Politechnika Wrocławska

Rozwiązania niezależnych od czasu równań Schrödingera:

nieskończenie głęboka studnia potencjału i oscylator harmoniczny

Mariusz Adamski

Plan prezentacji:

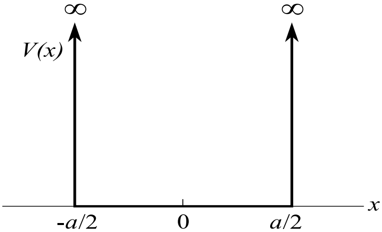
1. Potencjał nieskończenie głębokiej studni prostokątnej.
2. Potencjał oscylatora harmonicznego.

Nieskończenie głęboka studnia potencjału

Potencjał nieskończenie głębokiej studni prostokątnej można zapisać następująco:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < -a/2 \quad \text{lub} \quad x > a/2, \\ 0, & -a/2 < x < a/2. \end{cases}$$

Potencjał taki ma tę własność, że wiąże cząstkę o dowolnej skończonej energii $E \geq 0$.



Nieskończenie głęboka studnia potencjału

W obszarze studni ogólne rozwiązanie niezależnego od czasu równania Schrödingera można zapisać w postaci fali stojącej:

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx, \quad \text{gdzie} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad -a/2 < x < a/2.$$

Funkcja falowa powinna znikać poza studnią – w szczególności:

$$A\sin\frac{ka}{2} + B\cos\frac{ka}{2} = 0,$$

oraz

$$A\sin\left(-\frac{ka}{2}\right) + B\cos\left(-\frac{ka}{2}\right) = 0 \Rightarrow -A\sin\frac{ka}{2} + B\cos\frac{ka}{2} = 0.$$

Nieskończenie głęboka studnia potencjału

Po dodaniu powyższych równań otrzymamy:

$$2B\cos\frac{ka}{2} = 0,$$

natomiast po odjęciu

$$2A\sin\frac{ka}{2} = 0.$$

Nie istnieje taka wartość parametru k, dla której $\cos\frac{ka}{2}$ i $\sin\frac{ka}{2}$ równe są jednocześnie zeru. Musimy zatem przyjąć

$$A = 0 \quad \text{i} \quad \cos\frac{ka}{2} = 0$$

lub

$$B = 0 \quad \text{i} \quad \sin\frac{ka}{2} = 0.$$

Nieskończenie głęboka studnia potencjału

Otrzymujemy zatem dwa rodzaje rozwiązań:

$$\psi(x) = B\cos kx, \quad \text{gdzie} \quad \cos\frac{ka}{2} = 0,$$

oraz

$$\psi(x) = A\sin kx, \quad \text{gdzie} \quad \sin\frac{ka}{2} = 0.$$

Dozwolone wartości k dla rozwiązań pierwszego rodzaju

$$\frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \ldots \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 3, 5, \ldots$$

Natomiast dla rozwiązań drugiego rodzaju

$$\frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 2, 4, 6, \ldots$$

Nieskończenie głęboka studnia potencjału

Ostatecznie funkcje własne dla potencjału nieskończenie głębokiej studni prostokątnej przybierają postać:

$$\psi_n(x) = B_n \cos k_n x, \qquad \text{gdzie} \quad k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 3, 5, \ldots$$

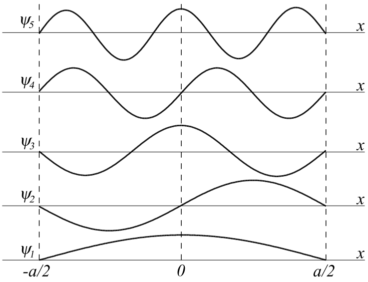
oraz

$$\psi_n(x) = A_n \sin k_n x, \qquad \text{gdzie} \quad k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 2, 4, 6, \ldots$$

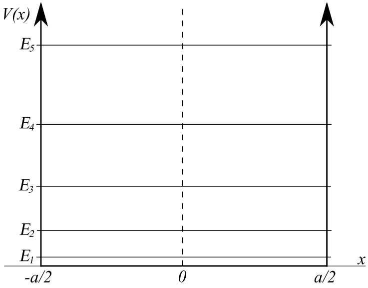
Liczb kwantowych n można użyć także do numeracji wartości własnych, odpowiadających danym funkcjom własnym ψ_n. Ze związku $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ oraz faktu, że $k_n = n\pi/a$ otrzymujemy

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Nieskończenie głęboka studnia potencjału



Kilka pierwszych funkcji własnych



Kilka pierwszych wartości własnych

Plan prezentacji:

1. Potencjał nieskończenie głębokiej studni prostokątnej.
2. Potencjał oscylatora harmonicznego.

Plan prezentacji:

√ 1. Potencjał nieskończenie głębokiej studni prostokątnej.
2. Potencjał oscylatora harmonicznego.

Potencjał oscylatora harmonicznego

Istnieje ograniczona ilość potencjałów, dla których można rozwiązać równanie Schrödingera metodami analitycznymi. Wśród nich znajduje się bardzo ważny potencjał oscylatora harmonicznego. Może on zostać użyty do opisu wielu układów, w których jakaś wielkość wykonuje małe drgania wokół położenia równowagi.

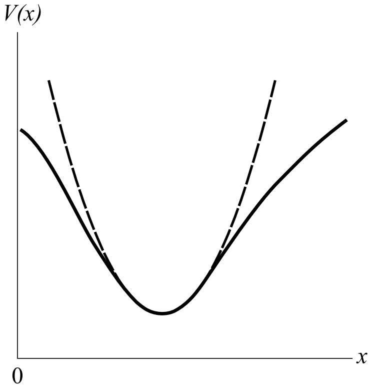
Potencjał $V(x)$ musi przyjmować wartość minimalną w położeniu równowagi; ponieważ występujące w rzeczywistości potencjały są funkcjami ciągłymi, prawie zawsze można przybliżyć je przez parabolę w pobliżu minimum.

Potencjał oscylatora harmonicznego

Wybierając początek osi x i osi energii tak, by znajdowały się one w tym minimum, paraboliczną funkcję potencjału możemy zapisać jako:

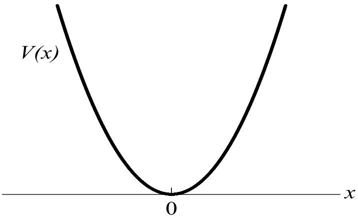
$$V(x) = \frac{k}{2}x^2,$$

gdzie k jest pewną stałą.



Potencjał oscylatora harmonicznego

Cząstka poruszająca się pod wpływem takiego potencjału doznaje działania liniowej siły zwrotnej $F(x) = -\frac{dV}{dx} = -kx$. Z mechaniki klasycznej wiemy, że cząstka poruszająca się pod wpływem takiej



siły porusza się ruchem harmonicznym z częstością

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Stacjonarne równanie Schrödingera opisujące ten przypadek ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2\psi = E\psi.$$

Potencjał oscylatora harmonicznego

Rozwiązując to równanie, znajdujemy wartości własne energii oscylatora

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

co jest bliskie przewidywaniom Plancka, według którego energia cząstki wykonującej ruch harmoniczny przybiera wartości

$$E_n = n\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Okazuje się, że postulat Plancka nie przewidywał istnienia drgań zerowych.

Potencjał oscylatora harmonicznego

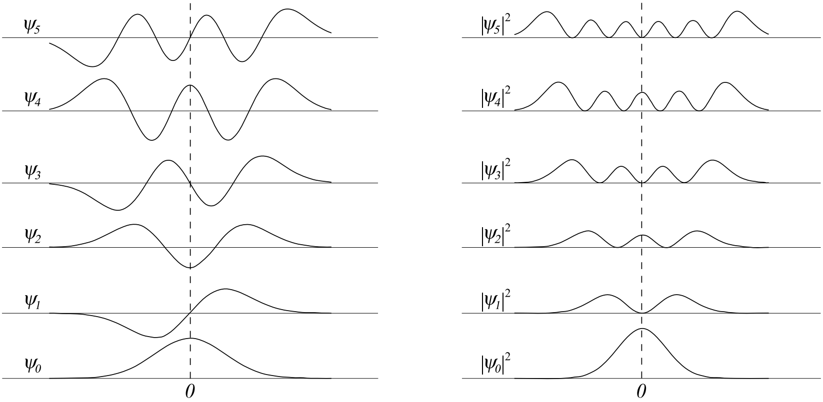
Funkcje własne oscylatora harmonicznego we współrzędnej bezwymiarowej $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ są postaci

$$\psi_n(\xi) = A_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2},$$

gdzie H_n to n-ty wielomian Hermite'a, a stała normalizacyjna $A_n = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2}$.

Liczba kwantowa	Funkcja własna
0	$A_0 e^{-\xi^2/2}$
1	$A_1 2\xi e^{-\xi^2/2}$
2	$A_2(4\xi^2 - 2)e^{-\xi^2/2}$
3	$A_3(8\xi^3 - 12\xi)e^{-\xi^2/2}$
4	$A_4(16\xi^4 - 48\xi^2 + 12)e^{-\xi^2/2}$
5	$A_5(32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi)e^{-\xi^2/2}$

Potencjał oscylatora harmonicznego



Kilka pierwszych funkcji własnych i odpowiadających im gęstości prawdopodobieństwa.

Plan prezentacji:

√ 1. Potencjał nieskończenie głębokiej studni prostokątnej.
2. Potencjał oscylatora harmonicznego.

Plan prezentacji:

√ 1. Potencjał nieskończenie głębokiej studni prostokątnej.
√ 2. Potencjał oscylatora harmonicznego.

Politechnika Wrocławska

Bibliografia:

[1] *Fizyka kwantowa* – R. Eisberg, R. Resnick
[2] *Mechanika kwantowa* – L. I. Schiff
[3] *Wstęp do mechaniki kwantowej* – R. L. Liboff