Potencialna jama s skokom

Marija Vidmar

23.2.2005

Naloga: Poišči transcedentni enačbi,ki določata lastna stanja delca v neskončni potencialni jami širine $2a$, katere potencial zapišemo kot

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; \quad 0 < |x| < b, \\ V_0 & ; \quad b < |x| < a, \\ \infty & ; \quad |x| > a \end{cases}$$

Velja $0 < b < a$. Obravnavaj rešitve v primeru, ko je lastna energija $E \ll V_0$ in $E \gg V_0$

Rešitev: Rešujemo stacionarno Schroedingerjevo enačbo

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

Koordinatno izhodišče postavimo tako, da je jama simetrična glede na izhodišče. Ker je na robovih potencial neskončen, imamo samo vezana stanja. Ločimo dva primera: $E < V_0$ in $E > V_0$.

1 $E > V_0$

1.1 Sode rešitve

Valovna funkcija ima obliko

$$\begin{aligned} \psi_1(x) = & \quad A\cos(k_1 x) & ; \quad 0 < x < b \\ \psi_2(x) = & \quad B\sin(k_2 x) + C\cos(k_2 x) & ; \quad b < x < a, \end{aligned} \tag{1}$$

in velja

$$k_1^2 = \frac{E}{\hbar^2}2m \quad \text{in} \quad k_2^2 = \frac{E - V_0}{\hbar^2}2m \quad \Rightarrow \frac{k_2}{k_1} = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \tag{2}$$

Imamo tri koeficiente: A, B in C in tri robne pogoje: v točki $x = b$ mora biti valovna funkcija zvezna in zvezno odvedljiva, v točki

$x = a$ pa mora imeti vrednost nič, saj je potencial tam neskončen. Matematično to napišemo:

$$\begin{aligned}\psi_1(b) &= \psi_2(b) \\ \frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x}|_{x=b} &= \frac{\partial\psi_2(x)}{\partial x}|_{x=b} \\ \psi_2(a) &= 0\end{aligned} \tag{3}$$

Če zdaj vstavimo našo valovno funkcijo (1) v zgornje robne pogoje, dobimo:

$$\begin{aligned}A\cos(k_1 b) &= B\sin(k_2 b) + C\cos(k_2 b) \\ -Ak_1\sin(k_1 b) &= Bk_2\cos(k_2 b) - Ck_2\sin(k_2 b) \\ 0 &= B\sin(k_2 a) + C\cos(k_2 a)\end{aligned}$$

Iz zadnje enačbe sledi $C = -B\tan(k_2 a)$. To vstavimo v prvi dve enačbi in prvo pomnožimo s $k_1\sin(k_1 b)$, drugo pa s $\cos(k_1 b)$ ter seštejemo. Tako se znebimo koeficienta A. Seštevek ima obliko:

$$\begin{aligned}&B[k_1\sin(k_1 b)\{\sin(k_2 b) - \tan(k_2 a)\cos(k_2 b)\} \\ &+ k_2\cos(k_1 b)\{\cos(k_2 b) + \tan(k_2 a)\sin(k_2 b)\}] = 0\end{aligned} \tag{4}$$

Ker $B \neq 0$ (to bi pomenilo, da na območju $b < x < a$ ni ničesar, kajti B in C sta povezana le preko konstante - to ni fizikalno smiselno), je torej oglati oklepaj enak nič. Enačbo predelamo v preglednejšo obliko tako, da delimo s $\cos(k_1 b)$ in $\cos(k_2 b)$.

$$k_1\tan(k_1 b)[\tan(k_2 b) - \tan(k_2 a)] + k_2[1 + \tan(k_2 a)\tan(k_2 b)] = 0$$

Upoštevamo še, da je $\tan(\alpha - \beta) = (\tan\alpha - \tan\beta)/(1 + \tan\alpha\tan\beta)$ in dobimo

$$\tan(k_1 b)\tan(k_2(b - a)) = -\frac{k_2}{k_1} \tag{5}$$

1.2 Lihe rešitve

Pri lihih rešitvah je postopek podoben, kot pri sodih, le da ima valovna funkcija malo drugačno obliko.

$$\begin{aligned}\psi_1(x) = &\quad A\sin(k_1 x) &&; \quad 0 < x < b \\ \psi_2(x) = &\quad B\sin(k_2 x) + C\cos(k_2 x) &&; \quad b < x < a,\end{aligned} \tag{6}$$

Tudi v tem primeru veljajo zveze (2) in robni pogoji (3). Z upoštevanjem robnih pogojev dobimo:

$$\begin{aligned}A\sin(k_1 b) &= B\sin(k_2 b) + C\cos(k_2 b) \\ Ak_1\cos(k_1 b) &= Bk_2\cos(k_2 b) - Ck_2\sin(k_2 b) \\ 0 &= B\sin(k_2 a) + C\cos(k_2 a)\end{aligned}$$

Nadaljujemo tako, da prvo enačbo pomnožimo s $k_1 \cos(k_1 b)$, drugo pa s $\sin(k_1 b)$ in odštejemo. Tako dobimo:

$$\begin{aligned} B[k_1 \cos(k_1 b)\{\sin(k_2 b) - \tan(k_2 a)\cos(k_2 b)\} \\ - k_2 \sin(k_1 b)\{\cos(k_2 b) + \tan(k_2 a)\sin(k_2 b)\}] = 0 \end{aligned}$$

Vidimo, da je enačba podobna enačbi (4), spremenil se je preznak med členoma in položaj $\cos(k_1 b)$ oz. $\sin(k_1 b)$. Iz enakega razloga kot prej je $B \neq 0$. Nadaljujemo povsem analogno kot v primeru sodih rešitev in dobimo:

$$\frac{k_1}{k_2} \tan(k_2(a-b)) + \tan(k_1 b) = 0 \tag{7}$$

1.3 Limitni primer: $E \gg V_0$

Obravnavali bomo primer lihih rešitev, za sode je analogno. Enačbo (7) prepišemo v obliko:

$$\sin(k_2(a-b))\cos(k_1 b) - \frac{k_1}{k_2}\sin(k_1 b)\cos(k_2(a-b)) = 0$$

Označimo $E/V_0 = x$ in faktorizirajmo zgornji izraz:

$$\begin{aligned} \sqrt{1-x}\ \frac{1}{2}\ [\ \sin(k_1 b + k_2(a-b)) + \sin(k_1 b - k_2(a-b))] = \\ -\frac{1}{2}\ [\ \sin(k_2(a-b) + k_1 b) + \sin(k_2(a-b) - k_1 b)] \end{aligned}$$

Združimo člene v argumentih, ki vsebujejo a in b:

$$\begin{aligned} \sqrt{1-x}\ [\ \sin(b(k_1-k_2) + k_2 a) + \sin(b(k_1+k_2) - k_2 a)] = \\ -[\ \sin(b(k_1-k_2) + k_2 a) + \sin(k_2 a - b(k_1 - k_2))] \end{aligned}$$

Vidimo, da nastopata enaka člena na levi in desni. Člen s $k_1 - k_2$ bo majhen, saj smo v limiti $E \gg V_0$. Člen s $k_1 + k_2$ pa bo ostal velik. Izpostavimo isti člen:

$$\sin(b(k_1-k_2) + k_2 a) = -\frac{\sqrt{1-x}-1}{\sqrt{1-x}+1}\sin(b(k_1+k_2) - k_2 a)$$

Poglejmo argument sinusa na levi strani enačaja. Pričakujemo, da bodo rešitev le malo drugačna kot rešitev za neskončno potencialno jamo s širino $2a$. Vpliv potenciala je zelo majhen. Zato iz argumenta izpostavimo $k_1 a$:

$$k_1 a\left(\frac{b(k_1-k_2)}{k_1}+\frac{k_2}{k_1}\right)\to k_1 a\left(\frac{b}{a}(1-\sqrt{1-x})+\sqrt{1-x}\right)$$

Zdaj lahko razvijemo koren, saj je $x \ll 1$:

$$k_1 a\left(\frac{bx}{2a}-\frac{x}{2}+1\right)=k_1 a\left(1-x\frac{a-b}{2a}\right)$$

Enak razmislek sledi za argument sinusa na desni strani enačaja. Po razvoju dobimo:

$$k_1\left(2b-a)+\frac{x}{2}(a-b)\right)$$

Na koncu razvijemo še ulomek s koreni:

$$\frac{\sqrt{1-x}-1}{\sqrt{1-x}+1}\sim\frac{1-\frac{x}{2}-1}{1-\frac{x}{2}+1}\sim-\frac{x}{4}$$

Če zložimo vse skupaj:

$$\sin\left(k_1 a-\frac{x}{2}k_1(a-b)\right)=-\frac{x}{4}\sin\left(k_1(2b-a)+\frac{k_1 x}{2}(a-b)\right)$$

Zdaj se spomnimo, da je $x = V_0/E \propto V_0/k_1^2$. Desna stran enačaja pada s kvadratom, drugi del argumenta na levi strani pa linearno($k_1 x \to V_0/k_1$). Ko $k_1 \to \infty$, torej velja:

$$\sin\left(k_1 a-\frac{x}{2}k_1(a-b)\right)=0\to k_1 a=n\Pi+\frac{V_0\hbar^2}{4mk_1}(a-b)$$

Enačbo rešujemo iterativno. Za prvi k_1 na desni vstavimo kar $n\Pi$.

2 $E < V_0$

2.1 Sode rešitve

Valovne funkcije imajo obliko:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A\cos(kx) &&;\quad 0<x<b\\ \psi_2(x) &= B\sinh(\kappa x)+C\cosh(\kappa x) &&;\quad b<x<a,\end{aligned}$$

in velja

$$k^2=\frac{E}{\hbar^2}2m \quad \text{in} \quad \kappa^2=\frac{V_0-E}{\hbar^2}2m \quad \Rightarrow \frac{\kappa}{k}=\sqrt{\frac{V_0-E}{E}} \tag{8}$$

Tako kot v primeru $E > V_0$ upoštevamo robne pogoje (3), malo potelovadimo in dobimo:

$$\tan(kb)\tanh(\kappa(a-b)) = \frac{\kappa}{k}$$

Vidimo, da je enačba podobna enačbi (5), le namesto navadnega tangensa nam nastopa hiperbolični.

2.2 Lihe rešitve

Valovne funkcije:

$$\begin{array}{rcll} \psi_1(x) = & A\sin(kx) & ; & 0 < x < b \\ \psi_2(x) = & B\sinh(\kappa x) + C\cosh(\kappa x) & ; & b < x < a, \end{array}$$

Upoštevamo robne pogoje (3) in enakosti (8), pa dobimo:

$$\tanh(\kappa(a-b)) = -\frac{\kappa}{k}\tan(kb) \qquad (9)$$

2.3 Limitni primer: $E \ll V_0$

Obravnavajmo primer za lihe rešitve. Ker je potencial V_0 zelo velik, je tudi κ zelo velik, to pa pomeni, da je argument funkcije $\tanh(\kappa(a-b))$ zelo velik. Torej lahko ta $\tanh(\ldots)$ nadomestimo z 1. Tako iz enačbe (9) dobimo enačbo:

$$\sin(kb) = -\frac{k}{\kappa}\cos(kb) \rightarrow kb = n\Pi - arcsin\left(\frac{k}{\kappa}\cos(kb)\right)$$

Vstavimo še k/κ in se spomnimo, kaj je prvi približek za k:

$$\frac{k}{\kappa} = \left(\frac{V_0}{E} - 1\right)^{-\frac{1}{2}} \qquad kb \sim n\pi$$

Ko še razvijemo arcsin(...) do linarnega člena in uporabimo prvi približek za k v argumentu kosinusa:

$$kb = n\Pi - (-1)^n\left(\frac{V_0\hbar^2}{2m(\frac{n\Pi}{b})^2} - 1\right)^{-\frac{1}{2}}$$

Tudi to enačbo rešujemo iterativno.