

Kvantni delec v neskončni potencialni jami

Imejmo sedaj delec z maso m zaprt v enodimenzionalni škatli. Na delec znotraj škatle ne deluje nobena sila, na robovih pa je ta tako velika, da se delec ob trku z robom škatle odbije (upor in trenje zanemarimo). Za potencial, ki deluje na delec v škatli, lahko rečemo, da je 0 znotraj, zunaj pa gre preko vseh meja. To pomeni, da so stene škatle neprodorne in delec ne more zapustiti notranjosti le-te. Potencial lahko zapišemo kot

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{drugod} \end{cases},$$

kjer je a dimenzija oziroma širina jame.

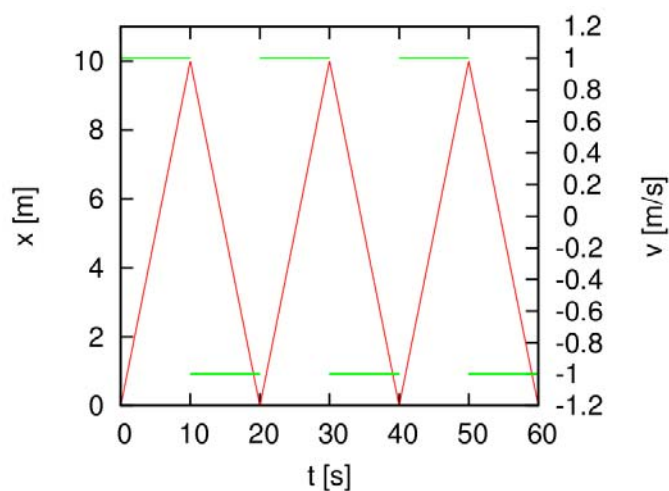
Velika telesa oziroma klasični delci se znotraj jame gibljejo premo enakomerno ali mirujejo. Ob prožnih trkih s steno pa se jim hitrost obrne. Hitrost delca lahko zapišemo kot

$$v = \begin{cases} v_0, & \text{ko se giblje v desno} \\ -v_0, & \text{ko se giblje v levo} \end{cases}.$$

v_0 je hitrost, s katero delec poženemo. In položaj

$$x = \begin{cases} v_0(t - nt_0), & n \text{ je sod} \\ a - v_0(t - nt_0), & n \text{ je lih} \end{cases},$$

kjer je n število trkov s steno in $t_0 = a/v_0$, čas med dvema zaporednima trkoma. Delec ima kinetično energijo ves čas gibanja konstantno in natančno določeno. Gibalna količina je enaka produktu mase in hitrosti. Položaj delca in njegovo gibalno količino v vsakem trenutku natančno poznamo. Spreminjanje hitrosti in položaja klasičnega delca je narisano na sliki 1. Verjetnost, da najdemo delec kjerkoli v jami, je kar enaka obratni vrednosti širine škatle $\rho = \frac{1}{a}$



Slika 1: Odvisnost hitrosti (zelena črta) in položaja (rdeča črta) klasičnega delca v neskončni potencialni jami. Širina jame je 10 m in hitrost 1 m/s.

Tudi v tem primeru opis gibanja kvantnih delcev dobimo z rešitvijo gibalne enačbe za kvantne delce, to je Schrödingerjeve enačbe, ki ima v časovni verziji obliko

$$\hat{H}\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}.$$

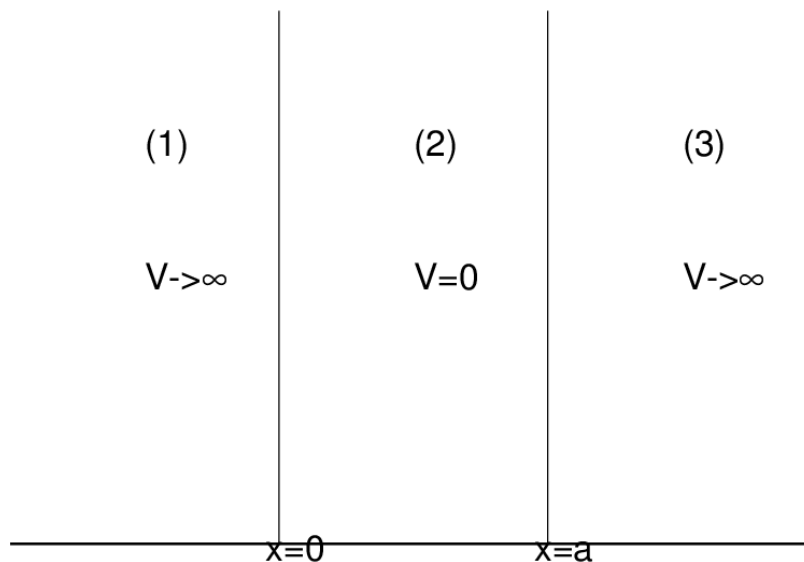
Ker nas trenutno zanimajo le stacionarna stanja, najprej rešimo stacionarno Schrödingerjevo enačbo

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

\hat{H} je operator celotne energije ali Hamiltonov operator, ki ima za enodimenzionalno gibanje naslednjo obliko

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

Potencial delca ima tri različne možnosti, zato moramo napisati enačbo za vsa tri različna področja (glej sliko 2). Na prvem in tretjem področju je potencial neskončno velik. Na to področje bi delec lahko prišel, le v primeru, če bi imel neskončno veliko energijo, kar pa fizikalno ni možno, zato mora biti gostota ρ na tem delu enaka 0. Ker pa je gostota kvadrat absolutne vrednosti valovne funkcije, mora biti sama valovna funkcija ψ na tem delu tudi enaka 0. Tudi če zapišemo stacionarno Schrödingerjevo enačbo, pridemo do podobnega sklepa. Na desni strani dobimo produkt energije in valovne funkcije, ki je končno število, na levi strani pa prvi člen, ki je drugi odvod valovne funkcije, ki je končen, ter drugi, kjer imamo produkt potenciala, ki gre proti neskončni vrednosti, in valovne funkcije. Da je enačba izpolnjena, mora iti ta produkt proti končni vrednosti, kar pa bi veljalo edino v primeru, če bi bila valovna funkcija enaka 0.



Slika 2: Odvisnost potenciala od položaja delca.

Na drugem delu ($0 \leq x \leq a$) je potencial enak nič in Schrödingerjevo enačbo zapišemo

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

Enačbo sedaj pomnožimo z $(-2m)$ in delimo s \hbar^2 ter po uvedbi nove spremenljivke $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$ dobimo

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0.$$

Tudi tu ima enačba dve rešitvi in krajevni del celotne funkcije zapišemo kot

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx).$$

Valovna funkcija mora biti zvezna, zato imamo naslednje robne pogoje

$$\psi(0) = 0, \psi(a) = 0.$$

Iz prvega robnega pogoja dobimo

$$\psi(0) = A\sin(k0) + B\cos(k0) = B = 0$$

in valovna funkcija se poenostavi na

$$\psi(x) = A\sin(kx).$$

Drugi robni pogoj pa sedaj zapišemo kot

$$\psi(a) = A\sin(ka) = 0.$$

Tu imamo sedaj dve možnosti. Prva je $A = 0$. V tem primeru imamo valovno funkcijo kar identično enako 0 na vsem območju. Pravimo, da imamo trivialno rešitev, ki pa ustreza pogoju, da delca ni v potencialni jami. Ta rešitev za nas ni zanimiva, saj nas zanimajo rešitve s prisotnim delcem. Druga možnost pa je $\sin(ka) = 0$. To pa je izpolnjeno, ko je

$$ka = n\pi,$$

kjer je n celo število. V primeru, ko je n enak 0, dobimo zopet trivialno rešitev, ko je n negativen, pa dobimo iste fizikalne rešitve kot v primeru pozitivnih n -jev. Torej dobimo za valovni vektor k

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, n \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$$

samo nekaj možnosti. Rečemo, da je valovni vektor in s tem energija delca diskretno porazdeljena. Energija delca je odvisna od kvantnega števila n

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{n^2h^2}{8ma^2}.$$

Upoštevali smo še, da je $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. Valovna funkcija n -tega stanja ima obliko

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

znotraj jame, zunaj pa je enaka 0. Konstanto A določimo z normalizacijo. Zahtevamo, da nam valovna funkcija opiše stanje enega delca, to pomeni, da mora biti integral gostote ρ_n po vsem območju enak 1. Temu rečemo, da funkcijo normiramo.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n dx = 1$$

Upoštevali smo, da je gostota enaka

$$\rho_n = \psi_n^* \psi_n.$$

Ker je gostota od 0 različna le za x med 0 in a, se integral poenostavi na

$$\int_0^a \psi_n^* \psi_n dx = 1.$$

Valovna funkcija ψ_n je realna, tako da je kompleksno konjugirana vrednost ψ_n^* kar enaka sami valovni funkciji ψ_n in integral se poenostavi:

$$\int_0^a \psi_n^2 dx = 1.$$

Ko sedaj vstavimo vrednost valovne funkcije, dobimo

$$\int_0^a A_n^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = A_n^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1.$$

Integral izračunamo tako, da preidemo na dvojne kote

$$\int \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \int \frac{1}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right) dx = \frac{x}{2} - \frac{a \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{4n\pi}.$$

Vrednost integrala na spodnji meji je enaka 0 in na zgornji $\frac{a}{2}$ in za konstanto A_n dobimo

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

in normirano valovno funkcijo

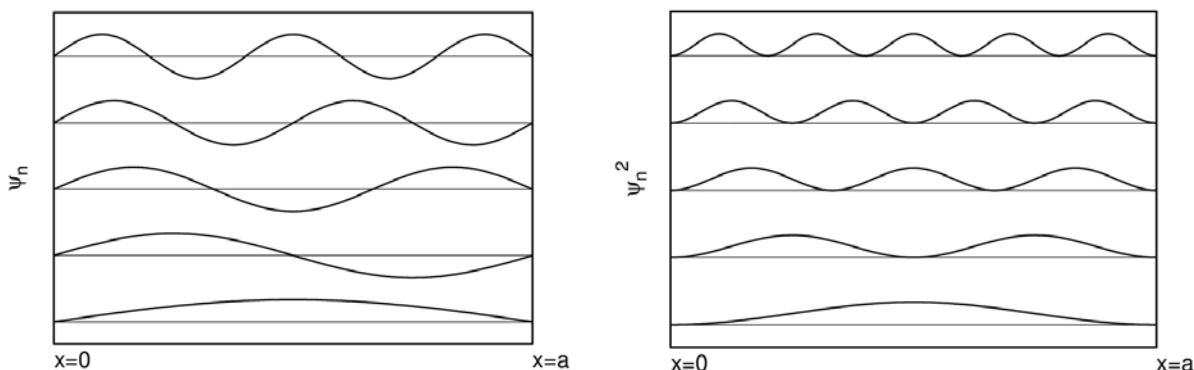
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right).$$

Vidimo, da z rešitvijo stacionarne Schrödingerjeve enačbe dobimo lastne vrednosti energije sistema E_n in lastne funkcije $\psi_n(x)$ (glej tabelo 1). Energija lahko zavzame samo nekatere vrednosti za razliko od klasičnega sistema, kjer ima delec lahko katerokoli pozitivno energijo. Vsaki lastni funkciji ustreza verjetnostna gostota $\rho_n = |\psi_n|^2$ (glej sliko 3). Lastno stanje z najnižjo energijo ($n=1$) imenujemo osnovno stanje in lastna stanja z večjo energijo vzbujena stanja. Vidimo, da lastno stanje določa kvantno

število n . Energije sistema lahko prikažemo na energijskem diagramu oziroma energijske spektru, kjer na os y naneseemo celotno energijo in lastne vrednosti energije označimo z vodoravnimi črtami (glej sliko 4). Za kvantni delec v neskončni potencialni jami je spekter diskreten. Iz odvisnosti gostote in valovne funkcije ugotovimo, da ima stanje s kvantnim številom n , $n-1$ ničel znotraj jame, oziroma $n+1$, če upoštevamo tudi ničli na robu. Oblika valovne funkcije nas spominja na stoječe valovanje na struni.

Tabela 1: Prvih 5 energij in valovnih funkcij.

n	E_n	$\psi_n(x)$
1	$\frac{h^2}{8ma^2} = E_1$	$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$
2	$\frac{4h^2}{8ma^2} = 4E_1$	$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$
3	$\frac{9h^2}{8ma^2} = 9E_1$	$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$
4	$\frac{16h^2}{8ma^2} = 16E_1$	$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right)$
5	$\frac{25h^2}{8ma^2} = 25E_1$	$\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{5\pi x}{a}\right)$



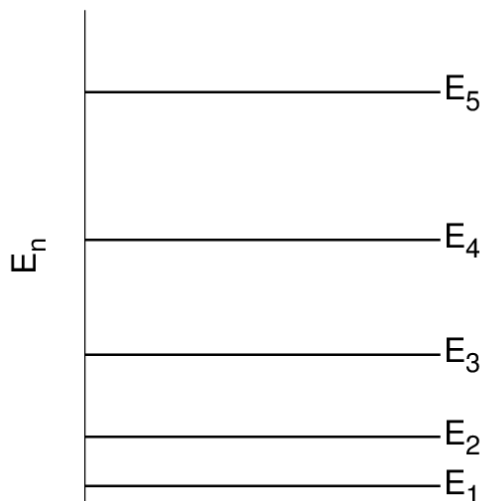
Slika 3: Krajevna odvisnost valovne funkcije in verjetnostne gostote za prvih pet lastnih funkcij.

Verjetnostna gostota za n -to lastno stanje je enaka

$$\rho_n = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right).$$

Višje je kvantno število n , bolj je stanje vzbujeno, močnejše niha gostota okoli srednje vrednosti $\frac{1}{a}$. Ko postane kvantno število dovolj veliko, ne moremo več opaziti oscilacij, ker se le te dogajajo na krajši razdalji kot je natančnost naših meritev. Takrat opazimo samo povprečno gostoto, ki je pa kar enaka

klasični gostoti. Temu pravimo Bohrov princip korespondence. Klasična mehanika je limitni primer kvantne mehanike, ko so kvantna števila zelo visoka.



Slika 4: Energijski spekter za kvantni delec v neskončni ravni potencialni jami. Spodnja tanka črta je energija 0.

Osnovno stanje delca nima energije enake nič. Celotna energija delca je kar njegova kinetična energija. Če bi bila energija delca enaka nič, bi bila tudi njegova gibalna količina oziroma hitrost. Delec bi miroval, ker pa bi miroval, bi morali hkrati poznati tudi njegov položaj, to pa je v nasprotju s Heisenbergovim principom nedoločljivosti. Povprečen položaj delca lahko izračunamo kot pričakovano verjetnost operatorja koordinate $\hat{x} = x$.

$$\langle \hat{x} \rangle_n = \int_0^a \psi_n^* \hat{x} \psi_n dx = \int_0^a x \psi_n^2 dx$$

V integral sedaj vstavimo vrednost valovne funkcije ψ_n in dobimo

$$\langle \hat{x} \rangle_n = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{a} \right) dx.$$

Omenjeni integral izračunamo po integraciji *per partes*. Nedoločeni integral je

$$\int x \sin^2(bx) dx = \frac{x^2}{4} - \frac{\cos(2bx)}{8b^2} - \frac{x \sin(2bx)}{4b}.$$

Ko to vstavimo v izraz za $\langle \hat{x} \rangle_n$ dobimo

$$\langle \hat{x} \rangle_n = \frac{2}{a} \left(\frac{x^2}{4} - \frac{\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{8\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} - \frac{x \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{4\frac{n\pi}{a}} \right) \Bigg|_0^a = \frac{2}{a} \left(\frac{a^2}{4} \right) = \frac{a}{2}.$$

Vsi ostali členi pri integralu se izničijo. Nedoločnost koordinate x je enaka korenu pričakovane vrednosti kvadrata odstopanja koordinate x od povprečne vrednosti

$$\Delta x = \sqrt{\langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle}.$$

Če izraz kvadriramo in upoštevamo, da je povprečje vsote enako vsoti povprečij in povprečje s skalarjem pomnoženega operatorja enako s skalarjem pomnoženega povprečja

$$\langle \hat{a} + \hat{b} \rangle = \langle \hat{a} \rangle + \langle \hat{b} \rangle, \langle c\hat{b} \rangle = c\langle \hat{b} \rangle,$$

dobimo

$$\Delta x = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}.$$

Da izračunamo nedoločenost položaja potrebujemo še pričakovano verjetnost kvadrata koordinate x.

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_n = \int_0^a \psi_n^* \hat{x}^2 \psi_n dx = \int_0^a x^2 \psi_n^2 dx.$$

Tudi ta integral izračunamo z metodo *per partes*. Nedoločeni integral je

$$\int x^2 \sin^2(bx) dx = \frac{x^3}{6} - \frac{x \cos(2bx)}{4b^2} - \frac{(-1+2b^2x^2)\sin(2bx)}{8b^3}.$$

Ko to vstavimo v izraz za $\langle \hat{x}^2 \rangle_n$ dobimo

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_n = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}.$$

Za nedoločenost koordinate x dobimo

$$\Delta x_n = \sqrt{\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} - \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{a}{2} \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}}.$$

Po istem postopku izračunamo še nedoločenost gibalne količine. Najprej izračunamo pričakovano verjetnost gibalne količine $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\langle \hat{p}_x \rangle_n = \int_0^a \psi_n^* \hat{p}_x \psi_n dx = \int_0^a \psi_n^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_n dx = -i\hbar \int_0^a \psi_n \psi_n' dx$$

Omenjeni integral lahko izračunamo, če uvedemo novo spremenljivko $y = \psi_n$ in dobimo

$$\langle \hat{p}_x \rangle_n = -i\hbar \frac{1}{2} \psi_n^2 \Big|_0^a = -i\hbar \frac{1}{2} (\psi_n^2(a) - \psi_n^2(0)).$$

Valovna funkcija je pri 0 in a enaka nič, tako da je pričakovana verjetnost gibalne količine tudi enaka 0.

$$\langle \hat{p}_x \rangle_n = 0.$$

Pričakovana verjetnost gibalne količine ni 0, ker bi delec miroval, temveč ker je enako verjetno, da se delec giblje v smeri pozitivne in negativne osi x. Valovno funkcijo lahko zapišemo tudi kot linearno kombinacijo dveh ravnih valov, ki potujeta v nasprotno smer

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{2i} (e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}).$$

Pričakovana verjetnost gibalne količine prvega dela je nasprotno enaka pričakovani verjetnosti drugega dela. Sedaj izračunamo še pričakovano verjetnost kvadrata gibalne količine. Za to imamo dve možnosti. Lahko ga izračunamo po istem postopku kot pričakovano verjetnost gibalne količine

$$\langle \widehat{p}_x^2 \rangle_n = \int_0^a \psi_n^* \widehat{p}_x^2 \psi_n dx = \int_0^a \psi_n^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi_n dx = -\hbar^2 \int_0^a \psi_n \psi_n'' dx.$$

V ta izraz sedaj vstavimo vrednost za lastno funkcijo ψ_n , najprej izračunamo drugi odvod in potem še integral. Zopet je potrebno narediti integracijo *per partes*. Kot drugo možnost pa imamo, da izrazimo kvadrat gibalne količine iz Hamiltonovega operatorja

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} \rightarrow \widehat{p}_x^2 = 2m\widehat{H}$$

Pričakovana verjetnost kvadrata gibalne količine je sedaj enaka

$$\langle \widehat{p}_x^2 \rangle_n = \langle 2m\widehat{H} \rangle_n = 2m\langle \widehat{H} \rangle_n$$

ter pričakovana verjetnost Hamiltonovega operatorja

$$\langle \widehat{H} \rangle_n = \int_0^a \psi_n^* \widehat{H} \psi_n dx.$$

Sedaj uporabimo lastnost, da je funkcija ψ_n lastna funkcija operatorja \widehat{H} , za katero velja

$$\widehat{H}\psi_n = E_n\psi_n$$

in dobimo

$$\langle \widehat{H} \rangle_n = \int_0^a \psi_n^* E_n \psi_n dx = E_n \int_0^a \psi_n^2 dx = E_n$$

ter za pričakovano verjetnost kvadrata gibalne količine

$$\langle \widehat{p}_x^2 \rangle_n = 2m \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2}$$

in za nedoločenost

$$\Delta p_{x_n} = \frac{n\pi\hbar}{a}.$$

Za produkt nedoločenosti položaja in gibalne količine dobimo

$$\Delta x_n \Delta p_{x_n} = \frac{n\pi}{a} \frac{a}{2} \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2 \pi^2}} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{n^2 \pi^2}{3} - 2}.$$

Izraz pod korenem je večji od 1 za katerokoli vrednost n-ja in dobimo, da je produkt

$$\Delta x_n \Delta p_{x_n} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Produkt je najmanjši v osnovnem stanju, ko je enak $1.1357 \frac{\hbar}{2}$.

Poglejmo si sedaj še nekaj lastnosti lastnih funkcij. Izračunajmo sedaj integral

$$\int_0^a \psi_m^* \psi_n dx = \int_0^a \psi_m \psi_n dx = \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx.$$

Produkt sinusov najprej pretvorimo v razliko dveh kosinusov

$$\sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{1}{2} \left(\cos(m-n) \frac{\pi x}{a} - \cos(m+n) \frac{\pi x}{a} \right)$$

in nato integriramo vsak del z uvedbo nove spremenljivke. Integral pride enak 0, če m in n nista enaka.

$$\int_0^a \psi_m^* \psi_n dx = 0, m \neq n$$

Pravimo, da so lastne funkcije med seboj ortogonalne. Če pa sta m in n enaka, pa je integral enak 1, saj so lastne funkcije normirane. To lahko sedaj zapišemo kot

$$\int_0^a \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}.$$

δ_{mn} je Kroneckerjev delta, ki je enaka 1, če sta m in n enaka, in 0, če sta različna. Te lastne funkcije tvorijo ortonormirano bazo funkcij, se pravi, da lahko vsako poljubno funkcijo na območju za x med 0 in a zapišemo kot linearno kombinacijo teh funkcij

$$\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n.$$

Integral $\int_0^a \psi^* \psi dx$ je kar enak vsoti kvadrata absolutnih vrednosti koeficientov c_n

$$\int_0^a \psi^* \psi dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2.$$

Če hočemo, da je ta funkcija ψ normirana, mora biti ta vsota enaka 1

$$1 = \int_0^a \psi^* \psi dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

$|c_n|^2$ podaja verjetnost, da delec, ki ga opisuje valovna funkcija ψ , najdemo v stanju ψ_n . Koeficiente c_n izračunamo kot

$$\int_0^a \psi_n^* \psi dx = c_n.$$

Valovna funkcija ψ ni stacionarno stanje in se mu gostota s časom spreminja. Časovna valovna funkcija se s časom spreminja kot

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}.$$

Pri merjenju energije delca v neskončni potencialni jami dobimo vedno eno od lastnih vrednosti energije, se pravi lastnih vrednosti Hamiltonovega operatorja. Nikoli ne moremo dobiti kakšne druge vrednosti. Če meritev izvedemo m -krat in vedno dobimo energijo E_n , lahko s približno verjetnostjo $(1 - \frac{1}{m})$ sklepamo, da imamo delec v n -tem stacionarnem stanju. Če pa pri merjenju dobimo sedaj eno sedaj drugo energijo, lahko sklepamo, da delec z gotovostjo ni v stacionarnem stanju, temveč v sestavljenem. Za delec, ki ga opiše valovna funkcija $\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n$, izmerimo energijo E_n z verjetnostjo $|c_n|^2$. Povprečna energija tega stanja je

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_0^a \psi^* \hat{H} \psi dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n.$$