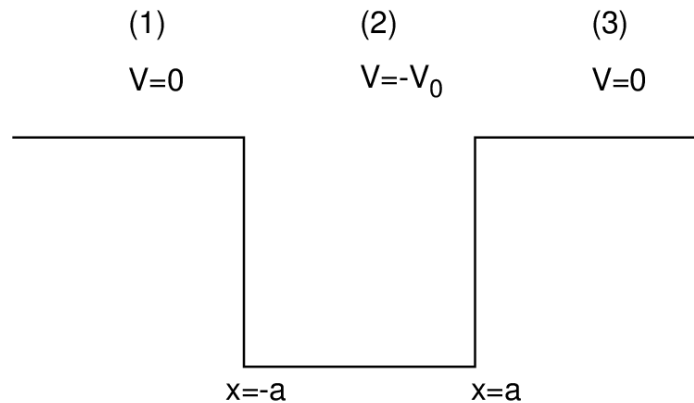


Kvantni delec v končni potencialni jami

Sedaj si pogledjmo gibanje delca v potencialu, ki v hipu pade s potenciala 0 na potencial $-V_0$ in nato po razdalji $2a$ naraste nazaj na vrednost 0. Takšno potencialno funkcijo zapišemo kot

$$V(x) = \begin{cases} 0, & (x \leq -a) \vee (x \geq a) \\ -V_0, & -a < x < a \end{cases}$$



Slika 1: Odvisnost potenciala od položaja delca.

Za klasične delce imamo primer, če pridejo na kratek in zelo strm klanec navzdol in, ko se spustijo v jamo, imajo potem kratko ravnino, nato pa se dvignejo na prvotno višino. Pri klasičnih delcih imamo dve možnosti. Delci imajo lahko skupno energijo pozitivno. V tem primeru se delci gibljejo po ravnini, se spustijo v jamo in potem se vsi dvignejo iz jame. Vsi delci preidejo oviro, ki jo imajo pri gibanju. Delci imajo lahko skupno energijo negativno, vendar večjo kot je potencial na dnu jame. V tem primeru se delci gibljejo med stenama jame, kot so se gibal v neskončni potencialni jami. Delci so ves čas v jami in je nikoli ne morejo zapustiti.

V kvantnem opisu moramo rešiti stacionarno Schrödingerjevo enačbo na prvem, drugem in tretjem območju (glej sliko 1). Oglejmo si najprej primer, ko je energija delca pozitivna ($E > 0$). Na prvem in tretjem področju imamo enačbo enako enačbi, kot smo jo imeli pri prostem delcu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1.$$

Tu imamo rešitvi

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

in

$$\psi_3(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}.$$

Velja še $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$. Na drugem področju pa imamo isto enačbo in rešitev kot na potencialnem skoku

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - V_0\psi_2 = E\psi_2.$$

$$\psi_2(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx}.$$

q je v tem primeru $\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} = q^2$, Celotna valovna funkcija mora biti zvezna, zato mora veljati, da je

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a), \psi_2(a) = \psi_3(a),$$

prav tako mora biti zvezen odvod

$$\frac{d\psi_1}{dx}(-a) = \frac{d\psi_2}{dx}(-a), \frac{d\psi_2}{dx}(a) = \frac{d\psi_3}{dx}(a).$$

Ko sistem rešimo, dobimo podobno rešitev, kot smo jo imeli pri gibanju na plasti, le da je tu dolžina še enkrat daljša in q je drugačen. Delež odbitega toka na oviri oziroma verjetnost, da se delec na jami odbije, je

$$\eta_{od} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(2qa)}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(2qa) + 4k^2q^2}$$

ter delež prepuščenega toka, oziroma verjetnost, da delec preide potencialno jamo je

$$\eta_{pre} = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{4k^2q^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2(2qa) + 4k^2q^2}$$

Takšnemu gibanju rečemo tudi sipanje delcev na potencialu. V tem primeru je delec prost in ima lahko kakršno koli energijo, pri svojem gibanju pa se siplje na jami, to pomeni, da se del curka delcev odbije, del pa preide jamo kot smo videli že pri potencialni plasti.

Sedaj si pogledjmo še primer, ko je energija delca negativna, mora pa biti večja od $-V_0$, saj je energija delca njegova skupna energija ($0 > E > -V_0$), torej vsota kinetične in potencialne energije. Kinetična energija pa je vedno nenegativna.

Na prvem in tretjem delu imamo sedaj rešitvi

$$\psi_1(x) = Ae^{-\chi x} + Be^{\chi x}$$

$$\psi_3(x) = Fe^{-\chi x} + Ge^{\chi x}$$

ter na drugem delu

$$\psi_2(x) = C\sin(qx) + D\cos(qx),$$

ker je delec vezan jami. χ je definirana kot $\frac{2m|E|}{\hbar^2} = \chi^2$ in q kot $\frac{2m(V_0-|E|)}{\hbar^2} = q^2$. Gostota delca mora biti povsod končna, $e^{-\chi x}$ na prvem delu pa gre preko vseh meja, zato mora biti koeficient A enak 0, prav tako gre preko vseh meja funkcija $e^{\chi x}$, zato mora biti tudi koeficient G enak 0. Tudi tu morata biti funkcija in njen odvod zvezen, iz česar sledi

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a), \psi_2(a) = \psi_3(a),$$

$$\frac{d\psi_1}{dx}(-a) = \frac{d\psi_2}{dx}(-a), \frac{d\psi_2}{dx}(a) = \frac{d\psi_3}{dx}(a).$$

Iz teh dveh pogojev dobimo naslednji dve enačbi, ki povezujeta koeficiente A, B, C in D

$$Be^{-\chi a} = C\sin(-qa) + D\cos(-qa)$$

$$C\sin(qa) + D\cos(qa) = Fe^{-\chi a}$$

$$\chi Be^{-\chi a} = Cq\cos(-qa) - Dq\sin(-qa)$$

$$Cq\cos(qa) - Dq\sin(qa) = -\chi Fe^{-\chi a}$$

Sedaj upoštevamo, da je sinus liha funkcija in kosinus soda ($\sin(-x) = -\sin(x)$, $\cos(-x) = \cos(x)$) in dobimo

$$Be^{-\chi a} = -C\sin(qa) + D\cos(qa)$$

$$C\sin(qa) + D\cos(qa) = Fe^{-\chi a}$$

$$\chi Be^{-\chi a} = Cq\cos(qa) + Dq\sin(qa)$$

$$Cq\cos(qa) - Dq\sin(qa) = -\chi Fe^{-\chi a}$$

Sedaj prvo enačbo pomnožimo s χ in jo odštejemo od tretje ter drugo s χ in jo prištejemo zadnji, s tem eliminiramo neznanki B in F ter dobimo

$$0 = C(q\cos(qa) + \chi\sin(qa)) + D(q\sin(qa) - \chi\cos(qa))$$

$$C(q\cos(qa) + \chi\sin(qa)) - D(q\sin(qa) - \chi\cos(qa)) = 0$$

Ti dve enačbi sedaj seštejemo in vsi členi, ki vsebujejo D, se izničijo. Dobimo

$$2C(q\cos(qa) + \chi\sin(qa)) = 0$$

Ta enačba ima dve možni rešitvi: (1) $C = 0$ in (2) $(q\cos(qa) + \chi\sin(qa)) = 0$. Če katero koli od teh dveh rešitev nesemo v enačbo, kjer imamo še spremenljivko D, dobimo

$$D(q\sin(qa) - \chi\cos(qa)) = 0.$$

Tudi v tem primeru imamo dve možni rešitvi enačbe: (a) $D = 0$ in (b) $(q\sin(qa) - \chi\cos(qa)) = 0$.

Skupaj imamo sedaj štiri možnosti:

(1a) $C = 0, D = 0$ V tem primeru dobimo, da je valovna funkcija povsod enaka 0, kar pomeni, da delca nimamo v sistemu. Ta rešitev fizikalno ni smiselna.

(1b) $C = 0$, $(q\sin(qa) - \chi\cos(qa)) = 0$. Tu dobimo $F = D\cos(qa)e^{\chi a}$ in $B = D\cos(qa)e^{\chi a}$. Valovne funkcije na posameznih delih so

$$\psi_1(x) = D\cos(qa)e^{\chi a}e^{\chi x}$$

$$\psi_2(x) = D\cos(qx)$$

$$\psi_3(x) = D\cos(qa)e^{\chi a}e^{-\chi x}$$

Konstanto D dobimo s pogojem, da je funkcija normirana ($\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1$). Energijo delca določimo s pomočjo enačbe $(q\sin(qa) - \chi\cos(qa)) = 0$, ki jo spremenimo v

$$\text{tg}(qa) = \frac{\chi}{q}$$

Sedaj upoštevajmo še definicijo za $q = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} = q^2$, ki jo spremenimo v

$$\frac{2mV_0}{\hbar^2} - \frac{2m|E|}{\hbar^2} = q^2$$

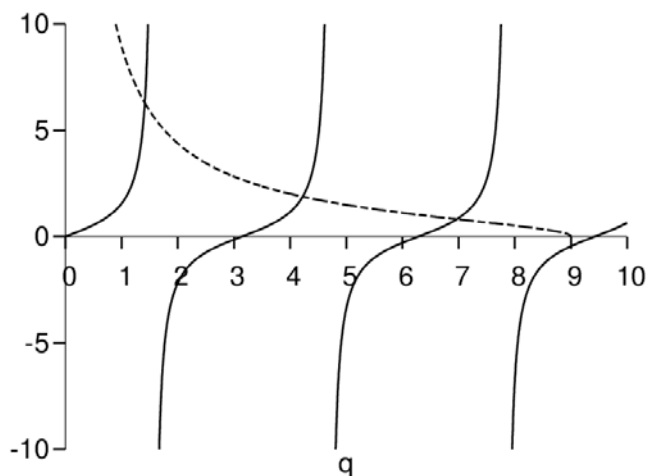
Prvi člen na levi poimenujmo z β^2 , drugi del pa je χ^2 in dobimo

$$\chi^2 = \beta^2 - q^2$$

ter za energijsko enačbo

$$\text{tg}(qa) = \frac{\sqrt{\beta^2 - q^2}}{q}$$

Ta enačba ni rešljiva analitično temveč le numerično. Rešitve so narisane na sliki 2.



Slika 2. Primer rešitev pri (1b) za $a=1$ ter $\beta=9$.

(2a) $D = 0$, $(q\cos(qa) + \chi\sin(qa)) = 0$. Tu dobimo $F = C\sin(qa)e^{\chi a}$ in $B = -C\sin(qa)e^{\chi a}$. Valovne funkcije na posameznih delih so

$$\psi_1(x) = -C\sin(qa)e^{\chi a}e^{\chi x}$$

$$\psi_2(x) = C\sin(qx)$$

$$\psi_3(x) = C\sin(qa)e^{\chi a}e^{-\chi x}$$

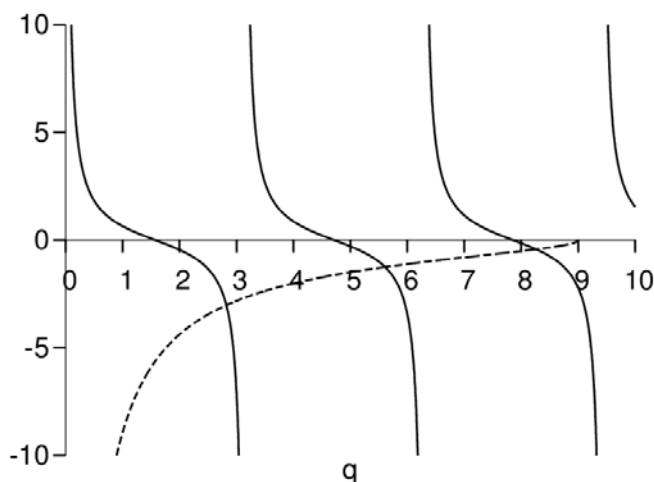
Tudi konstanto C dobimo s pogojem, da je funkcija normirana ($\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1$). Energijo delca določimo s pomočjo enačbe $(q\cos(qa) + \chi\sin(qa)) = 0$, ki jo spremenimo v

$$\text{ctg}(qa) = -\frac{\chi}{q}$$

ki se poenostavi na

$$\text{ctg}(qa) = -\frac{\sqrt{\beta^2 - q^2}}{q}.$$

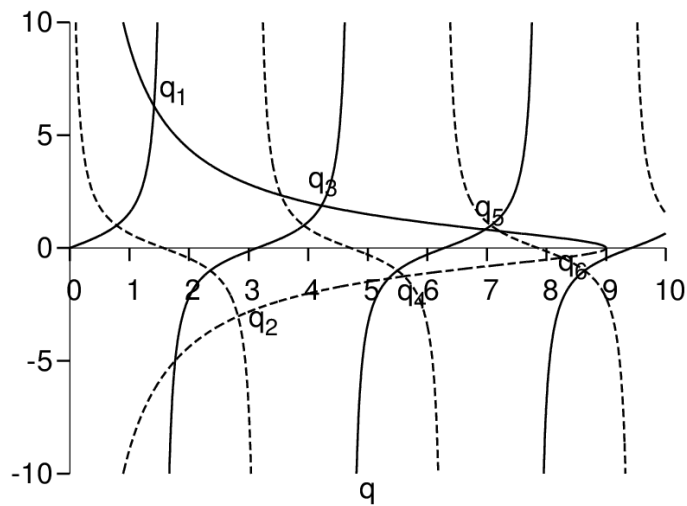
Tudi ta enačba ni rešljiva analitično temveč le numerično. Rešitve so narisane na sliki 3.



Slika 3. Primer rešitev pri (2a) za $a=1$ ter $\beta=9$.

(2b) $(q\sin(qa) - \chi\cos(qa)) = 0$, $(q\cos(qa) + \chi\sin(qa)) = 0$. Ta del nima rešitve, saj nimamo takšnih q , ki bi ustrezali obema enačbama.

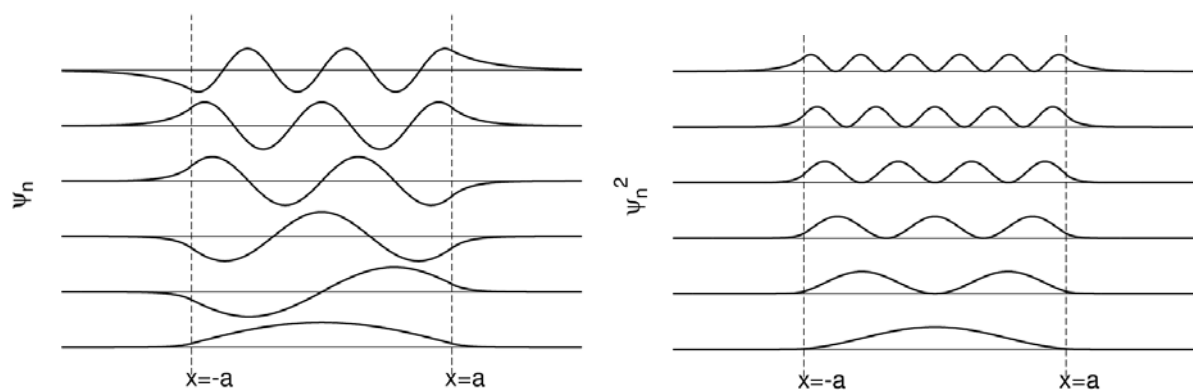
Na sliki 4 so narisana presečišča vseh krivulj in označeni različni q -ji, ki jih dobimo, v tabeli 1 pa rešitve ter njihove lastnosti. Na sliki 5 so narisane še vse valovne funkcije in gostote ter na sliki 6 energijski spekter.



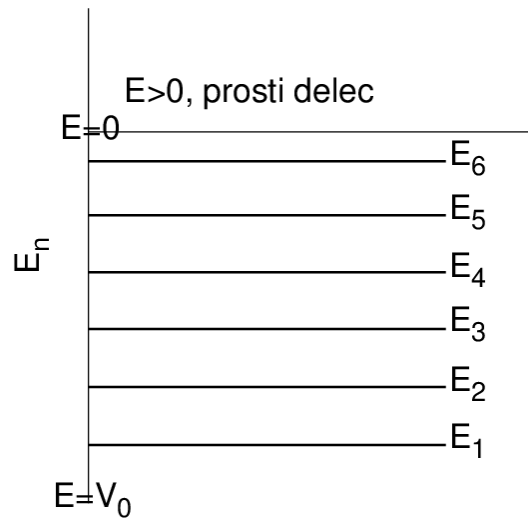
Slika 4. Vse rešitve za $a=1$ ter $\beta=9$.

Tabela 1: Rešitve za $a=1$ ter $\beta=9$.

Stanje	q	E_n	Lastnosti $\psi_n(x)$
osnovno	q_1	$\frac{\hbar^2 q_1^2}{2m} - V_0$	soda funkcija, brez ničel
prvo vzbujeno	q_2	$\frac{\hbar^2 q_2^2}{2m} - V_0$	liha funkcija, ena ničla
drugo vzbujeno	q_3	$\frac{\hbar^2 q_3^2}{2m} - V_0$	soda funkcija, dve ničli
tretje vzbujeno	q_4	$\frac{\hbar^2 q_4^2}{2m} - V_0$	liha funkcija, tri ničel
četrto vzbujeno	q_5	$\frac{\hbar^2 q_5^2}{2m} - V_0$	soda funkcija, štiri ničli
peto vzbujeno	q_6	$\frac{\hbar^2 q_6^2}{2m} - V_0$	liha funkcija, pet ničel



Slika 5: Krajevna odvisnost valovne funkcije in verjetnostne gostote za vsa vezana stanja za $a=1$ ter $\beta=9$.



Slika 6: Energijski spekter za kvantni delec v končni ravni potencialni jami za $a=1$ ter $\beta=9$.

Iz rezultatov vidimo, da je osnovno stanje soda funkcija, rečemo tudi, da je osnovno sodo, naslednje stanje je liho itd. To lastnost opazimo tudi pri drugih kvantnih sistemih. Pri končni potencialni jami imamo vedno končno število vezanih stanj in vedno imamo vsaj eno vezano stanje (pri rešitvi (1a) imamo vedno vsaj eno presečišče). Če se globina jame povečuje in širi, se povečuje število vezanih stanj. Višja stanja so šibkeje vezana. Pri verjetnostni gostoti vidimo, da je verjetnost, da najdemo delec zunaj jame, vse večja z večanjem energije.