Funkcje własne energii

Wykład 3

Karol Kołodziej

Instytut Fizyki
Uniwersytet Śląski, Katowice
http://kk.us.edu.pl

Bezczasowe równanie Schrödingera

Równanie Schrödingera

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t).$$

opisujące ruch cząstki o masie m w polu siły $\vec{F}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}V(\vec{r},t)$ upraszcza się jeśli energia potencjalna nie zależy jawnie od czasu

$$V(\vec{r},t) \equiv V(\vec{r}).$$

Poszukajmy szczególnego rozwiązania równania Schrödingera, które można przedstawić w postaci iloczynu

$$\psi(\vec{r},t) = u(\vec{r})\,f(t).$$

Równanie Schrödingera

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t).$$

opisujące ruch cząstki o masie m w polu siły $\vec{F}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}V(\vec{r},t)$ upraszcza się jeśli energia potencjalna nie zależy jawnie od czasu

$$V(\vec{r},t) \equiv V(\vec{r}).$$

Poszukajmy szczególnego rozwiązania równania Schrödingera, które można przedstawić w postaci iloczynu

$$\psi(\vec{r},t) = u(\vec{r})\, f(t).$$

Bezczasowe równanie Schrödingera

Równanie Schrödingera przybiera wówczas postać

$$i\hbar\, u(\vec{r})\,\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = f(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r},t)u(\vec{r})\right].$$

Dzieląc obie strony przez iloczyn uf otrzymamy

$$\underbrace{\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}}_{\text{funkcja } t} = \underbrace{\frac{1}{u(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r})\,u(\vec{r})\right]}_{\text{funkcja } \vec{r}}$$

Bezczasowe równanie Schrödingera

Równanie Schrödingera przybiera wówczas postać

$$i\hbar\, u(\vec{r})\,\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = f(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r},t)u(\vec{r})\right].$$

Dzieląc obie strony przez iloczyn uf otrzymamy

$$\underbrace{\frac{i\hbar}{f(t)}\,\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}}_{\text{funkcja } t} = \underbrace{\frac{1}{u(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r})\,u(\vec{r})\right]}_{\text{funkcja } \vec{r}}$$

Lewa strona tego równania zależy tylko od t, a prawa tylko od $\vec{r}$.

Bezczasowe równanie Schrödingera

Równanie Schrödingera przybiera wówczas postać

$$i\hbar\, u(\vec{r})\,\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = f(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r},t)u(\vec{r})\right].$$

Dzieląc obie strony przez iloczyn uf otrzymamy

$$\underbrace{\frac{i\hbar}{f(t)}\,\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}}_{\text{funkcja } t} = \underbrace{\frac{1}{u(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r})\,u(\vec{r})\right]}_{\text{funkcja } \vec{r}}$$

Lewa strona tego równania zależy tylko od t, a prawa tylko od $\vec{r}$.

Dlatego obie strony muszą być równe pewnej stałej, tzw. stałej separacji, którą oznaczymy E.

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{u(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r})\,u(\vec{r})\right] = \mathrm{const.} = E.$$

Stąd otrzymujemy dwa równania różniczkowe:

Dlatego obie strony muszą być równe pewnej stałej, tzw. stałej separacji, którą oznaczymy E.

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{u(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r})\,u(\vec{r})\right] = \mathrm{const.} = E.$$

Stąd otrzymujemy dwa równania różniczkowe:

na część *czasową*

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\,f(t)$$

Bezczasowe równanie Schrödingera

Dlatego obie strony muszą być równe pewnej stałej, tzw. stałej separacji, którą oznaczymy E.

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\,\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{u(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r})\,u(\vec{r})\right] = \text{const.} = E.$$

Stąd otrzymujemy dwa równania różniczkowe:
na część *czasową*

$$i\hbar\,\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\,f(t)$$

i część *przestrzenną*

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\,u(\vec{r})$$

funkcji falowej $\psi(\vec{r}, t)$.

Bezczasowe równanie Schrödingera

Dlatego obie strony muszą być równe pewnej stałej, tzw. stałej separacji, którą oznaczymy E.

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{u(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\vec{r}) + V(\vec{r})\,u(\vec{r})\right] = \mathrm{const.} = E.$$

Stąd otrzymujemy dwa równania różniczkowe:
na część *czasową*

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\,f(t)$$

i część *przestrzenną*

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\,u(\vec{r})$$

funkcji falowej $\psi(\vec{r}, t)$.

Równanie na część *przestrzenną* $u(\vec{r})$ funkcji falowej $\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r}) f(t)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r})$$

nosi nazwę bezczasowego równania Schrödingera.

Część czasowa równania Schrödingera

Równanie na część *czasową*

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\, f(t)$$

można łatwo rozwiązać metodą rozdzielenia zmiennych.

$$\frac{\mathrm{d}f}{f} = \frac{1}{i\hbar} E \,\mathrm{d}t$$

Część czasowa równania Schrödingera

Równanie na część *czasową*

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\, f(t)$$

można łatwo rozwiązać metodą rozdzielenia zmiennych.

$$\frac{\mathrm{d}f}{f} = \frac{1}{i\hbar} E\,\mathrm{d}t \quad \Rightarrow \quad \ln f = -\frac{i}{\hbar} Et + \ln C$$

Część czasowa równania Schrödingera

Równanie na część *czasową*

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\, f(t)$$

można łatwo rozwiązać metodą rozdzielenia zmiennych.

$$\frac{\mathrm{d}f}{f} = \frac{1}{i\hbar} E\, \mathrm{d}t \quad \Rightarrow \quad \ln f = -\frac{i}{\hbar} Et + \ln C \quad \Rightarrow \quad f(t) = Ce^{-iEt/\hbar},$$

Część czasowa równania Schrödingera

Równanie na część *czasową*

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\, f(t)$$

można łatwo rozwiązać metodą rozdzielenia zmiennych.

$$\frac{\mathrm{d}f}{f} = \frac{1}{i\hbar} E \,\mathrm{d}t \quad \Rightarrow \quad \ln f = -\frac{i}{\hbar} Et + \ln C \quad \Rightarrow \quad f(t) = Ce^{-iEt/\hbar},$$

gdzie C jest stałą dowolną, którą można włączyć w czynnik normalizacyjny funkcji $u(\vec{r})$.

Część czasowa równania Schrödingera

Równanie na część *czasową*

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\, f(t)$$

można łatwo rozwiązać metodą rozdzielenia zmiennych.

$$\frac{\mathrm{d}f}{f} = \frac{1}{i\hbar} E\, \mathrm{d}t \quad \Rightarrow \quad \ln f = -\frac{i}{\hbar} Et + \ln C \quad \Rightarrow \quad f(t) = Ce^{-iEt/\hbar},$$

gdzie C jest stałą dowolną, którą można włączyć w czynnik normalizacyjny funkcji $u(\vec{r})$.

Wówczas szczególne rozwiązanie równania Schrödingera ma postać

$$\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar}.$$

Część czasowa równania Schrödingera

Równanie na część *czasową*

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\, f(t)$$

można łatwo rozwiązać metodą rozdzielenia zmiennych.

$$\frac{\mathrm{d}f}{f} = \frac{1}{i\hbar} E\, \mathrm{d}t \quad \Rightarrow \quad \ln f = -\frac{i}{\hbar} Et + \ln C \quad \Rightarrow \quad f(t) = Ce^{-iEt/\hbar},$$

gdzie C jest stałą dowolną, którą można włączyć w czynnik normalizacyjny funkcji $u(\vec{r})$.
Wówczas szczególne rozwiązanie równania Schrödingera ma postać

$$\psi\left(\vec{r}, t\right) = u\left(\vec{r}\right)\, e^{-iEt/\hbar}.$$

Równanie własne operatora energii

Równanie

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\, f(t)$$

możemy również zapisać w formie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\vec{r}, t\right) = E\, \psi\left(\vec{r}, t\right),$$

Równanie własne operatora energii

Równanie

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\, f(t)$$

możemy również zapisać w formie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi\,(\vec{r}, t) = E\,\psi\,(\vec{r}, t)\,,$$

a więc w formie równania własnego operatora energii

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

Równanie własne operatora energii

Równanie

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = E\, f(t)$$

możemy również zapisać w formie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\vec{r}, t\right) = E\, \psi\left(\vec{r}, t\right),$$

a więc w formie równania własnego operatora energii

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

Równanie własne operatora energii

Zauważmy, że równanie na część przestrzenną $u(\vec{r})$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r})$$

też ma postać równania własnego operatora Hamiltona

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}).$$

Równanie własne operatora energii

Zauważmy, że równanie na część przestrzenną $u(\vec{r})$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\,u(\vec{r})$$

też ma postać równania własnego operatora Hamiltona

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\,.$$

Stałą separacji E nazywamy w tym przypadku wartością własną operatorów $\hat{E}$ i $\hat{H}$.

Równanie własne operatora energii

Zauważmy, że równanie na część przestrzenną $u(\vec{r})$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r})$$

też ma postać równania własnego operatora Hamiltona

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\,.$$

Stałą separacji E nazywamy w tym przypadku wartością własną operatorów $\hat{E}$ i $\hat{H}$.

Zgodnie z równaniem Schrödingera operatory te są sobie równoważne nie tylko dla funkcji separowalnych, ale dla wszystkich rozwiązań równania falowego.

Równanie własne operatora energii

Zauważmy, że równanie na część przestrzenną $u(\vec{r})$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r})$$

też ma postać równania własnego operatora Hamiltona

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\,.$$

Stałą separacji E nazywamy w tym przypadku wartością własną operatorów $\hat{E}$ i $\hat{H}$.
Zgodnie z równaniem Schrödingera operatory te są sobie równoważne nie tylko dla funkcji separowalnych, ale dla wszystkich rozwiązań równania falowego.

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 \quad =$$

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t)\,\psi(\vec{r}, t)$$

Stan stacjonarny cząstki

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t) = u^*(\vec{r})\,e^{iEt/\hbar}\,u(\vec{r})\,e^{-iEt/\hbar}$$

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa

$$\color{blue}{|\psi(\vec{r},t)|^2} \color{black} = \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t) = u^*(\vec{r})\,e^{iEt/\hbar}\,u(\vec{r})\,e^{-iEt/\hbar}$$
$$=$$

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa

$$\begin{aligned} |\psi(\vec{r}, t)|^2 &= \psi^*(\vec{r}, t)\,\psi(\vec{r}, t) = u^*(\vec{r})\,e^{iEt/\hbar}\,u(\vec{r})\,e^{-iEt/\hbar} \\ &= u^*(\vec{r})\,u(\vec{r}) \end{aligned}$$

Stan stacjonarny cząstki

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa

$$\begin{aligned} |\psi(\vec{r}, t)|^2 &= \psi^*(\vec{r}, t)\,\psi(\vec{r}, t) = u^*(\vec{r})\, e^{iEt/\hbar}\, u(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar} \\ &= u^*(\vec{r})\, u(\vec{r}) = |u(\vec{r})|^2 \end{aligned}$$

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa

$$
\begin{aligned}
|\psi(\vec{r},t)|^2 &= \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t) = u^*(\vec{r})\,e^{iEt/\hbar}\,u(\vec{r})\,e^{-iEt/\hbar} \\
&= u^*(\vec{r})\,u(\vec{r}) = |u(\vec{r})|^2
\end{aligned}
$$

nie zależy od czasu,

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa

$$
\begin{aligned}
|\psi(\vec{r}, t)|^2 &= \psi^*(\vec{r}, t)\,\psi(\vec{r}, t) = u^*(\vec{r})\, e^{iEt/\hbar}\, u(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar} \\
&= u^*(\vec{r})\, u(\vec{r}) = |u(\vec{r})|^2
\end{aligned}
$$

nie zależy od czasu, to o funkcji falowej

$$\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r})\; e^{-iEt/\hbar}$$

mówimy, że reprezentuje stan stacjonarny cząstki.

Ponieważ gęstość prawdopodobieństwa

$$\begin{aligned} |\psi(\vec{r}, t)|^2 &= \psi^*(\vec{r}, t)\,\psi(\vec{r}, t) = u^*(\vec{r})\, e^{iEt/\hbar}\, u(\vec{r})\, e^{-iEt/\hbar} \\ &= u^*(\vec{r})\, u(\vec{r}) = |u(\vec{r})|^2 \end{aligned}$$

nie zależy od czasu, to o funkcji falowej

$$\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r})\; e^{-iEt/\hbar}$$

mówimy, że reprezentuje stan stacjonarny cząstki.

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Funkcja falowa reprezentująca cząstkę dobrze zlokalizowaną w przestrzeni musi spełniać warunek normalizacyjny

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 \, \mathrm{d}^3 r = 1.$$

Aby całka normalizacyjna po nieskończonym obszarze istniała funkcja falowa $\psi(\vec{r}, t)$ musi znikać w nieskończoności

$$|\psi(\vec{r}, t)| \to 0 \Big|_{|\vec{r}| \to \infty}.$$

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Funkcja falowa reprezentująca cząstkę dobrze zlokalizowaną w przestrzeni musi spełniać warunek normalizacyjny

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 \, \mathrm{d}^3 r = 1.$$

Aby całka normalizacyjna po nieskończonym obszarze istniała funkcja falowa $\psi(\vec{r}, t)$ musi znikać w nieskończoności

$$|\psi(\vec{r}, t)| \to 0\Big|_{|\vec{r}| \to \infty}.$$

W praktyce oznacza to, że funkcja falowa musi znikać na *"dostatecznie"* dużych odległościach.

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Funkcja falowa reprezentująca cząstkę dobrze zlokalizowaną w przestrzeni musi spełniać warunek normalizacyjny

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 \, \mathrm{d}^3 r = 1.$$

Aby całka normalizacyjna po nieskończonym obszarze istniała funkcja falowa $\psi(\vec{r}, t)$ musi znikać w nieskończoności

$$|\psi(\vec{r}, t)| \to 0 \Big|_{|\vec{r}| \to \infty}.$$

W praktyce oznacza to, że funkcja falowa musi znikać na *"dostatecznie"* dużych odległościach.

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Oprócz paczek falowych dobrze zlokalizowanych w przestrzeni przy "wyprowadzeniu" równania Schrödingera rozpatrywaliśmy również funkcje falowe niezlokalizowane takie, jak np.

$$\psi(\vec{r}, t) = N e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)},$$

które reprezentują cząstki o dobrze określonym pędzie nadbiegające do rozpatrywanego obszaru z dużych odległości, a następnie odlatujące do odległego obszaru przestrzeni, czyli tzw. fale płaskie. Pokazaliśmy, że dla fal płaskich całka normalizacyjna po nieograniczonym obszarze nie istnieje.

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Oprócz paczek falowych dobrze zlokalizowanych w przestrzeni przy "wyprowadzeniu" równania Schrödingera rozpatrywaliśmy również funkcje falowe niezlokalizowane takie, jak np.

$$\psi(\vec{r}, t) = Ne^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)},$$

które reprezentują cząstki o dobrze określonym pędzie nadbiegające do rozpatrywanego obszaru z dużych odległości, a następnie odlatujące do odległego obszaru przestrzeni, czyli tzw. fale płaskie. Pokazaliśmy, że dla fal płaskich całka normalizacyjna po nieograniczonym obszarze nie istnieje.

Przeczy to probabilistycznej interpretacji funkcji falowej.

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Oprócz paczek falowych dobrze zlokalizowanych w przestrzeni przy "wyprowadzeniu" równania Schrödingera rozpatrywaliśmy również funkcje falowe niezlokalizowane takie, jak np.

$$\psi(\vec{r}, t) = N e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)},$$

które reprezentują cząstki o dobrze określonym pędzie nadbiegające do rozpatrywanego obszaru z dużych odległości, a następnie odlatujące do odległego obszaru przestrzeni, czyli tzw. fale płaskie.
Pokazaliśmy, że dla fal płaskich całka normalizacyjna po nieograniczonym obszarze nie istnieje.
Przeczy to probabilistycznej interpretacji funkcji falowej.

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Fale płaskie reprezentują cząstki o dobrze określonym pędzie i zupełnie nieokreślonym położeniu.

Nie należą one do przestrzeni stanów fizycznych, która zawiera tylko funkcje falowe całkowalne z kwadratem modułu.

Fale płaskie reprezentują cząstki o dobrze określonym pędzie i zupełnie nieokreślonym położeniu.

Nie należą one do przestrzeni stanów fizycznych, która zawiera tylko funkcje falowe całkowalne z kwadratem modułu.

Ponieważ równanie falowe

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\left(\vec{r}\right)\right] u\left(\vec{r}\right) = E\, u\left(\vec{r}\right)$$

jest równaniem różniczkowym drugiego rzędu, to,

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Fale płaskie reprezentują cząstki o dobrze określonym pędzie i zupełnie nieokreślonym położeniu.
Nie należą one do przestrzeni stanów fizycznych, która zawiera tylko funkcje falowe całkowalne z kwadratem modułu.
Ponieważ równanie falowe

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r})$$

jest równaniem różniczkowym drugiego rzędu, to, jeśli tylko potencjał $V(\vec{r})$ jest skończony,

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Fale płaskie reprezentują cząstki o dobrze określonym pędzie i zupełnie nieokreślonym położeniu.
Nie należą one do przestrzeni stanów fizycznych, która zawiera tylko funkcje falowe całkowalne z kwadratem modułu.
Ponieważ równanie falowe

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r})$$

jest równaniem różniczkowym drugiego rzędu, to, jeśli tylko potencjał $V(\vec{r})$ jest skończony, znajomość funkcji falowej i jej gradientu na dużych odległościach pozwala znaleźć jednoznaczne rozwiązanie określające funkcję falową w dowolnym punkcie przestrzeni.

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

Fale płaskie reprezentują cząstki o dobrze określonym pędzie i zupełnie nieokreślonym położeniu.
Nie należą one do przestrzeni stanów fizycznych, która zawiera tylko funkcje falowe całkowalne z kwadratem modułu.
Ponieważ równanie falowe

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r})$$

jest równaniem różniczkowym drugiego rzędu, to, jeśli tylko potencjał $V(\vec{r})$ jest skończony, znajomość funkcji falowej i jej gradientu na dużych odległościach pozwala znaleźć jednoznaczne rozwiązanie określające funkcję falową w dowolnym punkcie przestrzeni.

To z kolei pozwala jednoznacznie obliczyć gęstość prawdopodbieństwa znalezienia cząstki w tym punkcie.
Dlatego naturalne wydaje się przyjęcie założenia, że

To z kolei pozwala jednoznacznie obliczyć gęstość prawdopodbieństwa znalezienia cząstki w tym punkcie. Dlatego naturalne wydaje się przyjęcie założenia, że funkcja falowa i jej gradient powinny być

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

To z kolei pozwala jednoznacznie obliczyć gęstość prawdopodbieństwa znalezienia cząstki w tym punkcie. Dlatego naturalne wydaje się przyjęcie założenia, że funkcja falowa i jej gradient powinny być

- ciągłe,

To z kolei pozwala jednoznacznie obliczyć gęstość prawdopodbieństwa znalezienia cząstki w tym punkcie. Dlatego naturalne wydaje się przyjęcie założenia, że funkcja falowa i jej gradient powinny być

- ciągłe,
- skończone

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

To z kolei pozwala jednoznacznie obliczyć gęstość prawdopodbieństwa znalezienia cząstki w tym punkcie. Dlatego naturalne wydaje się przyjęcie założenia, że funkcja falowa i jej gradient powinny być

- ciągłe,
- skończone
- i jednowartościowe

To z kolei pozwala jednoznacznie obliczyć gęstość prawdopodbieństwa znalezienia cząstki w tym punkcie. Dlatego naturalne wydaje się przyjęcie założenia, że funkcja falowa i jej gradient powinny być

- ciągłe,
- skończone
- i jednowartościowe

w każdym punkcie przestrzeni.

Warunki brzegowe i warunki ciągłości

To z kolei pozwala jednoznacznie obliczyć gęstość prawdopodbieństwa znalezienia cząstki w tym punkcie. Dlatego naturalne wydaje się przyjęcie założenia, że funkcja falowa i jej gradient powinny być

- ciągłe,
- skończone
- i jednowartościowe

w każdym punkcie przestrzeni.

Nieskończona bariera potencjału

Załóżmy, że na pewnej ciągłej powierzchni w przestrzeni potencjał ma nieskończoną nieciągłość, tzn. po jednej stronie tej powierzchni energia potencjalna przyjmuje dowolną wartość skończoną, a po drugiej, np. $+\infty$.

Załóżmy, że na pewnej ciągłej powierzchni w przestrzeni potencjał ma nieskończoną nieciągłość, tzn. po jednej stronie tej powierzchni energia potencjalna przyjmuje dowolną wartość skończoną, a po drugiej, np. $+\infty$.

Jakie warunki graniczne powinna spełniać funkcja falowa $u(\vec{r})$ i jej gradient $\vec{\nabla} u(\vec{r})$ na tej powierzchni?

Nieskończona bariera potencjału

Załóżmy, że na pewnej ciągłej powierzchni w przestrzeni potencjał ma nieskończoną nieciągłość, tzn. po jednej stronie tej powierzchni energia potencjalna przyjmuje dowolną wartość skończoną, a po drugiej, np. $+\infty$.
Jakie warunki graniczne powinna spełniać funkcja falowa $u(\vec{r})$ i jej gradient $\vec{\nabla} u(\vec{r})$ na tej powierzchni?
Początek układu współrzędnych wybierzmy na powierzchni granicznej, a oś Ox skierujmy prostopadle do płaszczyzny stycznej w punkcie przecięcia osi Ox z tą powierzchnią.

Nieskończona bariera potencjału

Załóżmy, że na pewnej ciągłej powierzchni w przestrzeni potencjał ma nieskończoną nieciągłość, tzn. po jednej stronie tej powierzchni energia potencjalna przyjmuje dowolną wartość skończoną, a po drugiej, np. $+\infty$.

Jakie warunki graniczne powinna spełniać funkcja falowa $u(\vec{r})$ i jej gradient $\vec{\nabla} u(\vec{r})$ na tej powierzchni?

Początek układu współrzędnych wybierzmy na powierzchni granicznej, a oś Ox skierujmy prostopadle do płaszczyzny stycznej w punkcie przecięcia osi Ox z tą powierzchnią.

Lokalnie można przyjąć, że powierzchnia nieciągłości potencjału jest płaszczyzną.

Załóżmy, że na pewnej ciągłej powierzchni w przestrzeni potencjał ma nieskończoną nieciągłość, tzn. po jednej stronie tej powierzchni energia potencjalna przyjmuje dowolną wartość skończoną, a po drugiej, np. $+\infty$.

Jakie warunki graniczne powinna spełniać funkcja falowa $u(\vec{r})$ i jej gradient $\vec{\nabla} u(\vec{r})$ na tej powierzchni?

Początek układu współrzędnych wybierzmy na powierzchni granicznej, a oś Ox skierujmy prostopadle do płaszczyzny stycznej w punkcie przecięcia osi Ox z tą powierzchnią.

Lokalnie można przyjąć, że powierzchnia nieciągłości potencjału jest płaszczyzną.

Nieskończona bariera potencjału

W naszym układzie współrzędnych energia potencjalna zależy tylko od jednej zmiennej x, $V(\vec{r}) = V(x, y, z) \equiv V(x)$.
Przyjmijmy

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dla} \quad x < 0, \\ V_0, & \text{dla} \quad x > 0, \end{cases}$$

a później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$.

W naszym układzie współrzędnych energia potencjalna zależy tylko od jednej zmiennej x, $V(\vec{r}) = V(x, y, z) \equiv V(x)$.
Przyjmijmy

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dla} \quad x < 0, \\ V_0, & \text{dla} \quad x > 0, \end{cases}$$

a później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \rightarrow +\infty$.
Zadanie. Uzasadnić, że bezczasowe równanie Schrödingera

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r})$$

w przypadku jednowymiarowym, przyjmuje postać

Nieskończona bariera potencjału

W naszym układzie współrzędnych energia potencjalna zależy tylko od jednej zmiennej x, $V(\vec{r}) = V(x, y, z) \equiv V(x)$.
Przyjmijmy

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dla} \quad x < 0, \\ V_0, & \text{dla} \quad x > 0, \end{cases}$$

a później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$.
Zadanie. Uzasadnić, że bezczasowe równanie Schrödingera

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r})$$

w przypadku jednowymiarowym, przyjmuje postać

Nieskończona bariera potencjału

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x).$$

Później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, dlatego możemy założyć, że energia cząstki spełnia warunek $0 \leqslant E \leqslant V_0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x).$$

Później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, dlatego możemy założyć, że energia cząstki spełnia warunek $0 \leqslant E \leqslant V_0$.
Założmy najpierw, że $x < 0$, wtedy nasze równanie ma postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,u(x)$$

Nieskończona bariera potencjału

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x).$$

Później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, dlatego możemy założyć, że energia cząstki spełnia warunek $0 \leqslant E \leqslant V_0$.
Załóżmy najpierw, że $x < 0$, wtedy nasze równanie ma postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,u(x) = -\alpha^2\,u(x),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x).$$

Później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, dlatego możemy założyć, że energia cząstki spełnia warunek $0 \leqslant E \leqslant V_0$. Załóżmy najpierw, że $x < 0$, wtedy nasze równanie ma postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,u(x) = -\alpha^2\,u(x), \quad \text{gdzie} \quad \alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \text{const.}$$

Nieskończona bariera potencjału

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x).$$

Później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, dlatego możemy założyć, że energia cząstki spełnia warunek $0 \leqslant E \leqslant V_0$. Załóżmy najpierw, że $x < 0$, wtedy nasze równanie ma postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,u(x) = -\alpha^2\,u(x), \quad \text{gdzie} \quad \alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \text{const.}$$

Zamieniając $x \to t$ otrzymalibyśmy równanie oscylatora harmonicznego, więc rozwiązanie ogólne ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x).$$

Później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, dlatego możemy założyć, że energia cząstki spełnia warunek $0 \leqslant E \leqslant V_0$.
Załóżmy najpierw, że $x < 0$, wtedy nasze równanie ma postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,u(x) = -\alpha^2\,u(x), \quad \text{gdzie} \quad \alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \text{const.}$$

Zamieniając $x \to t$ otrzymalibyśmy równanie oscylatora harmonicznego, więc rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) = A\sin\alpha x + B\cos\alpha x,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x).$$

Później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, dlatego możemy założyć, że energia cząstki spełnia warunek $0 \leqslant E \leqslant V_0$. Załóżmy najpierw, że $x < 0$, wtedy nasze równanie ma postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,u(x) = -\alpha^2\,u(x), \quad \text{gdzie} \quad \alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \text{const.}$$

Zamieniając $x \to t$ otrzymalibyśmy równanie oscylatora harmonicznego, więc rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) = A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, \qquad \text{gdzie} \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}.$$

Nieskończona bariera potencjału

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x).$$

Później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, dlatego możemy założyć, że energia cząstki spełnia warunek $0 \leqslant E \leqslant V_0$. Załóżmy najpierw, że $x < 0$, wtedy nasze równanie ma postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,u(x) = -\alpha^2\,u(x), \quad \text{gdzie} \quad \alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \text{const.}$$

Zamieniając $x \to t$ otrzymalibyśmy równanie oscylatora harmonicznego, więc rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) = A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, \qquad \text{gdzie} \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}.$$

Dla $x > 0$ równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x)$$

przybiera postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\,u(x) = \beta^2\,u(x), \qquad \beta^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}.$$

Ponieważ później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, to możemy przyjąc $E < V_0$, a zatem $\beta^2 > 0$.

Dla $x > 0$ równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x)$$

przybiera postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\,u(x) = \beta^2\,u(x), \qquad \beta^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}.$$

Ponieważ później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, to możemy przyjąc $E < V_0$, a zatem $\beta^2 > 0$.

Podstawmy

$$u(x) = e^{\lambda x} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \lambda\,e^{\lambda x} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \lambda^2\,e^{\lambda x},$$

Dla $x > 0$ równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x)$$

przybiera postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\,u(x) = \beta^2\,u(x), \qquad \beta^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}.$$

Ponieważ później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, to możemy przyjąc $E < V_0$, a zatem $\beta^2 > 0$.
Podstawmy

$$u(x) = e^{\lambda x} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \lambda\,e^{\lambda x} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \lambda^2\,e^{\lambda x},$$

Wstawmy to do naszego równania

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \beta^2\,u(x) \quad \Rightarrow \quad \lambda^2 e^{\lambda x} = \beta^2 e^{\lambda x} \quad \Leftrightarrow \quad \lambda^2 = \beta^2 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \pm\beta.$$

Dla $x > 0$ równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = E\,u(x)$$

przybiera postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\,u(x) = \beta^2\,u(x), \qquad \beta^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}.$$

Ponieważ później dokonamy przejścia granicznego $V_0 \to +\infty$, to możemy przyjąc $E < V_0$, a zatem $\beta^2 > 0$.
Podstawmy

$$u(x) = e^{\lambda x} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \lambda\,e^{\lambda x} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \lambda^2\,e^{\lambda x},$$

Wstawmy to do naszego równania

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \beta^2\,u(x) \quad \Rightarrow \quad \lambda^2 e^{\lambda x} = \beta^2 e^{\lambda x} \quad \Leftrightarrow \quad \lambda^2 = \beta^2 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \pm\beta.$$

Dlatego rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) = Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, \qquad \text{gdzie} \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}.$$

Dlatego rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) = Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, \qquad \text{gdzie} \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}.$$

Zadanie. Sprawdzić, że funkcje $u(x)$ dana takim wzorem jest rozwiązaniem równania $u''(x) = \beta^2 u(x)$.

Dlatego rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) = Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, \qquad \text{gdzie} \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}.$$

Zadanie. Sprawdzić, że funkcje $u(x)$ dana takim wzorem jest rozwiązaniem równania $u''(x) = \beta^2 u(x)$.

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A \sin \alpha x + B \cos \alpha x, & \mathrm{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \mathrm{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x}$$

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} =$$

Nieskończona bariera potencjału

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \Bigg\{$$

Nieskończona bariera potencjału

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A\cos\alpha x - \alpha B\sin\alpha x, \\ \end{cases}$$

Nieskończona bariera potencjału

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A\cos\alpha x - \alpha B\sin\alpha x, & \text{dla} \\ & \end{cases}$$

Nieskończona bariera potencjału

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A\cos\alpha x - \alpha B\sin\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \\ \end{cases}$$

Nieskończona bariera potencjału

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A \sin \alpha x + B \cos \alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A \cos \alpha x - \alpha B \sin \alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \\ -\beta Ce^{-\beta x} + \beta De^{+\beta x}, \end{cases}$$

Nieskończona bariera potencjału

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A\cos\alpha x - \alpha B\sin\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \\ -\beta Ce^{-\beta x} + \beta De^{+\beta x}, & \text{dla} \end{cases}$$

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A\cos\alpha x - \alpha B\sin\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \\ -\beta Ce^{-\beta x} + \beta De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0. \end{cases}$$

Nieskończona bariera potencjału

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A\cos\alpha x - \alpha B\sin\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \\ -\beta Ce^{-\beta x} + \beta De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0. \end{cases}$$

Ponieważ $u(x)$ musi być ograniczone przy $x \to \infty$ $\Rightarrow$ $D = 0$.

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A\cos\alpha x - \alpha B\sin\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \\ -\beta Ce^{-\beta x} + \beta De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0. \end{cases}$$

Ponieważ $u(x)$ musi być ograniczone przy $x \to \infty$ $\Rightarrow$ $D = 0.$

Warunki ciągłości $u(x)$ i $\mathrm{d}u/\mathrm{d}x$ w punkcie $x = 0$ dają:

$$B = C \qquad \text{i} \qquad \alpha A = -\beta C.$$

Nieskończona bariera potencjału

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A\cos\alpha x - \alpha B\sin\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \\ -\beta Ce^{-\beta x} + \beta De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0. \end{cases}$$

Ponieważ $u(x)$ musi być ograniczone przy $x \to \infty$ $\Rightarrow$ $D = 0.$
Warunki ciągłości $u(x)$ i $\mathrm{d}u/\mathrm{d}x$ w punkcie $x = 0$ dają:

$$B = C \qquad \text{i} \qquad \alpha A = -\beta C.$$

$V_0 \to +\infty \Rightarrow \beta \to +\infty \Rightarrow C = 0,$ gdyż inaczej $A \to \infty$
i funkcję falowa $u(x)$ byłaby nieskończona dla $x < 0.$

Nieskończona bariera potencjału

Podsumujmy. Funkcja falowa $u(x)$ i jej gradient mają postać

$$u(x) = \begin{cases} A\sin\alpha x + B\cos\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \quad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \\ Ce^{-\beta x} + De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0, \quad \beta = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \alpha A\cos\alpha x - \alpha B\sin\alpha x, & \text{dla} \quad x < 0, \\ -\beta Ce^{-\beta x} + \beta De^{+\beta x}, & \text{dla} \quad x > 0. \end{cases}$$

Ponieważ $u(x)$ musi być ograniczone przy $x \to \infty \quad \Rightarrow \quad D = 0.$
Warunki ciągłości $u(x)$ i $\mathrm{d}u/\mathrm{d}x$ w punkcie $x = 0$ dają:

$$B = C \qquad \text{i} \qquad \alpha A = -\beta C.$$

$V_0 \to +\infty \quad \Rightarrow \quad \beta \to +\infty \quad \Rightarrow \quad C = 0,$ gdyż inaczej $A \to \infty$
i funkcję falowa $u(x)$ byłaby nieskończona dla $x < 0$.

Widzimy, że funkcja falowa

$$u(x) = A \sin \alpha x = Ce^{-\beta x}$$

znika w punkcie $x = 0$, gdyż $C = 0$ i $\sin(\alpha \cdot 0) = 0$, niezależnie od wartości współczynnika A, ale składowej jej gradientu w kierunku prostopadłym do powierzchni granicznej nie znika, gdyż

$$\frac{\mathrm{d}u(0)}{\mathrm{d}x} = \alpha A \cos(\alpha \cdot 0) \neq 0.$$

Nieskończona bariera potencjału

Widzimy, że funkcja falowa

$$u(x) = A \sin \alpha x = Ce^{-\beta x}$$

znika w punkcie $x = 0$, gdyż $C = 0$ i $\sin(\alpha \cdot 0) = 0$, niezależnie od wartości współczynnika A, ale składowej jej gradientu w kierunku prostopadłym do powierzchni granicznej nie znika, gdyż

$$\frac{\mathrm{d}u(0)}{\mathrm{d}x} = \alpha A \cos(\alpha \cdot 0) \neq 0.$$

Warunki graniczne na powierzchi nieskończonego skoku energii potencjalnej wymagają znikania funkcji falowej na tej powierchni.

Nieskończona bariera potencjału

Widzimy, że funkcja falowa

$$u(x) = A \sin \alpha x = Ce^{-\beta x}$$

znika w punkcie $x = 0$, gdyż $C = 0$ i $\sin(\alpha \cdot 0) = 0$, niezależnie od wartości współczynnika A, ale składowej jej gradientu w kierunku prostopadłym do powierzchni granicznej nie znika, gdyż

$$\frac{\mathrm{d}u(0)}{\mathrm{d}x} = \alpha A \cos(\alpha \cdot 0) \neq 0.$$

Warunki graniczne na powierzchi nieskończonego skoku energii potencjalnej wymagają znikania funkcji falowej na tej powierchni.

Warunki graniczne nie wyznaczają współczynnika A,

Nieskończona bariera potencjału

Widzimy, że funkcja falowa

$$u(x) = A \sin \alpha x = Ce^{-\beta x}$$

znika w punkcie $x = 0$, gdyż $C = 0$ i $\sin(\alpha \cdot 0) = 0$, niezależnie od wartości współczynnika A, ale składowej jej gradientu w kierunku prostopadłym do powierzchni granicznej nie znika, gdyż

$$\frac{\mathrm{d}u(0)}{\mathrm{d}x} = \alpha A \cos(\alpha \cdot 0) \neq 0.$$

Warunki graniczne na powierzchi nieskończonego skoku energii potencjalnej wymagają znikania funkcji falowej na tej powierchni. Warunki graniczne nie wyznaczają współczynnika A, który można wyznaczyć z warunku normalizacji funkcji $u(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |u(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1.$$

Nieskończona bariera potencjału

Widzimy, że funkcja falowa

$$u(x) = A \sin \alpha x = C e^{-\beta x}$$

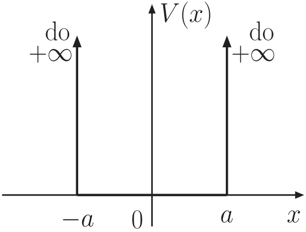
znika w punkcie $x = 0$, gdyż $C = 0$ i $\sin(\alpha \cdot 0) = 0$, niezależnie od wartości współczynnika A, ale składowej jej gradientu w kierunku prostopadłym do powierzchni granicznej nie znika, gdyż

$$\frac{\mathrm{d}u(0)}{\mathrm{d}x} = \alpha A \cos(\alpha \cdot 0) \neq 0.$$

Warunki graniczne na powierzchi nieskończonego skoku energii potencjalnej wymagają znikania funkcji falowej na tej powierchni. Warunki graniczne nie wyznaczają współczynnika A, który można wyznaczyć z warunku normalizacji funkcji $u(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |u(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1.$$

Rozważmy jednowymiarowy ruch cząstki w prostokątnej studni potencjału o nieskończonej wysokości.

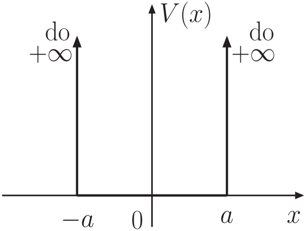


$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dla} \quad |x| < a, \\ +\infty, & \text{dla} \quad |x| > a. \end{cases}$$

Odpowiada to idealnie sztywnym nieprzenikalnym ścianom w punktach $x = \pm a$.

Nieskończona studnia potencjału

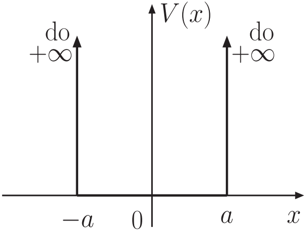
Rozważmy jednowymiarowy ruch cząstki w prostokątnej studni potencjału o nieskończonej wysokości.



$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dla} \quad |x| < a, \\ +\infty, & \text{dla} \quad |x| > a. \end{cases}$$

Odpowiada to idealnie sztywnym nieprzenikalnym ścianom w punktach $x = \pm a$. Jak pokazaliśmy, funkcja falowa $u(x)$ musi znikać w tych punktach, co prowadzi do warunków brzegowych $u(\pm a) = 0$.

Rozważmy jednowymiarowy ruch cząstki w prostokątnej studni potencjału o nieskończonej wysokości.



$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dla} \quad |x| < a, \\ +\infty, & \text{dla} \quad |x| > a. \end{cases}$$

Odpowiada to idealnie sztywnym nieprzenikalnym ścianom w punktach $x = \pm a$. Jak pokazaliśmy, funkcja falowa $u(x)$ musi znikać w tych punktach, co prowadzi do warunków brzegowych $u(\pm a) = 0$.

Nieskończona studnia potencjału

Dla $|x| < a$ jednowymiarowe równanie falowe ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = Eu(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,u(x).$$

Rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x), \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \alpha A\cos(\alpha x) - \alpha B\sin(\alpha x).$$

Nieskończona studnia potencjału

Dla $|x| < a$ jednowymiarowe równanie falowe ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = Eu(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\, u(x).$$

Rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) \quad = \quad A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x), \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \alpha A\cos(\alpha x) - \alpha B\sin(\alpha x).$$

A warunki brzegowe dają

$$\begin{aligned} u(a) &= A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = 0, \\ u(-a) &= -A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = 0. \end{aligned}$$

Dla $|x| < a$ jednowymiarowe równanie falowe ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = Eu(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\,u(x).$$

Rozwiązanie ogólne ma postać

$$\begin{aligned} u(x) &= A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x), \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ \Rightarrow \qquad & \frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \alpha A\cos(\alpha x) - \alpha B\sin(\alpha x). \end{aligned}$$

A warunki brzegowe dają

$$\begin{aligned} u(a) &= A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = 0, \\ u(-a) &= -A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = 0. \end{aligned}$$

Dodając i odejmując stronami powyższe dwa równania, a następnie dzieląc przez 2 otrzymujemy

$$B\cos(\alpha a) = 0 \qquad \text{i} \qquad A\sin(\alpha a) = 0.$$

Warunki te można spełnić przyjmując $A = B = 0$, ale to odpowiada $u(x) = 0$ dla wszystkich $|x| < a$.

Dodając i odejmując stronami powyższe dwa równania, a następnie dzieląc przez 2 otrzymujemy

$$B\cos(\alpha a) = 0 \qquad \text{i} \qquad A\sin(\alpha a) = 0.$$

Warunki te można spełnić przyjmując $A = B = 0$, ale to odpowiada $u(x) = 0$ dla wszystkich $|x| < a$.
Jednoczesne spełnienie równań

$$\cos(\alpha a) = 0 \qquad \text{i} \qquad \sin(\alpha a) = 0$$

też jest niemożliwe.

Dodając i odejmując stronami powyższe dwa równania, a następnie dzieląc przez 2 otrzymujemy

$$B\cos(\alpha a) = 0 \qquad \text{i} \qquad A\sin(\alpha a) = 0.$$

Warunki te można spełnić przyjmując $A = B = 0$, ale to odpowiada $u(x) = 0$ dla wszystkich $|x| < a$.
Jednoczesne spełnienie równań

$$\cos(\alpha a) = 0 \qquad \text{i} \qquad \sin(\alpha a) = 0$$

też jest niemożliwe.

Dlatego przyjmijmy

$$\begin{cases} A = 0, \\ \cos(\alpha a) = 0 \end{cases} \quad \text{lub} \quad \begin{cases} B = 0, \\ \sin(\alpha a) = 0 \end{cases}$$

Nieskończona studnia potencjału

Dlatego przyjmijmy

$$\begin{cases} A = 0, \\ \cos(\alpha a) = 0 \end{cases} \qquad \text{lub} \qquad \begin{cases} B = 0, \\ \sin(\alpha a) = 0 \end{cases}$$

$\alpha a = n\frac{\pi}{2}, \quad n$ nieparzyste

$u(x) = B\cos\frac{n\pi x}{2a},$

$\alpha a = n\frac{\pi}{2}, \quad n$ parzyste

$u(x) = A\sin\frac{n\pi x}{2a}$

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Nieskończona studnia potencjału

Dlatego przyjmijmy

$$\begin{cases} A = 0, \\ \cos(\alpha a) = 0 \end{cases} \qquad \text{lub} \qquad \begin{cases} B = 0, \\ \sin(\alpha a) = 0 \end{cases}$$

$\alpha a = n\frac{\pi}{2}, \quad n$ nieparzyste

$u(x) = B\cos\frac{n\pi x}{2a},$

$\alpha a = n\frac{\pi}{2}, \quad n$ parzyste

$u(x) = A\sin\frac{n\pi x}{2a}$

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Przypadek $n = 0$ daje $u(x) = A\sin 0 = 0$, dlatego go pomijamy.

Nieskończona studnia potencjału

Dlatego przyjmijmy

$$\begin{cases} A = 0, \\ \cos(\alpha a) = 0 \end{cases} \qquad \text{lub} \qquad \begin{cases} B = 0, \\ \sin(\alpha a) = 0 \end{cases}$$

$\alpha a = n\frac{\pi}{2}$, $\quad n$ nieparzyste

$u(x) = B\cos\frac{n\pi x}{2a}$,

$\alpha a = n\frac{\pi}{2}$, $\quad n$ parzyste

$u(x) = A\sin\frac{n\pi x}{2a}$

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Przypadek $n = 0$ daje $u(x) = A\sin 0 = 0$, dlatego go pomijamy.

Jeśli $n < 0 \quad \Rightarrow \quad u(x) = B\cos\frac{|n|\pi x}{2a}$ lub $u(x) = -A\sin\frac{|n|\pi x}{2a}$,
czyli rozwiązania są liniowo zależne od rozwiązań dla $n > 0$.

Dlatego przyjmijmy

$$\begin{cases} A = 0, \\ \cos(\alpha a) = 0 \end{cases} \qquad \text{lub} \qquad \begin{cases} B = 0, \\ \sin(\alpha a) = 0 \end{cases}$$

$\alpha a = n\frac{\pi}{2}$, $\quad n$ nieparzyste $\qquad$ $\alpha a = n\frac{\pi}{2}$, $\quad n$ parzyste

$u(x) = B\cos\frac{n\pi x}{2a}$, $\qquad$ $u(x) = A\sin\frac{n\pi x}{2a}$

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Przypadek $n = 0$ daje $u(x) = A\sin 0 = 0$, dlatego go pomijamy.
Jeśli $n < 0 \quad \Rightarrow \quad u(x) = B\cos\frac{|n|\pi x}{2a}$ lub $u(x) = -A\sin\frac{|n|\pi x}{2a}$,
czyli rozwiązania są liniowo zależne od rozwiązań dla $n > 0$.

Otrzymaliśmy dyskretne poziomy energetyczne numerowane liczbą kwantową $n = 1, 2, 3, \ldots$

Najniższy poziom energetyczny odpowiada $n = 1$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Jest to energia stanu podstawowego.

Nieskończona studnia potencjału

Otrzymaliśmy dyskretne poziomy energetyczne numerowane liczbą kwantową $n = 1, 2, 3, \ldots$

Najniższy poziom energetyczny odpowiada $n = 1$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Jest to energia stanu podstawowego. Zauważmy, że jest ona niezerowa.

Nieskończona studnia potencjału

Otrzymaliśmy dyskretne poziomy energetyczne numerowane liczbą kwantową $n = 1, 2, 3, \ldots$

Najniższy poziom energetyczny odpowiada $n = 1$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Jest to energia stanu podstawowego. Zauważmy, że jest ona niezerowa.

Oszacujmy minimalną wartość energii kinetycznej cząstki z zasady nieoznaczoności, $\Delta x \Delta p \sim \hbar$

Nieskończona studnia potencjału

Otrzymaliśmy dyskretne poziomy energetyczne numerowane liczbą kwantową $n = 1, 2, 3, \ldots$

Najniższy poziom energetyczny odpowiada $n = 1$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Jest to energia stanu podstawowego. Zauważmy, że jest ona niezerowa.

Oszacujmy minimalną wartość energii kinetycznej cząstki z zasady nieoznaczoności, $\Delta x \Delta p \sim \hbar$

$$\Delta x \sim a \quad \Rightarrow \quad \Delta p \sim \frac{\hbar}{a},$$

Otrzymaliśmy dyskretne poziomy energetyczne numerowane liczbą kwantową $n = 1, 2, 3, \ldots$

Najniższy poziom energetyczny odpowiada $n = 1$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Jest to energia stanu podstawowego. Zauważmy, że jest ona niezerowa.

Oszacujmy minimalną wartość energii kinetycznej cząstki z zasady nieoznaczoności, $\Delta x \Delta p \sim \hbar$

$$\Delta x \sim a \quad \Rightarrow \quad \Delta p \sim \frac{\hbar}{a},$$

a zatem minimalna wartość energii kinetycznej $E = p^2/2m$

$$E_{\mathrm{min}} \sim \frac{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \sim E_0.$$

Nieskończona studnia potencjału

a zatem minimalna wartość energii kinetycznej $E = p^2/2m$

$$E_{\min} \sim \frac{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \sim E_0.$$

Widzimy, że rząd wielkości energii stanu podstawowego zgadza się z zasadą nieoznaczoności.

Nieskończona studnia potencjału

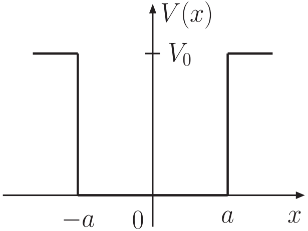
a zatem minimalna wartość energii kinetycznej $E = p^2/2m$

$$E_{\min} \sim \frac{\left(\frac{\hbar}{a}\right)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \sim E_0.$$

Widzimy, że rząd wielkości energii stanu podstawowego zgadza się z zasadą nieoznaczoności.

Skończona studnia potencjału

Rozważmy jednowymiarowy ruch cząstki w prostokątnej studni potencjału o skończonej wysokości.

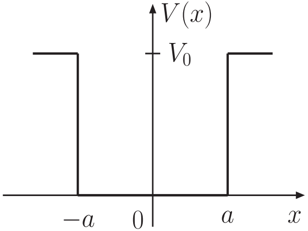


$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dla} \quad |x| < a, \\ V_0, & \text{dla} \quad |x| > a. \end{cases}$$

Dla $|x| < a$ mamy takie samo równanie i rozwiązanie jak w przypadku studni nieskończonej.

Skończona studnia potencjału

Rozważmy jednowymiarowy ruch cząstki w prostokątnej studni potencjału o skończonej wysokości.



$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{dla} \quad |x| < a, \\ V_0, & \text{dla} \quad |x| > a. \end{cases}$$

Dla $|x| < a$ mamy takie samo równanie i rozwiązanie jak w przypadku studni nieskończonej.

Skończona studnia potencjału

Dla $|x| > a$ równanie falowe ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V_0 u(x) = E u(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}\, u(x).$$

Musimy rozważyć dwa przypadki.

Skończona studnia potencjału

Dla $|x| > a$ równanie falowe ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V_0 u(x) = E u(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}\, u(x).$$

Musimy rozważyć dwa przypadki.

$E < V_0 \quad \Rightarrow \quad$ współczynnik po prawej stronie równania jest dodatni.

Dla $|x| > a$ równanie falowe ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V_0 u(x) = E u(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}\, u(x).$$

Musimy rozważyć dwa przypadki.

$E < V_0 \quad \Rightarrow \quad$ współczynnik po prawej stronie równania jest dodatni. Oznaczmy

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \qquad \Rightarrow \qquad \beta = \left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Skończona studnia potencjału

Dla $|x| > a$ równanie falowe ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V_0 u(x) = E u(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}\, u(x).$$

Musimy rozważyć dwa przypadki.

$E < V_0 \quad \Rightarrow \quad$ współczynnik po prawej stronie równania jest dodatni. Oznaczmy

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \qquad \Rightarrow \qquad \beta = \left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Wtedy nasze równanie przybiera postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \beta^2\, u(x),$$

a rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) = Ce^{-\beta x} + De^{\beta x}.$$

Skończona studnia potencjału

Dla $|x| > a$ równanie falowe ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V_0 u(x) = E u(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}\, u(x).$$

Musimy rozważyć dwa przypadki.

$E < V_0 \quad \Rightarrow \quad$ współczynnik po prawej stronie równania jest dodatni. Oznaczmy

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,(V_0 - E) \qquad \Rightarrow \qquad \beta = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\,(V_0 - E)\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Wtedy nasze równanie przybiera postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = \beta^2\, u(x),$$

a rozwiązanie ogólne ma postać

$$u(x) = Ce^{-\beta x} + De^{\beta x}.$$

Funkcja $u(x)$ musi znikać przy $x \to \pm\infty \quad \Rightarrow$

- jeśli $x > a \quad \Rightarrow \quad D = 0$,
- a jeśli $x < -a \quad \Rightarrow \quad C = 0$.

Podsumujmy nasze wyniki dla $u(x)$

$$u(x) = \begin{cases} De^{\beta x}, & \text{dla} \quad x < -a, \\ A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x), & \text{dla} \quad |x| < a, \\ Ce^{-\beta x}, & \text{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Obliczmy pochodną

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \beta De^{\beta x}, & \text{dla} \quad x < -a, \\ \alpha A\cos(\alpha x) - \alpha B\sin(\alpha x), & \text{dla} \quad |x| < a, \\ -\beta Ce^{-\beta x}, & \text{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Skończona studnia potencjału

Funkcja $u(x)$ musi znikać przy $x \to \pm\infty$ $\Rightarrow$

- jeśli $x > a$ $\Rightarrow$ $D = 0$,
- a jeśli $x < -a$ $\Rightarrow$ $C = 0$.

Podsumujmy nasze wyniki dla $u(x)$

$$u(x) = \begin{cases} De^{\beta x}, & \mathrm{dla} \quad x < -a, \\ A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x), & \mathrm{dla} \quad |x| < a, \\ Ce^{-\beta x}, & \mathrm{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Obliczmy pochodną

$$\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} \beta De^{\beta x}, & \mathrm{dla} \quad x < -a, \\ \alpha A\cos(\alpha x) - \alpha B\sin(\alpha x), & \mathrm{dla} \quad |x| < a, \\ -\beta Ce^{-\beta x}, & \mathrm{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Warunki "zszycia" funkcji falowej i jej gradientu w punktach $x = \pm a$ wynikające z żądania ciągłości dla $x \in (-\infty, +\infty)$

$$
\begin{cases}
De^{-\beta a} = -A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) & (1) \\
A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a} & (2) \\
\beta De^{-\beta a} = \alpha A\cos(\alpha a) + \alpha B\sin(\alpha a) & (3) \\
\alpha A\cos(\alpha a) - \alpha B\sin(\alpha a) = -\beta Ce^{-\beta a} & (4)
\end{cases}
$$

Warunki "zszycia" funkcji falowej i jej gradientu w punktach $x = \pm a$ wynikające z żądania ciągłości dla $x \in (-\infty, +\infty)$

$$\begin{cases} De^{-\beta a} = -A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) & (1) \\ A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a} & (2) \\ \beta De^{-\beta a} = \alpha A\cos(\alpha a) + \alpha B\sin(\alpha a) & (3) \\ \alpha A\cos(\alpha a) - \alpha B\sin(\alpha a) = -\beta Ce^{-\beta a} & (4) \end{cases}$$

$(1) + (2) \quad \Rightarrow$

Warunki "zszycia" funkcji falowej i jej gradientu w punktach $x = \pm a$ wynikające z żądania ciągłości dla $x \in (-\infty, +\infty)$

$$\begin{cases} De^{-\beta a} = -A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) & (1) \\ A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a} & (2) \\ \beta De^{-\beta a} = \alpha A\cos(\alpha a) + \alpha B\sin(\alpha a) & (3) \\ \alpha A\cos(\alpha a) - \alpha B\sin(\alpha a) = -\beta Ce^{-\beta a} & (4) \end{cases}$$

$(1) + (2) \quad \Rightarrow \quad 2B\cos(\alpha a) = (C + D)\, e^{-\beta a} \quad (5)$

$(2) - (1) \quad \Rightarrow$

Skończona studnia potencjału

Warunki "zszycia" funkcji falowej i jej gradientu w punktach $x = \pm a$ wynikające z żądania ciągłości dla $x \in (-\infty, +\infty)$

$$\begin{cases} De^{-\beta a} = -A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) & (1) \\ A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a} & (2) \\ \beta De^{-\beta a} = \alpha A\cos(\alpha a) + \alpha B\sin(\alpha a) & (3) \\ \alpha A\cos(\alpha a) - \alpha B\sin(\alpha a) = -\beta Ce^{-\beta a} & (4) \end{cases}$$

$$(1) + (2) \quad \Rightarrow \quad 2B\cos(\alpha a) = (C + D)\, e^{-\beta a} \qquad (5)$$

$$(2) - (1) \quad \Rightarrow \quad 2A\sin(\alpha a) = (C - D)\, e^{-\beta a} \qquad (6)$$

$$(3) + (4) \quad \Rightarrow$$

Warunki "zszycia" funkcji falowej i jej gradientu w punktach $x = \pm a$ wynikające z żądania ciągłości dla $x \in (-\infty, +\infty)$

$$\begin{cases} De^{-\beta a} = -A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) & (1) \\ A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a} & (2) \\ \beta De^{-\beta a} = \alpha A\cos(\alpha a) + \alpha B\sin(\alpha a) & (3) \\ \alpha A\cos(\alpha a) - \alpha B\sin(\alpha a) = -\beta Ce^{-\beta a} & (4) \end{cases}$$

$$\begin{array}{lcll} (1)+(2) & \Rightarrow & 2B\cos(\alpha a) = (C+D)\,e^{-\beta a} & (5) \\ (2)-(1) & \Rightarrow & 2A\sin(\alpha a) = (C-D)\,e^{-\beta a} & (6) \\ (3)+(4) & \Rightarrow & 2\alpha A\cos(\alpha a) = \beta\,(D-C)\,e^{-\beta a} & (7) \\ (3)-(4) & \Rightarrow & & \end{array}$$

Skończona studnia potencjału

Warunki "zszycia" funkcji falowej i jej gradientu w punktach $x = \pm a$ wynikające z żądania ciągłości dla $x \in (-\infty, +\infty)$

$$\begin{cases} De^{-\beta a} = -A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) & (1) \\ A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a} & (2) \\ \beta De^{-\beta a} = \alpha A\cos(\alpha a) + \alpha B\sin(\alpha a) & (3) \\ \alpha A\cos(\alpha a) - \alpha B\sin(\alpha a) = -\beta Ce^{-\beta a} & (4) \end{cases}$$

$$(1) + (2) \quad \Rightarrow \quad 2B\cos(\alpha a) = (C + D)\, e^{-\beta a} \qquad (5)$$

$$(2) - (1) \quad \Rightarrow \quad 2A\sin(\alpha a) = (C - D)\, e^{-\beta a} \qquad (6)$$

$$(3) + (4) \quad \Rightarrow \quad 2\alpha A\cos(\alpha a) = \beta\,(D - C)\, e^{-\beta a} \qquad (7)$$

$$(3) - (4) \quad \Rightarrow \quad 2\alpha B\sin(\alpha a) = \beta\,(D + C)\, e^{-\beta a} \qquad (8)$$

Skończona studnia potencjału

Warunki "zszycia" funkcji falowej i jej gradientu w punktach $x = \pm a$ wynikające z żądania ciągłości dla $x \in (-\infty, +\infty)$

$$\begin{cases} De^{-\beta a} = -A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) & (1) \\ A\sin(\alpha a) + B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a} & (2) \\ \beta De^{-\beta a} = \alpha A\cos(\alpha a) + \alpha B\sin(\alpha a) & (3) \\ \alpha A\cos(\alpha a) - \alpha B\sin(\alpha a) = -\beta Ce^{-\beta a} & (4) \end{cases}$$

$$\begin{array}{lcll} (1)+(2) & \Rightarrow & 2B\cos(\alpha a) = (C+D)\,e^{-\beta a} & (5) \\ (2)-(1) & \Rightarrow & 2A\sin(\alpha a) = (C-D)\,e^{-\beta a} & (6) \\ (3)+(4) & \Rightarrow & 2\alpha A\cos(\alpha a) = \beta\,(D-C)\,e^{-\beta a} & (7) \\ (3)-(4) & \Rightarrow & 2\alpha B\sin(\alpha a) = \beta\,(D+C)\,e^{-\beta a} & (8) \end{array}$$

Przyjmijmy $A = 0$, wtedy
(6) i (7) $\Rightarrow$ $C = D$

Przyjmijmy $A = 0$, wtedy

(6) i (7) $\quad \Rightarrow \quad C = D$

(5) i (8) $\quad \Rightarrow \quad B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a}$ i $\alpha B\sin(\alpha a) = \beta Ce^{-\beta a}$,

Przyjmijmy $A = 0$, wtedy
(6) i (7) $\Rightarrow$ $C = D$
(5) i (8) $\Rightarrow$ $B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a}$ i $\alpha B\sin(\alpha a) = \beta Ce^{-\beta a}$,
a dzieląc stronami otrzymamy

$$\alpha\,\mathrm{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad A = 0, \qquad C = D. \qquad \text{(I)}$$

Skończona studnia potencjału

Przyjmijmy $A = 0$, wtedy
(6) i (7) $\Rightarrow$ $C = D$
(5) i (8) $\Rightarrow$ $B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a}$ i $\alpha B \sin(\alpha a) = \beta C e^{-\beta a}$,
a dzieląc stronami otrzymamy

$$\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad A = 0, \qquad C = D. \tag{I}$$

Przyjmijmy $B = 0$, wtedy

Przyjmijmy $A = 0$, wtedy
(6) i (7) $\Rightarrow$ $C = D$
(5) i (8) $\Rightarrow$ $B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a}$ i $\alpha B \sin(\alpha a) = \beta C e^{-\beta a}$,
a dzieląc stronami otrzymamy

$$\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad A = 0, \qquad C = D. \qquad \text{(I)}$$

Przyjmijmy $B = 0$, wtedy
(5) i (8) $\Rightarrow$ $C = -D$

Przyjmijmy $A = 0$, wtedy
(6) i (7) $\Rightarrow$ $C = D$
(5) i (8) $\Rightarrow$ $B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a}$ i $\alpha B\sin(\alpha a) = \beta Ce^{-\beta a}$,
a dzieląc stronami otrzymamy

$$\alpha\,\mathrm{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad A = 0, \qquad C = D. \qquad \text{(I)}$$

Przyjmijmy $B = 0$, wtedy
(5) i (8) $\Rightarrow$ $C = -D$
(6) i (7) $\Rightarrow$ $A\sin(\alpha a) = -De^{-\beta a}$ i $\alpha A\cos(\alpha a) = \beta De^{-\beta a}$,

Przyjmijmy $A = 0$, wtedy
(6) i (7) $\Rightarrow$ $C = D$
(5) i (8) $\Rightarrow$ $B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a}$ i $\alpha B \sin(\alpha a) = \beta C e^{-\beta a}$,
a dzieląc stronami otrzymamy

$$\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad A = 0, \qquad C = D. \qquad \text{(I)}$$

Przyjmijmy $B = 0$, wtedy
(5) i (8) $\Rightarrow$ $C = -D$
(6) i (7) $\Rightarrow$ $A\sin(\alpha a) = -De^{-\beta a}$ i $\alpha A \cos(\alpha a) = \beta D e^{-\beta a}$,
a dzieląc stronami otrzymamy

$$\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a) = -\beta, \qquad B = 0, \qquad C = -D. \qquad \text{(II)}$$

Przyjmijmy $A = 0$, wtedy
(6) i (7) $\Rightarrow$ $C = D$
(5) i (8) $\Rightarrow$ $B\cos(\alpha a) = Ce^{-\beta a}$ i $\alpha B\sin(\alpha a) = \beta Ce^{-\beta a}$,
a dzieląc stronami otrzymamy

$$\alpha\,\mathrm{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad A = 0, \qquad C = D. \tag{I}$$

Przyjmijmy $B = 0$, wtedy
(5) i (8) $\Rightarrow$ $C = -D$
(6) i (7) $\Rightarrow$ $A\sin(\alpha a) = -De^{-\beta a}$ i $\alpha A\cos(\alpha a) = \beta De^{-\beta a}$,
a dzieląc stronami otrzymamy

$$\alpha\,\mathrm{ctg}(\alpha a) = -\beta, \qquad B = 0, \qquad C = -D. \tag{II}$$

Zauważmy, że łącząc warunki $\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) = \beta$ z równań (I) i $\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a) = -\beta$ z równań (II) otrzymamy

$$\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a) = -\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) \quad \Rightarrow \quad \operatorname{tg}^2(\alpha a) = -1 \quad \Leftrightarrow \quad \operatorname{tg}(\alpha a) = \pm i,$$

Zauważmy, że łącząc warunki $\alpha\,\mathrm{tg}(\alpha a) = \beta$ z równań (I) i $\alpha\,\mathrm{ctg}(\alpha a) = -\beta$ z równań (II) otrzymamy

$$\alpha\,\mathrm{ctg}(\alpha a) = -\alpha\,\mathrm{tg}(\alpha a) \quad \Rightarrow \quad \mathrm{tg}^2(\alpha a) = -1 \quad \Leftrightarrow \quad \mathrm{tg}(\alpha a) = \pm i,$$

a my mamy

$$\alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} > 0,$$

co daje rzeczywiste wartości $\mathrm{tg}\,(\alpha a)$, a nie urojone.

Skończona studnia potencjału

Zauważmy, że łącząc warunki $\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) = \beta$ z równań (I) i $\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a) = -\beta$ z równań (II) otrzymamy

$$\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a) = -\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) \quad \Rightarrow \quad \operatorname{tg}^2(\alpha a) = -1 \quad \Leftrightarrow \quad \operatorname{tg}(\alpha a) = \pm i,$$

a my mamy

$$\alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} > 0,$$

co daje rzeczywiste wartości $\operatorname{tg}(\alpha a)$, a nie urojone.
Sprzeczności tej unikniemy zakładając, że istnieją dwie niezależne klasy rozwiązań:

- pierwsza klasa spełnia warunki (I),
- a druga klasa spełnia warunki (II).

Skończona studnia potencjału

Zauważmy, że łącząc warunki $\alpha\,\mathrm{tg}(\alpha a) = \beta$ z równań (I) i $\alpha\,\mathrm{ctg}(\alpha a) = -\beta$ z równań (II) otrzymamy

$$\alpha\,\mathrm{ctg}(\alpha a) = -\alpha\,\mathrm{tg}(\alpha a) \quad \Rightarrow \quad \mathrm{tg}^2(\alpha a) = -1 \quad \Leftrightarrow \quad \mathrm{tg}(\alpha a) = \pm i,$$

a my mamy

$$\alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} > 0,$$

co daje rzeczywiste wartości $\mathrm{tg}\,(\alpha a)$, a nie urojone.
Sprzeczności tej unikniemy zakładając, że istnieją dwie niezależne klasy rozwiązań:

- pierwsza klasa spełnia warunki (I),
- a druga klasa spełnia warunki (II).

Skończona studnia potencjału

Aby znaleźć dozwolone poziomy energii rozważmy równania

$$\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a) = -\beta, \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} > 0,$$
$$\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad \beta = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - E\right)\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Mnożąc obustronnie przez a otrzymamy

$$\begin{aligned} \alpha a \operatorname{ctg}(\alpha a) &= -\beta a, \\ \alpha a \operatorname{tg}(\alpha a) &= \beta a. \end{aligned}$$

Skończona studnia potencjału

Aby znaleźć dozwolone poziomy energii rozważmy równania

$$\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a) = -\beta, \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} > 0,$$

$$\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad \beta = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - E\right)\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Mnożąc obustronnie przez a otrzymamy

$$\begin{aligned} \alpha a \operatorname{ctg}(\alpha a) &= -\beta a, \\ \alpha a \operatorname{tg}(\alpha a) &= \beta a. \end{aligned}$$

Podstawmy

$$\xi = \alpha a, \qquad \eta = \beta a, \qquad \xi, \eta \geqslant 0,$$

Skończona studnia potencjału

Aby znaleźć dozwolone poziomy energii rozważmy równania

$$\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a) = -\beta, \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} > 0,$$
$$\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad \beta = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - E\right)\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Mnożąc obustronnie przez a otrzymamy

$$\begin{aligned} \alpha a \operatorname{ctg}(\alpha a) &= -\beta a, \\ \alpha a \operatorname{tg}(\alpha a) &= \beta a. \end{aligned}$$

Podstawmy

$$\xi = \alpha a, \qquad \eta = \beta a, \qquad \xi, \eta \geqslant 0,$$

wówczas otrzymamy

Skończona studnia potencjału

Aby znaleźć dozwolone poziomy energii rozważmy równania

$$\alpha \operatorname{ctg}(\alpha a) = -\beta, \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} > 0,$$
$$\alpha \operatorname{tg}(\alpha a) = \beta, \qquad \beta = \left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Mnożąc obustronnie przez a otrzymamy

$$\begin{aligned} \alpha a \operatorname{ctg}(\alpha a) &= -\beta a, \\ \alpha a \operatorname{tg}(\alpha a) &= \beta a. \end{aligned}$$

Podstawmy

$$\xi = \alpha a, \qquad \eta = \beta a, \qquad \xi, \eta \geqslant 0,$$

wówczas otrzymamy

$$\begin{aligned} \xi \operatorname{ctg} \xi &= -\eta, \\ \xi \operatorname{tg} \xi &= \eta. \end{aligned}$$

Zauważmy ponadto, że

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\, a^2 + \frac{2m\left(V_0 - E\right)}{\hbar^2}\, a^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = r^2.$$

$$\begin{aligned} \xi \operatorname{ctg} \xi &= -\eta, \\ \xi \operatorname{tg} \xi &= \eta. \end{aligned}$$

Zauważmy ponadto, że

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\, a^2 + \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}\, a^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = r^2.$$

Czyli dopuszczalne wartości zmiennych ξ i η leżą na okręgu o środku w początku układu współrzędnych i promieniu

$$r = \left(\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}},$$

a ściślej na I ćwiartce takiego okręgu, gdyż $\xi, \eta > 0$.

$$\begin{aligned} \xi \operatorname{ctg} \xi &= -\eta, \\ \xi \operatorname{tg} \xi &= \eta. \end{aligned}$$

Zauważmy ponadto, że

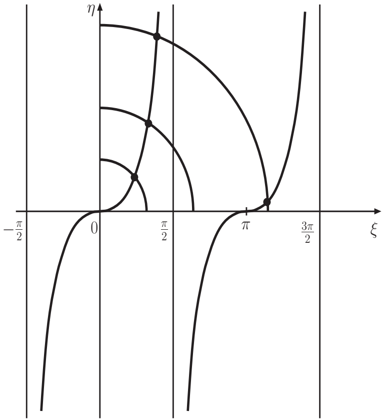
$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\, a^2 + \frac{2m\,(V_0 - E)}{\hbar^2}\, a^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = r^2.$$

Czyli dopuszczalne wartości zmiennych ξ i η leżą na okręgu o środku w początku układu współrzędnych i promieniu

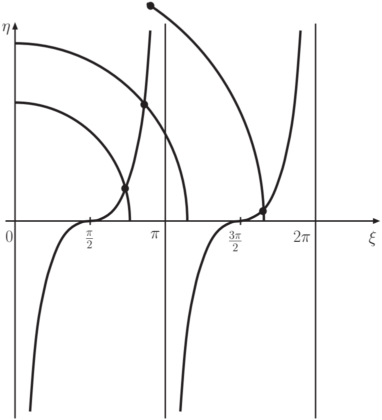
$$r = \left(\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}},$$

a ściślej na I ćwiartce takiego okręgu, gdyż $\xi, \eta > 0$.

Rozwiązania znajdziemy graficznie wykreślając krzywe $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$ i $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ – funkcje te mają dokładnie takie same asymptoty jak $\operatorname{tg}\xi$ i $\operatorname{ctg}\xi$ – oraz I ćwiartki okręgu $\xi^2 + \eta^2 = r^2$.

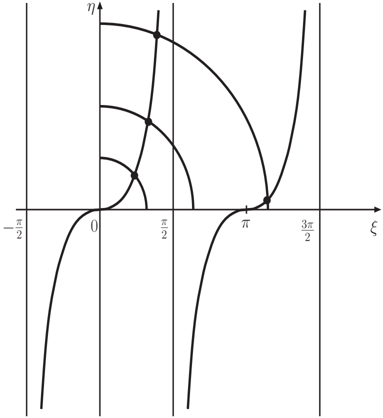


$\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$

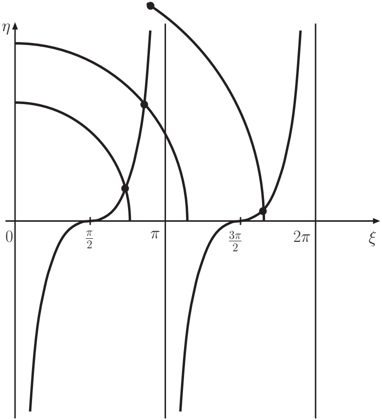


$\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$

Rozwiązania znajdziemy graficznie wykreślając krzywe $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$ i $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ – funkcje te mają dokładnie takie same asymptoty jak tgξ i ctgξ – oraz I ćwiartki okręgu $\xi^2 + \eta^2 = r^2$.



$\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$



$\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$

Skończona studnia potencjału

Przypomnijmy, że

$$r = \left(\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad V_0a^2 = \frac{\hbar^2 r^2}{2m}.$$

Widzimy, że dla

$$0 \leqslant r \leqslant \frac{\pi}{2} \quad \Leftrightarrow \quad 0 \leqslant V_0a^2 \leqslant \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$$

mamy dokładnie jedno rozwiązanie I klasy.

Przypomnijmy, że

$$r = \left(\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad V_0a^2 = \frac{\hbar^2 r^2}{2m}.$$

Widzimy, że dla

$$0 \leqslant r \leqslant \frac{\pi}{2} \quad \Leftrightarrow \quad 0 \leqslant V_0a^2 \leqslant \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$$

mamy dokładnie jedno rozwiązanie I klasy.
Z kolei dla

$$\frac{\pi}{2} \leqslant r \leqslant \pi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \leqslant V_0a^2 \leqslant \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}$$

mamy jedno rozwiązanie I klasy i jedno rozwiązanie II klasy.

Przypomnijmy, że

$$r = \left(\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad V_0a^2 = \frac{\hbar^2 r^2}{2m}.$$

Widzimy, że dla

$$0 \leqslant r \leqslant \frac{\pi}{2} \quad \Leftrightarrow \quad 0 \leqslant V_0a^2 \leqslant \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$$

mamy dokładnie jedno rozwiązanie I klasy.
Z kolei dla

$$\frac{\pi}{2} \leqslant r \leqslant \pi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \leqslant V_0a^2 \leqslant \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}$$

mamy jedno rozwiązanie I klasy i jedno rozwiązanie II klasy.

Dla

$$\pi \leqslant r \leqslant \frac{3}{2}\pi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \leqslant V_0 a^2 \leqslant \frac{9\pi^2\hbar^2}{8m}$$

mamy dwa rozwiązania I klasy i jedno rozwiązanie II klasy, itd.
Ze wzrostem $V_0 a^2$ będą pojawiać się kolejne dopuszczalne poziomy energetyczne, które

Dla

$$\pi \leqslant r \leqslant \frac{3}{2}\pi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \leqslant V_0 a^2 \leqslant \frac{9\pi^2\hbar^2}{8m}$$

mamy dwa rozwiązania I klasy i jedno rozwiązanie II klasy, itd.
Ze wzrostem $V_0 a^2$ będą pojawiać się kolejne dopuszczalne poziomy energetyczne, które odpowiadają dozwolnym wartościom ξ_0 i η_0 będącym współrzędnymi punktów przecięcia.

Dla

$$\pi \leqslant r \leqslant \frac{3}{2}\pi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \leqslant V_0 a^2 \leqslant \frac{9\pi^2\hbar^2}{8m}$$

mamy dwa rozwiązania I klasy i jedno rozwiązanie II klasy, itd.
Ze wzrostem $V_0 a^2$ będą pojawiać się kolejne dopuszczalne poziomy energetyczne, które odpowiadają dozwolnym wartościom ξ_0 i η_0 będącym współrzędnymi punktów przecięcia.
Poziomy te możemy wyznaczyć z równania

$$\alpha = \frac{\xi_0}{a} = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad \frac{\xi_0^2}{a^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2\xi_0^2}{2ma^2}.$$

Dla

$$\pi \leqslant r \leqslant \frac{3}{2}\pi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \leqslant V_0 a^2 \leqslant \frac{9\pi^2\hbar^2}{8m}$$

mamy dwa rozwiązania I klasy i jedno rozwiązanie II klasy, itd. Ze wzrostem $V_0 a^2$ będą pojawiać się kolejne dopuszczalne poziomy energetyczne, które odpowiadają dozwolnym wartościom ξ_0 i η_0 będącym współrzędnymi punktów przecięcia. Poziomy te możemy wyznaczyć z równania

$$\alpha = \frac{\xi_0}{a} = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad \frac{\xi_0^2}{a^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2\xi_0^2}{2ma^2}.$$

Skończona studnia potencjału

Rozwiązanie należące do I klasy ma postać

$$u(x) = \begin{cases} Ce^{\beta x}, & \text{dla} \quad x < -a, \\ B\cos(\alpha x), & \text{dla} \quad |x| < a, \\ Ce^{-\beta x}, & \text{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Rozwiązanie należące do II klasy ma postać

$$u(x) = \begin{cases} De^{\beta x}, & \text{dla} \quad x < -a, \\ A\sin(\alpha x), & \text{dla} \quad |x| < a, \\ -De^{-\beta x}, & \text{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Skończona studnia potencjału

Rozwiązanie należące do I klasy ma postać

$$u(x) = \begin{cases} Ce^{\beta x}, & \text{dla} \quad x < -a, \\ B\cos(\alpha x), & \text{dla} \quad |x| < a, \\ Ce^{-\beta x}, & \text{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Rozwiązanie należące do II klasy ma postać

$$u(x) = \begin{cases} De^{\beta x}, & \text{dla} \quad x < -a, \\ A\sin(\alpha x), & \text{dla} \quad |x| < a, \\ -De^{-\beta x}, & \text{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Zadanie. Pokazać, że funkcje falowe I klasy są parzyste, tzn. $u(-x) = u(x)$, a funkcje II klasy są nieparzyste, $u(-x) = -u(x)$.

Rozwiązanie należące do I klasy ma postać

$$u(x) = \begin{cases} Ce^{\beta x}, & \text{dla} \quad x < -a, \\ B\cos(\alpha x), & \text{dla} \quad |x| < a, \\ Ce^{-\beta x}, & \text{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Rozwiązanie należące do II klasy ma postać

$$u(x) = \begin{cases} De^{\beta x}, & \text{dla} \quad x < -a, \\ A\sin(\alpha x), & \text{dla} \quad |x| < a, \\ -De^{-\beta x}, & \text{dla} \quad x > a. \end{cases}$$

Zadanie. Pokazać, że funkcje falowe I klasy są parzyste, tzn. $u(-x) = u(x)$, a funkcje II klasy są nieparzyste, $u(-x) = -u(x)$.

Skończona studnia potencjału

Taki podział funkcji własnych na parzyste i nieparzyste wynika z symetrii potencjału

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{dla} \quad x < -a, \\ 0, & \text{dla} \quad |x| < a, \\ V_0, & \text{dla} \quad x > a, \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad V(-x) = V(x).$$

Napiszmy równanie falowe z potencjałem $V(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = Eu(x)$$

i dokonajmy zamiany zmiennej $x \to -x$.

Taki podział funkcji własnych na parzyste i nieparzyste wynika z symetrii potencjału

$$V(x) \;=\; \begin{cases} V_0, & \mathrm{dla} \quad x < -a, \\ 0, & \mathrm{dla} \quad |x| < a, \\ V_0, & \mathrm{dla} \quad x > a, \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad V(-x) = V(x).$$

Napiszmy równanie falowe z potencjałem $V(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(x) = Eu(x)$$

i dokonajmy zamiany zmiennej $x \rightarrow -x$.

Przy zamianie $x \to -x$

$$\begin{aligned} V(x) &\to V(-x) = V(x), \\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} &\to \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}(-x)^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(-x)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(-x)} = \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \end{aligned}$$

Dlatego otrzymujemy równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(-x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(-x) = Eu(-x).$$

Przy zamianie $x \to -x$

$$
\begin{aligned}
V(x) &\to V(-x) = V(x), \\
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} &\to \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}(-x)^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(-x)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(-x)} = \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}
\end{aligned}
$$

Dlatego otrzymujemy równanie

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(-x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(-x) = Eu(-x).
$$

Widzimy, że $u(x)$ i $u(-x)$ spełaniają dokładnie takie samo równanie falowe, z taką samą wartością własną E.

Skończona studnia potencjału

Przy zamianie $x \to -x$

$$
\begin{aligned}
V(x) &\to V(-x) = V(x), \\
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} &\to \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}(-x)^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(-x)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(-x)} = \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}
\end{aligned}
$$

Dlatego otrzymujemy równanie

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\mathrm{d}^2 u(-x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u(-x) = Eu(-x).
$$

Widzimy, że $u(x)$ i $u(-x)$ spełaniają dokładnie takie samo równanie falowe, z taką samą wartością własną E.

Skończona studnia potencjału

Załóżmy, że energii E odpowiada tylko jedna niezależna funkcja falowa $u(x)$, tzn. nie ma degeneracji.
Wtedy funkcja $u(-x)$ musi być liniowo zależna od $u(x)$, a więc istnieje stała ε taka, że

$$u(-x) = \varepsilon u(x).$$

Skończona studnia potencjału

Załóżmy, że energii E odpowiada tylko jedna niezależna funkcja falowa $u(x)$, tzn. nie ma degeneracji.
Wtedy funkcja $u(-x)$ musi być liniowo zależna od $u(x)$, a więc istnieje stała ε taka, że

$$u(-x) = \varepsilon u(x).$$

Dokonajmy zamiany zmiennej $x \to -x$.

$$u(x) = \varepsilon u(-x).$$

Załóżmy, że energii E odpowiada tylko jedna niezależna funkcja falowa $u(x)$, tzn. nie ma degeneracji.
Wtedy funkcja $u(-x)$ musi być liniowo zależna od $u(x)$, a więc istnieje stała ε taka, że

$$u(-x) = \varepsilon u(x).$$

Dokonajmy zamiany zmiennej $x \to -x$.

$$u(x) = \varepsilon u(-x).$$

Zatem

$$u(x) = \varepsilon u(-x) = \varepsilon^2 u(x) \quad \Leftrightarrow \quad \varepsilon^2 = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \varepsilon = \pm 1.$$

Załóżmy, że energii E odpowiada tylko jedna niezależna funkcja falowa $u(x)$, tzn. nie ma degeneracji.
Wtedy funkcja $u(-x)$ musi być liniowo zależna od $u(x)$, a więc istnieje stała ε taka, że

$$u(-x) = \varepsilon u(x).$$

Dokonajmy zamiany zmiennej $x \to -x$.

$$u(x) = \varepsilon u(-x).$$

Zatem

$$u(x) = \varepsilon u(-x) = \varepsilon^2 u(x) \quad \Leftrightarrow \quad \varepsilon^2 = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \varepsilon = \pm 1.$$

Skończona studnia potencjału

Widzimy, że jeśli nie ma degeneracji, to funkcje falowe symetrycznego potencjału muszą być albo parzyste

$$u(-x) = u(x), \qquad (\varepsilon = 1),$$

Widzimy, że jeśli nie ma degeneracji, to funkcje falowe symetrycznego potencjału muszą być albo parzyste

$$u(-x) = u(x), \qquad (\varepsilon = 1),$$

albo nieparzyste

$$u(-x) = -u(x), \qquad (\varepsilon = -1).$$

Widzimy, że jeśli nie ma degeneracji, to funkcje falowe symetrycznego potencjału muszą być albo parzyste

$$u(-x) = u(x), \qquad (\varepsilon = 1),$$

albo nieparzyste

$$u(-x) = -u(x), \qquad (\varepsilon = -1).$$

O takich funkcjach falowych mówimy, że mają określoną parzystość: dodatnią ($\varepsilon = 1$) lub ujemną ($\varepsilon = -1$).

Widzimy, że jeśli nie ma degeneracji, to funkcje falowe symetrycznego potencjału muszą być albo parzyste

$$u(-x) = u(x), \qquad (\varepsilon = 1),$$

albo nieparzyste

$$u(-x) = -u(x), \qquad (\varepsilon = -1).$$

O takich funkcjach falowych mówimy, że mają określoną parzystość: dodatnią ($\varepsilon = 1$) lub ujemną ($\varepsilon = -1$).

Skończona studnia potencjału

Poprzednio założyliśmy, że $E < V_0$, a teraz rozważmy przypadek $E > V_0$. Równanie falowe dla $|x| > a$ zapisujemy w formie

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\,(E - V_0)\,u(x).$$

Poprzednio założyliśmy, że $E < V_0$, a teraz rozważmy przypadek $E > V_0$. Równanie falowe dla $|x| > a$ zapisujemy w formie

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\,(E - V_0)\,u(x).$$

Zdefiniujmy

$$\alpha'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,(E - V_0) \quad \Rightarrow \quad \alpha' = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\,(E - V_0)\right]^{\frac{1}{2}},$$

Poprzednio założyliśmy, że $E < V_0$, a teraz rozważmy przypadek $E > V_0$. Równanie falowe dla $|x| > a$ zapisujemy w formie

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\ (E - V_0)\, u(x).$$

Zdefiniujmy

$$\alpha'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\ (E - V_0) \quad \Rightarrow \quad \alpha' = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\ (E - V_0)\right]^{\frac{1}{2}},$$

wówczas równanie falowe przybiera postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\alpha'^2\ u(x).$$

Poprzednio założyliśmy, że $E < V_0$, a teraz rozważmy przypadek $E > V_0$. Równanie falowe dla $|x| > a$ zapisujemy w formie

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\,(E - V_0)\,u(x).$$

Zdefiniujmy

$$\alpha'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,(E - V_0) \quad \Rightarrow \quad \alpha' = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\,(E - V_0)\right]^{\frac{1}{2}},$$

wówczas równanie falowe przybiera postać

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = -\alpha'^2\,u(x).$$

Skończona studnia potencjału

Rozwiązanie ogólne dla $|x| > a$ ma postać

$$u(x) = A' \sin(\alpha' x) + B' \cos(\alpha' x).$$

Współczynniki A' i B' można wybrać w taki sposób, aby to rozwiązanie "zszyć" w sposób gładki, Rozwiązanie ogólne dla $|x| > a$ ma postać

$$u(x) = A' \sin(\alpha' x) + B' \cos(\alpha' x).$$

Współczynniki A' i B' można wybrać w taki sposób, aby to rozwiązanie "zszyć" w sposób gładki, tzn. z zachowaniem ciągłości pierwszej pochodnej,

Skończona studnia potencjału

Rozwiązanie ogólne dla $|x| > a$ ma postać

$$u(x) = A' \sin(\alpha' x) + B' \cos(\alpha' x).$$

Współczynniki A' i B' można wybrać w taki sposób, aby to rozwiązanie "zszyć" w sposób gładki, tzn. z zachowaniem ciągłości pierwszej pochodnej, z rozwiązaniem dla $|x| < a$

$$u(x) = A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x), \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Skończona studnia potencjału

Rozwiązanie ogólne dla $|x| > a$ ma postać

$$u(x) = A' \sin(\alpha' x) + B' \cos(\alpha' x).$$

Współczynniki A' i B' można wybrać w taki sposób, aby to rozwiązanie "zszyć" w sposób gładki, tzn. z zachowaniem ciągłości pierwszej pochodnej, z rozwiązaniem dla $|x| < a$

$$u(x) = A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x), \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Dlatego energia cząstki może przyjmować dowolne, ciągłe wartości.

Skończona studnia potencjału

Rozwiązanie ogólne dla $|x| > a$ ma postać

$$u(x) = A' \sin(\alpha' x) + B' \cos(\alpha' x).$$

Współczynniki A' i B' można wybrać w taki sposób, aby to rozwiązanie "zszyć" w sposób gładki, tzn. z zachowaniem ciągłości pierwszej pochodnej, z rozwiązaniem dla $|x| < a$

$$u(x) = A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x), \qquad \alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Dlatego energia cząstki może przyjmować dowolne, ciągłe wartości.