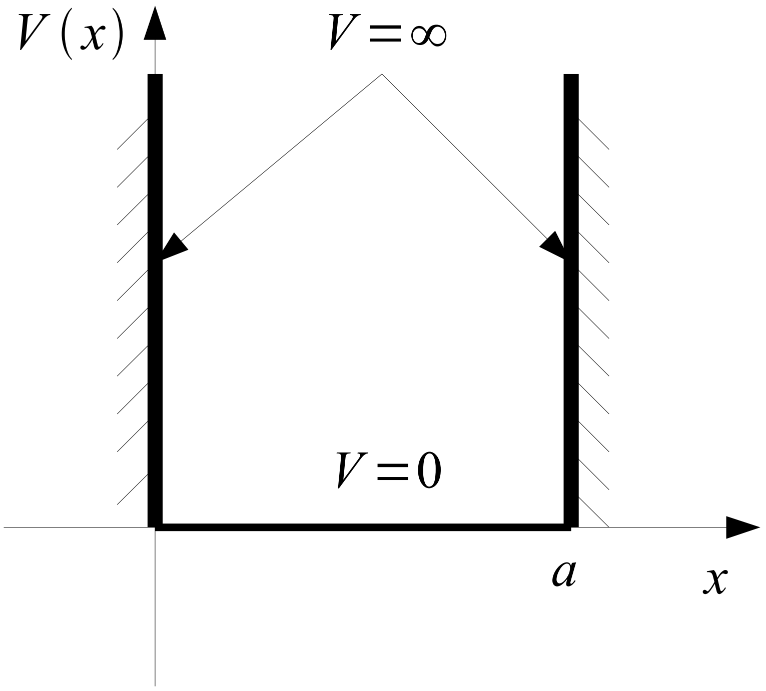
Zadatak 1.

Elektron se giba u jednodimenzionalnoj neprobojnoj potencijalnoj jami širine $a = 1\,nm$. (Vidi sliku)

a) Nađite vlastite funkcije i vlastite energije elektrona. Kolika je energija osnovnog stanja elektrona?

b) Izračunajte neodređenosti položaja i količine gibanja elektrona u određenom stanju. Koliki je umnožak tih neodređenosti?

c) Ponovite račun pod b) pod pretpostavkom da vrijede klasični zakoni gibanja elektrona.



Rješenje:

a) Stacionarna Schrödingerova jednadžba ima oblik:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{d^2x}=E\Psi(x) \quad , \quad 0\leqslant x\leqslant a$$

odnosno:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}+k^2\Psi(x)=0 \quad , \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

Opće rješenje ove jednadžbe je:

$$\Psi(x)=A\cdot\sin(k\cdot x+\phi)$$

Rubni uvjeti su:

$$\Psi(0)=0 \quad , \quad \Psi(a)=0$$

iz čega slijedi:

$$\phi=0 \quad , \quad k=\frac{n\pi}{a} \quad , \quad n=1,2,\ldots$$

Uvjet normalizacije:

$$|A|^2\int_0^a \sin^2(kx)\,dx=1 \quad \Rightarrow \quad A=\mathrm{e}^{i\varphi}\sqrt{\frac{2}{a}}$$

Dakle, vlastite energije i vlastite funkcije su:

$$E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2} \quad , \quad \Psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad , \quad n=1,2,\ldots..$$

Osnovno stanje odgovara kvantnom broju n=1, s energijom

$$E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}=0{,}376\,eV$$

b) Neodređenost neke, bilo koje, fizičke veličine O, računa se na način:

$$\Delta O=\sqrt{\langle O^2\rangle-\langle O\rangle^2}$$

Za položaj imamo:

$$\langle x\rangle=\frac{2}{a}\int_0^a x\cdot\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx=\frac{2}{a}\int_0^a x\cdot\frac{1-\cos\left(\frac{2\pi n x}{a}\right)}{2}dx=$$

$$=\frac{1}{a}\left[\frac{x^2}{2}\Big|_0^a-\int_0^a x\cdot\cos\left(\frac{2\pi n x}{a}\right)dx\right]=\frac{a}{2}-\frac{1}{a}\left[\frac{a}{2n\pi}\left(x\cdot\sin\left(\frac{2\pi n x}{a}\right)\Big|_0^a-\right.\right.$$

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

Na sličan način, supstitucijom i parcijalnim integriranjem, dobijemo:

$$\langle x^2\rangle=\frac{2}{a}\left(\frac{a}{2\pi}\right)^3\int_0^{2\pi}u^2\cdot\sin^2\left(\frac{nu}{2}\right)du=a^2\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2\pi^2n^2}\right)$$

$$\Delta x=a\sqrt{\frac{1}{3}-\frac{1}{2\pi^2n^2}-\frac{1}{4}}=a\sqrt{\frac{1}{12}-\frac{1}{2\pi^2n^2}}$$

Za količinu gibanja imamo:

$$\langle p\rangle = -i\hbar\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\frac{d}{dx}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = 0$$

$$\langle p^2\rangle = -\hbar^2\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\frac{d^2}{dx^2}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \hbar^2\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

$$\Delta p = \frac{n\pi\hbar}{a}$$

Umnožak neodređenosti položaja i količine gibanja:

$$\Delta x\cdot\Delta p = \hbar\cdot\sqrt{\frac{n^2\pi^2}{12}-\frac{1}{2}} \geqslant 0{,}568\,\hbar$$

c) Po zakonima klasične mehanike, čestica se giba stalnom brzinom, osim u točkama gdje se sudara sa zidom i tu se odbija mijenjajući samo predznak svoje brzine. Dakle, giba se periodički. Period njezina gibanja je

$$T = \frac{2a}{v}$$

gdje je v njezina brzina. Postavlja se pitanje kolika je vjerojatnost dp da ćemo u intervalu vremena dt česticu naći u okolini određenog položaja unutar jame? Ta vjerojatnost je očito jednaka omjeru intervala vremena i poluperioda. Zašto poluperioda? Zato što u određenoj točci čestica može imati brzinu *v* ili -*v*. Dakle, vrijedi

$$dp = \frac{dt}{\frac{T}{2}} = \frac{2\,dx}{v\,T} = \frac{dx}{a}$$

To znači da je gustoća vjerojatnosti konstantna i iznosi $1/a$.
Kad znamo gustoću vjerojatnosti, onda znamo izračunati prosječne vrijednosti bilo koje veličine.
Imamo:

$$\langle x \rangle = \int_0^a x \cdot \frac{1}{a}\,dx = \frac{a}{2} \quad , \quad \langle x^2 \rangle = \int_0^a x^2 \cdot \frac{1}{a}\,dx = \frac{a^2}{3}$$

$$\langle v \rangle = 0 \quad , \quad \langle v^2 \rangle = v^2 \;\Rightarrow \langle p \rangle = 0 \quad , \quad \langle p^2 \rangle = m^2 v^2$$

Iz ovoga slijedi:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{m\,v\,a}{\sqrt{12}}$$

Ako bismo umnožak $m\,v\,a$, prema shvaćanju "stare" kvantne mehanike, zamijenili s $n\hbar$, onda bismo za velike kvantne brojeve dobili isti izraz za neodređenost što smo ga izveli iz Schrödingerove jednadžbe.

Zadatak 2.

Riješite Schrödingerovu jednadžbu za elektron unutar kvadratične dvodimenzionalne neprobojne potencijalne jame širine a=1 nm.

a) Kolika je energija osnovnog stanja elektrona?

b) Koje su valne funkcije prvog pobuđenog stanja elektrona?

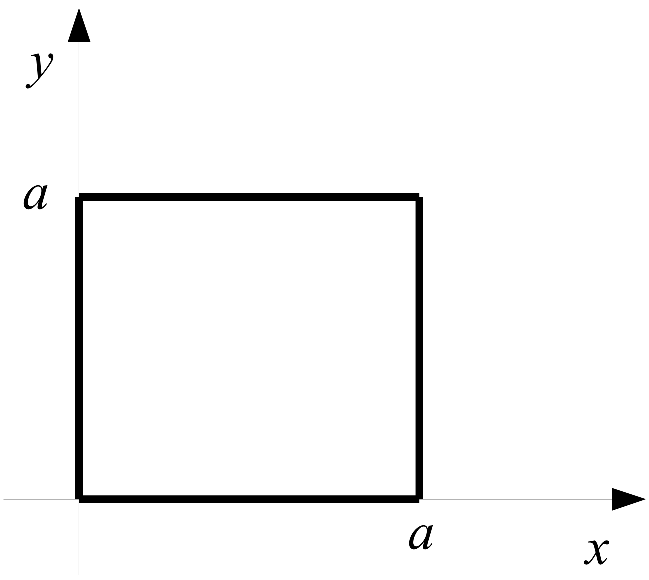
Rješenje:

a) Schrödingerova jednadžba je:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}\right)=E\Psi$$

Rubni uvjeti su:

$$\Psi(x=0,y)=0 \quad , \quad \Psi(x=a,y)=0$$
$$\Psi(x,y=0)=0 \quad , \quad \Psi(x,y=a)=0$$



Valnu funkciju $\Psi(x, y)$ možemo predočiti u obliku umnoška

$$\Psi(x, y) = F(x) \cdot G(y)$$

zato što operator deriviranja po varijabli x komutira s operatorom deriviranja po varijabli y.

Ako za funkcije F i G postavimo jednadžbe

$$\frac{d^2 F(x)}{d x^2} + k_x^2 F(x) = 0 \quad , \quad \frac{d^2 G(y)}{d y^2} + k_x^2 G(y) = 0$$

onda iz Schrödingerove jednadžbe dobivamo

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2\right)$$

Ova metoda rješavanja se zove **separacija varijabli**.

Primjenom rezultata Zadatka 1, i rubnih uvjeta za valnu funkciju $\Psi(x, y)$, dobivamo

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a} \quad , \quad k_y = \frac{n_y \pi}{a} \quad , \quad n_x, n_y = 1,2, \ldots.$$

Normalizirana valna funkcija je:

$$\Psi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi y}{a}\right)$$

Vlastite energije su:

$$E_{n_x,n_y}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(n_x^2+n_y^2\right)$$

Osnovno stanje ima kvantne brojeve

$$n_x=1 \quad , \quad n_y=1$$

Dobili smo **dva** kvantna broja jednostavno zato što je gibanje u dvije dimenzije.

b) Prvo sljedeće stanje energije iznad osnovnog stanja se može ostvariti na dva načina

$$n_x=2 \quad , \quad n_y=1 \quad i \quad n_x=1 \quad , \quad n_y=2$$

Tim dvama skupovima kvantnih brojeva odgovara **ista energija**, a **dvije različite** valne funkcije:

$$\Psi_{2,1}(x,y)=\frac{2}{a}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cdot\sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) \quad ,$$

$$\Psi_{1,2}(x,y)=\frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cdot\sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right)$$

Ta pojava, da jednoj te istoj energiji pripada više od jedne vlastite valne funkcije, zove se **degeneracija stanja.** Ona je povezana sa simetrijom potencijala—ako kvadrat zakrenemo za 90^o , ništa se ne će promijeniti.