Delec v dvojni potencialni jami

Matjaž Gregorič

13. junij 2005

Naloga

Razišči spekter delca v dvojni potencialni jami, kjer je potencial enak

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

Obravnavaj le primer, ko je energija lastnega stanja veliko manjša od V_0. Če delec postavimo v levo ali desno stran jame v stanje z neko pričakovano vrednostjo energije, po kolikšnem času se bo z največjo verjetnostjo znašel na nasprotni strani?

Rešitev

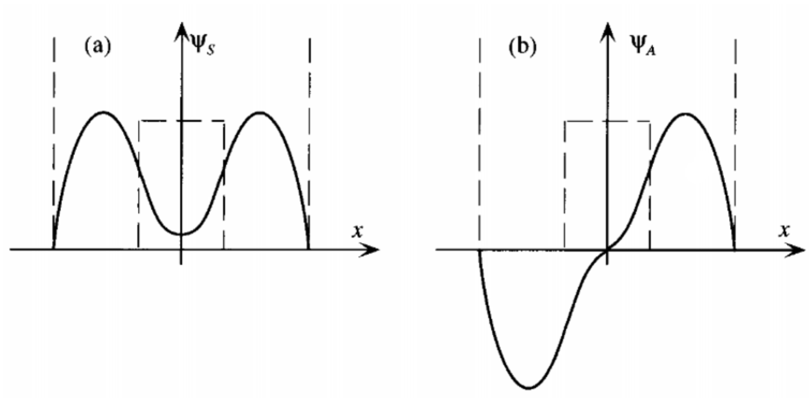
Omejimo se na primer, ko je energija lastnega stanja E manjša od V_0. Vemo, da so v tem primeru rešitve Schrödingerjeve enačbe v obmučju $|x| < b$ eksponentne funkcije, v območju $b < |x| < a$ so rešitve sinusi in kosinusi, v območju $|x| > a$ pa mora biti valovna funkcija enaka 0. Ker je potencial simetričen $V(x) = V(-x)$, lahko rešitve razdelimo na simetrične in antisimetrične. Če upoštevamo še, da mora imeti valovna funkcija pri $x = \pm a$ vrednost 0, lahko zapišemo rešitvi

$$\psi_S(x) = \begin{cases} A \sin k(a+x) & ; \quad -a < x < -b \\ B \cosh Kx & ; \quad -b < x < b \\ A \sin k(a-x) & ; \quad b < x < a \end{cases} ,$$

$$\psi_A(x) = \begin{cases} -A \sin k(a+x) & ; \quad -a < x < -b \\ B \sinh Kx & ; \quad -b < x < b \\ A \sin k(a-x) & ; \quad b < x < a \end{cases} ,$$

kjer sta $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ in $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

Rešitvi izgledata približno takole:



V točki $x = b$ mora biti valovna funkcija zvezna, prav tako pa tudi njen odvod. Za simetrično rešitev to pomeni

$$\begin{aligned} A \sin k(a-b) &= B \cosh Kb \qquad \text{(zveznost funkcije)}, \\ -kA \cos k(a-b) &= KB \sinh Kb \quad \text{(zveznost odvoda)}. \end{aligned}$$

Ko enačbi delimo eno z drugo pridemo do pogoja

$$\tan k(a-b) = -\frac{k}{K} \coth Kb.$$

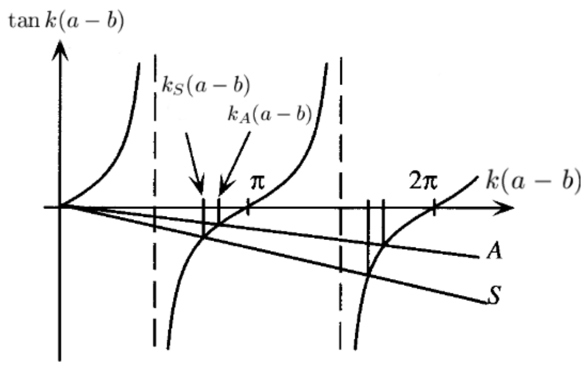
Podobno dobimo za antisimetrično rešitev pogoj

$$\tan k(a-b) = -\frac{k}{K} \tanh Kb.$$

Po predpostavki je energija lastnega stanja mnogo manjša od V_0, kar pomeni, da je $K \sim \sqrt{2mV_0}/\hbar \gg k$. Če predpostavimo še, da je potencialna pregrada dovolj široka, da je $2bK \gg 1$, lahko $\coth Kb$ aproksimiramo z $1 + 2\mathrm{e}^{-2bK}$, $\tanh Kb$ pa z $1 - 2\mathrm{e}^{-2bK}$. Dobimo pogoj

$$\tan k(a-b) = -\frac{k}{K} \left(1 \pm 2\mathrm{e}^{-2bK}\right).$$

Rešitve poiščemo grafično. Ker smo predpostavili, da je K približno konstanten, lahko kvantizirane rešitve za k dobimo kot abscisne vrednosti presečišč premic $y = -\varepsilon_S k(a-b)$ ter $y = -\varepsilon_A k(a-b)$ s funkcijo $\tan k(a-b)$.



Konstanti ε_S in ε_A sta

$$\varepsilon_S = \tfrac{1}{K(a-b)}\left(1 + 2\mathrm{e}^{-2bK}\right), \qquad \varepsilon_A = \tfrac{1}{K(a-b)}\left(1 - 2\mathrm{e}^{-2bK}\right) \ .$$

Ker je $Kb \gg 1$, sta ε_S in $\varepsilon_A \ll 1$. Rešitvi k_S in k_A ustrezata lastnima funkcijama ψ_S in ψ_A z najmanjšima energijama. Iz grafa vidimo, da sta njuni vrednosti nekoliko manjši od $\frac{\pi}{(a-b)}$, kar je rešitev za k v primeru ene same neskončne potencialne jame širine $(a-b)$. Vidimo tudi, da je k_S za odtenek manjši od k_A, kar pomeni, da je energija osnovnega simetričnega stanja nekoliko nižja od energije osnovnega antisimetričnega stanja, $E_S < E_A$ (to velja tudi za vsa višja lastna stanja).

$$E_S = \frac{\hbar k_S^2}{2m}, \quad E_A = \frac{\hbar k_A^2}{2m}$$

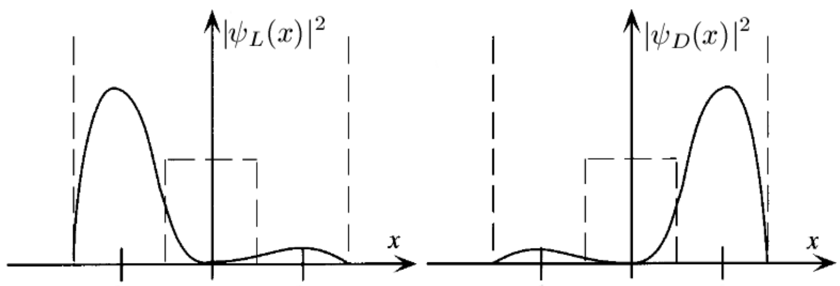
Konstanti ε_S in ε_A sta zelo majhni, zato sta vrednosti $k_S(a-b)$ in $k_A(a-b)$ precej blizu π, v bližini te točke pa lahko $\tan k(a-b)$ aproksimiramo kar s premico $y = k(a-b) - \pi$. Tako dobimo ocene za obe vrednosti k:

$$k_S \approx \frac{\pi}{(1+\varepsilon_S)(a-b)}, \quad k_A \approx \frac{\pi}{(1+\varepsilon_A)(a-b)}$$

Ker sta valovni funkciji ψ_S in ψ_A rešitvi Schrodingerjeve enačbe, so rešitve tudi njune linearne kombinacije. Posebej zanimivi sta linearni kombinaciji

$$\psi_L = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S - \psi_A) \qquad \text{in} \qquad \psi_D = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S + \psi_A),$$

ki predstavljata rešitvi, ko je delec z zelo veliko verjetnostjo na levi oziroma desni strani.



Naj bo delec ob času $t = 0$ v stanju z valovno funkcijo ψ_D, kar klasično pomeni, da se nahaja v desni jami. Oglejmo si časovni razvoj valovne funkcije

$$
\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_S(x)\mathrm{e}^{-iE_S t/\hbar} + \psi_A(x)\mathrm{e}^{-iE_A t/\hbar}\right) \\
&= \frac{\mathrm{e}^{-iE_S t/\hbar}}{\sqrt{2}}\left(\psi_S(x) + \psi_A(x)\mathrm{e}^{-i\omega t}\right),
\end{aligned}
$$

kjer je $\omega = (E_A - E_S)/\hbar$.

Ob času $t = \frac{\pi}{\omega}$ je funkcija do faznega faktorja sorazmerna s ψ_L, takrat je torej delec z največjo verjetnostjo v levi jami. Ob času $t = \frac{2\pi}{\omega}$ pa je valovna funkcija spet enaka začetni. Dobimo nekakšno utripanje, delec periodično skače iz desne v levo jamo in nazaj.

Če je delec ob $t = 0$ na desni strani, se na nasprotni strani z največjo verjetnostjo pojavi ob času $t = \frac{\pi}{\omega}$. Izračunajmo

$$
\begin{aligned}
\omega &= \frac{1}{\hbar}(E_A - E_S) \\
&= \frac{\hbar}{2m}(k_A^2 - k_S^2) \\
&\approx \frac{\hbar\pi^2}{2m(a-b)^2}\left(\frac{1}{(1+\varepsilon_A)^2} - \frac{1}{(1+\varepsilon_S)^2}\right) \\
&\approx \frac{\hbar\pi^2}{2m(a-b)^2}(1 - 2\varepsilon_A - 1 + 2\varepsilon_S) \\
&= \frac{4\hbar\pi^2}{mK(a-b)^3}\,\mathrm{e}^{-2bK}
\end{aligned}
$$

Delec se tako na nasprotni strani pojavi ob času $t = \frac{mK(a-b)^3}{4\hbar\pi}\,\mathrm{e}^{2bK}$.