Neskončna potencialna jama

Rok Bohinc

26. 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:

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

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 faktorja z absolutno vrednostjo ena 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 lastna 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

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

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:

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

ψ more biti zvezna zato je $\psi_1(\pm\frac{a}{2}) = 0$

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

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

- *Izraccunaj 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.

$$\int_0^{\frac{a}{2}} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = \frac{4}{5}\int_0^{\frac{a}{2}} \left(\psi_1(x)e^{\frac{iE_1t}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\psi_2(x)e^{\frac{i4E_1t}{\hbar}t}\right)\left(\psi_1(x)e^{\frac{-iE_1t}{\hbar}t} + \frac{1}{2}\psi_2(x)e^{\frac{-i4E_1t}{\hbar}t}\right)\mathrm{d}x =$$

$$\frac{4}{5}\int_0^{\frac{a}{2}} \left(\psi_1^2 + \frac{1}{4}\psi_2^2 + \frac{1}{2}\psi_1\psi_2\left(e^{\frac{-i3E_1t}{\hbar}t} + e^{\frac{+i3E_1t}{\hbar}t}\right)\right)\mathrm{d}x =$$

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

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.