Wykład IV Mechanika kwantowa

Jednowymiarowy próg i jama

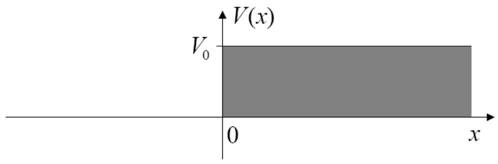
Próg potencjału

Szukamy rozwiązań jednowymiarowego równania Schrödingera bez czasu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\varphi(x)=E\varphi(x),$$

z energią potencjalną w postaci

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{dla} \quad x<0, \\ V_0 & \text{dla} \quad x\geq 0.\end{cases}$$



W obszarze $x<0$ mamy do czynienia ze swobodnym równaniem Schrödingera, którego rozwiązaniem są fale płaskie $\varphi(x)=Ce^{ikx}$, gdzie C jest stałą, a k wektorem falowym, takim że $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ (pęd równy jest $\hbar k$). Rozwiązanie w obszarze $x<0$ zapiszemy w postaci $\varphi(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx)$, co można traktować jako zapis sumy rozwiązań $\varphi(x)=Ce^{ikx}+De^{-ikx}$, gdzie $C=-\frac{i}{2}A+\frac{1}{2}B$ oraz $D=\frac{i}{2}A+\frac{1}{2}B$.

W obszarze $x>0$ mamy do czynienia z równaniem

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_0\right)\varphi(x)=E\varphi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}=-\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\varphi(x).$$

Musimy rozważyć dwa przypadki $(E-V_0)>0$ oraz $(E-V_0)<0$.

1) $(E-V_0)>0$

Rozwiązanie ma postać $\varphi(x)=F\sin(px)+G\cos(px)$, gdzie F,G są stałymi, a p jest takim wektorem falowym, że $E-V_0=\frac{\hbar^2p^2}{2m}$.

2) $(E-V_0)<0$ - energia potencjalna jest większa od całkowitej!

Rozwiązanie ma postać $\varphi(x)=He^{qx}+Ke^{-qx}$, gdzie H,K są stałymi, a q jest takim wektorem falowym, że $E-V_0=-\frac{\hbar^2q^2}{2m}$. Rozwiązanie $\sim e^{qx}$ trzeba odrzucić, tzn. przyjąć $H=0$, gdyż $e^{qx}\underset{x\to\infty}{\to}\infty$, więc nie można by unormować funkcji falowej. Rozwiązanie dla $x>0$ ma ostatecznie postać $\varphi(x)=Ke^{-qx}$.

Mając rozwiązania dla $x<0$ i $x>0$, „zszywamy” je w $x=0$, żądając aby funkcja falowa i jej pochodna były ciągłe w $x=0$. Warunki ciągłości

$$\varphi(0^-)=\varphi(0^+) \quad \text{oraz} \quad \left.\frac{d\varphi(x)}{dx}\right|_{x=0^-}=\left.\frac{d\varphi(x)}{dx}\right|_{x=0^+} \qquad (0^\pm \equiv \pm\lim_{\varepsilon\to 0}\varepsilon,\ \ \varepsilon\geq 0)$$

dostarczają równań

1) $(E-V_0)>0$

$$\varphi(0^-)=B=\varphi(0^+)=G$$

$$\left.\frac{d\varphi(x)}{dx}\right|_{x=0^-}=kA=\left.\frac{d\varphi(x)}{dx}\right|_{x=0^+}=pF \quad\Rightarrow\quad F=\frac{k}{p}A$$

2) $(E-V_0)<0$

$$\varphi(0^-)=B=\varphi(0^+)=K$$

$$\left.\frac{d\varphi(x)}{dx}\right|_{x=0^-}=kA=\left.\frac{d\varphi(x)}{dx}\right|_{x=0^+}=-qK \quad\Rightarrow\quad K=-\frac{k}{q}A$$

Rozwiązania równania $\hat{H}\varphi(x)=E\varphi(x)$ możemy więc zapisać w postaci

1) $(E-V_0)>0$

$$\varphi(x)=\begin{cases} A\sin(kx)+B\cos(kx) & \text{dla} \quad x<0, \\ \dfrac{k}{p}A\sin(px)+B\cos(px) & \text{dla} \quad x\geq 0, \end{cases}$$

gdzie $k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$ i $p=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-V_0)}$;

2) $(E-V_0)<0$

$$\varphi(x)=\begin{cases} A\left(\sin(kx)-\dfrac{k}{q}\cos(kx)\right) & \text{dla} \quad x<0, \\ -\dfrac{k}{q}Ae^{-qx} & \text{dla} \quad x\geq 0, \end{cases}$$

gdzie $k=\sqrt{2mE}/\hbar$ i $q=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$. Widzimy, że funkcja falowa wnika pod próg, chociaż jej energia jest niższa niż energia progu. Zauważmy, że $q \underset{V_0\to\infty}{\to} \infty$, więc dla nieskończenie wysokiego progu $(V_0=\infty)$ rozwiązanie przyjmuje postać

$$\varphi(x)=\begin{cases} A\sin(kx) & \text{dla} \quad x<0, \\ 0 \quad \text{dla} \quad x\geq 0, \end{cases}$$

czyli funkcja falowa nie wnika wtedy pod próg.

Wykład IV cd. Mechanika kwantowa

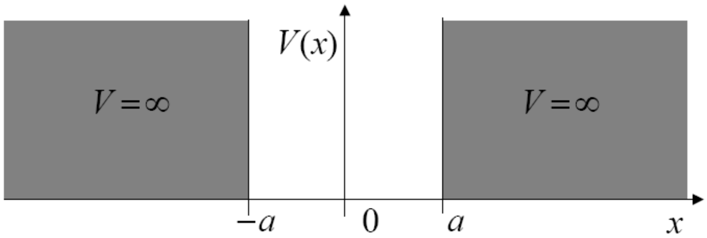
Nieskończenie wysoka jama potencjału

Szukamy rozwiązań jednowymiarowego równania Schrödingera bez czasu

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\varphi(x)=E\varphi(x),$$

z energią potencjalną w postaci

$$V(x)=\begin{cases}\infty & \text{dla} \quad x<-a,\\ 0 & \text{dla} \quad -a\le x\le a,\\ \infty & \text{dla} \quad a<x.\end{cases}$$



W obszarach $x<-a$ i $x>a$ funkcja falowa znika $\varphi(x)=0$, natomiast dla $-a\le x\le a$ mamy do czynienia z równaniem swobodnym, którego rozwiązanie zapisujemy w postaci $\varphi(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx)$, gdzie $k=\sqrt{2mE}/\hbar$. Aby „zszyć" rozwiązania z trzech różnych obszarów, żądamy ciągłości w punktach $x=\pm a$ tzn. $\varphi(\pm a)=0$. Daje to dwa równania:

$$\begin{cases}A\sin(ka)+B\cos(ka)=0,\\ -A\sin(ka)+B\cos(ka)=0,\end{cases}$$

o dwóch rodzajach rozwiązań

$$\begin{cases}A=0, \quad \cos(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi, \quad n=0,1,2,\ldots\\ B=0, \quad \sin(ka)=0 \quad \Rightarrow \quad ka=n\pi, \quad n=1,2,3,\ldots\end{cases}$$

Rozwiązania równania Schrödingera zapisujemy jako

$$\begin{cases}\varphi_n^+(x)=B\cos\left(\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{x}{a}\right),\\ \varphi_n^-(x)=A\sin\left(\pi n\frac{x}{a}\right).\end{cases}$$

Zauważmy, że $\varphi_n^+(x)=\varphi_n^+(-x)$ zaś $\varphi_n^-(x)=-\varphi_n^-(-x)$, więc $\varphi_n^+(x)$ nazywamy rozwiązaniami <u>parzystymi</u>, a $\varphi_n^-(x)$ <u>nieparzystymi</u>.

Wykład IV cd. Mechanika kwantowa

Normalizacja funkcji falowych

Warunek unormowania funkcji falowych przybiera postać

$$1 = \int_{-a}^{a} dx \left[\varphi_n^-(x)\right]^2 = A^2 \int_{-a}^{a} dx \sin^2\left(\pi n \frac{x}{a}\right) .$$

Wprowadzając zmienną $z \equiv \pi n x / a$ dostajemy

$$1 = A^2 \frac{a}{\pi n} \int_{-\pi n}^{\pi n} dz \sin^2 z = A^2 \frac{a}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dz \sin^2 z = A^2 \frac{a}{\pi} \pi = A^2 a \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{\sqrt{a}} ,$$

gdzie założono, że $A \in R$.

Dygresja matematyczna - obliczenie całki $\int_0^{2\pi} dz \sin^2 z$

$$\int_0^{2\pi} dz \sin^2 z = \int_0^{2\pi} dz \cos^2 z \quad \Rightarrow \quad \int_0^{2\pi} dz \sin^2 z = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} dz \underbrace{\left[\sin^2 z + \cos^2 z\right]}_{=1} = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} dz = \pi$$

W analogiczny sposób znajdujemy $B = 1/\sqrt{a}$ i funkcje falowe przyjmują ostateczną postać:

$$\begin{cases} \varphi_n^+(x) = \dfrac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\pi\left(n + \dfrac{1}{2}\right)\dfrac{x}{a}\right), \\ \varphi_n^-(x) = \dfrac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\pi n \dfrac{x}{a}\right). \end{cases}$$

Poziomy energii

W przypadku rozwiązań parzystych i nieparzystych wektor falowy przyjmuje, odpowiednio, wartości

$$\begin{cases} k_n^+ = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\dfrac{\pi}{a}, \quad n = 0,1,2,\ldots \\ k_n^- = n\dfrac{\pi}{a}, \quad n = 1,2,3,\ldots \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} E_n^+ = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)^2 \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n = 0,1,2,\ldots \\ E_n^- = n^2 \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n = 1,2,3,\ldots \end{cases}$$

Widzimy, że wartości energii opowiadające parzystym i nieparzystym stanom układają się na przemian. Ponieważ $(n + 1/2)^2 = (2n+1)^2/4$ oraz $n^2 = (2n)^2/4$, poziomy energii można zapisać jako

$$\boxed{E_n = l^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad l = 1,2,3,\ldots}$$

Możliwe długości fali

Ponieważ wektor falowy k odpowiada fali o długości $\lambda = 2\pi / k$, mamy

$$\begin{cases} \lambda_n^+ = \dfrac{2a}{\left(n+\dfrac{1}{2}\right)}, & n = 0,1,2,\ldots \\ \lambda_n^- = \dfrac{2a}{n}, & n = 1,2,3,\ldots \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \frac{\lambda}{2} = \frac{2a}{n}, \quad n = 1,2,3,\ldots$$

Stany uwięzione w jamie odpowiadają falom stojącym. Całkowita wielokrotność połówek fali równa jest długości jamy.