Delec v sferno simetričnem končnem potencialu

Jan Premru
Fakulteta za matematiko in fiziko

18. junij 2005

1 Naloga

Obravnava deleca v sferno simetričnem končnem potencialu oblike

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & ; r < a \\ 0 & ; r > a \end{cases}$$

in določitev pogoja za obstoj vezanih stanj ter izračun degeneracije prvega vzbujenega vezanega stanja.

2 Teoretične osnove

Vedno začnemo s Scrödingerjevo enačbo(1).

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(r)\psi = \hat{H}\psi \tag{1}$$

Lotimo se je s separacijo spremenljivk $\psi(r,t) = \Psi(r)T(t)$. Ko vstavimo v enačbo(1) in delimo s $\Psi(r)T(t)$ dobimo naslednjo zvezo.

$$\frac{\hat{H}\Psi}{\Psi} = i\hbar \frac{\partial T}{\partial t} = E$$

Ker sta obe strani enačbe neodvisni(oziroma odvisni od dveh neodvisnih spremenljivk), morata biti obe hkrati enaki neki konstanti sistema(celotni energiji E). Druga DE je trivialno rešljiva $T(t) = T_0 e^{-iEt/\hbar}$. Prvo pa malce preoblikujemo, množimo z $-\frac{2m}{\hbar^2}$ ter prevržemo člen s potencialom na drugo stran. Dobimo enačbo(2), kjer imamo krajevno odvisnost valovne funkcije.

$$\nabla^2 \Psi = -k^2 \Psi \quad ; \quad k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \tag{2}$$

2.1 Sferna simetrija

Zaradi sferne simetrije našega problema so za reševanje enačbe(2) primerne sferne koordinate. Če v njih zapišemo operator ∇^2, dobimo naslednjo enačbo

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\Psi = -k^2\Psi$$

Spet ločimo spremenljivke $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$. Večkrat(in tudi tokrat) vzamemo kar produkt $\Theta(\theta)\Phi(\phi) = Y_{lm}(\theta,\phi)$. Dobljene funkcije imenujemo sferni harmoniki. Ti nam podajajo kotno odvisnost valovne funkcije. Hkrati nam rešijo enačbo za lastne vrednosti kvadrata vrtilne količine $\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta,\phi)$, kjer je l obhodno kvantno število(obhodna vrtilna količina). Oglati oklepaj na $Y_{lm}(\theta,\phi)$ je ravno $-\frac{\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\phi)}{\hbar^2}$. Upoštevamo še $\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}$, pa se nam zadnja enačba preoblikuje v enačbo(3).

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0 \tag{3}$$

3 Določitev pogoja za obstoj osnovnega vezanega stanja

V enačbo(3) uvedimo novo spremenljivko $u = rR$. Poglejmo kakšen je prvi člen.

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial(\frac{u}{r})}{\partial r}) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2(\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2})) = \frac{1}{r^2}(r\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}$$

Pomnožimo še r, pa dobimo naslednjo obliko

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + (k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2})u = 0 \tag{4}$$

V zadnjo enačbo vstavimo nazaj k ter delimo s $-\frac{2m}{\hbar^2}$. Dobimo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + (\hat{V} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2})u = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + (\hat{V} + \hat{V}_c)u = Eu$$

Dobili smo kvalitativno enako enačbo kot v 1D primerih vezanih stanj, le da imamu tukaj spremenjen potencial zaradi obhodne vrtilne količine delca V_c. Imenujmo skupni potencial $-V_0 + V_c = V_{eff}$ efektivni potencial. Prispevek vrtilne količine k potencialu je pozitiven, v nasprotju s primarnim potencialom krogle, ki je negativen. Zanima nas katero je osnovno stanje. Privzemimo, da obstaja neko vezano stanje. To bo imelo bolj negativno energijo za tem manjše vzbujenosti obhodne vrtilne količine(majhne l). Takrat bo efektivni potencial najbolj negativen(posledično tudi najbolj dojemljiv za vezana stanja). Predpostavimo torej nično obhodno vrtilno količino $l = 0$.

Pokažimo, da za tako izbiro res dobimo osnovno vezano stanje. Hamiltonjan za $l = 0$ označimo s H_0, za $l > 0$ pa H. Velja $\hat{H}_0 \left|\psi_n\right\rangle = E_0 \left|\psi_n\right\rangle$ ter $\hat{H} \left|\psi_c\right\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}_c) \left|\psi_c\right\rangle = E_c \left|\psi_c\right\rangle$. Množimo zadnji izraz z leve s $\left\langle\psi_c\right|$.

$$\left\langle\psi_c\right| E_c \left|\psi_c\right\rangle = E_c = \left\langle\psi_c\right| (\hat{H}_0 + \hat{V}_c) \left|\psi_c\right\rangle = \left\langle\psi_c\right| H_0 \left|\psi_c\right\rangle + \left\langle\psi_c\right| \hat{V}_c \left|\psi_c\right\rangle$$

Ker pa velja $\left\langle\psi_c\right| \hat{V}_c \left|\psi_c\right\rangle > 0$(ker $V_c > 0$), sledi da je $E_c > \left\langle\psi_c\right| H_0 \left|\psi_c\right\rangle$. Razvijemo to po bazi operatorja H_0. Velja $\left|\psi_c\right\rangle = \sum_n c_n \left|\psi_n\right\rangle$.

$$\begin{aligned} E_c &> \left\langle\psi_c\right| H_0 \left|\psi_c\right\rangle = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \underbrace{\left\langle\psi_m\right| H_0 \left|\psi_n\right\rangle}_{E_n \delta_{nm}} = \\ &= \sum_n c_n^* c_n \underbrace{E_n}_{>E_0} \geq E_0 \sum_n c_n^* c_n = E_0 \end{aligned}$$

Torej je za vsako izbiro $l > 0$ energija tega stanja večja od energije stanja z $l = 0$. Upravičeno zato lahko za nadaljevanje naloge privzamemo $l = 0$. V enačbi(4) odpade člen z $l(l+1)$, ta se prevede na 1D problem. Rešitvi za ta problem poznamo.

$$\begin{aligned} u_1 &= A\cos(kr) + B\sin(kr) \quad ; \quad k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \\ u_2 &= Ce^{-\kappa r} + De^{\kappa r} \quad ; \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m\left|E\right|}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

Dva robna pogoja že imamo, in sicer zveznost ter zvezna odvedljivost obeh funkcij na meji.

$$\begin{aligned} u_1/_{r=a} &= u_2/_{r=a} \\ \frac{du_1}{dr}/_{r=a} &= \frac{du_2}{dr}/_{r=a} \end{aligned}$$

Tretji je padanje verjetnostne gostote v limiti $r \to \infty$. Ta nam da $D = 0$. Četrti pogoj pa je $u_1(r \to 0) = 0$. Ta pogoj dobimo iz integrala Scrödingerjeve enačbe:

$$\begin{aligned} \int_0^{r_0} (\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2\frac{\partial}{\partial r})(\frac{u}{r}Y_{00})r^2 dr &= -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{r_0} (E+V_0)(\frac{u}{r}Y_{00})r^2 dr \\ \int_0^{r_0} (\alpha-1)^2 r^{\alpha-1} dr &= -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{r_0} \underbrace{(E+V_0)}_{konst.} r^{\alpha+1} dr \end{aligned}$$

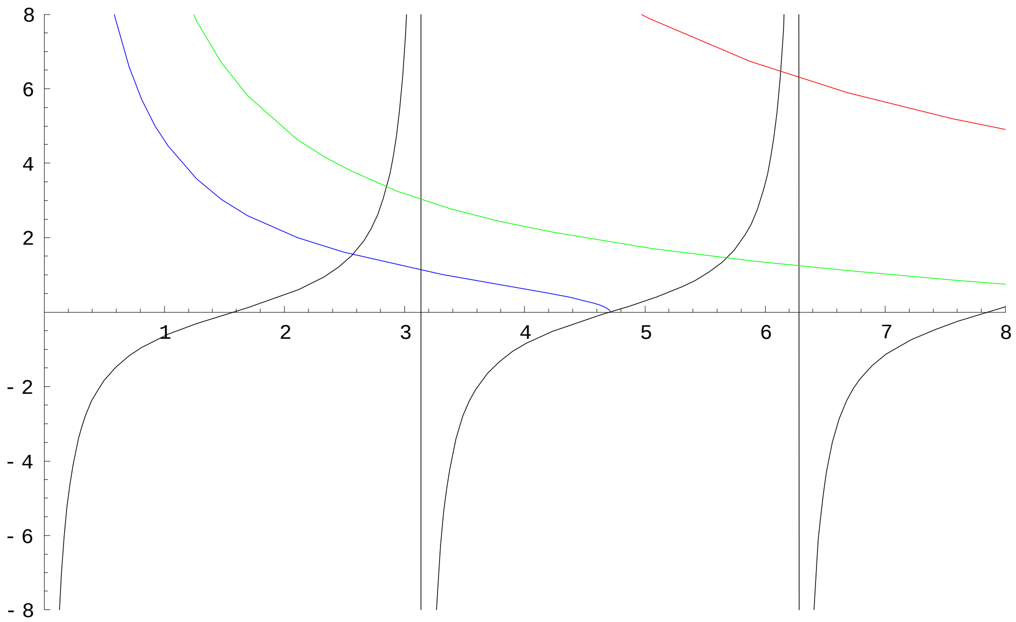
Za $u(r) \approx r^\alpha$ vzamemo kar potence, kajti vsako funkcijo lahko okoli 0 aproksimiramo s potenčno vrsto. Uvidimo, da mora biti $\alpha > 0$, da po integraciji na obeh straneh dobimo potenci r^x, kjer $x > 0$. Zato gresta z $r_0 \to 0$ tudi obe strani proti 0. Prav tako pa gre $u(r \to 0) \approx r^\alpha \to 0$. Iz tega pogoja sledi $A = 0$. Prva pogoja dasta enačbi:

$$\begin{aligned} B\sin(ka) &= Ce^{-\kappa a} \\ Bk\cos(ka) &= -C\kappa e^{-\kappa a} \end{aligned}$$

Ko enačbi zdelimo ter vstavimo κ in k, ter uvedemo $x = ka$ ter $x_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}a$, dobimo:

$$-\cot(x) = \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} \tag{5}$$

Prva rešitev je kar $x = x_0 = \frac{\pi}{2}$, iz česar sledi $x_0^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = \frac{\pi^2}{4}$ in pogoj $\boxed{V_0 \geq \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}}$. To je zadosten pogoj za obstoj osnovnega vezanega stanja $(l = 0)$ ter hkrati potreben pogoj za obstoj kakih višje vzbujenih stanj.



Slika 1: Grafično reševanje transcendentne enačbe(5)

4 Degeneracija vzbujenih stanj

Za naprej privzamemo, da je potencial dovolj globok, da obstaja dovolj vezanih stanj. Za primer $l = 0$ se na sliki ničla krivulje $\frac{\sqrt{x_0^2-x^2}}{x}$ premika daleč v desno(z naraščajočim V_0 oziroma x_0), zato dobimo mnogo presečišč s krivuljo -cot(x). Le ta po vrsti predstavljajo vzbujena stanja, ki nimajo vzbujene vrtilne količine($l = 0$), imajo pa vzbujen radialni del(presečišča $x = ka$ se premikajo desno, torej k in z njim energija naraščata). Očitno bo za prvo vzbujeno stanje(torej po vrsti drugo rešitev transcendentne enačbe) veljala omejitev $(\frac{3\pi}{2})^2 < x^2 < (2\pi)^2$ (modra in v limiti $V_0 \to \infty$ rdeča krivulja) in za energijo tega stanja $-V_0 + \frac{9\pi^2\hbar^2}{8ma^2} < E < V_0 + \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$.

Za z obhodno vrtilno količino $l > 0$ velja enačba(3). Delimo jo še s k^2, pa dobimo:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial(kr)^2} + \frac{2}{kr}\frac{\partial}{\partial(kr)} + 1 - \frac{l(l+1)}{(kr)^2}\right] R = 0$$

V enačbi prepoznamo sferno Besselovo diferencialno enačbo, katere rešitve so znane(sferne Besselove ter Neumanove funkcije ter linearne kompleksne kombinacije le teh - Hanklove funkcije). Za območji uporabimo nastavka:

$$\begin{aligned} R_1 &= A j_l(kr) + B n_l(kr) \qquad ; \quad k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \\ R_2 &= C h_l^{(1)}(k'r) + D h_l^{(2)}(k'r) \ ; \quad k' = i\kappa = i\sqrt{\frac{2m\,|E|}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

Upoštevamo, da rešitvi pri $r \to \infty$ ter $r \to 0$ ne smeta divergirati($B = 0$ in $D = 0$). Iz zveznosti ter zvezne odvedljivosti na meji dobimo:

$$\begin{aligned} A j_l(ka) &= C h_l^{(1)}(i\kappa a) \\ A k j_l'(ka) &= i C \kappa h_l'(i\kappa a) \end{aligned}$$

Če enačbi delimo, se znebimo konstant in dobimo transcendentno enačbo, ki nam določa diskretne vrednosti k:

$$\frac{j_l(ka)}{k j_l'(ka)} = \frac{h_l^{(1)}(i\kappa a)}{i\kappa h_l'^{(1)}(i\kappa a)}$$

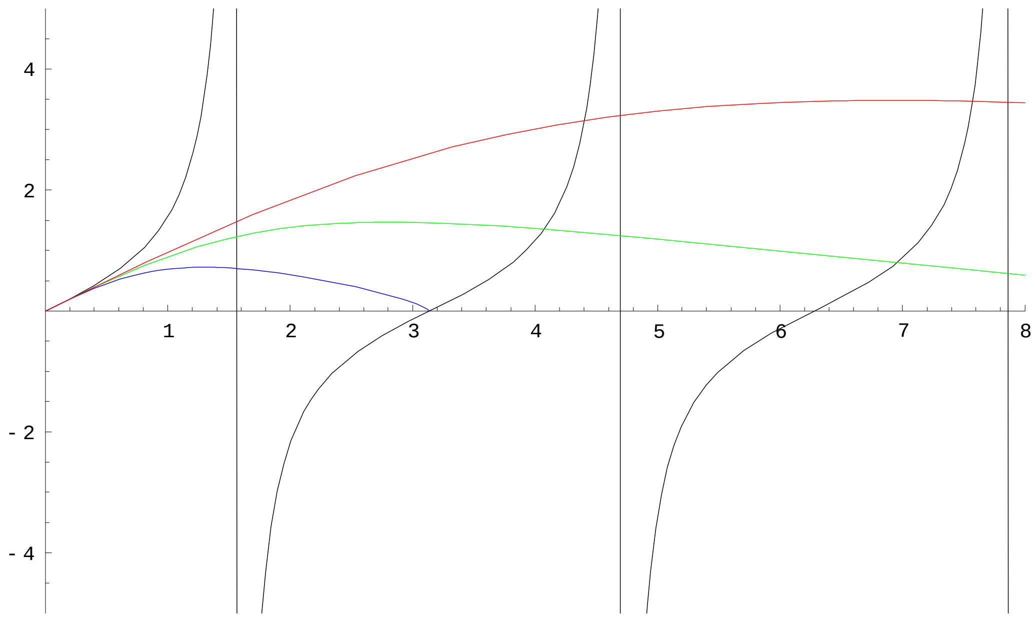
Zanima nas prvo vzbujeno stanje $l = 1$. Za višje vzbujena stanja($l > 1$) smo že prej ugotovili, da bodo imela višjo energijo. Dobimo:

$$\frac{j_1'(x)}{j_1(x)} = \frac{i\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} \frac{h_1'^{(1)}(i\sqrt{x_0^2 - x^2})}{h_1^{(1)}(i\sqrt{x_0^2 - x^2})} \tag{6}$$

Po formulah(najdemo jih lahko v programu Mathematica) izrazimo $j_1(x) = \frac{\sin(x) - x\cos(x)}{x^2}$, $j_1'(x) = \frac{\sin(x)}{x} + \frac{2\cos(x)}{x^2} - \frac{2\sin(x)}{x^3}$, $h_1^{(1)}(iX) = ie^{-X}(\frac{1}{X} + \frac{1}{X^2})$ ter $h_1'^{(1)}(iX) = -e^{-X}(\frac{1}{X} + \frac{2}{X^2} + \frac{2}{X^3})$. Z X smo označili $\sqrt{x_0^2 - x^2}$. Ko polepšamo izraz(6) in vstavimo X dobimo naslednjo transcendentno enačbo:

$$\tan(x) = \frac{x}{1 + (\frac{x^2}{x_0^2 - x^2})(\sqrt{x_0^2 - x^2} + 1)} \tag{7}$$

Enačbo v praksi rešujemo numerično, toda za nas bo dovolj, da premislimo o rešitvah, ki jih lahko razberemo iz slike.Prva rešitev je trivialna in enaka 0. Ta nima fizikalnega pomena(kakšno pa je valovanje oziroma delec ki ima $k = 0$?). Za prvo neničelno presečišče se izkaže, da spet lahko omejimo njegovo velikost $(\pi)^2 < x^2 < (\frac{3\pi}{2})^2$ ter energijo $-V_0 + \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} < E < -V_0 + \frac{9\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$.



Slika 2: Grafično reševanje transcendentne enačbe(7)

Vidimo, da ima stanje z $l = 1$ ter nevzbujenim radialnim delom nižjo energijo kot stanje $l = 0$ s prvim vzbujenim radialnim delom. Potemtakem je prvo vzbujeno stanje našega sistema stanje z $l = 1$ ter nevzbujenim radialnim delom. Degeneracijo določa le vrtilna količina, in sicer je le-ta enaka $2l + 1$. Torej ima prvo vzbujeno stanje degeneracijo 3.