Řešený příklad – potenciálové jámy

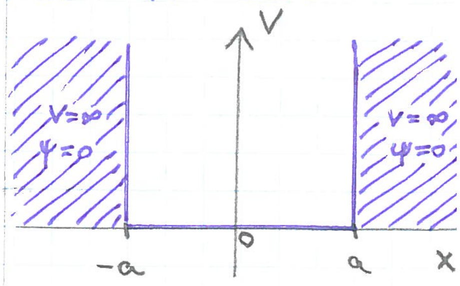
QMI-Př J1

① STACIONÁRNÍ STAVY V ∞-HLUBOKÉ JÁMĚ

(SR) $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$; kde $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

a $V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pro } |x|<a \\ \infty & \text{pro } |x|>a \end{cases}$

obr – potenciál



→ jen diskrétní (bodové) spektrum $\hat{H}$

(∗) okrajová podmínka $\psi(a) = \psi(-a) = 0$

• řešení (SR) v oblasti $|x|<a$:

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

def: $\hbar k = p = \sqrt{2mE}$

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

tj $\psi''(x) = -k^2\psi(x)$

obecné řešení $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

nebo $A\cos kx + B\sin kx$ Ⓐ

nebo $A\sin k(x+\delta)$ Ⓑ

který z těchto tvarů je výhodnější záleží na způsobu řešení viz Ⓐ nebo Ⓑ

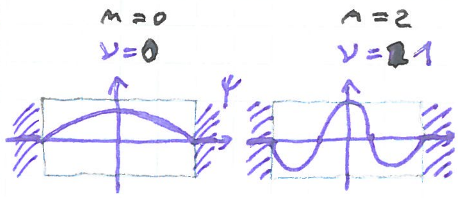
Ⓐ užití symetrie $V(x) = V(-x)$

⟹ lze hledat řešení s danou paritou

∘ n sudé: $\psi(x) = N\cos(kx)$

+okraj. podm. (∗) $0 = \psi(a) = \psi(-a) = N\cos ka$

$\Leftrightarrow$ $ka = \nu\pi + \frac{\pi}{2}$ $\nu = 0, 1, 2, 3\ldots$

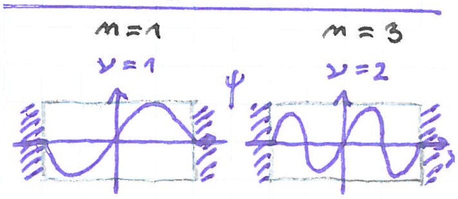


$k_\nu = \frac{\pi}{2a}(2\nu+1)$

∘ n liché: $\psi(x) = N\sin(kx)$

(∗) → $0 = \psi(a) = -\psi(-a) = N\sin ka$

$\Leftrightarrow$ $ka = \nu\pi$ $\nu = 1, 2, 3, \ldots$



$k_\nu = \frac{\pi}{2a}(2\nu)$

shrnutí: $k_n = \frac{\pi}{2a}(n+1)$; kde $n = 0, 1, 2, \ldots$

a energie $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar\pi(n+1)}{2a}\right)^2$ a

$$\boxed{\psi_n = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}}\sin k_n a & n \text{ liché} \\ \frac{1}{\sqrt{a}}\cos k_n a & n \text{ sudé} \end{cases}} \quad (\uparrow)$$

Ⓑ alternativní řešení .. přímá aplikace okraj. podmínek

$\psi(-a) = 0$ ⟹ $\psi(x) = A\sin k(x+a)$

$\psi(a) = 0 = A\sin 2ka$ tj $2ka = (n+1)\pi$ $n = 0, 1, 2\ldots$

rozmyslete, že (↑) a (↓) vyjadřují totožné funkce! (až na znaménko)

tj opět $k_n = \frac{\pi}{2a}(n+1)$ a $\boxed{\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin k_n(x+a)}$ (↓)

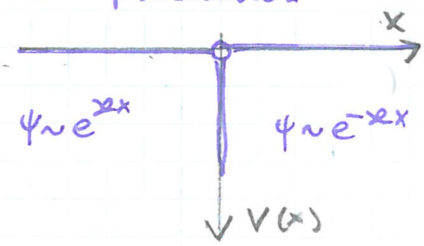
② Vázaný stav v δ-jámě

opět $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ ale

$$V(x) = -\lambda\,\delta(x)$$

vázaný stav pro $E<0$ ... $\psi(x\to\infty)=\psi(x\to-\infty)=0$ (*)

obr - potenciál



pro $E<0$ diskrétní (bodové) spektrum

pro $E>0$ spojité spektrum - zde neřešíme

- **řešení pro $x<0$** ... def $\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E|}$

$$\psi''(x) = \kappa^2\psi(x) \qquad E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$$

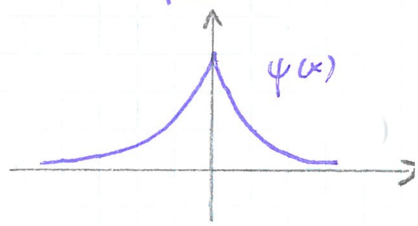
$$\to \quad \psi_-(x) = N_- e^{\kappa x} + \underbrace{\cancel{N' e^{-\kappa x}}}_{=0 \text{ podle } (*)}$$

- **řešení pro $x>0$**

$$\psi''(x) = \kappa^2\psi(x)$$

$$\to \quad \psi_+(x) = \underbrace{\cancel{N' e^{\kappa x}}}_{=0 \text{ podle } (*)} + N_+ e^{-\kappa x}$$

vlnová fce



- **podmínky na napojování v $x=0$**
  - spojitost $\quad \psi_-(0)=\psi_+(0) \iff N_-=N_+\equiv N$
  - skok v derivaci $\psi'(x)$ (z δ-chování V):

$$\Delta\psi'(0) \equiv \psi'_+(0)-\psi'_-(0) = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi''(x)\,dx \overset{(SR)}{=} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)\psi\,dx$$

neboli

$$-\kappa N - \kappa N = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}N \quad\to\quad \kappa = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$$

toto je vlastně kvantovací podm. na energii, neboť

$$\boxed{E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}}$$

- **normování $\psi(x)$:**

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2dx = |N|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\kappa|x|}dx = |N|^2\frac{1}{\kappa} = 1$$

tj. $N = \sqrt{\kappa}$

Závěr:
- $\exists$ právě jeden vázaný stav s $E = -\frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}$ a vl. fcí $\psi(x) = \sqrt{\kappa}\,e^{-\kappa|x|}$, kde $\kappa = \frac{m\lambda}{\hbar^2}$
- dále $\forall\, E>0$ $\exists$ dva stavy (lin. nez.) ze spoj. části spektra

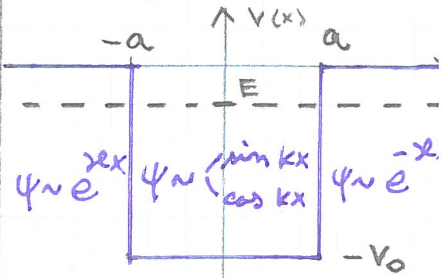
$\to$ viz. teorie rozptylu příští semestr

③ Obecná pravoúhlá jáma

(SR) $\hat{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$

kde $V(x) = -V_0\, \chi_{\langle -a,a\rangle}(x)$

obr – potenciál



diskrétní spektrum pro nějaká $E \in (-V_0, 0)$

(spojité .. $\forall E > 0$)

• **řešení pro $|x|<a$**

def k: $0 < V_0 + E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

(SR): $\psi'' = -k^2\psi$

$\Rightarrow \psi = A\sin kx + B\cos kx$

• **řešení (SR) pro $|x|>a$**

def κ: $0 > E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$

$\psi'' = \kappa^2\psi$

$\psi = C e^{-\kappa|x|}$

→ κ a k se spínají:

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv R^2 \quad (\bullet)$$

UŽITÍ SYMETRIE

• napojování v $|x|=a$ ... sudá řešení

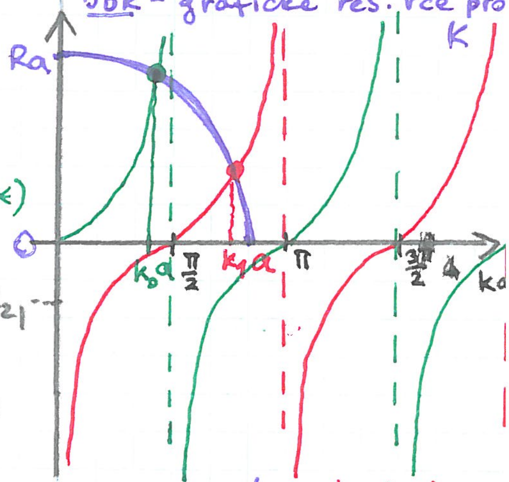
spojitost ψ a ψ' ⟷ spojitost $\frac{\psi'}{\psi}$

$$\frac{\psi'(a)}{\psi(a)} = -k\frac{\sin ka}{\cos ka} = -\kappa\frac{e^{-\kappa x}}{e^{-\kappa x}}$$

neboli $\boxed{ka\,\mathrm{tg}\,ka} = a\kappa = \boxed{\sqrt{(Ra)^2 - (ka)^2}}$ (*)

grafické řešení ⟶ $k_0, k_2, \dots$

OBR – grafické řeš. rce pro k



→ řešení $k_0\ k_1\ k_2\ k_3 \dots$

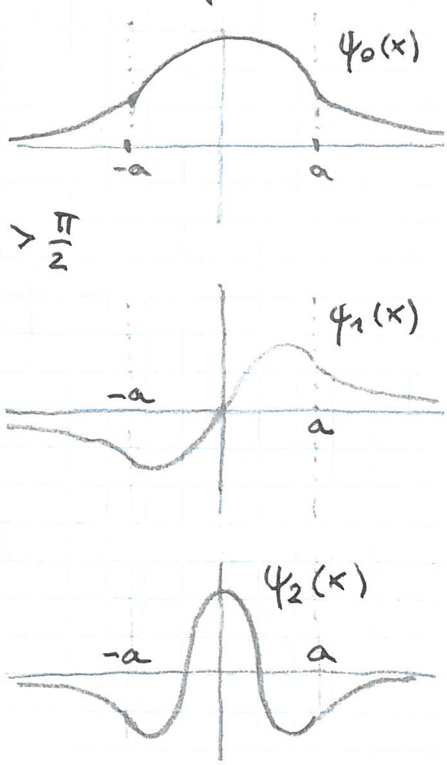
• napojování v $|x|=a$ .. lichá řešení

$$\frac{\psi'(a)}{\psi(a)} = \frac{k\cos ka}{\sin ka} = -\kappa$$

neboli $\boxed{-ka\,\mathrm{cotg}\,ka} = \kappa a = \boxed{\sqrt{(Ra)^2 - (ka)^2}}$ (*)

grafické řešení ... $k_1, k_3, k_5, \dots$

vlnové fce:



Závěr: – řešení k_0 existuje vždy

– řešení k_1 existuje pokud $Ra = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}\cdot a > \frac{\pi}{2}$

– řešení k_n existuje pro $\boxed{\frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0} > \frac{\pi}{2}n}$

každopádně konečný počet váz. stavů

neboli $V_0 a^2 > \frac{\hbar^2 \pi n}{4m}$

Energie: $\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} - V_0}$

pro dané k_n lze dopočítat normalizaci v ψ,
ale nestojí za to

(3a) ∞-hluboká jáma jako limita $V_0 \to \infty$:

z obrázku na předch. straně:

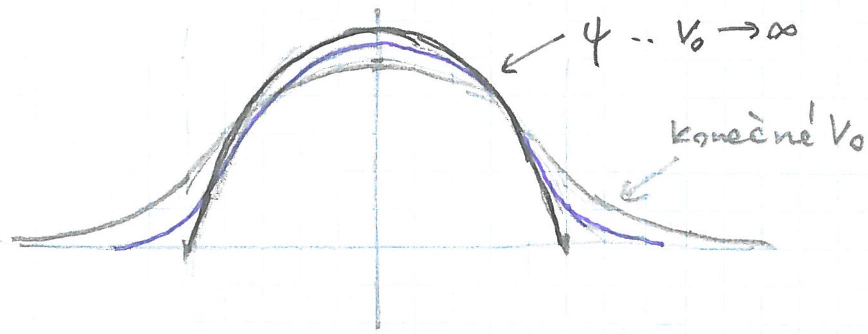
$$V_0 \to \infty \Rightarrow R \to \infty \Rightarrow k_0 a \to \frac{\pi}{2} \quad k_1 a \to \pi$$

obecně $k_n = \frac{\pi}{2a}(n+1)$

přitom $E_n \to -V_0 + \frac{\hbar^2 k_n}{2m}$ .. třeba posunout $+V_0$, aby dno jámy $V=0$

← SROVNEJ s (1)

vlnová fce:



(3b) δ-potenciál jako limita

nyní limita: $a \to 0$ a současně $V_0 = \frac{\lambda}{2a} \to \infty$ takže $2a \cdot V_0 = \lambda$

přitom z rovnice $(\circ)$ $\rho^2 = R^2 a^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\lambda}{2a}a^2 = \frac{\lambda m a}{\hbar^2} \to 0 \quad (\Delta)$

neboli $(ak_0) \to 0$ (ve skutečnosti $k_0 \sim \frac{1}{\sqrt{a}}$ ... lepší hledat $\varkappa_0$):

$$(*): \quad ak_0 \, \mathrm{tg}(ak_0) \simeq (ak_0)^2 = \underbrace{\rho^2 - \varkappa^2 a^2}_{\text{podle } (\circ)} \underbrace{= \varkappa a}_{\text{podle } (*)}$$

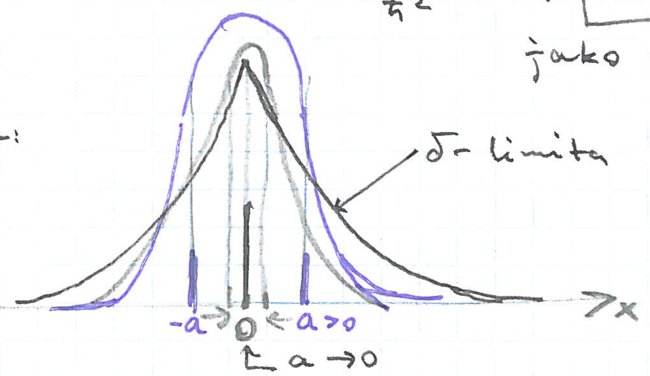
řešíme jako kvadrat. rci:

jediné kladné řeš.: $\varkappa a = \frac{1}{2}\left(-1 + \sqrt{1+4\rho^2}\right) \underset{\rho \to 0}{\simeq} \rho^2$

tj $(\Delta) \Rightarrow \varkappa a = \frac{\lambda m a}{\hbar^2}$ tj $\boxed{\varkappa = \frac{\lambda m}{\varkappa^2}}$ ✓

jako pro δ-jámu

vlnová fce:



SROVNEJ s (2)

POZNÁMKA:

Všechny nespojitosti a nekonečna v potenciálech je možno chápat jako limity případů, kde vše je konečné a hladké!