

Wykład VI

Podstawy fizyki kwantowej

Jednowymiarowy próg i jama

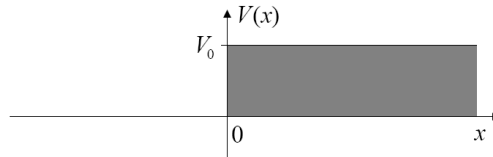
Próg potencjału

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

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



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 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (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

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

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 $E - V_0 = \frac{\hbar^2 p^2}{2m}$.

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 $E - V_0 = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m}$. Rozwiązanie $\sim e^{qx}$ trzeba odrzucić, tzn. przyjąć $H = 0$, gdyż $e^{qx} \rightarrow \infty$ przy $x \rightarrow \infty$, więc nie można by unormować funkcji falowej. Rozwiązanie dla $x > 0$ ma ostatecznie postać $\varphi(x) = Ke^{-qx}$.

Wykład VI cd.

Podstawy fizyki kwantowej

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

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

dostarczają równań

1) $(E - V_0) > 0$

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

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

2) $(E - V_0) < 0$

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

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

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

1) $(E - V_0) > 0$

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

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

2) $(E - V_0) < 0$

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

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 $q \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty} \infty$, więc dla nieskończenie wysokiego progu ($V_0 = \infty$) rozwiązanie przyjmuje postać

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

czyli funkcja falowa nie wnika wtedy pod próg.

Wykład VI cd.

Podstawy fizyki kwantowej

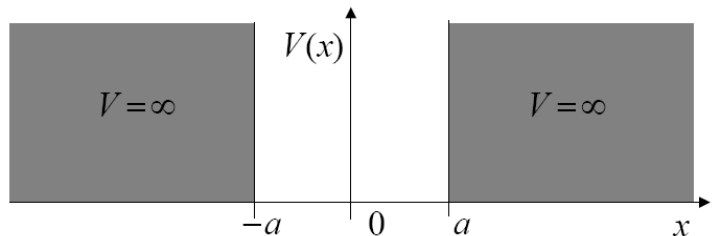
Nieskończenie wysoka jama potencjału

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

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



W obszarach $x < -a$ i $x > a$ funkcja falowa znika $\varphi(x) = 0$, natomiast dla $-a \leq x \leq a$ 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

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

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 parzystymi, a $\varphi_n^-(x)$ nieparzystymi.

Wykład VI cd.

Podstawy fizyki kwantowej

Normalizacja funkcji falowych

Warunek unormowania funkcji falowych przybiera postać

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

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

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

gdzie założono, że $A \in \mathbb{R}$.

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

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

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

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

Poziomy energii

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

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

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

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Wykład VI cd.

Podstawy fizyki kwantowej

Możliwe długości fali

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

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

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

