e^{-2k|x|}dx + 2k^2\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2k|x|}\delta(x)dx = k^2\hbar^2.$$

Tako po 10 velja:

$$\delta p = \hbar k.$$

Produkt obeh nedoločenosti je:

$$< \delta x, \delta p >= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Omenimo še, da se da nedoločenost kvadrata gibalne količine izračunati na nekoliko krajši način in zveze za kinetično energijo:

$$< T >= \frac{< p^2 >}{2m} = H - V \Rightarrow < p^2 >= 2m < (H - V) >,$$

$$< V >= -\int_{-\infty}^{\infty} \lambda\delta(x)(\sqrt{k}e^{-k|x|})^2 dx = -\lambda k,$$

torej dobimo z upoštevanjem vrednosti energije (6) in zveze (5) med λ in k:

$$< p^2 > = 2m(-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{m} = \hbar^2 k^2,$$

kar je enak rezultat, kot smo ga pridelali pri prejšnjem izračunu.

[3] sign(x)=$\{ \begin{array}{ll} -1, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{array}$