

Poglavje 4

Gibanje v 1 dimenziji

Oglejmo si nekaj primerov rešitev Schroedingerjeve enačbe v eni dimenziji.

4.1 Prost delec

Vzemimo delec, na katerega ne deluje nobena sila. Potencialna energija je tedaj konstanta, neodvisna od kraja, in lahko vzamemo, da je nič. Potem je Schroedingerjeva enačba

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Najpreprostejša rešitev te enačbe je ravni val

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

kjer je $\omega = \hbar k^2 / 2m$. Ravni valovi imajo časovno odvisnost $e^{-i\omega t}$ in so torej tudi rešitve stacionarne Schroedingerjeve enačbe in s tem lastne funkcije energije z lastno vrednostjo $W = \hbar\omega = \hbar^2 k^2 / 2m$. Ravni valovi imajo tudi dobro določeno gibalno količino $p = \hbar k$. Zato so tudi lastne funkcije operatorja gibalne količine:

$$\hat{p}\Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \hbar k \Psi$$

Tu smo prvič srečali valovno funkcijo, ki je lastna funkcija več operatorjev fizikalnih količin.

Vzemimo sedaj kot začetno stanje valovni paket

$$\Psi(x, 0) = \int A(k) e^{ikx} dk$$

Časovno odvisnost ravnih valov poznamo, zato je rešitev kar

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk = \\ &= \int A(k) e^{i(kx - \hbar k^2 t / 2m)} dk \end{aligned}$$

Časovni razvoj začetne valovne funkcije smo lahko zapisali kot vsoto lastnih funkcij energije. Videli bomo, da je to vselej mogoče.

Če imamo ob $t = 0$ Gaussov paket, je $A(k) = A_0 e^{-(k-k_0)^2 \sigma_x^2}$. Tedaj je rezultat gornjega integrala vedno Gaussov paket, kar je mogoče dobiti z integracijo. Paket ima seveda povprečno gibalno količino $\hbar k_0$. Vrh paketa se giblje s hitrostjo $\hbar k_0 / m$, obenem pa se paket širi. Vse te lastnosti vidimo preprosto z numerično integracijo in risanjem rezultata z Mathematico v <http://www.fiz.uni-lj.si/~tine/fizikaII.html>. Če začetna oblika ni Gaussova, se funkcijska oblika ne ohranja, ostale lastnosti pa so podobne. Zanimivo je še, da se Gaussov paket od vseh oblik širi najpočasneje.

4.2 Delec v neskončno globoki potencialni jami

Kot drugi primer si oglejmo rešitve stacionarne Schroedingerjeve enačbe za potencialno energijo, ki je na intervalu dolžine a nič, drugod pa neskončno velika. Neskončno visok skok potencialne energije predstavlja za delec, ki ima na intervalu, kjer je potencialna energija nič, končno kinetično energijo, idealno togo steno. Klasično je izbrana potencialna energija torej model za delec, ki se dobija med dvema togima stenama. Poetncialno energijo zapišemo

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

4.2. DELEC V NESKONČNO GLOBOKI POTENCIALNI JAMI 3

Ker delec ne more imeti neskončno velike energije, je verjetnost, da najdemo delec izven jame, nič in je tudi $\psi(x) = 0$ za $x < 0$ in $x > a$. Znotraj jame je $V(x) = 0$ in je stacionarna S. enačba

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = W \psi \quad \text{ali}$$
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2 \psi \quad k^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}$$

Splošna rešitev te enačbe je

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

Konstanti A in B sta še nedoločeni in potrebujemo še robne pogoje, da ju določimo. V Schroedingerjevi enačbi nastopa drugi odvod po x . Da bo ta obstojal, mora biti valovna funkcija zvezna, zato imamo robna pogoja

$$\begin{aligned} \psi(0) &= 0 \\ \psi(a) &= 0 \end{aligned}$$

Prvi pogoj pove, da je $B = 0$. Iz drugega pogoja dobimo

$$\sin ka = 0$$

kar lahko zadovoljimo le, če je

$$k = k_n = \frac{n\pi}{a}$$

kjer je $n = 1, 2, 3, \dots$. Valovno število k lahko zavzame le diskretne vrednosti. Ustrezne lastne vrednosti energije so

$$W_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2}$$

lastne funkcije pa

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

Lastnih vrednosti in lastnih funkcij je neskončno mnogo. Naravnemu številu n , s katerim oštevilčimo lastne funkcije, pravimo kvantno število.

Stanje z najnižjo energijo je *osnovno stanje*. Energija osnovnega stanja je večja od nič, kar je spet posledica tega, da je delec omejen na končen prostor.

Lastne funkcije $\psi_n(x)$ so stoječi valovi. Matematično je problem kvantnega delca v neskončni potencialni jami enak kot problem lastnih nihanj strune. Tudi pri struni imajo lastna nihanja obliko stoječih valov, to je vsote dveh nasprotnih potujočih valov, ki se odbijata od koncev strune. Valovni vektor stoječega vala je prav tako kot za delec v jami $k_n = n\pi/a$.

Iz pogoja za normalizacijo $\int |\psi|^2 dx = 1$ dobimo še konstanto A :

$$\begin{aligned} A_n^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx &= 1 \\ A_n^2 \frac{a}{2} &= 1 \\ A_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \end{aligned}$$

Lastnim vrednostim energije pravimo tudi spekter energij. Za vezane delce, to je, delce, ki jih potencialna energija omejuje na končno območje prostora, je spekter vedno diskreten.

4.2.1 Lastnosti lastnih funkcij

Lastne funkcije energije imajo nekatere pomembne lepe lastnosti. Najpomembnejša je, da lahko vsako valovno funkcijo delca v jami razvijemo po lastnih funkcijah energije. Naj je ob času $t = 0$ delec v stanju $\Psi(x, 0)$. To valovno funkcijo lahko zapišemo v obliki

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x) \quad (4.1)$$

Koeficienti c_n so seveda odvisno od funkcije $\Psi(x, 0)$. Tak zapis je možen zaradi naslednje lastnosti lastnih funkcij energije:

$$\begin{aligned} \int_0^a \psi_n \psi_{n'} dx &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{n\pi}{a} x \sin \frac{n'\pi}{a} x dx = \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \sin n\phi \sin n'\phi d\phi = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^\pi [\cos(n - n')\phi - \cos(n + n')\phi] d\phi = \\
&= \frac{\sin(n - n')\pi}{(n - n')\pi} - \frac{\sin(n + n')\pi}{(n + n')\pi}
\end{aligned}$$

Integral je enak 1, če je $n = n'$, sicer je 0. To lahko krajše zapišemo s *Kroneckerjevim simbolom* $\delta_{nn'}$, za katerega velja $\delta_{nn} = 1$ in $\delta_{nn'} = 0$ za $n \neq n'$:

$$\int_0^a \psi_n(x) \psi_{n'}(x) dx = \delta_{nn'} \quad (4.2)$$

Funkcije s to lastnostjo so med seboj *ortogonalne in normirane*, ali krajše, *ortonormirane*. Z njo zlahka pokažemo, da razvoj 4.1 obstaja. Pomnožimo 4.1 na levi in na desni z $\psi_{n'}(x)$ in integrirajmo:

$$\int_0^a \psi_{n'}(x) \Psi(x, 0) dx = \sum_n c_n \int_0^a \psi_{n'}(x) \psi_n(x) dx$$

V vsoti na desni je od nič različen le člen z $n = n'$, tako da je

$$c_{n'} = \int_0^a \psi_{n'}(x) \Psi(x, 0) dx$$

Razvoj 4.1 nam omogoča zapisati, kako se dana valovna funkcija razvija s časom. Časovna odvisnost lastnih stanj energije je $e^{-i\omega_n t}$, kjer je $\omega_n = W_n/\hbar$. Ker so funkcije $\psi_n(x) e^{-i\omega_n t}$ rešitve časovno odvisne Schroedingerjeve enačbe, je rešitev tudi njihova linearna kombinacija. Tako je valovna funkcija delca v poljubnem trenutku

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i\omega_n t}$$

S tem smo dobili rešitev časovno odvisne Schroedingerjeve enačbe za dano začetno stanje $\Psi(x, 0)$.

Zgled: lokaliziran delec

Poglejmo zelo poučen zgled. Podobno kot za prost delec lahko za začetno stanje delca ob $t = 0$ vzamemo Gaussov valovni paket, ki naj

bo znatno ožji od širine jame ($\sigma < a$), njegova sredina naj je pri $x = x_0$ in naj ima povprečno gibalno količino $\hbar k_0$:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sigma^{1/2}} e^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x}$$

Po 4.1 lahko to stanje razvijemo po lastnih funkcijah energije

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

kjer je

$$c_n = \frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{\sigma a}} \int_0^a e^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2} e^{ik_0 x} \sin \frac{n\pi}{a} x dx$$

Če upoštevamo predpostavko $\sigma < a$, lahko meje integracije približno potegnemo v neskončnost, sinus napišemo kot vsoto dveh eksponentnih funkcij in integral lahko z nekaj dela izračunamo. Dobimo

$$c_n = i (2\pi)^{1/4} \sqrt{\frac{\sigma}{a}} \left[e^{-\sigma^2(k_0 - n\pi/a)^2} e^{i(k_0 - n\pi/a)x_0} - e^{-\sigma^2(k_0 + n\pi/a)^2} e^{i(k_0 + n\pi/a)x_0} \right]$$

Časovni razvoj začetnega stanja je tako

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) \exp \left[-i \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 t \right]$$

Ta vsota hitro konvergira. Kratek program v Mathematici, ki nariše verjetnostno gostoto v poljubnem trenutku, je na <http://www.fiz.uni-lj.si/~tine/fizikaII.html>. Dokler paket ne trči ob steno, se giblje kot prost, to je z enakomerno hitrostjo, pri čemer se širi. Hitrost širjenja je spet tem večja, čim manjša je začetna širina. Ko paket trči ob steno, dobimo v verjetnostni gostoti oscilacije. Te so kvantni pojav in so posledica tega, da odbiti del valovne funkcije interferira z vpadnim. Razmik interferenčnih prog je odvisen od k_0 . To stanje je najbližje klasičnemu opisu delca, ki se odbija med stenama. Opazimo še, da lahko paket, ki se večkrat odbije, ne da bi se pri tem razširil po celi jami, sestavimo le tako, da je $k_0 \gg \pi/a$, to je, paket mora vsebovati

4.2. DELEC V NESKONČNO GLOBOKI POTENCIALNI JAMI 7

predvsem stanja z velikimi n . To je splošna značilnost stanj, ki so podobna klasičnim: njihova povprečna energija mora biti mnogo večja od najnižje energije delca.

Za prost delec so bila lastna stanja energije tudi lastna stanja gibalne količine. Pri delcu v neskončni potencialni jami ni tako. Lastno stanje energije $\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$ lahko zapišemo kot vsoto dveh eksponentnih funkcij

$$\psi_n(x) = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{a}} (e^{ik_n x} - e^{-ik_n x})$$

Prvi člen je valovna funkcija z dobro določeno pozitivno gibalno količino $\hbar k_n$, drugi pa valovno funkcijo z nasprotno enako gibalno količino. To prav lahko razumemo: klasično se delec odbija od sten jame in se prav toliko časa giblje v pozitivni smeri kot v negativni. Povprečna gibalna količina je seveda nič, povprečni kvadrat pa $\langle p^2 \rangle = \hbar^2 k_n^2 = \hbar^2 n^2 \pi^2 / a^2$.

Povezavo s klasičnim gibanjem si oglejmo še nekoliko podrobneje. Kvantna verjetnostna gostota, da najdemo delec, ki je v n -tem stanju energije, pri točki x , je

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x$$

Ta verjetnostna gostota ima $n - 1$ ničel - vozlov, njena povprečna vrednost pa je $1/a$. Definiramo lahko tudi klasično verjetnostno porazdelitev. Mislimo si, da v slučajno izbranih trenutkih izmerimo položaj delca. Ker se delec klasično giblje enakomerno z enako verjetnostjo v eno ali drugo smer, se nahaja v okolici vseh točk v jami enako dolgo in je klasična verjetnost p_{kl} , da ga najdemo med x in $x + dx$, neodvisna od x . Ker vemo, da se delec nahaja nekje v jami, je $\int_0^a p_{kl} dx = a p_{kl} = 1$ in je $p_{kl} = 1/a$, to je prav toliko kot je povprečna kvantna verjetnostna gostota. Prava kvantna verjetnostna gostota ima vozle, pri katerih je verjetnost, da najdemo tam delec, enaka 0, kar ni mogoče uskladiti s klasično predstavo, kako se delec giblje od točke do točke, saj bi pri tem moral prečkati tudi vozle. Pač pa smo tudi v klasični fiziki navajeni, da ima stoječe valovanje vozle. Ugotovitev, da so lastne funkcije energije za delec med dvema togima stenama stoječi valovi, bo kasneje še zelo pomembna.

4.2.2 Meritev energije

Denimo, da je v izbranem trenutku delec v nekem stanju $\psi(x)$, ki ni lastno stanje energije. Vemo, da ga lahko zapišemo kot razvoj

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

Povprečno energijo izračunamo po pravilu za kvantnomehansko povprečje fizikalne količine

$$\begin{aligned} \langle W \rangle &= \int_0^a \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx = \\ &= \sum_{n,n'} c_{n'}^* c_n \int_0^a \psi_{n'}(x) \hat{H} \psi_n(x) dx \end{aligned}$$

Funkcije $\psi_n(x)$ so lastne funkcije Hamiltonovega operatorja, zato je $\hat{H} \psi_n(x) = W_n \psi_n(x)$. Lastne funkcije so tudi ortonormirane, zato je

$$\begin{aligned} \langle W \rangle &= \sum_{n,n'} c_{n'}^* c_n W_n \int_0^a \psi_{n'}(x) \psi_n(x) dx = \\ &= \sum_{n,n'} c_{n'}^* c_n W_n \delta_{nn'} = \sum_n |c_n|^2 W_n \end{aligned} \quad (4.3)$$

Valovna funkcija $\psi(x)$ mora biti normirana, zato je

$$\begin{aligned} \int_0^a \psi^*(x) \psi(x) dx &= \sum_{n,n'} c_{n'}^* c_n \int_0^a \psi_{n'}(x) \psi_n(x) dx = \\ &= \sum_{n,n'} c_{n'}^* c_n \delta_{nn'} = \sum_n |c_n|^2 = 1 \end{aligned}$$

Izraz 4.3 kaže, da absolutni kvadrati koficientov razvoja $|c_n|^2$ predstavljajo verjetnosti, da delcu v stanju $\psi(x)$ izmerimo eno od lastnih vrednosti energije. Velja še več: pri kakršnikoli posamezni meritvi energije lahko izmerimo samo eno od lastnih vrednosti Hamiltonovega operatorja.

4.3 Harmonični oscilator

Kot naslednji, zelo pomemben, primer lastnih vrednosti in lastnih funkcij Hamiltonovega operatorja pogledimo harmonični oscilator. V klasični mehaniki je najpreprostejši primer delec na vzmeti, ki sinusno niha. Energija vzmetnega nihala je vsota kinetične energije in prožnostne energije vzmeti, ki predstavlja potencialno energijo delca. Prožnostna energija vzmeti je

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2$$

Če delec izmaknemo za x_0 iz mirovne lege in ga spustimo, harmonično (to je sinusno) zaniha s krožno frekvenco $\omega_0 = \sqrt{K/m}$:

$$x(t) = x_0 \cos \omega_0 t$$

Polna energija je

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}Kx^2 = \\ &= \frac{1}{2}(m\omega_0^2 x_0^2 \sin^2 \omega_0 t + Kx_0^2 \cos^2 \omega_0 t) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_0^2 \end{aligned}$$

Energija je konstantna, če ni upora ali trenja.

Harmonično nihanje dobimo vselej, kadar je potencialna energija kvadratna funkcija odmika, zato vsakemu sistemu s tako potencialno energijo pravimo harmonični oscilator. Pogosto je kvadratna odvisnost potencialne energije le približek za majhne odmike, na primer pri težnem nihalu. Podobno je v mikroskopskem svetu na primer potencialna energija dvoatomne molekule, če nekoliko povečamo razmik med atomoma, kvadratna funkcija razmika. Zato pogledimo rešitve stacionarne Schroedingerjeve enačbe za potencialno energijo oblike $V(x) = \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$. Hamiltonov operator je

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x)$$

in je stacionarna Schroedingerjeva enačba

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \psi = W\psi \quad (4.4)$$

Pri velikih vrednostih $|x|$ narašča potencialna energija čez vse meje, zato mora za vsako končno energijo delca težiti verjetnost, da najdemo delec v zelo veliki oddaljenosti od izhodišč²a, proti nič, tako da imamo robna pogoja

$$\psi(x \rightarrow \infty) = \psi(x \rightarrow -\infty) = 0$$

Reševanje diferencialnih enačb, kjer koeficienti niso konstante, je nekoliko bolj zapleteno. Poglejmo glavne korake, s katerimi pridemo do rešitev enačbe 4.4.

4.3.1 *Iskanje lastnih vrednosti in lastnih funkcij

Zaradi večje preglednosti najprej preoblikujmo enačbo 4.4 v brezdimenzijsko obliko. Z novo spremenljivko $\xi = (m\omega_0/\hbar)^{1/2} x$ preide enčba v

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2\psi(\xi) + \varepsilon\psi(\xi) = 0$$

kjer je $\varepsilon = 2W/(\hbar\omega_0)$. Tako ξ kot ε sta brez enote. Vidimo še, da v novi enačbi ni nobenega prostega parametra, v prvotni obliki enčbe pa sta dva (m in ω_0) in še konstanta \hbar . Rešitve za poljubno izbiro mase in lastne frekvence (ali konstante vzmeti) so si torej podobne.

Za dovolj velike ξ , tako da je $\xi^2 \gg \varepsilon$, lahko v zadnjem členu v enačbi postavimo $\varepsilon = 1$. Enačbo $\psi'' - \xi^2\psi + \psi = 0$ rešita funkciji $e^{-\xi^2/2}$ in $e^{\xi^2/2}$, o čemer se zlahka prepričamo z odvajanjem. Zato privzamemo nastavek $\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} f(\xi)$. Druga asimptotična rešitev $e^{\xi^2/2}$ ne pride v poštev, ker v neskončnosti narašča. Za funkcijo f dobimo novo diferencialno enačbo

$$\frac{d^2f}{d\xi^2} - 2\xi\frac{df}{d\xi} + (\varepsilon - 1)f = 0$$

Rešitev poskusimo poiskati v obliki potenčne vrste $f(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \xi^j$. Prvi odvod je $f' = \sum_{j=1}^{\infty} j c_j \xi^{j-1}$, drugi pa $f'' = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) c_j \xi^{j-2} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+2)(j+1) c_{j+2} \xi^j$. Te izraze postavimo v diferencialno enačbo in zberemo člene z enako potenco ξ :

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+2)(j+1) c_{j+2} - (2j+1-\varepsilon) c_j] \xi^j = 0$$

Enačba mora veljati za vsak ξ , zato mora biti koeficient pri vsaki potenci ξ enak nič. Tako dobimo rekurzijsko zvezo

$$c_{j+2} = \frac{2j + 1 - \varepsilon}{(j + 2)(j + 1)} c_j$$

Iz vrednosti c_0 lahko izračunamo vse sode koeficiente, iz c_1 pa vse lihe. Zanima nas obnašanje $f(\xi)$ pri velikih ξ . Za to so odlični čelniz visokimi potencami. Pri velikih j je približno

$$c_{j+2} \simeq \frac{2}{j} c_j$$

tako da mora biti za velike j

$$c_{2j} \simeq \frac{1}{j!} c_0$$

in je za $\xi \gg 1$

$$f(\xi) \simeq c_0 \sum \frac{1}{j!} \xi^{2j} = c_0 e^{\xi^2}$$

Pri taki $f(\xi)$ bi valovna funkcija $\psi(\xi) = f(\xi) e^{-\xi^2/2}$ za velike ξ naraščala, namesto da bi šla proti nič. Edina rešitev, ki lahko zadosti robnima pogojevima, je, da se vrsta za $f(\xi)$ pri nekem $j = n$ konča, če je torej $f(\xi)$ polinom. To lahko dosežemo s pravilno izbiro ε , kar nam da lastne vrednosti energije:

$$\begin{aligned} c_{n+2} &= 0 \\ \frac{2n + 1 - \varepsilon}{(n + 2)(n + 1)} &= 0 \\ \varepsilon_n &= 2n + 1 \end{aligned}$$

Od tod dobimo za energijo

$$W_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.5)$$

Polinomi, ki jih dobimo za $f(\xi)$ z uporabo rekurzijske zveze, se imenujejo Hermitovi polinomi. Prvi so $H_0(\xi) = 1$, $H_1 = 2\xi$, $H_2 =$

$4\xi^2 - 2$, $H_3 = 8\xi^3 - 12\xi, \dots$. Zaradi oblike rekurzijske zveze so sodi polinomi sode funkcije, lihi pa lihe. V splošnem lahko Hermitove polinome izračunamo iz enačbe

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

*

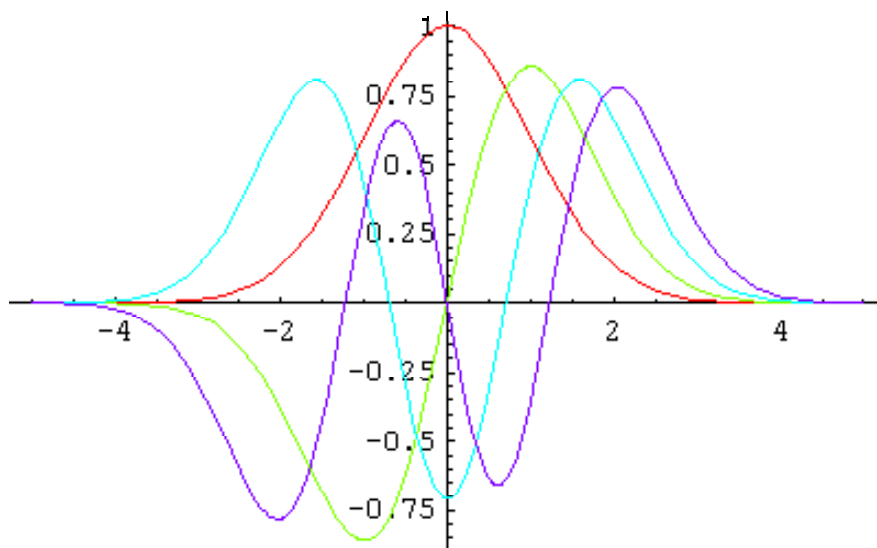
Tako smo dobili lastne vrednosti energije za harmonski oscilator $W_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$ in lastne funkcije

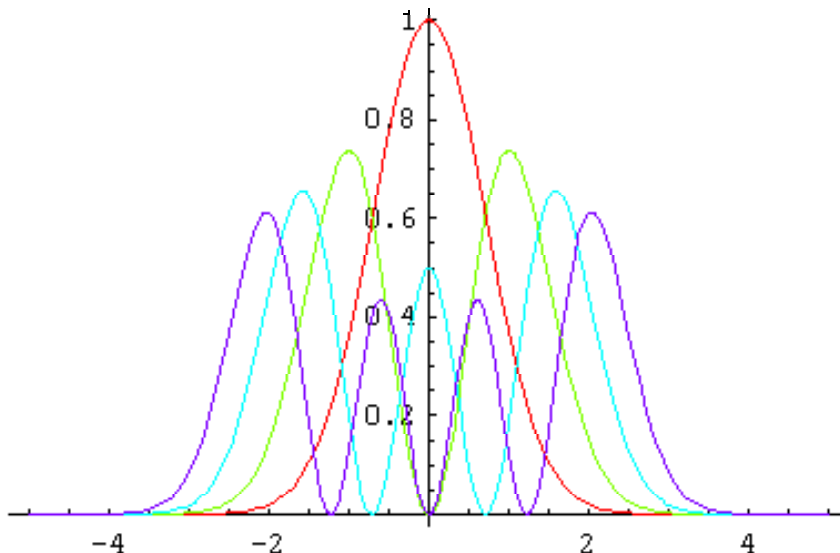
$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2} e^{-m\omega x^2/2\hbar} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \quad (4.6)$$

Te lastne funkcije so že normirane. Podobno kot pri neskončni potencialni jami so med seboj ortogonalne in sestavljajo ortonormiran sistem:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n'}(x) \psi_n(x) dx = \delta_{n'n}$$

Nekaj najnižjih lastnih funkcij kaže slika 1. Hermitov polinom stopnje n ima n ničel. Slika 2 pa kaže ustrezne verjetnostne gostote.





Pri klasičnem harmoničnem nihanju je obarčalna točka določena s skupno energijo nihala. V skrajni legi delec miruje in je vsa energija potencialna. Na gornjih slikah so klasične obračalne točke pri vrednostih $x_c = \sqrt{2n+1}$. Če pozorno pogledamo slike verjetnostne gostote, vidimo, da je za vsako stanje znatna verjetnost, da delec najdemo pri $x > x_c$.

Tudi pri harmoničnem oscilatorju je energija osnovnega stanja $W_0 = \hbar\omega_0/2$ pozitivna zaradi lokalizacije delca, medtem ko je skupna energija klasičnega delca na vzmeti, ki miruje v ravnovesnem položaju, nič. Osnovno stanje je kar naš znani valovni paket.

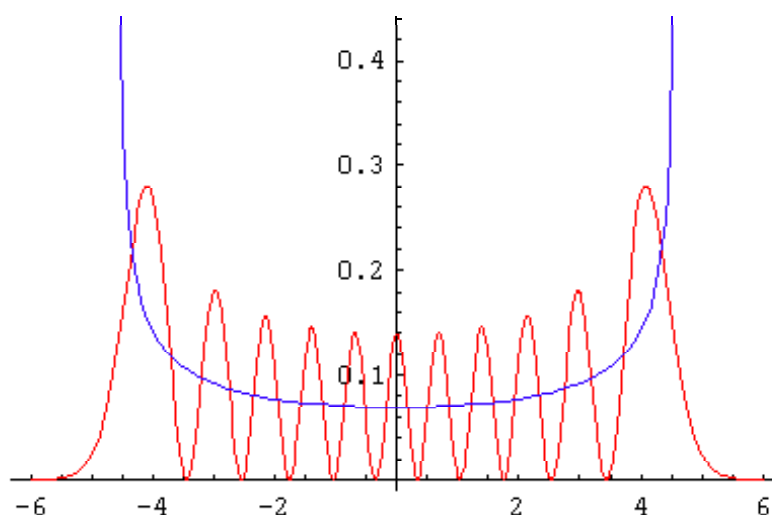
Kot v neskončni potencialni jami lahko tudi tu vidimo, da postane pri dovolj velikih kvantnih številih n kvantna verjetnostna gostota v povprečju podobna klasični. Klasična verjetnost, da najdemo delec med x in $x + dx$ je obratno sorazmerna s hitrostjo delca na mestu x :

$$p_{kl} = \frac{C}{v(x)}$$

kjer je C normalizacijska konstanta, ki poskrbi, da je $\int p_{kl} dx = 1$. Ker je $x = x_0 \cos \omega_0 t$ in $v = x_0 \omega_0 \sin \omega_0 t = x_0 \omega_0 \sqrt{1 - \cos^2 \omega_0 t} = \omega_0 \sqrt{x_0^2 - x^2}$, je

$$p_{kl}(x) = \frac{1}{\pi \omega_0 \sqrt{x_0^2 - x^2}}$$

Slika 3 kaže klasično in kvantno gostoto verjetnosti za $n = 10$.



Ker tvorijo lastne funkcije energije ortonormiran sistem, lahko po njih razvijemo poljubno začetno stanje:

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

Koeficiente razvoja spet izračunamo z integralom

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \Psi(x, 0) dx$$

Časovni razvoj je potem

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-i\omega_0(n+1/2)t}$$

Gaussov paket, ki ima neko začetno povprečno gibalno količino, niha okoli ravnovesne lege s klasično frekvenco nihanja ω_0 , kar lahko vidimo v programu v Mathematici na <http://www.fiz.uni-lj.si/~tine/fizikaII.html>.

4.4 Gostota toka delcev in kontinuitetna enačba

Preden nadaljujemo s primeri gibanja, si pogledjmo še, kako lahko izračunamo iz valovne funkcije gostoto toka delcev. Ta je pomembna, kadar imamo opravka z nevezanimi stanji, torej v primerih, ko potencialna energija ne omejuje delcev na končni del prostora. Vzemimo najprej, da je delec v delu prostora, kjer je potencial konstanten, lahko kar 0. Tedaj so dobre rešitve Schroedingerjeve enačbe ravni valovi z dobro določeno gibalno količino $p = \hbar k$:

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

Ustrezna hitrost delca je $p/m = \hbar k/m$. V klasični fiziki je gostota toka delcev produkt gostote delcev in njihove hitrosti. V kvantni mehaniki je torej smiselno definirati gostoto toka kot produkt gostote verjetnosti, da najdemo delec na danem mestu, in pričakovane vrednosti hitrosti:

$$j = \frac{\hbar k}{m} \Psi^* \Psi = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \quad (4.7)$$

Ta zveza nam tudi za raven val omogoča smiselno normalizacijo konstante A : namesto da zahtevamo, da je integral $|\Psi|^2$ po vsem prostoru enak 1, izberemo A tako, da dobimo predpisano gostoto toka delcev.

Za stanja, ki niso ravni valovi, postopamo takole. Zapišimo Schroedingerjevo enačbo in njej konjugirano kompleksno enačbo:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi &= i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V(x) \Psi^* &= -i \hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \end{aligned}$$

Prvo enčbo pomnožimo s Ψ^* , drugo pa s Ψ in drugo enačbo odštejmo od prve. Člena s potencialom se odštejeta, ostane

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) = i \hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right)$$

To enačbo lahko preoblikujemo v

$$i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) = \frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} \quad (4.8)$$

Na desni strani imamo časovni odvod gostote verjetnosti. Zamislimo si za trenutek, da imamo opravka s klasično gostoto delcev $\rho(x, t)$, ki se na intervalu med x in $x + dx$ spreminja s časom, recimo zmanjšuje. Če naj se število delcev ohranja, mora pri $x + dx$ več delcev odtekati z intervala, kot jih pri x priteka na interval. Število delcev na dx je $\rho S dx$, kjer je S površina v prečni smeri. Velja

$$-S \frac{\partial \rho}{\partial t} dx = S j(x + dx) - S j(x) = S \frac{\partial j}{\partial x} dx$$

kjer je j gostota toka delcev. Tako imamo *kontinuitetno enačbo*

$$-\frac{\partial j}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

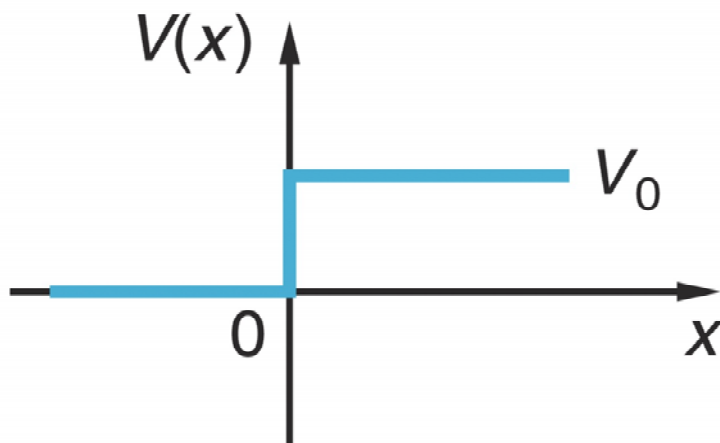
ki pravi le, da se število delcev ohranja. V enačbi 4.8 imamo na desni odvod gostote verjetnosti. Če se število delcev ohranja, se mora ohranjati tudi integral gostote verjetnosti, kar pomeni, da mora količina na levi strani en. 4.8

$$j = -i \frac{\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \quad (4.9)$$

predstavljati gostoto toka verjetnosti, ki je sorazmerna z gostoto toka delcev. Izraz 4.9 tako privzamemo za definicijo gostote toka delcev.

4.5 Odboj na potencialni stopnici

Poglejmo še primer nevezanega delca, najprej s posebej preprosto potencialno energijo - potencialno stopnico, ki jo kaže slika. Takemu potencialu ustreza pri svetlobnem valovanju prehod preko meje z različnimi lomnimi količniki. Vemo, da se na taki meji del valovanja vselej odbije. Za elektrone bi približno tak stopničast potencial lahko dobili tako, da bi elektrone zavrli med dvema mrežicama, na katere bi priključili napetost V_0 . Razdalja med mrežicama bi morala biti majhna v primerjavi z de Broglievo valovno dolžino, da bi lahko prostorsko odvisnost potenciala približno obravnavali kot ostro stopnico.



Denimo, da na stopnico z leve pada curek delcev z dano gostoto toka. Po klasični fiziki bi curek delcev, ki ima levo od stopnice kinetično energijo več od V_0 , brez odbitega dela preiti stopnico, ker pa se valovna funkcija obnaša kot valovanje, dobimo v kvantnem računu tudi odbiti curek. Naj bo za $x < 0$ valovno število delcev k_1 in kinetična energija $W_1 = \hbar^2 k_1^2 / 2m$. Kinetična energija pri $x > 0$ je seveda $W_1 - V_0$, zato je valovno število $k_2 = \sqrt{2m(W_1 - V_0)} / \hbar$. Valovna funkcija levo od stopnice je vsota vpadnega in odbitega dela

$$\psi_1(x) = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}$$

Desno od stopnice imamo samo prepuščeni curek, v katerem se delci gibljejo le v pozitivno smeri, zato je tam valovna funkcija

$$\psi_2(x) = a_2 e^{ik_2 x}$$

Amplituda a_1 določa gostoto vpadnega toka $j_0 = |a_1|^2 k_1$ in jo obravnavamo kot znan podatek. Izračunati moramo amplitudi b_1 in a_2 , ki določata odbiti in prepuščeni del vpadnega toka. Za to uporabimo robne pogoje, da morata biti valovna funkcija in njen odvod pri $x = 0$ zvezna:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

S tema pogojevma dobimo enačbi

$$\begin{aligned} a_1 + b_1 &= a_2 \\ k_1 a_1 - k_1 b_1 &= k_2 a_2 \end{aligned}$$

Rešitev je

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} a_1 \\ a_2 &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} a_1 \end{aligned}$$

Definirajmo odbojnost kot razmerje odbite in vpadne gostote toka: $R = j_1/j_0$. Ker je velikost hitrosti odbitih in vpadnih delcev enaka, je

$$R = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

Prepustnost je razmerje preupščene in vpadne gostote toka: $T = j_2/j_0$. Tu moramo upoštevati tudi, da se pri prehodu čez stopnico spremeni hitrost delcev, zato je po enačbi 4.7 za gostoto toka

$$T = \frac{|a_2|^2 k_2}{|a_1|^2 k_1} = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Enačbi za R in T sta analogni enčbam za odbojnost in prepustnost dielektrične meje v optiki.

Zanimivo je pogledati še primer, ko je začetna kinetična energija manjša od višine potencialne stopnice. Tedaj je $k_2 = \sqrt{2m(W_1 - V_0)}/\hbar = i\sqrt{2m(V_0 - W_1)}/\hbar = i\kappa$ imaginaren in je valovna funkcija na desni

$$\psi_2(x) = a_2 e^{-\kappa x}$$

Verjetnostna gostota, da najdemo delec v *prepovedanem* področju, kjer je njegova kinetična energija negativna, je različna od nič, kar je spet povsem kvanten pojav. Odbojnost je v tem primeru

$$R = \left| \frac{k_1 - i\kappa}{k_1 + i\kappa} \right|^2 = 1$$

kot pričakujemo tudi klasično.

4.6 Potencialna plast in tunelski pojav

Lotimo se še nekoliko bolj zapletenega primera potencialne plasti, kjer je potencial $V(x) = V_0$ v območju $0 < x < x_0$, drugod pa je 0. Spet naj z leve prihaja curek delcev z znano gostoto toka. Valovna funkcija je

$$\psi(x) = \begin{cases} a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ a_2 e^{ik_2 x} + b_2 e^{-ik_2 x} & 0 < x < x_0 \\ a_3 e^{ik_1 x} & x > x_0 \end{cases}$$

kjer je $k_2 = \sqrt{2m(W_1 - V_0)}/\hbar$ in je $W_1 = \hbar^2 k_1^2 / 2m$ kinetična energija vpadnih delcev. Iščemo vse amplitude razen a_1 , ki določa vpadno gostoto toka $j_0 = |a_1|^2 k_1$. Valovna funkcija in njen odvod morata biti zvezna pri $x = 0$ in $x = x_0$, kar da enačbe

$$\begin{aligned} a_1 + b_1 &= a_2 + b_2 \\ k_1(a_1 - b_1) &= k_2(a_2 + b_2) \\ a_3 e^{ik_1 x_0} &= a_2 e^{ik_2 x_0} + b_2 e^{-ik_2 x_0} \\ k_1 a_3 e^{ik_1 x_0} &= k_2(a_2 e^{ik_2 x_0} - b_2 e^{-ik_2 x_0}) \end{aligned}$$

Iz zadnjih dveh enačb izračunamo amplitudi v plasti a_2 in b_2 :

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{1}{2} a_3 \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)x_0} \\ b_2 &= \frac{1}{2} a_3 \left(1 - \frac{k_1}{k_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)x_0} \end{aligned}$$

To postavimo v prvi dve enačbi in dobimo še

$$\begin{aligned} a_3 &= \frac{2 k_1 k_2 e^{-ik_1 x_0}}{2 k_1 k_2 \cos k_2 x_0 - i(k_1^2 + k_2^2) \sin k_2 x_0} a_1 \\ b_1 &= \frac{-i(k_1^2 - k_2^2) \sin k_2 x_0}{2 k_1 k_2 \cos k_2 x_0 - i(k_1^2 + k_2^2) \sin k_2 x_0} a_1 \end{aligned}$$

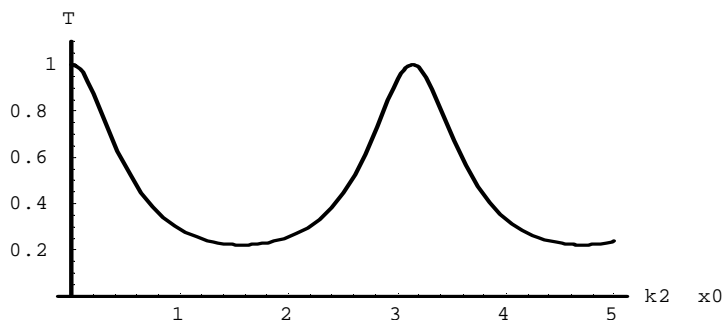
Zanima nas predvsem razmerje prepuščenega in vpadnega toka, to je prepustnost plasti $T = j_3/j_0$:

$$T = \frac{|a_3|^2}{|a_1|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2 k_2 x_0} \quad (4.10)$$

Odbojnost je $R = j_1/j_0$

$$R = 1 - T = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2} = \frac{\frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2 k_2 x_0}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2 k_2 x_0}$$

Odvisnost T od $k_2 x_0$ kaže slika. Podobno odvisnost prepustnosti od razmika dobimo v optiki pri Fabri-Perotovem interferometru. Pri vrednostih $k_2 x_0 = n\pi$ je $T = 1$. Tedaj je debelina plasti ravno mnogokratnik polovične valovne dolžine in dobimo konstruktivno interferenco med odboji na obeh mejah. Za energijo velja tedaj $W_1 = V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m x_0^2}$.



Kinetična energija vpadnih delcev je lahko manjša od višine potencialne plasti V_0 . Klasično bi se tedaj morali vsi delci odbiti in prepustnost bi bila 0. V našem računu postane za $V_0 > W_1$ vrednost k_2 imaginarna, vendar je račun še vedno veljaven. Tedaj lahko zapišemo

$$k_2 = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - W_1)} = i\kappa$$

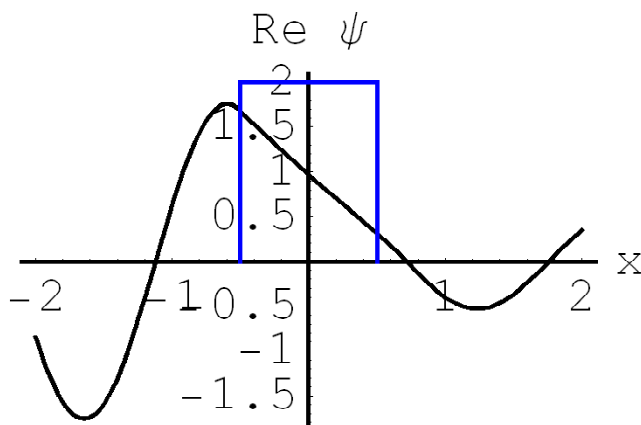
Valovna funkcija v plasti je vsota realnih eksponentnih funkcij

$$\psi_2 = a_2 e^{-\kappa x} + b_2 e^{\kappa x}$$

desno od plasti pa ima zopet obliko vala z amplitudo

$$a_3 = \frac{2ik_1\kappa e^{-ik_1x_0}}{2ik_1\kappa \operatorname{ch}\kappa x_0 + (k_1^2 - \kappa^2) \operatorname{sh}\kappa x_0} a_1$$

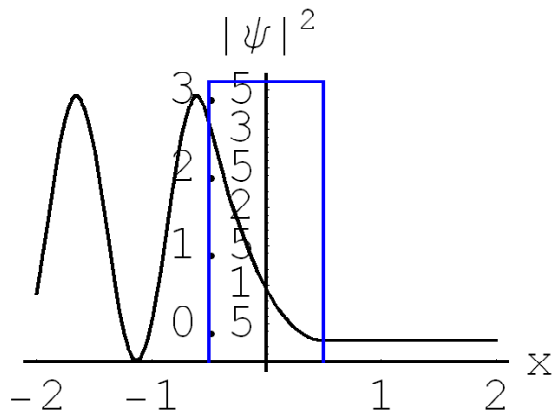
Valovna funkcija je različna od nič tudi desno od bariere in delci lahko prehajajo skozi plast, kar klasično ni mogoče. Temu pojavu pravimo tuneliranje skozi potencialno bariero. Naslednja slika kaže realni del valovne funkcije pri tuneliranju skozi plast



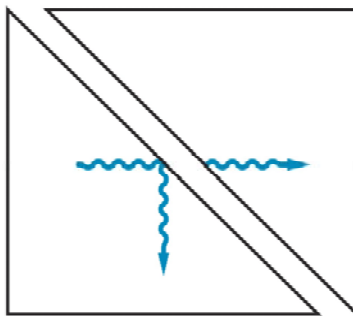
Prepustnost je $T = |a_3|^2 / |a_1|^2$. Če je $\kappa x_0 > 1$, sta funkciji $\operatorname{ch}\kappa x_0$ in $\operatorname{sh}\kappa x_0$ približno $e^{\kappa x_0}$ in je

$$T \simeq \frac{4k_1^2\kappa^2}{(k_1^2 + \kappa^2)} e^{-2\kappa x_0} = \frac{4k_1^2\kappa^2}{(k_1^2 + \kappa^2)} e^{-2\frac{x_0}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - W_1)}}$$

Potek gostote verjetnosti pri tuneliranju kaže slika. Oscilacije gostote verjetnosti na levi strani plasti so posledica tega, da se večina valovne funkcije odbije in dobimo na levi skoraj stoječi val.

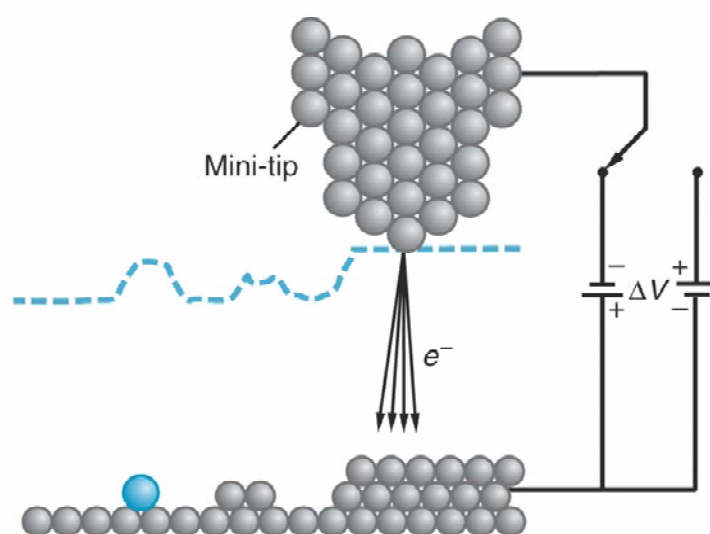


Pojav tuneliranja ima analogijo v optiki. Pri totalnem odboju svetlobe na optično redkejšem sredstvu električna poljska jakost v redkejšem sredstvu pojema eksponentno, enako kot valovna funkcija v prepovedanem območju. Če pri totalnem odboju na hipotenuzi pravokotne prizme toliko približamo drugo prizmo, da seže v eksponento pojema^oe polje, dobimo v drugi prizmi del valovanja, katerega gostota toka pojema eksponentno z razdaljo med prizmama.



Pojav tuneliranja je praktično pomemben pri elektronskem vrstičnem elektronskem mikroskopu. Ta deluje tako, da preiskovani prevodni površini približamo na razdaljo pod 1 nm čim bolj ostro kovinsko konico. Med njo in površino pritismo napetost nekaj voltov. Elektroni iz površine lahko pri dovolj majhni razdalji do konice tunelirajo. Tunelski tok je eksponentno odvisen od razdalje. Navadno naprava deluje tako, da s povratno zvezo, s katero približuje in oddaljuje konico, vzdržuje

konstanten tok. Ko se konica premika vzdolž površine, tako signal povratne zveze predstavlja vertikalne pomike konice in dobimo sliko površine. Zaradi eksponentne odvisnosti je naprava zelo občutljiva, zazna razlike v oddaljenosti od površine manj od 0,01 nm, torej 0,1 velikosti atoma in je z njo mogoče delati slike površine, na katerih je mogoče videti atomsko strukturo površine.



Drug primer, kjer je tuneliranje bistveno, je razpad α atomskih jeder, o katerem bomo govorili na koncu leta.