Zastosowania równania Schrodingera

W dodatku D4 wyprowadzono jednowymiarowe równanie Schrodingera (bez czasu), które pozwala na znajdowanie funkcji falowych cząstek o energii całkowitej *E*, poruszających się pod wpływem sił

$$F(x) = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

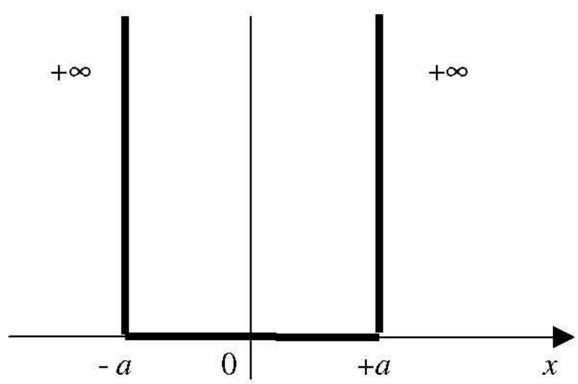
związanych z polem potencjału *V*(*x*)

równanie to ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = [E - V(x)] \cdot \psi(x) \tag{1}$$

prześledzimy teraz metody rozwiązywania tego równania w różnych sytuacjach

(I) cząstka o tkwi w jednowymiarowej nieskończenie głębokiej studni potencjału, jaka jest jej funkcja falowa?



zadanie to można łatwo rozwiązać nie wiedząc nic o istnieniu równania Schrodingera, ponieważ nieskończenie wysoka bariera potencjału jest dla fal nie przenikliwa, powoduje to, że pomiędzy ścianami mogą istnieć fale stojące o długości spełniającej warunek

$$n\frac{\lambda}{2} = 2a \quad \rightarrow \quad \lambda_n = \frac{4a}{n} \tag{2}$$

i stąd wynika dalej, że pęd i energia są skwantowane zgodnie z formułami

$$p_n = \frac{2\pi \cdot \hbar}{\lambda_n} = \frac{\pi \cdot \hbar}{2a}n \quad \rightarrow \quad E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}n^2 \tag{3}$$

chcąc zastosować do tego problemu równanie (1) należy zauważyć, że pomiędzy ścianami, czyli dla $|x| < a$ równanie ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = E\cdot\psi(x) \tag{4}$$

która okaże się nam znana, gdy równanie zapiszemy w postaci

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + k^2\psi(x) = 0 \qquad \text{gdzie: } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{5}$$

jak widać jest to równanie oscylatora, które ma rozwiązania

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{6}$$

przy okazji z (5) wynika, że

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{7}$$

jest liczbą falową poszukiwanej fali

jak wyznaczyć A i B ?

są to amplitudy fal poruszających się w lewo i w prawo, można to zrobić zakładając nieprzenikliwość ścian, czyli przyjmując, że dla $|x| \geq a$ funkcja $\psi(x)=0$, stąd otrzymujemy 2 równania

$$\psi(a) = Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0 \tag{8a}$$
$$\psi(-a) = Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0 \tag{8b}$$

z sumy (8a) + (8b) wynika, że

$$A(e^{-ika} + e^{ika}) + B(e^{-ika} + e^{ika}) = (A+B)(e^{-ika} + e^{ika}) = 0 \tag{9}$$

a stąd

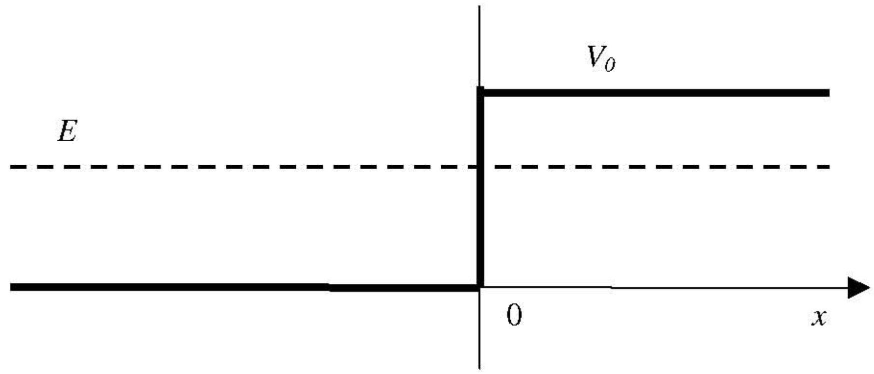
$$(e^{-ika} + e^{ika}) = 2\cos ka = 0 \tag{10}$$

warunek ten jest spełniony dla

$$ka = \frac{\pi}{2}n \tag{11}$$

co daje identyczne długości fal jak wynikające z formuły (2)

(II) rozwiążemy teraz inny typowy problem: cząstka porusza się w przestrzeni, w której występuje bariera potencjału V_0, przy czym $E < V_0$ (cząstka się odbija)



naszym zadaniem jest znalezienie funkcji falowej tej cząstki

widzimy, że dla x < 0 obowiązuje równanie (4) stąd poprawne są rozwiązania typu (6)

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{12}$$

gdzie

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{14}$$

dla x >0 równanie Schrodingera (1) ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = [E - V_0]\cdot\psi(x) \tag{15}$$

co daje

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} - q^2\psi(x) = 0 \qquad \text{gdzie: } q^2 = \frac{2m[V_0 - E]}{\hbar^2} \tag{16}$$

jest to, jak widzimy, równanie oscylatora, w którym „częstość" drgań jest urojona, doświadczony czytelnik wie, że taki oscylator to oscylator tłumiony nadkrytycznie i ma rozwiązania

$$\psi(x) = Ce^{qx} + De^{-qx} \tag{17}$$

mniej doświadczony czytelnik powinien „wstawić" (17) do (16) i upewnić się, że tak jest

z (17) widać, że $C = 0$, gdyż narastanie amplitudy fali po „wejściu" do ściany potencjału nie ma fizycznego sensu, zatem ostatecznie mamy komplet rozwiązań

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \text{dla} \quad x<0 \tag{18a}$$

i

$$\psi(x) = De^{-qx} \qquad \text{dla} \quad x>0 \tag{18b}$$

jak wyznaczyć tym razem stałe A, B i D ?

należy zacząć od spostrzeżenia, że w 1 wymiarowym problemie falowym sens mają tylko 2 stałe (fale w lewo i fale w prawo), zatem uprościmy sobie problem zakładając, że $D = 1$

następny warunek wynika z oczekiwania, by amplitudy funkcji falowej po lewej stronie i po prawej stronie bariery „zszywały" się w punkcie $x = 0$ (oznacza to ciągłość funkcji)

$$\psi(0)\big|_{x<0} = \psi(0)\big|_{x>0} \tag{19a}$$

a także miały ciągłą pierwszą pochodną, czyli spełniały warunek

$$\frac{d}{dx}\psi(0)\bigg|_{x<0} = \frac{d}{dx}\psi(0)\bigg|_{x>0} \tag{19b}$$

z (19) i (18) wynika, że

$$A + B = 1 \tag{20a}$$

i

$$ik(A - B) = -q \tag{20b}$$

stąd

$$A = \frac{1 + \frac{iq}{k}}{2} \qquad \text{i} \qquad B = \frac{1 - \frac{iq}{k}}{2}. \tag{21}$$

pozostawiamy czytelnikowi sporządzenie wykresów funkcji gęstości prawdopodobieństwa

$$|\psi(x)|^2 \tag{22}$$

po obu stronach bariery

(III) dalszym etapem komplikacji równania Schrodingera jest dopuszczenie ciągłej funkcji potencjału $V(x)$

często rozwiązywanym zagadnieniem jest równanie cząstki zawieszonej na sprężynie

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{23}$$

jest to kwantyzacja oscylatora, którą już raz podejmowaliśmy (patrz dodatek D2)