1D Vodikov atom

21. september 2007

Naloga

Elektron se giblje vzdolž tanke cevke, ki je pravokotna na prevodno ploščo. Na površini plošče se nabere pozitiven naboj, zato elektron čuti privlačno silo, ki je taka, kot da bi na nasprotni strani plošče stala zrcalna slika elektrona z nasprotnim nabojem.

Potencial, ki ga čuti elektron, je

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot 4x} & x > 0 \end{cases}$$

1. Določi valovni funkciji in energiji osnovnega in prvega vzbujenega stanja. Namig: Uporabi rešitve za vodikov atom.
2. Izračunaj produkt nedoločenosti položaja in gibalne količine elektrona v osnovnem stanju sistema.
3. Ploščo ob času $t = 0$ enakomerno nabijemo, tako da je površinska gostota naboja σ. Naboj nato počasi odteka s plošče, $\sigma(t) = \sigma e^{-t/\tau}$. Kolikšna je verjetnost, da je po dolgem času elektron v prvem vzbujenem stanju. Računaj v prvem redu perturbacije.

Rešitev

Problem bomo obravnavali podobno kot klasičen vodikov atom. Edina razlika je v tem, da je Hamiltonian elektrona v danem potencialu odvisen samo od enega parametra in to je razdalja elektrona do prevodne plošče. Oba kota (φ, θ), ki sta običajna parametra v sferičnih problemih, tukaj ne igrata nobene vloge zaradi specifične narave problema (elektron se giblje vzdolž tanke cevke).

Tako lahko Hamiltonian za elektron napišemo:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 4x} \tag{1}$$

Parameter x je enakovreden parametru r pri vodikovemu atomu. Pomembna razlika med tem in klasičnim Hamiltonianom je zmanjšanje naboja z e na $\frac{e}{2}$. To sicer zelo malo spremeni sam Hamiltonov operator, vendar sprememba deluje na Bohrov radij, ki je podan:

$$r_B = \frac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{me^2} \tag{2}$$

Kot vidimo, sprememba naboja poveča Bohrov radij za aktualni problem na $4r_B$. Tako bomo povsod, kjer v enačbah nastopa Bohrov radij, dodali faktor 4.

1. Za določitev lastnih valovnih funkcij in lastnih energij napišemo Schrödingerjevo enačbo:

$$H\psi=E\psi \tag{3}$$

Na lastni valovni funkciji lahko uporabimo prijem separacije spremenljivk:

$$\psi(x,\vartheta,\phi)=R(x)Y(\vartheta,\phi) \tag{4}$$

Kot smo omenili prej, sferičnega dela v tem specifičnem problemu ne potrebujemo, zato lahko nastavimo kar

$$\psi(x,\vartheta,\phi)=R(x) \tag{5}$$

R(x) so znane funkcije, od katerih bomo v tej nalogi potrebovali le dve:

$$R_1(x)=2\cdot 4^{-\frac{3}{2}} r_B^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{x}{4r_b}} \tag{6}$$

$$R_2(x)=2\cdot 4^{-\frac{3}{2}}(2r_B)^{-\frac{3}{2}}(1-\frac{x}{8r_B})e^{-\frac{x}{8r_B}} \tag{7}$$

Ti dve funkciji že vsebujeta modificiran Bohrov radij – povsod smo dodali faktor 4. Ker je to enodimenzionalni problem, bomo uporabili naslednjo substitucijo:

$$R_n(x)=\frac{U_n(x)}{x} \tag{8}$$

oziroma

$$U_n(x)=R_n(x)\cdot x \tag{9}$$

Namesto $R_n(x)$ bomo zdaj v Schrödingerjevo enačbo vstavljali $U_n(x)$.

Lastni funkciji tako že imamo. Zdaj potrebujemo še lastni energiji za osnovno in prvo vzbujeno stanje.
Hamiltonian ima obliko

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 4x} \tag{10}$$

Shrödingerjeva enačba pa je videti

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 U_n(x)}{\partial x^2}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 4x}U_n(x)=E_n U_n(x) \tag{11}$$

Najprej v enačbo vstavimo lastno funkcijo osnovnega stanja

$$U_1(x)=2r_B^{-\frac{3}{2}} x e^{-\frac{x}{4r_b}} \tag{12}$$

Za lastno energijo osnovnega stanja dobimo

$$E_1=-\frac{\hbar^2}{2m\cdot 16 r_B^2}\ , \tag{13}$$

kar da –0,85 eV. Vidimo, da je elektron v danem potencialu precej šibkeje vezan kot v vodikovem atomu, kjer je vezavna energija Rydbergova konstanta –13,6 eV.

Na podoben način vstavimo v Schrödingerjevo enačbo še lastno funkcijo prvega vzbujenega stanja

$$U_2(x)=2\cdot 4^{-\frac{3}{2}}(2r_B)^{-\frac{3}{2}}x(1-\frac{x}{8r_B})e^{-\frac{x}{8r_B}} . \tag{14}$$

To je nekoliko daljši račun zaradi člena $(1-\frac{x}{8r_B})$. Naposled dobimo rezultat

$$E_2=-\frac{\hbar^2}{2m\cdot 64\,r_B^2} , \tag{15}$$

kar je po pričakovanjih $\frac{1}{4}E_1$. Lastne energije aktualnega problema se ravnajo po pravilu iz klasičnega vodikovega atoma:

$$E_n=\frac{E_1}{n^2} . \tag{16}$$

2. Da dobimo produkt nedoločenosti položaja in gibalne količine v osnovnem stanju, izračunamo vsako nedoločenost posebej:

$$\delta p=\sqrt{\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2} \tag{17}$$

$$\delta x=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2} \tag{18}$$

$$\langle x\rangle=\int_0^\infty U_1^*(x)\,x\,U_1(x)\,dx \tag{19}$$

$$\langle x^2\rangle=\int_0^\infty U_1^*(x)\,x^2\,U_1(x)\,dx \tag{20}$$

$$\langle p\rangle=\int_0^\infty U_1^*(x)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})U_1^*(x)\,dx \tag{21}$$

$$\langle p^2\rangle=\int_0^\infty U_1^*(x)(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2})U_1(x)\,dx \tag{22}$$

Meje integrala imajo svojo obliko zaradi narave potenciala (pri $x<0$ je potencial neskončen, zato se delec tam ne more nahajati).

Dejanski račun je nekoliko dolgotrajen, zato ga bomo izpustili. Omenimo le to, da vključuje uporabo Γ funkcije. Naposled dobimo rezultat:

$$\delta p\delta x=\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar , \tag{23}$$

kar se sklada s Heisenbergovo omejitvijo

$$\delta p\delta x\geq\frac{\hbar}{2} . \tag{24}$$

3. Iz fizike 1 vemo, da ima jakost električnega polja ene same ravne plošče obliko

$$E=\frac{\sigma}{2\varepsilon_0} . \tag{25}$$

V našem primeru to pomeni

$$E=\frac{\sigma}{2\varepsilon_0}e^{-\frac{t}{\tau}} , \tag{26}$$

kjer je τ karakteristični čas odtekanja naboja s plošče. Želimo izvedeti verjetnost, da bo elektron po dolgem času v prvem vzbujenem stanju, če je bil pred vključitvijo dodatnega električnega potenciala v osnovnem stanju.

Hamiltonian danega problema je oblike

$$H=H_0-eEx . \tag{27}$$

Dodatni člen je posledica dodatnega električnega potenciala in ga bomo obravnavali kot perturbacijo.

Tukaj uporabimo nastavek, podan v eni od prejšnjih nalog (naslov: Časovno odvisna perturbacija I). Verjetnost za prvo vzbujeno stanje je podano kot $|c_2(t)|^2$, kjer je

$$c_2(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \langle 2,0|e^{i\frac{E_2 t'}{\hbar}}(-\frac{e\sigma}{2\varepsilon_0}x)e^{-\frac{t'}{\tau}}e^{-i\frac{E_1 t'}{\hbar}}|1,0\rangle dt' . \tag{28}$$

Najprej izračunamo krajevni del:

$$\langle 2,0|(-\frac{e\sigma}{2\varepsilon_0})x|1,0\rangle , \tag{29}$$

katerega vrednost dobimo

$$\frac{8^{\frac{5}{2}}}{2\cdot 3^4}e\sigma\cdot r_B . \tag{30}$$

Temu sledi še izračun časovnega dela:

$$\int_0^t e^{-i\frac{(E_1-E_2)t'}{\hbar}}e^{-\frac{t'}{\tau}}dt' . \tag{31}$$

Da bi poenostavili račun, naredimo naslednji krajšavi:

$$a=\frac{1}{\tau} , \tag{32}$$

$$b=\frac{(E_1-E_2)}{\hbar} . \tag{33}$$

Tako dobimo nov integral, ki ga je preprosto rešiti:

$$\int_0^t e^{-(a+ib)t'}dt'=\frac{-1}{a+ib}(e^{-(a+ib)t}-1) . \tag{34}$$

Ker hočemo vedeti verjetnost po dolgem času, lahko t pošljemo proti neskončnosti:

$$\frac{-1}{a+ib}(e^{-(a+ib)t}-1)\xrightarrow[t\to\infty]{}\frac{(-1)(-1)}{a+ib}=\frac{1}{a+ib} . \tag{35}$$

Tako je

$$c_2(\infty) = -\frac{i}{\hbar}\frac{8^{\frac{5}{2}}}{2\cdot 3^4} e\sigma\cdot r_B \frac{1}{a+ib} \ . \tag{36}$$

Po prej danem nastavku je verjetnost, da je elektron po dolgem času v prvem vzbujenem stanju:

$$P_2 = \frac{8^5}{2^2 3^8}\left(\frac{e\sigma\cdot r_B}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{\frac{1}{\tau^2}+\frac{9E_2^2}{\hbar^2}} \tag{37}$$