Neskončna potencialna jama

Rok Bohinc

22. februar 2008

- *Pokaži, da imajo lastne funkcije dobro določeno parnost - so ali sode ali lihe, če je potencial sod $V(-x) = V(x)$ in so lastna stanja nedegenerirana*

Napišimo Schrodingerjevo enačbo:

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

Če namesto argumenta x pišemo argument -x in upoštevamo, da je potencial V(x) soda funkcija, dobimo sledečo enačbo:

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

Očitno imata funkciji $\psi(x)$ in $\psi(-x)$ enako energijo. Torej sta ti dve funkciji enaki do predznaka natančno. To pa sledi iz tega, da če hočemo izračunati vrjetnost, da se delec nahaja na nekem območju, moremo vzeti absolutni kvadrat funkcije $\Rightarrow P = \int |\psi(x)|^2 dx$.

Če sedaj predpostavimo, da stanja niso degenerirana lahko napišemo $\psi(x) = \alpha\psi(-x)$ oziroma $\psi(-x) = \alpha\psi(x)$. Vstavimo $\psi(x)$ iz prve enačbe v drugo dobimo:

$$\psi(-x) = \alpha^2\psi(-x)$$

$$\alpha = \pm 1$$

Naredimo sklep, da če imamo potencial, ki je sod, je valovna funkcija ali soda, ali liha.

- *Poišči lastne energije in lastne funkcije delca v neskončni potencialni jami z dolžino a.*

Poiščimo lastne energije E in lastne funkcije $\psi(x)$ neskončne potencialne jame s pomočjo stacionarne Schrodingerjeve:

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

V našem primeru ima potencial sledečo obliko

$$V(x) = \begin{cases} 0; |x| < \frac{a}{2} \\ \infty; sicer \end{cases}$$

Torej, če rešujemo stacionarno Schrodingerjevo enačbo območju $|x| < \frac{a}{2}$ dobimo preprosto diferencialno enačbo oblike:$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$, katere rešitve so

$$\psi_1(x) = A\sin kx + B\cos kx \;\; ; \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Sedaj pa upoštevamo, da more biti $\psi(x) = 0$ na območju $|x| > \frac{a}{2}$. To ugotovitev pride iz razmisleka, da delec ne more imeti neskončne energije E. Zato moremo nujno postaviti valovno funkcijo na nič, kjer je potenciala neskončna. Edino tako lahko zadušimo člen $V\psi$ v stacionarni Schrodingerjevi enačbi. Tako lahko zapišemo:

$$\psi_2(x) = 0; |x| \geq \frac{a}{2}$$

$$\psi \text{ more biti zvezna zato je } \psi_1(\pm\tfrac{a}{2}) = 0$$

Z upoštevanjem robnih pogojev dobimo $k_n = \frac{\pi}{a}n$, pri čemer more biti n liho število za $\psi_n(x) = Acos(k_n x)$ in sodo število za $\psi_n(x) = Bsin(k_n x)$. Konstanti A in B dobimo iz pogoja, da more biti valovna funkcija normirana:

$$A^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos^2 \frac{2\pi n}{a} x = A^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}} = B$$

Delec v neskončni potencialni jami z dolžino a ob času t = 0 opišemo z valovno funkcijo

$$\psi(x) = C\left(\cos\frac{\pi x}{a} + \frac{1}{2}\sin\frac{2\pi x}{a}\right).$$

- *Izracčunaj časovni razvoj valovne funkcije.*
- *Kako se s časom spreminja verjetnost, da se delec nahaja v desni polovici potencialne jame?*
- *Izračunaj časovno odvisnost pričakovane vrednosti položaja in gibalne količine delca.*
- *Kako sta ti dve količini povezani?*

Razvijmo najprej funkcijo $\psi(x)$ po lastnih funkcijah $\psi_n(x)$. Hitro lahko opazimo, da je naša funkcija linearna kombinacija prvih dveh lastnih funcij $\psi_1(x)$ in $\psi_2(x)$.

$$\psi(x) = C\left(\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_1(x) + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{a}{2}}\psi_2(x)\right)$$

Konstanto C določimo s tem, da more biti $\psi(x)$ normirana.

$$C^2\int\left(\frac{a}{2}\psi_1^2 + \frac{a}{4}\psi_1\psi_2 + \frac{a}{8}\psi_2^2\right)\mathrm{d}x = C^2\frac{a}{2}\int\psi_1^2\mathrm{d}x + C^2\frac{a}{8}\int\psi_2^2\mathrm{d}x = C^2\frac{a}{2} + C^2\frac{a}{8} = 1$$

Tu smo upoštevali ortonormiranost lastnih funkcij: integral mešanega člena je nič, integral kvadratov pa ena.

$$C = \sqrt{\frac{8}{5a}}$$

Če hočemo vedeti kako se funkcija razvija s časom potem moremo vsaki lastni funkciji zraven "pripopat"exp $\frac{-iE_n t}{\hbar}$.

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{4}{5}}\left(\psi_1(x)e^{\frac{-iE_1}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\psi_2(x)e^{\frac{-iE_2 t}{\hbar}t}\right)$$

- *Kako se s časom spreminja verjetnost, da se delec nahaja v desni polovici potencialne jame?*

V splošnem velja $E_m = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$.
Za lažje računanje izrazimo E_2 z $E_1 \rightarrow E_2 = 4E_1$

Da izračunamo kako se s časom spreminja verjetnost, da se delec nahaja v desni polovici potencialne jame, moremo integrirati vrjetnostno gostoto od 0 do a/2.

$$\int_0^{\frac{a}{2}} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = \frac{4}{5}\int_0^{\frac{a}{2}} \left(\psi_1(x)e^{\frac{iE_1 t}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\psi_2(x)e^{\frac{i4E_1 t}{\hbar}t}\right)\left(\psi_1(x)e^{\frac{-iE_1 t}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\psi_2(x)e^{\frac{-i4E_1 t}{\hbar}t}\right)\mathrm{d}x =$$

$$\frac{4}{5}\int_0^{\frac{a}{2}} \left(\psi_1^2 + \frac{1}{4}\psi_2^2 + \frac{1}{2}\psi_1\psi_2\left(e^{\frac{-i3E_1 t}{\hbar}t} + e^{\frac{+i3E_1 t}{\hbar}t}\right)\right)\mathrm{d}x =$$

$$\frac{4}{5}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{8} + \cos\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)\frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{2}} \cos\frac{\pi x}{a}\cdot\sin\frac{2\pi x}{a}\mathrm{d}x\right) =$$

Uporabimo pravilo $\sin 2x = 2\sin x\cos x$ in uvedemo substitucijo $u = \cos\frac{\pi x}{a}$, $\mathrm{d}u = -\frac{\pi}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\mathrm{d}x$ in dobimo

$$\frac{1}{2} + \frac{16}{5a}\cos\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)\int_0^1 \frac{a}{\pi}u^2\mathrm{d}u = \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi}\cos\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)$$

- *Izračunaj časovno odvisnost pričakovane vrednosti položaja in gibalne količine delca.*

Izračunati moremo naslednja integrala:

$$\langle x\rangle = \int \Psi^*(x,t)\hat{x}\Psi(x,t)\mathrm{d}x$$

$$\langle p\rangle = \int \Psi^*(x,t)\hat{p}\Psi(x,t)\mathrm{d}x$$

pri čemer je $\hat{x} = x$ in $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

Soda funkcija na simetričnem intervalu da neko končno vrednost, liha pa 0. Pri obeh integralih preživita tako samo mešana člena$C\int \psi_1\psi_2 x dx$, kajti ψ_1 je soda, ψ_2 je liha in x je pravtako liha funkcija, kar da celokupno sodo funcijo. $\frac{\partial}{\partial x}\psi_2$ je soda, ψ_1 je soda, kar da spet sodo funkcijo. Ker je v Latexu zoprno pisat dalše račune bom napisal samo rezultate

$$\langle x\rangle = \frac{64a\cos\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)}{45\pi^2}$$

$$\langle p\rangle = \frac{32\hbar\sin\left(\frac{3E_1}{\hbar}t\right)}{15a}$$

- *Kako sta ti dve količini povezani?*

$$\langle p\rangle = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2E_1}\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = m\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}$$

Velja torej klasična zveza.