X Stany związane – nieskończona studnia potencjału.

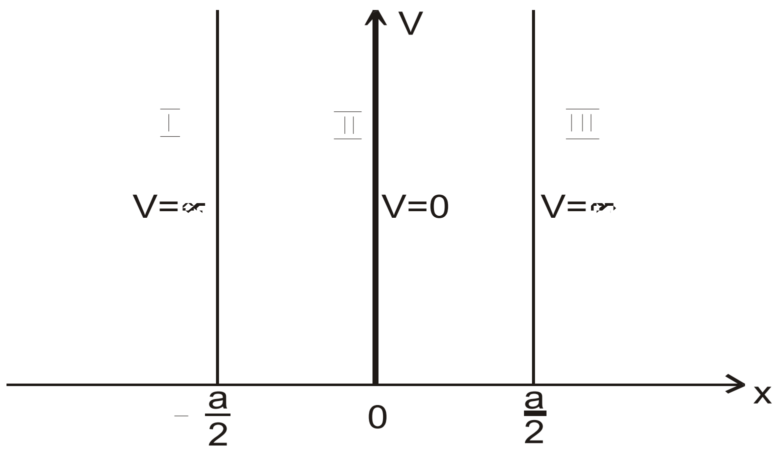
Jeżeli energia cząsteczki nie pozwala jej na opuszczenie określonego obszaru powstają tzw. stany związane.

Stan związany ma skwantowany wektor falowy k, tzn. tylko niektóre wartości wektora falowego są spełnione, ponieważ musi powstać fala, która ma węzły na barierach.

Potencjał nieskończenie głębokiej prostokątnej studni ma tę własność, że wiąże cząstkę o skończonej energii $E \geq 0$. W mechanice klasycznej dozwolona jest dowolna wartość energii, natomiast w mechanice kwantowej dozwolone są tylko pewne dyskretne wartości własne E_n. Dla niezbyt dużych wartości liczby kwantowej n odpowiadające im wartości własne i funkcje własne użyte być mogą jako przybliżenie odpowiadających im wartości własnych i funkcji własnych dla potencjału o dużym, lecz skończonym V_0.

Nieskończona studnia potencjału.

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < -\frac{a}{2} \quad \text{lub} \quad x > \frac{a}{2} \\ 0, & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \end{cases}$$



W obszarach I i III cząsteczka nie występuje i funkcja falowa zanika

$$\Psi_1 = \Psi_3 = 0$$

W obszarze II równanie Schrödingera ma postać

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

Rozwiązanie tego równania zapisujemy w postaci :

$$\Psi_2 = A\sin kx + B\cos kx \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Można też szukać rozwiązań postaci $c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$, jednak w przypadku ruchu ograniczonego wygodniej jest używać funkcji sinus i cosinus. Z ciągłości funkcji falowej dla $x = \pm a/2$ otrzymujemy :

$$\Psi(-\frac{a}{2}) = \Psi(\frac{a}{2}) = 0$$

$$2A\sin\frac{ka}{2} = 0$$

$$2B\cos\frac{ka}{2} = 0$$

(Uwaga: w przypadku nieskończonego skoku potencjału nie uciąglamy pochodnej funkcji falowej).

Oba te warunki muszą być spełnione, więc wybieramy taką wartość k, by $\cos\frac{ka}{2} = 0$, jednocześnie zakładając, że $A = 0$, albo wybieramy takie k, by $\sin\frac{ka}{2} = 0$ i $B = 0$.

$$\Psi_n(x) = B_n \cos k_n x \qquad k_n = \frac{n\pi}{a}, \qquad n = 1,3,5,...$$

$$\Psi_n(x) = A_n \sin k_n x \qquad k_n = \frac{n\pi}{a}, \qquad n = 2,4,6,...$$

Ze związku $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ i ze wzorów na dozwolone wartości k otrzymujemy:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^{\ 2}}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \qquad n = 1,2,3,4,...$$

Dochodzimy więc do wniosku, że dozwolone są tylko pewne wartości energii całkowitej E, czyli że jest ona skwantowana.

Szczególnie interesująca jest pierwsza wartość własna energii dla nieskończenie głębokiej studni prostokątnej, którą nazywa się energią drgań zerowych. Jest to najniższa możliwa energia całkowita, jaką może mieć cząstka ograniczona przez potencjał nieskończenie głębokiej studni. Energia drgań zerowych nie jest równa zeru. Zjawisko to jest w zasadzie wynikiem zasady nieoznaczoności. Jeśli obszar, w którym przebywa cząstka jest ograniczony przez potencjał, wówczas znamy współrzędną x tej cząstki z niepewnością rzędu $\Delta x \approx a$. Zatem niepewność x-owej składowej pędu tej cząstki musi być przynajmniej równa $\Delta p = \frac{\hbar}{2\Delta x} \approx \frac{\hbar}{2a}$. Z zasady nieoznaczoności wynika, że cząstka związana przez ten potencjał nie może mieć całkowitej energii równej zeru, bo oznaczałoby to, że niepewność jej pędu też jest równa zeru. W szczególnym przypadku wartości własnej E_1 pęd jest równy co do wartości bezwzględnej $p_1 = \sqrt{2mE_1} = \frac{\pi\hbar}{a}$. Cząstka może poruszać się w dowolnym kierunku; faktyczna więc wartość pędu nie jest określona i jego niepewność jest rzędu $\hbar/a$.

Wnioskujemy więc, że istnienie energii drgań zerowych wynika z konieczności istnienia ruchu zerowego. Stoi to w sprzeczności z zasadami fizyki klasycznej.

W analogiczny sposób można pokazać , że dla studni potencjału spełniającej warunek $V(x)=0$ dla $0 \le x \le a$ otrzymywane funkcje falowe są postaci

$$\Psi_n = A \cdot \sin(k_n \cdot x) \quad ; \quad k_n = \frac{n\pi}{a}$$

Stałą A znajdujemy z warunku unormowania prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w pudle, a mianowicie :

$$P = \int_0^a |\Psi|^2 dx = \int_0^a |A|^2 \sin^2(k_n x) dx = 1$$

Ponieważ

$$\int_0^a \sin^2(k_n x)\, dx = \frac{a}{2}$$

Zatem $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ i unormowana funkcja falowa ma postać

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x)$$