

Vaje iz Kvantne mehanike 1

Delec v polneskončni potencialni jami

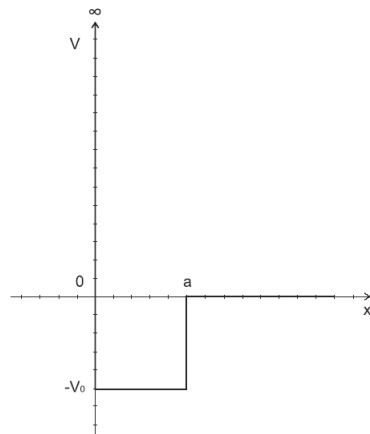
Katarina Mramor

6. marec 2006

Poišči transcendentno enačbo za vezana lastna stanja delca v polneskončni potencialni jami oblike

$$V(x) = \begin{cases} \infty & ; \quad x < 0 \\ -V_0 & ; \quad 0 < x < a \\ 0 & ; \quad a < x \end{cases} \quad (1)$$

Kako je število vezanih stanj odvisno od parametrov sistema?



Rešujemo *Schrödingerjevo* enačbo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V\Psi(x) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \text{ali} \quad (2)$$

$$H\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (3)$$

Valovno funkcijo zapišemo kot:

1. $\psi_1(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad ; \quad 0 < x < a,$

2. $\psi_2(x) = C \exp(-\kappa x) \quad ; \quad x > a.$

Robni pogoji:

- $\psi(0) = 0$

- $\psi_1(a) = \psi_2(a)$
- $\frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x}|_{x=a} = \frac{\partial\psi_2(x)}{\partial x}|_{x=a}$.

Tu je $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E + V_0)}$ in $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(-E)}$.

V prvo enačbo vstavimo prvi robni pogoj. Dobimo:

$$\psi(0) = A \cos(0) + B \sin(0) = 0 \Rightarrow A = 0.$$

Drugi in tretji robni pogoj nam dasta:

$$\psi_1(a) = B \sin(ka) = C \exp(-\kappa a) \quad (4)$$

$$\frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x}|_{x=a} = kB \cos(ka) = -\kappa C \exp(-\kappa a) = \frac{\partial\psi_2(x)}{\partial x}|_{x=a}. \quad (5)$$

Delimo enačbo 5 z enačbo 4 in dobimo:

$$\begin{aligned} -\kappa &= k \operatorname{ctg}(ka). \\ -\frac{\kappa}{k} &= \operatorname{ctg}(ka) \end{aligned} \quad (6)$$

Naj bo

$$\begin{aligned} z_0 &= \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0} \quad \text{in} \\ z_i &= k \cdot a = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)}. \end{aligned}$$

Velja:

$$\begin{aligned} z_i^2 &= \frac{a^2}{\hbar^2}2mE + \frac{a^2}{\hbar^2}2mV_0 = -a^2\kappa^2 + z_0^2. \\ a\kappa &= \sqrt{z_0^2 - z_i^2} \end{aligned} \quad (7)$$

Enačbo 7 vstavimo v enačbo 6 in dobimo:

$$-\frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{z_0^2 - z_i^2}{z_i^2}} = \operatorname{ctg}(z_i).$$

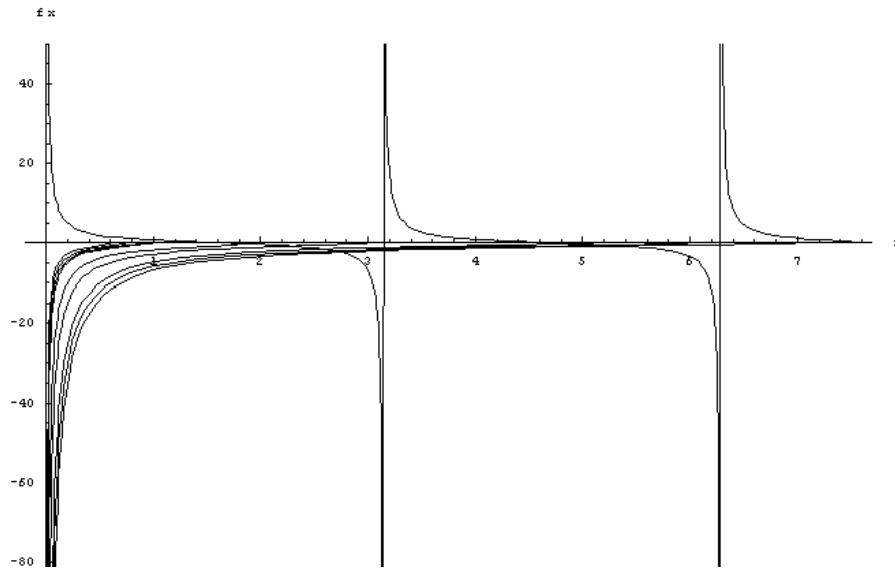
Poglejmo še limitne primere:

- $k_0 < \frac{\pi}{2} \Rightarrow$ ni vezanih stanj. Če izrazimo še V_0 :

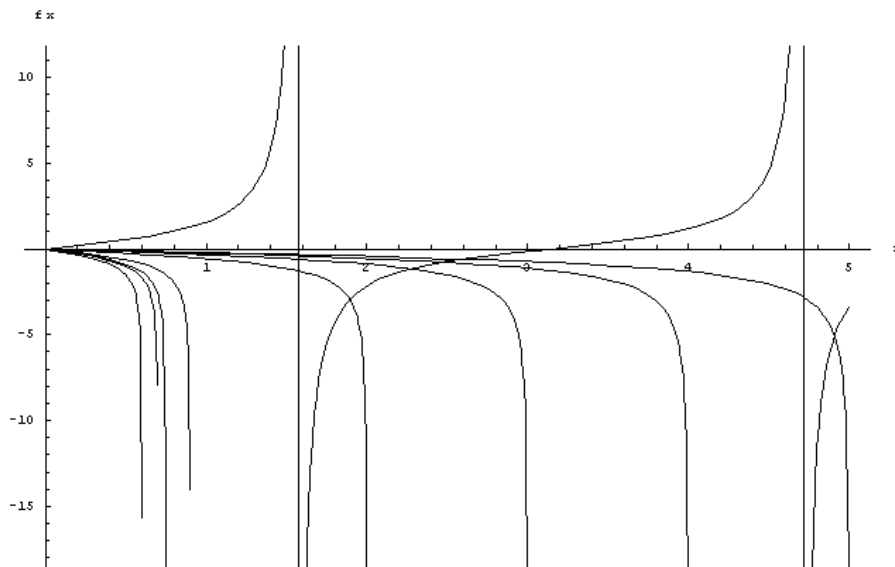
$$\begin{aligned} z_0 &= \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0} \\ V_0 &= \frac{k_0^2 \hbar^2}{2m} \\ V_0 &> \frac{(\frac{\pi}{2})^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \end{aligned}$$

- $k_0 \rightarrow \infty \Rightarrow k_i \rightarrow \pi$

$$E_i = \frac{z_i^2 \hbar^2}{2ma^2} + V_0$$



Slika 1: Grafičen prikaz rešitev: $-\frac{\kappa}{k} = \text{ctg}(k)$. Presečišča $\text{ctg}(k)$ z funkcijo $-\frac{\kappa}{k}$ predstavljajo energijo. Pod $\frac{\pi}{2}$ vezanih stanj ni, zato tudi ni presečišč.



Slika 2: Grafičen prikaz rešitev: $-\frac{k}{\kappa} = \tan(k)$.