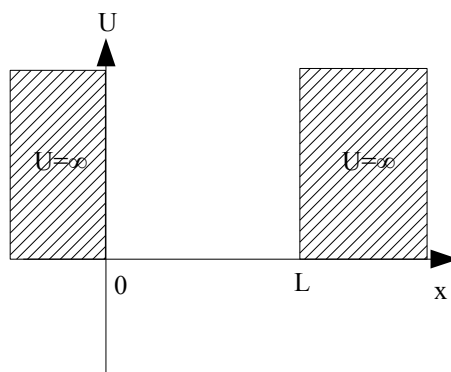


Nieskończona jednowymiarowa studnia potencjału

Zagadnienie dane jest następująco: znaleźć funkcje własne i wartości własne operatora energii dla cząstki umieszczonej w nieskończonej studni potencjału, przy czym cząstka porusza się wyłącznie w jednym wymiarze. Rozkład potencjału przedstawia się następująco:



gdzie prostokątne zakreskowane obszary oznaczają położenia, w których potencjał jest nieskończony. Na przedziale $(0, L)$ potencjał jest równy zero. Wynika z tego że:

- cząstka może znajdować się tylko w przedziale $(0, L)$, lub równoważnie
- funkcje własne operatora energii mogą mieć niezerowe wartości tylko w przedziale $(0, L)$

Na podstawie powyższego zakłada się, że funkcje własne operatora energii mają wartość zero w punktach $x = 0$ oraz $x = L$. Są to tzw. warunki brzegowe.

Zagadnienie własne operatora energii wyraża się następująco:

$$\hat{H} \Phi_n(x) = E_n \Phi_n(x)$$

Jest to tzw. równanie Schrödingera niezależne od czasu. Aby je rozwiązać, należy podstawić po lewej stronie odpowiedni do danej sytuacji fizycznej operator energii, czyli hamiltonian H . W obszarze $(0, L)$ cząstka jest swobodna, gdyż potencjał jest w nim stały (siła jest ujemnym gradientem potencjału, w rozważanym przypadku jest to po prostu pochodna wzięta ze znakiem minus, gdyż zagadnienie jest jednowymiarowe – pochodna funkcji stałej jest równa zero), a poza tym obszarem cząstka znaleźć się nie może. Rozważać należy zatem funkcje własne jedynie w przedziale $(0, L)$.

Operator składowej x pędu ma postać:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Ponieważ potencjał w rozważanym obszarze jest równy zero, hamiltonian składa się wyłącznie z części, związanej z energią kinetyczną i ma postać:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Mając hamiltonian można rozpocząć szukanie jego funkcji własnych. Równanie Schrödingera z rozważanym hamiltonianem ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi_n(x)}{\partial x^2} = E_n \Phi_n(x)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi_n(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m E_n}{\hbar^2} \Phi_n(x)$$

Z powyższego wynika, że druga pochodna funkcji własnej jest proporcjonalna do tejże funkcji własnej. Własność tę mają funkcje harmoniczne, czyli *sin* oraz *cos*. Ponieważ dla obu tych funkcji zachodzi zależność:

$$\frac{d^2 f(kx)}{dx^2} = -k^2 f(kx)$$

wiadomo, że czynnikiem liniowym w argumencie funkcji harmonicznego jest pierwiastek ze współczynnika, związanego z energią, który pojawia się w równaniu Schrödingera.

Biorąc to wszystko pod uwagę przyjmuje się postać funkcji własnej jako kombinację liniową funkcji harmonicznego z argumentem skalowanym pierwiastkiem współczynnika wziętego z równania Schrödingera:

$$\Phi_n(x) = A \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} x\right) + B \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} x\right)$$

W uparciu o powyższe rozwiązanie ogólne należy znaleźć rozwiązanie szczególne. Potrzebna jest do tego znajomość współczynników *A* oraz *B*.

Po pierwsze należy zauważyć, że pierwszy warunek brzegowy mówi, że funkcja własna zeruje się w punkcie $x=0$. Ponieważ $\sin(0)=0$, zaś $\cos(0)=1$ dla spełnienia tego warunku brzegowego konieczne jest, aby $B=0$. Wynika z tego, że szukana funkcja własna operatora energii dla nieskończonej studni potencjału ma postać:

$$\Phi_n(x) = A \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} x\right)$$

Funkcje harmoniczne są okresowe. Oznacza to, że zwiększenie ich argumentu o całkowitą wielokrotność pewnej charakterystycznej wartości, zwanej okresem, nie zmienia wartości funkcji, innymi słowy, że wartości funkcji okresowej powtarzają się co okres. O ile musi zmienić się wartość argumentu *x* funkcji własnej, aby uzyskać ponownie tą samą jej wartość? Biorąc pod uwagę wartość okresu funkcji harmonicznego oczekujemy, że okres funkcji własnej λ wyraża się następująco:

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}$$

$$\lambda = 2\pi \frac{\hbar}{\sqrt{2mE_n}}$$

Zwiększenie argumentu *x* o czynnik λ lub jego całkowitą wielokrotność nie ma wpływu na wartość funkcji własnej. Ponieważ zarówno dla $x=0$, jak dla $x=L$ funkcja własna powinna się zerować, należy się domyślać istnienia związku pomiędzy długością *L* a wyznaczonym okresem funkcji własnej λ , co z kolei oznacza, że długość *L* musi być powiązana z wartościami energii E_n .

Wartość stałej *A* można znaleźć z tzw. warunku normowania. Ze względu na prostotę rachunkową żąda się, aby funkcje własne miały normę równą 1. Norma w przestrzeniach L^2 , do których należą szukane funkcje własne, jest zazwyczaj tzw. normą indukowaną przez iloczyn skalarny:

$$\|\Phi\| = \sqrt{\langle \Phi | \Phi \rangle}$$

Sam iloczyn skalarny w przestrzeni $L^2(\mathbb{R})$ ma postać:

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Phi(x)} \Psi(x) dx$$

Żądanie, aby norma funkcji własnej była równa jeden jest równoważne żądaniu, aby:

$$\langle \Phi_n(x) | \Phi_n(x) \rangle = 1$$

Aby znaleźć wartość stałej A należy obliczyć wartość iloczynu skalarnego:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 \sin^2\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} x\right) dx &= |A|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} x\right) dx = \\ &= |A|^2 \left[\frac{L}{2} - \frac{\hbar}{4\sqrt{2mE_n}} \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \cdot 2L\right) \right] \end{aligned}$$

Drugi człon w nawiasie kwadratowym zeruje się z uwagi na drugi warunek brzegowy. Argument funkcji \sin w wyniku całkowania różni się od argumentu analizowanej funkcji własnej jedynie czynnikiem mnożącym, równym 2. Jeżeli funkcja własna operatora energii ma się zerować dla $x=L$, to również ten czynnik musi się zerować, bo wartość x , będąca całkowitą wielokrotnością L , daje argument funkcji \sin będący całkowitą wielokrotnością kąta π radianów, a dla takich kątów funkcja \sin się zeruje. Po uwzględnieniu tego faktu stała A może być wyznaczona w następujący sposób:

$$\begin{aligned} |A|^2 \frac{L}{2} &= 1 \\ |A|^2 &= \frac{2}{L} \\ A &= \sqrt{\frac{2}{L}} \end{aligned}$$

Szukane funkcje własne mają zatem następującą postać:

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} x\right)$$

Dozwolone wartości własne energii można znaleźć w oparciu o drugi warunek brzegowy. Ponieważ funkcje własne mają zerować się w punkcie $x=L$, zachodzi:

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} L &= \pi \cdot n, \quad n \in \mathbb{N} \setminus \{0\} \\ \frac{2mE_n}{\hbar^2} L^2 &= \pi^2 \cdot n^2 \end{aligned}$$

Warte zauważenia jest wyłączenie zera ze zbioru dopuszczalnych wartości n . Dla $n=0$ otrzymuje się funkcję własną całkowalną z kwadratem, ale trywialną – tożsamościowo równą zero. Oznacza to, że nie może istnieć nieruchoma cząstka w studni potencjału! W wyniku prostych przekształceń otrzymuje się następującą zależność na wartości własne energii cząstki w studni potencjału:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m L^2}, \text{ gdzie } n=1, 2, \dots$$

Uzyskaliśmy wynik, z którego jasno wynika, że energia cząstki w rozważanym zagadnieniu nie jest dowolna: jest ściśle zależna od wartości szerokości studni potencjału, ponadto jest całkowitą wielokrotnością pewnej niezerowej wartości minimalnej – wartości energii dla $n=1$ – mówimy, że energia w zagadnieniu jest skwantowana. Jest to typowe dla zagadnień mechaniki kwantowej w przypadku, gdy mamy do czynienia z zawężeniem możliwych wartości położenia do danego skończonego przedziału. Dokładnie z taką sytuacją mamy do czynienia w rozważanym zagadnieniu. Podstawiając powyższą zależność, otrzymuje się ostatecznie następującą postać funkcji własnych hamiltonianu cząstki w jednowymiarowej nieskończonej studni potencjału:

$$\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} x\right) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right), \text{ gdzie } n=1, 2, \dots$$

Przypadek trójwymiarowy - "pudełko potencjału"

Zagadnienie dane jest następująco: rozważane jest sześcienne pudełko potencjału o boku o długości L , którego jeden z wierzchołków znajduje się w punkcie $(0, 0, 0)$, a trzy krawędzie pokrywają się z osiami prostokątnego układu współrzędnych, tak że trzy z wierzchołków umieszczone są w odległości L od środka układu współrzędnych na jego osiach. Na zewnątrz pudełka potencjał jest nieskończony, a wewnątrz jest równy zero. Należy znaleźć funkcje własne i wartości własne operatora energii dla cząstki znajdującej się wewnątrz takiego pudełka.

Warto na początku zauważyć, że zagadnienie wzdłuż poszczególnych osi układu współrzędnych sprowadza się do zagadnienia na jednowymiarową nieskończoną studnię potencjału. Umiejętne przedstawienie zagadnienia "pudełka potencjału" pozwoli na wykorzystanie rozwiązania jednowymiarowego.

Hamiltonian cząstki swobodnej w przypadku trójwymiarowym przedstawia się następująco:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

Zakłada się, że szukane rozwiązanie jest postaci:

$$\Psi(\vec{r}) = f(x) \cdot g(y) \cdot h(z)$$

Jaką postać ma prawa strona równania Schrödingera bez czasu?

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} g(y) h(z) + f(x) \frac{\partial^2 g(y)}{\partial y^2} h(z) + f(x) g(y) \frac{\partial^2 h(z)}{\partial z^2} \right)$$

Jako funkcje f , g oraz h podstawione zostanie rozwiązanie zagadnienia jednowymiarowej nieskończonej studni potencjału wyrażone w odpowiednich zmiennych:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n_x}{L} x\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n_y}{L} y\right) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n_z}{L} z\right) = \\ &= \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{\pi n_x}{L} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_y}{L} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{L} z\right) \end{aligned}$$

Nietrudno pokazać, że ta funkcja jest unormowana do jedności. Parametry n_x , n_y i n_z pełnią analogiczną rolę, jak w rozwiązaniu jednowymiarowym – parametryzują długość wektora falowego (tym razem względem każdego wymiaru z osobna). Wstawiając tak skonstruowaną funkcję własną do równania Schrödingera po jego lewej stronie, otrzymuje się następującą stronę prawą:

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \Psi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{L^2} \vec{n}^2 \Psi(\vec{r})$$

$$\text{gdzie } \vec{n} = (n_x, n_y, n_z), \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Z równania tego można wywnioskować, że wartości własne energii dla zagadnienia cząstki swobodnej w “pudełku potencjału” wyrażają się następująco:

$$E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 \vec{n}^2}{L^2}, \quad \text{gdzie } \vec{n}^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2, \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Funkcje własne operatora energii mają postać:

$$\Psi(\vec{n}) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{\pi n_x}{L} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_y}{L} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{L} z\right), \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

Autor: Adam Drzewiecki <A.Drzewiecki@ztpnet.pl>