Končna potencialna jama

Mitja Blažinčič

26. mar 2007

Za končno potencialno jamo s širino a in potencialom

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ V_0 & , \quad \text{sicer} \end{cases}$$

1. Poišči transcendentni enačbi, ki določata lastne energije delca v lihih in sodih lastnih stanjih in ju grafično reši.
2. Poišči pogoj za obstoj prvega vzbujenega stanja.
3. Določi lastne energije v limiti $V_0 \to \infty$.
4. Poišči lastne energije in lastne funkcije v limiti $a \to 0$ pri ěmer je $V_0 a$ konstanten.

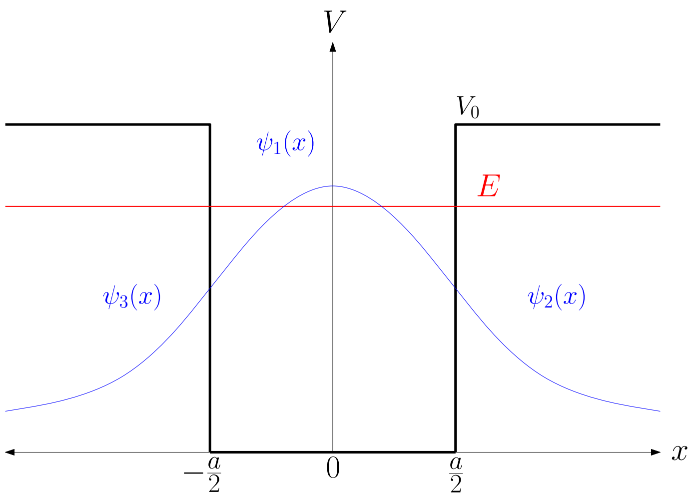

Figure 1: Skica potenciala (črno) in nivo energije E (rdeče). Skicirana je tudi valovna funkcija (modro).

1 Lastne rešitve

Poiščimo najprej vezana lastna stanja ($E < V_0$). Nastavek za rešitev Schrödingerjeve enačbe za ta problem je

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A\cos(k_1 x) \\ \psi_2(x) &= Be^{-k_2 x} \qquad\qquad \text{(sode rešitve)} \\ \psi_3(x) &= Be^{k_2 x}\,, \end{aligned} \tag{1}$$

za sode rešitve, in

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A\sin(k_1 x) \\ \psi_2(x) &= Be^{-k_2 x} \qquad\qquad \text{(lihe rešitve)} \\ \psi_3(x) &= -Be^{k_2 x}\,, \end{aligned} \tag{2}$$

za lihe. Gornja zlepka (en. 1 in 2) dobimo direktno z reševanjem Schrödingerjeve enačbe. Za lastne rešitve zapišemo pogoj

$$H\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)\,. \tag{3}$$

Na območju 1 uporabimo nastavek za rešitev valovne funkcije ko je $E > V$

$$\psi(x) = A\cos(k_1 x) + B\sin(k_1 x)\,, \qquad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\,, \tag{4}$$

(saj $E > V(-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}) = 0$), le robni pogoji se bodo spremenili. Za območje 2 pa gornjo enačbo (3) razpišemo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V_0\psi = E\psi\,.$$

To lahko prepišem v

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi\,, \qquad E < V_0\,.$$

To diferencialno enačbo reši nastavek

$$\psi_2(x) = Be^{-k_2 x} + Ce^{k_2 x}\,, \qquad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}\,. \tag{5}$$

Valovna funkcija je definirana kot tista rešitev Schrödingerjeve enačbe, ki je v kvadratu normalizabilna, tj. $\int \psi^*\psi \mathrm{d}x = 1$ (z izjemo ravnega vala ki ga normaliziramo s tokom), je zvezna in zvezno odvedljiva, torej iz L^2 prostora.

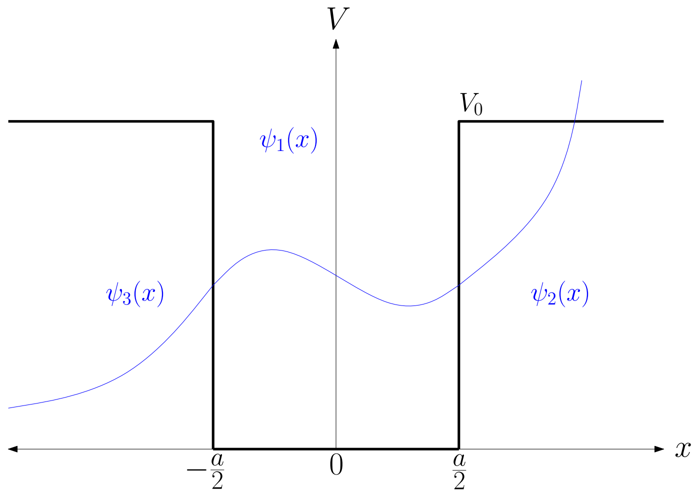

Figure 2: Primer rešitve Schrödingerjeve enačbe, ki ni valovna funkcija.

Robna pogoja sta torej zveznost in zvezna odvedljivost. Tema pogojema, sicer ustrezajo tudi rešitve Schrödingerjeve enačbe oblike (skica na sliki 2)

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= C_1 \sin(k_1 x)\\ \psi_2(x) &= C_2 e^{k_2 x}\\ \psi_3(x) &= C_3 e^{k_2 x}\ ,\end{aligned}$$

vendar ne ustrezajo pogoju normalizabilnosti in zato niso valovne funkcije. Izbrati moramo tak zlepek, da zadostimo temu pogoju. Vemo, da bodo zaradi sodosti potenciala lastne valovne funkcije ali sode ali lihe in ne superpozicija sodih in lihih. Lastne valovne funkcije torej iščemo med rešitvami oblike (en. 2 in 1).
Na meji $a/2$ lahko zapišem pogoj zveznosti

$$A\cos(k_1 x)|_{\frac{a}{2}} = Be^{-k_2 x}|_{\frac{a}{2}} \tag{6}$$

in zvezne odvedljivosti

$$-Ak_1 \sin(k_1 x)|_{\frac{a}{2}} = -Bk_2 e^{-k_2 x}|_{\frac{a}{2}} \tag{7}$$

Da se znebimo koeficientov, enačbi zdelimo in dobimo zvezo

$$k_2 = k_1 \tan(k_1 \frac{a}{2}) \qquad \text{(lihe)}\ . \tag{8}$$

Analogno iz nastacka za lihe rešitve (en. 2) dobimo zvezo

$$k_2 = -k_1 \cot(k_1 \frac{a}{2}) \qquad \text{(lihe)}\ . \tag{9}$$

Iz enačb (4) in (5) lahko zapišemo vsoto za $k_1^2 + k_2^2$, jo pomnožimo z a^2 in dobimo

$$k_1^2 a^2 + k_2^2 a^2 = a^2 \frac{2mV_0}{\hbar^2} \ .$$

Sedaj proglasim $k_1 a = x$ in $a^2 \frac{2mV_0}{\hbar^2} = x_0^2$ in enačba dobi obliko $k_2^2 a^2 = x_0^2 - x^2$. V to vstavim k_2 (enačbi 8 in 9) in dobim sistem trancendentnih enačb za x

$$\begin{aligned} \tan(\frac{x}{2}) &= \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} \\ -\cot(\frac{x}{2}) &= \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} \ . \end{aligned} \qquad (10)$$

Te enačbe nadalje rešujemo z računalnikom, za šolske potrebe pa to rešimo grafično (slika 3). Število rešitev je odvisno od $x_0 = x_0(V, a)$.

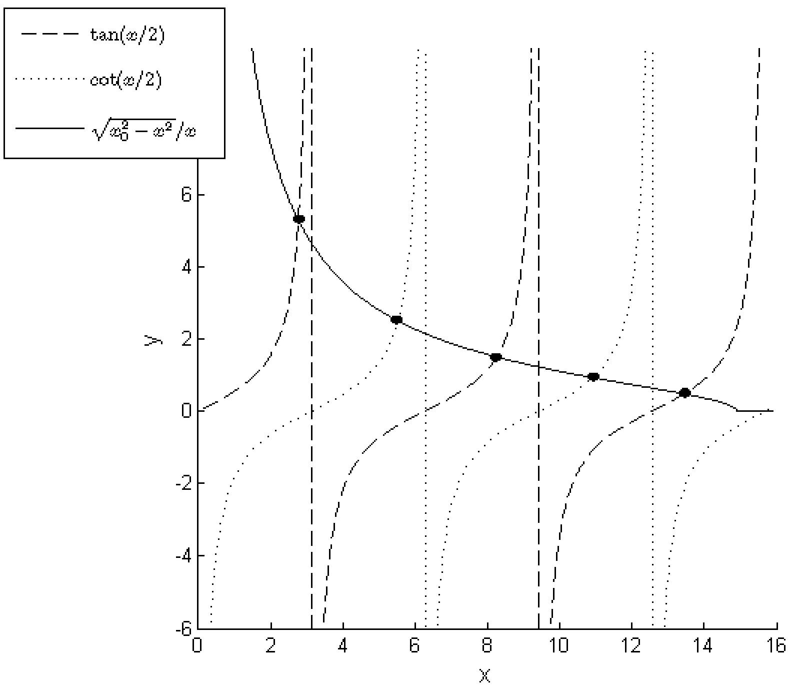

Figure 3: Grafične rešitve transcendentnih enačb označene s črnimi pikami.

2 Pogoj za prvo vzbujeno stanje

Iz slike (3) lahko takoj vidimo, da druga rešitev transcendentnih enačb (tj. prvo vzbujeno stanje) obstaja ob pogoju da je $x_0 > \pi$ oz.

$$a^2 V_0 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \,.$$

3 Lastne energije v limiti $V_0 \to \infty$

V limiti $V_0 \to \infty$, je problem natanko neskončna potencialna jama. V tej limiti, gre tudi $x_0 \to \infty$, torej gredo rešitve transcendentnih enačb za $\tan(x/2)$ k $x_n \to (2n+1)\pi$ in za $\cot(x/2)$ $x_n \to 2n\pi$. Torej so rešitve za k_1

$$k_1 = \frac{(2n+1)\pi}{a} \,, \qquad n = 0, 1, \ldots \qquad \text{(za sode rešitve)} \tag{11}$$

$$k_1 = \frac{2n\pi}{a} \,, \qquad n = 1, 2, \ldots \qquad \text{(za lihe rešitve)}\,. \tag{12}$$

Iz tega lahko izračunamo energije in ugotovimo, da so enake energijam za neskončno potencialno jamo.

4 Lastne energije v limiti δ funkcije

Sedaj si oglejmo še limito $a \to 0$ pri čemer je $V_0 a$ konstantna. Fizikalna intuicija nam da takoj vedeti, da je to pravzaprav δ funkcija, saj je v limiti potencial neskončno ozek, a s končnim integralom.
V tej limiti gre očitno tudi

$$x_0 = \sqrt{\frac{a^2 2mV_0}{\hbar^2}} \to 0 \,,$$

saj konstanto $2mV_0 a/\hbar^2$ množimo z a. Obstaja le osnovna rešitev

$$\tan(\frac{x}{2}) = \frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} \,, \tag{13}$$

ki je $x \in (0, x_0)$ in gre zato tudi $x \to 0$. Sedaj zapišem

$$x = x_0 - \epsilon \,.$$

Iz enačbe (13) vidimo, da je $\epsilon << x_0$. Leva stran ($\tan(x/2)$) je v tem režimu zelo majhna. Ker je x v imenovalcu na desni mahjen, mora biti izraz pod

korenom veliko manjši, ali bolje rečeno je $x_0^2 \approx x^2$, torej je $\epsilon << x_0$. Lahko bi rekli, da je x veliko bližje vrednosti x_0 kot 0.
V enačbi (13) lahko desno stran prepišemo v (izpeljava poteka iz leve proti desni)

$$\frac{\sqrt{x_0^2 - x^2}}{x} = \sqrt{\left(\frac{x_0}{x}\right)^2 - 1} = \sqrt{\left(\frac{x_0}{x_0 - \epsilon}\right)^2 - 1} = \sqrt{\left(\frac{1}{1 - \frac{\epsilon}{x_0}}\right)^2 - 1}\,. \quad (14)$$

Ker je $\epsilon << x_0$ lahko razvijem $\frac{1}{1-\epsilon/x_0} \approx 1 + \frac{\epsilon}{x_0}$, to kvadriram in obdržim linearne člene. Levo stran lahko prav tako razvijem $\tan(x) \approx x$ in dobim enačbo

$$\frac{x_0 - \epsilon}{2} = \sqrt{\frac{2\epsilon}{x_0}}\,.$$

Na levi strani lahko ϵ zanemarim in dobim rešitev

$$x = x_0 - \frac{x_0^3}{8}\,.$$

Z upoštevanjem $k_1 a = x$ (noter vstavim izraz za k_1 in zgoraj dobljeni x) dobim za energijo

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(x_0 - \frac{x_0^3}{8}\right)^2 \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(x_0^2 - \frac{x_0^4}{4}\right) = V_0\left(1 - \frac{m}{2\hbar^2}a^2 V_0\right)\,. \quad (15)$$

Lastna energija je za majhen popravek pod nivojem potenciala. V limiti ψ_1 izgine in ostaneta le eksponentno padajoči ψ_2, ψ_3. V enačbo za k_2 (en. 5) še vstavim gornji približek (en. 15) za energijo in rešitev v tem primeru je

$$\psi(x) = \sqrt{k_2} e^{-k_2|x|}\,, \qquad k_2 = \frac{maV_0}{\hbar^2}\,.$$