Системи са егзактним решењима

1 Увод

У овом поглављу размотрићемо низ једнодимензионих и тродимензионих случајева у којима је могуће егзактно решити временски независну Шредингерову једначину.

Позивамо студенте да размисле о добијеним решењима више него да буду усмерени на саму математику проблема (на извођења). Такође, питања понашања честица у односу на потенцијалне јаме, потенцијалне криве или површи, иако изгледају да нису директно повезана са квантном хемијом, заправо су веома значајна, јер се решавањем електронских Шредингерових једначина за различите положаје језгара добијају површи потенцијалних енергија за кретање језгара у којима често треба размотрити и кинетичке проблеме: да ли језгра могу да превазиђу извесне баријере или не, на који начин деформација потенцијала утиче на ротационо-вибрационе нивое, да ли при пресеку неких потенцијалних кривих језгра могу да „тунелирају" кроз стања са негативном кинетичком енергијом, када је могућа дисоцијација молекула, и слично. Заправо, поједини аутори сматрају да цела теоријска хемија почива на површима потенцијалних енергија (које се добијају решавањем електронске Шредингерове једначине): „Хемија је у својој основи проучавање стационарних тачака на површима потенцијалне енергије"(*Lewis*, 2011). Међутим, да бисмо правилно схватили резултате који се добијају из квантно-хемијских прорачуна, потребно је добро познавати основне системе, да ли и како квантне честице пролазе кроз препреке, како се понашају у потенцијалним јамама, шта значи када се електрон нађе ван потенцијалне јаме, и слично.

За мали број система који су од интереса за квантну хемију Шредингерова једначина може егзактно (аналитички) да се реши. Али то не значи да су егзактна решења мање битна, напротив: егзактна решења су путоказ за решавање сложенијих проблема. Најчешће је први корак у решавању сложенијих проблема свођење на простији систем, за који је решење познато. Према томе, познавање једноставнијих моделних система је од важности за дискусију резултата веће тачности, јер ако се она суштински разликују од резултата за упрошћени систем, најчешће је знак да постоји грешка у том „тачнијем" опису.

Временски независна Шредингерова једначина, која описује кретање честице масе m у једној димензији (изабраћемо један правац, нпр. x-осу) са временски независном потенцијалном енергијом (конзервативни системи), има облик:

$$\hat{H}\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x), \tag{1}$$

где је E укупна енергија честице. Решавањем ове једначине добијају се дозвољене вредности енергија E и таласне функције $\psi(x)$, које се често зову временски независне таласне фунцкије или таласне функције стационарних стања. Као што смо помињали раније, постулати квантне механике и статистичка интерпретација таласне функције ограничавају избор могућих функција: таласне функције и њихови први изводи морају бити једнозначне, непрекидне и диференцијабилне функције на целом интервалу дефинисања, додатно, таласне функције везаних стања морају бити квадратно-интеграбилне. Поред тога, будићи да је Шредингерова једначина диференцијална једначина, њена решења морају испуњавати одређене граничне услове, који се постављају на основу физике проблема. Скуп свих својствених вредности E назива се енергетски спектар, и он може бити дискретан (ако је систем у везаном стању) или континуалан (слободно стање).

Део хамилтонијана у (1) који се односи на кинетичку енергију, $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$, има исти облик за све системе (зависи од масе m честице). Оно што је специфично за различите системе је потенцијална енергија $V(\vec{r})$ као функција положаја. Често ћемо (само у овом поглављу) уместо термина потенцијална енергија скраћено писати потенцијал.[1] У задацима који следе, решаваћемо и дискутовати веома једноставне примере решавања Шредингерове једначине за различите облике потенцијала: слободну честицу када је $V(x) = 0$ у целом простору; затим честицу у потенцијалној јами када је $V(x) = 0$ само у ограниченом делу простора унутар јаме и $V(x) = \infty$ ван јаме; надаље, када честица наилази на баријеру са константним потенцијалом $V(x) = V$. Такође, показаћемо да се у одређеним случајевима кретање честице у три димензије може раздвојити и описивати одвојено за сваку димензију. На крају ћемо размотрати неколико сферно-симетричних потенцијала, попут водониковог атома, честице у сферној јами и изотропног хармонијског осцилатора.

За поменуте облике потенцијала, уз још неке потенцијале који овде нису разматрани, Шредингерову једначину је могуће аналитички решити. За компликованије облике потенцијала, могуће је добити само приближна решења уз извесне апроксимације. Ова приближна решења се могу у принципу добити са произвољном тачношћу ако се узимају све блаже апроксимације.

[1] Уместо „За честицу масе m чија је потенцијална енергија описана функцијом $V(\vec{r},t)$“, писаћемо „За честицу масе m у потенцијалу $V(\vec{r},t)$“, иако потенцијалну енергију $V(\vec{r},t)$ не треба мешати са потенцијалом. Подсећања ради: у електричном пољу је $\vec{F} = -\nabla V$, а $\vec{E} = -\nabla\phi$, па је потенцијална енергија честице у пољу заправо електрични потенцијал поља помножен наелектрисањем честице.

1.1 Млаз електрона

Задатак 1. Решити временски независну Шредингерову једначину за честицу масе m која се креће у правцу x осе, при чему је њена потенцијална енергија једнака нули (честица је слободна).

Решење:
Како је $V = 0$, укупна енергија честице, E, једнака је кинетичкој енергији. Временски независна Шредингерова једначина има следећи облик:

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

Увођењем позитивне константе $k^2 = 2mE/\hbar^2$, претходна једначина постаје:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0.$$

Решење ове хомогене диференцијалне једначине другог реда са константним коефицијентима тражи се у облику функције $\psi(x) = e^{rx}$. Заменом претпостављеног решења у почетну једначину добија се карактеристична једначина, а њеним решавањем константа r:

$$\frac{d^2e^{rx}}{dx^2} + k^2e^{rx} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad r^2 + k^2 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad r = \pm ik.$$

Постоје два (партикуларна) решења почетне диференцијалне једначине:

$$\psi_1(x) = e^{ikx} \qquad \text{и} \qquad \psi_2(x) = e^{-ikx}.$$

Опште решење је линеарна комбинација партикуларних решења, са произвољним у општем случају комплексним коефицијентима A и B.

$$\Psi(x) = A\psi_1(x) + B\psi_2(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Када се уврсти временска зависност таласне функције $e^{-\frac{iE}{\hbar}t} = e^{-\frac{ik^2\hbar}{2m}t}$, добија се временски зависно решење:

$$\Psi(x,t) = A\psi_1(x)e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t} + B\psi_2(x)e^{-i\frac{k^2\hbar}{2m}t} = Ae^{ik(x-\frac{k\hbar}{2m}t)} + Be^{-ik(x+\frac{k\hbar}{2m}t)}.$$

Овај израз представља једначину равног таласа (таласа материје). Први члан описује талас који се простире у позитивном смеру x осе, а други члан талас исте енергије који се простире у негативном смеру x осе. За слободну честицу не постоје гранични услови, јер је потенцијал свуда униформан. Стога, нема ограничења у вредностима k и не постоје дискретне дозвољене вредности енергије E, већ је спектар хамилтонијана континуалан. Својствене вредности (енергије) су двоструко дегенерисане, јер постоје два линеарно независна стања, ψ_1 и ψ_2, која одговарају истој вредности енергије. Такође и свака њихова линеарна комбинација, Ψ, одговара истој својственој вредности. Међутим, функције ψ_1, ψ_2 и Ψ не могу репрезентовати физичка стања јер нису квадратно интеграбилне, услед тога што $|\psi_{1,2}(x)|^2$ не тежи 0 када $x \to \pm\infty$. С друге стране, суперпозиција више равних таласа са међусобно блиским вредностима k (која такође задовољава почетну Шредингерову једначину) може бити квадратно-интеграбилна и представљати физичко стање система. Таква комбинација равних таласа назива се таласни пакет.

Задатак 2. Испитати да ли су таласне функције слободне честице из претходног задатака, $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ и $\Psi(x)$, као решења временски независне Шредингерове једначине, својствене функције и оператора импулса $\hat{p}_x$.

Решење:
Будући да се честица слободно креће са импулсом $\vec{p}$ у правцу x осе, њена енергија је кинетичка и важи $E = \dfrac{p_x^2}{2m}$, тј. $p_x = \sqrt{2mE}$. Коришћењем овог израза добијају се таласне функције као функције импулса:

$$\psi_1(x) = e^{ikx} = e^{\frac{ix\sqrt{2mE}}{\hbar}} = e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}, \quad \psi_2(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \quad \text{и} \quad \Psi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}p_x x} + Be^{-\frac{i}{\hbar}p_x x}.$$

Дејство оператора импулса на ове функције је:

$$\begin{aligned}
\hat{p}_x\psi_1(x) &= -i\hbar\frac{d}{dx}e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} = p_x\psi_1(x),\\
\hat{p}_x\psi_2(x) &= -i\hbar\frac{d}{dx}e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} = -p_x\psi_2(x),\\
\hat{p}_x\Psi(x) &= -i\hbar\frac{d}{dx}\left(Ae^{\frac{i}{\hbar}p_x x} + Be^{-\frac{i}{\hbar}p_x x}\right) = p_x Ae^{\frac{i}{\hbar}p_x x} - p_x Be^{-\frac{i}{\hbar}p_x x} \neq const \cdot \Psi(x).
\end{aligned}$$

Видимо да су својствене функције хамилтонијана, ψ_1 и ψ_2, истовремено и својствене функције оператора импулса, али са различитим својственим вредностима, p_x и $-p_x$, редом. Можемо закључити, да ове таласне функције одговарају стањима честице истог интезитета импулса али супротног смера кретања. Таласна функција Ψ је суперпозиција ова два стања. Она није својствена функција оператора импулса и стога не представља стање честице са одређеним импулсом. Међутим, знамо да мерење импулса честице у овом стању, може дати само две вредности: p_x са вероватноћом пропорционалном (јер нисмо нормирали функцију) $|A|^2$ и $-p_x$ са вероватноћом пропорционалном $|B|^2$.

1.2 Честица у једнодимензионој потенцијалној јами

Задатак 3. Размотримо честицу у потенцијалној јами са бесконачно високим зидовима. Честица масе m налази се у једнодимензионој јами, ширине a са бесконачно високим зидовима, при чему потенцијална енергија има две вредности:

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

Наћи могуће вредности енергије честице, E_n, и одговарајућа својствена стања.

Решење:
Решења су следеће нормиране таласне функције и енергије:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad \text{и} \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \dots \tag{2}$$

За области ван јаме решења су једнака нули. Унутар јаме стања су везана и енергетски спектар је недегенерисан. Квантизација се јавља (видети задатак 5.10) при решавању Шредингерове једначине као последица граничних услова, тј. услова непрекидности таласне функције на границама $\psi(0) = 0$ и $\psi(a) = 0$. Такође на основу израза за енергију можемо закључити да се енергетска разлика суседних нивоа, $E_{n+1} - E_n$, повећава са повећањем квантног броја n.

Додајмо још и краће поређење између предвиђања која даје у овом случају квантна механика и класична физика. Класично понашање честица између ригидних зидова је да изводи осцилаторно кретање са било којом енергијом, а може и да мирује, $E = 0$. Са друге стране, према квантној механици, енергија може имати само одређене вредности, (чији је број бесконачан), али не постоји ни једно својствено стање (нити нека линеарна комбинација стања) у којем би енергија честице била једнака нули: честица у потенцијалној јами не мирује.

Задатак 4. Израчунати вредности енергије прва четири нивоа за електрон у потенцијалној јами ширине $a = 1$ Å. Графички представити енергетске нивое, таласне функције и густине вероватноће за ова стања.

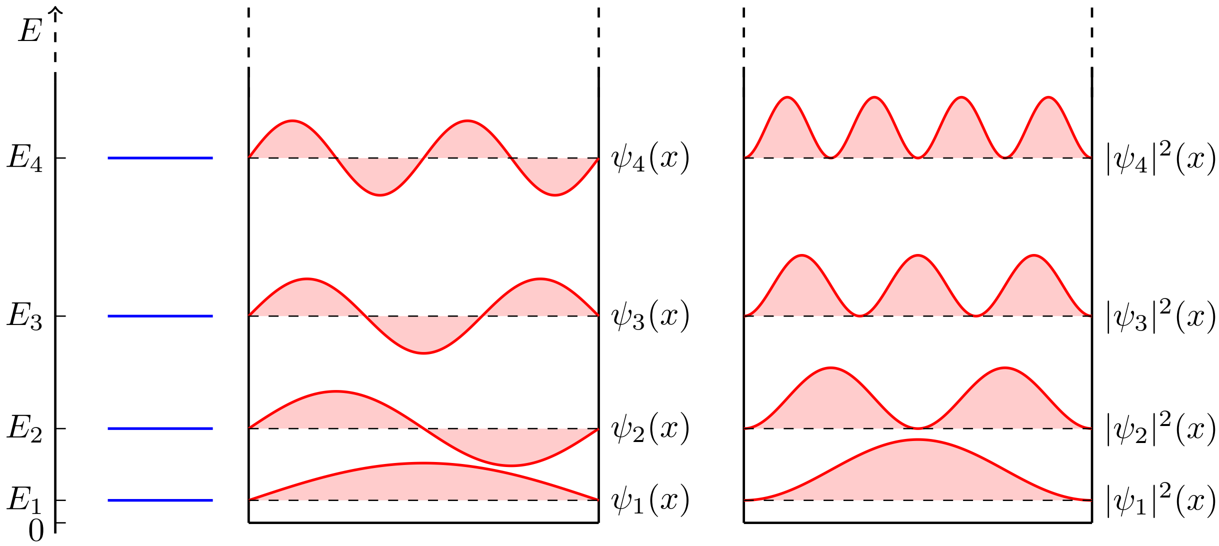
Решење:
На основу израза (2) добијене су таласне функције:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{1\pi x}{a}, \quad \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a},$$
$$\psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi x}{a}, \quad \psi_4(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{4\pi x}{a}.$$

И енергије:

$$E_1 = \frac{1^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = 37{,}6 \text{ eV}, \quad E_2 = \frac{2^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = 150{,}6 \text{ eV},$$
$$E_3 = \frac{3^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = 338{,}8 \text{ eV}, \quad E_4 = \frac{4^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = 602{,}3 \text{ eV}.$$

Графички приказ енергетских нивоа, таласних функција и густина вероватноћа дат је на слици 1.



Слика 1. Енергетски нивои, таласне функције и густине вероватноће за четири најнижа стања електрона у потенцијалној јами.

Задатак 5. Нека разматрани систем представља електрон у потенцијалној јами ширине $a = 1$ Å са почетком у $x = 0$ и бесконачно високим зидовима, при чему је електрон у унутрашњости јаме слободан. Претпоставити да се врши милион мерења x координате електрона у његовом основном стању ($n = 1$). Користећи се постулатима квантне механике, колико мерења ће дати резултат да се електрон налази између 0,500 Å и 0,501 Å, а колико између 0,990 Å и 0,991 Å? Сматрати да су интервали инфинитезимални.

Решење:

Густина вероватноће налажења електрона дефинисана је у било којој тачки потенцијалне јаме, и једнака је квадрату таласне функције $\psi_1(x)$, која одговара основном стању, $\psi_1(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$. Вероватноћа налажења електрона је дефинисана за одређени интервал, и представља производ густине вероватноће и ширине интервала, $dP = \psi_1^2(x)dx$. Како је дати интервал инфинитезималан, можемо сматрати да је унутар њега $\psi_1(x)$ константа. Према томе, вероватноћа је (када број мерења тежи бесконачности, онда удео одређеног резултата тежи вероватноћи, $N_i/N_u \to P_i$ за $N_u \to \infty$):

$$P_1 = \psi_1^2(x)\Delta x_1 = \frac{2}{1\ \text{Å}} \sin^2\left(\frac{\pi \cdot 0{,}500\ \text{Å}}{1\ \text{Å}}\right) 0{,}001\ \text{Å} = 2 \cdot 10^{-3},$$

$$P_2 = \psi_1^2(x)\Delta x_2 = \frac{2}{1\ \text{Å}} \sin^2\left(\frac{\pi \cdot 0{,}990\ \text{Å}}{1\ \text{Å}}\right) 0{,}001\ \text{Å} = 2 \cdot 10^{-6}.$$

Множењем вероватноће појединих исхода мерења са укупним бројем мерења добијамо број мерења који дају те исходе:

$$N_1 = P_1 N_u = 2 \cdot 10^{-3} \cdot 10^6 = 2000,$$

$$N_2 = P_2 N_u = 2 \cdot 10^{-6} \cdot 10^6 = 2.$$

Према томе, када се изврши милион мерења положаја електрона, електрон ће се приближно 2000 пута наћи у интервалу 0,500-0,501 Å, а приближно 2 пута у интервалу 0,990-0,991 Å. Резултат се квалитативно могао предвидети на основу слике 1, на којој видимо да је густина вероватноће налажења електрона у основном стању највећа на средини јаме, а да се смањује са приближавањем зидовима јаме.

Задатак 6. Честица масе m се налази у једнодимензионој јами ширине a и бесконачне висине, при чему је потенцијална енергија дата следећим изразом:

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

Наћи енергије и одговарајућа својствена стања честице.

Решење: $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + V_0, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \dfrac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$

1.3 Честица у тродимензионој потенцијалној јами

Задатак 7. Уколико се потенцијална енергија честице масе m може написати у облику суме чланова $\hat{V}(x,y,z) = \hat{V}(x) + \hat{V}(y) + \hat{V}(z)$, да ли се тродимензиона Шредингерова једначина може свести на решавање три једнодимензионе Шредингерове једначине? Показати.

Решење:
Временски независна Шредингерова једначина, која описује кретање система у три димензије у временски независном потенцијалу (за конзервативне системе), има облик:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{3}$$

У Декартовим координатама она има следећи облик:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \hat{V}(x,y,z)\right]\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z). \tag{4}$$

Овакве парцијалне диференцијалне једначине је у општем случају тешко решити. Међутим, уколико се потенцијал $\hat{V}(x,y,z)$ може раздвојити на суму три независна једнодимензиона члана:

$$\hat{V}(x,y,z) = \hat{V}(x) + \hat{V}(y) + \hat{V}(z)$$

једначину (4) је могуће решити методом раздвајања променљивих. На тај начин се тродимензиона Шредингерова једначина раздваја на три независне једнодимензионе једначине. Коришћењем последње једначине, укупан хамилтонијан се може раздвојити на:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \hat{V}(y) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \hat{V}(z) = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z. \tag{5}$$

У том случају се укупна таласна функција, $\psi(x, y, z)$, која зависи од три променљиве, може написати као производ три функције од којих свака зависи само од једне променљиве:

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z).$$

Заменом ове функције и хамилтонијана (5) у Шредингерову једначину (4) добија се:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \hat{V}(y) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \hat{V}(z)\right]\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z) = E\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z).$$

Када се последња једначина подели са $\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, узимајући у обзир да извод по датој координати делује само на функцију те координате, добија се:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_x(x)}\frac{d^2\psi_x(x)}{dx^2} + \hat{V}(x)\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_y(y)}\frac{d^2\psi_y(y)}{dy^2} + \hat{V}(y)\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_z(z)}\frac{d^2\psi_z(z)}{dz^2} + \hat{V}(z)\right] = E.$$

На левој страни једнакости имамо три функције које зависе од различитих променљивих x, y и z, а на десној страни је константна вредност. Једнакост ће бити испуњена само ако је свака од ових функција једнака неким новим константама, чији је збир једнак почетној константи. То нам даје могућност да почетну једначину раздвојимо на три једначине:

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_x(x)}{dx^2} + \hat{V}(x)\psi_x(x) &= E_x\psi_x(x), \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_y(y)}{dy^2} + \hat{V}(y)\psi_y(y) &= E_y\psi_y(y), \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_z(z)}{dz^2} + \hat{V}(z)\psi_z(z) &= E_z\psi_z(z),
\end{aligned}$$

при чему је укупна енергија:

$$E = E_x + E_y + E_z.$$

На овај начин се помоћу методе раздвајања променљивих тродимензиона Шредингерова једначина свела на три једноставније једнодимензионе једначине. Услов за такву сепарацију је да се потенцијална енергија може написати као сума чланова $\hat{V}(x) + \hat{V}(y) + \hat{V}(z)$.

Задатак 8. Честица масе m се налази у тродимензионој јами са бесконачно високим зидовима. Димензије јаме су a, b и c дуж x, y и z осе, редом. Наћи енергије и одговарајућа својствена стања честице. Узети да је почетак јаме у координатном почетку ($x = y = z = 0$) и да је потенцијал у јами $V(x, y, z) = 0$.

Решење:
Шредингерова једначина унутар јаме је:

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

Решење једначине налазимо методом раздвајања променљивих, чијом се применом добијају три једначине:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_x(x)}{dx^2} = E_x\psi_x(x), \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_y(y)}{dy^2} = E_y\psi_y(y) \quad \text{и} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_z(z)}{dz^2} = E_z\psi_z(z).$$

Свака од ових једначина је Шредингерова једначина за једнодимензиону јаму. Укупна таласна функција је производ $\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, а укупна енергије је збир појединачних енергија $E = E_x + E_y + E_z$.

На тај начин добијају се таласне функције за честицу у тродимензионој јами:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x, y, z) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n_x\pi x}{a}\sin\frac{n_y\pi y}{b}\sin\frac{n_z\pi z}{c}$$

и одговарајуће енергије:

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

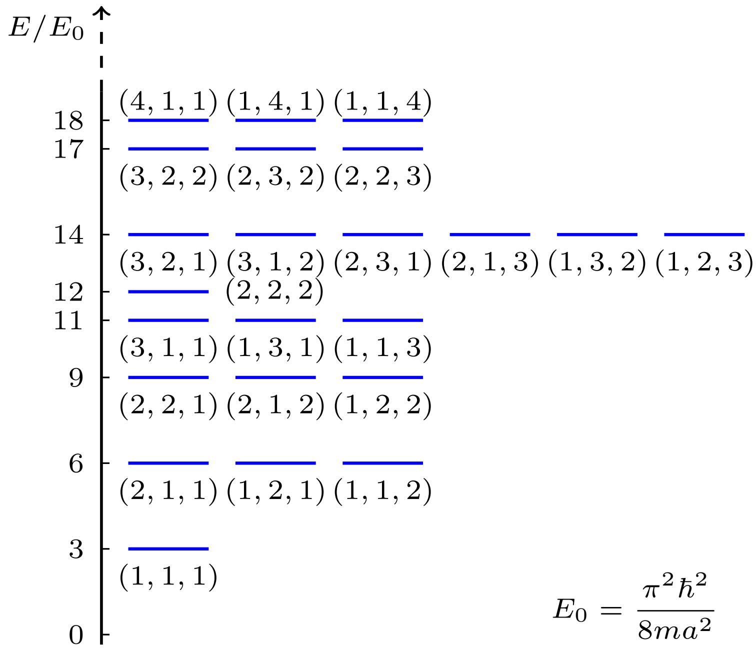
при чему је у индексу назначена зависност од квантних бројева $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3\ldots$

Задатак 9. Наћи степен дегенерације за првих осам нивоа код честице у кубној тродимензионој потенцијалној јами са бесконачно високим зидовима.

Решење:
Можемо искористити резултате претходног задатка, с тим што је код кубне потенцијалне јаме $a = b = c$, па су енергије честица:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right), \qquad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \ldots$$

Енергија основног стања је $E_{1,1,1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1^2 + 1^2 + 1^2\right) = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = 3E_0$, и оно је недегенерисано. Енергије побуђених стања, комбинације квантних бројева и степен дегенерације, g_n, за остала стања представљени су у табели 1. Спектар је дат на слици 2.



Слика 2. Спектар енергија за честицу у кубној потенцијалној јами.

Табела 1. Енергетски нивои и дегенерација за честицу у кубној потенцијалној јами.

E ($E_0 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$)	(n_x, n_y, n_z)	g_n
$3E_0$	$(1,1,1)$	1
$6E_0$	$(2,1,1),\ (1,2,1),\ (1,1,2)$	3
$9E_0$	$(2,2,1),\ (2,1,2),\ (1,2,2)$	3
$11E_0$	$(3,1,1),\ (1,3,1),\ (1,1,3)$	3
$12E_0$	$(2,2,2)$	1
$14E_0$	$(3,2,1),\ (3,1,2),\ (2,3,1),$ $(2,1,3),\ (1,3,2),\ (1,2,3)$	6
$17E_0$	$(3,2,2),\ (2,3,2),\ (2,2,3)$	3
$18E_0$	$(4,1,1),\ (1,4,1),\ (1,1,4)$	3

1.4 Наилазак честице на баријеру

Задатак 10. Решити временски независну Шредингерову једначину за честицу масе m која се креће у позитивном смеру x осе, и у тачки $x = 0$ наилази на потенцијалну баријеру висине V_0. Наћи коефицијенте пропустљивости и рефлексије, за случај када је енергија честица: а) $E > V_0$ и б) $E < V_0$. Потенцијал је дат следећим изразом:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\infty < x < 0 \\ V_0, & 0 < x < +\infty. \end{cases}$$

Решење:

Временски независне Шредингерове једначине за области I и II са слике 3 су:

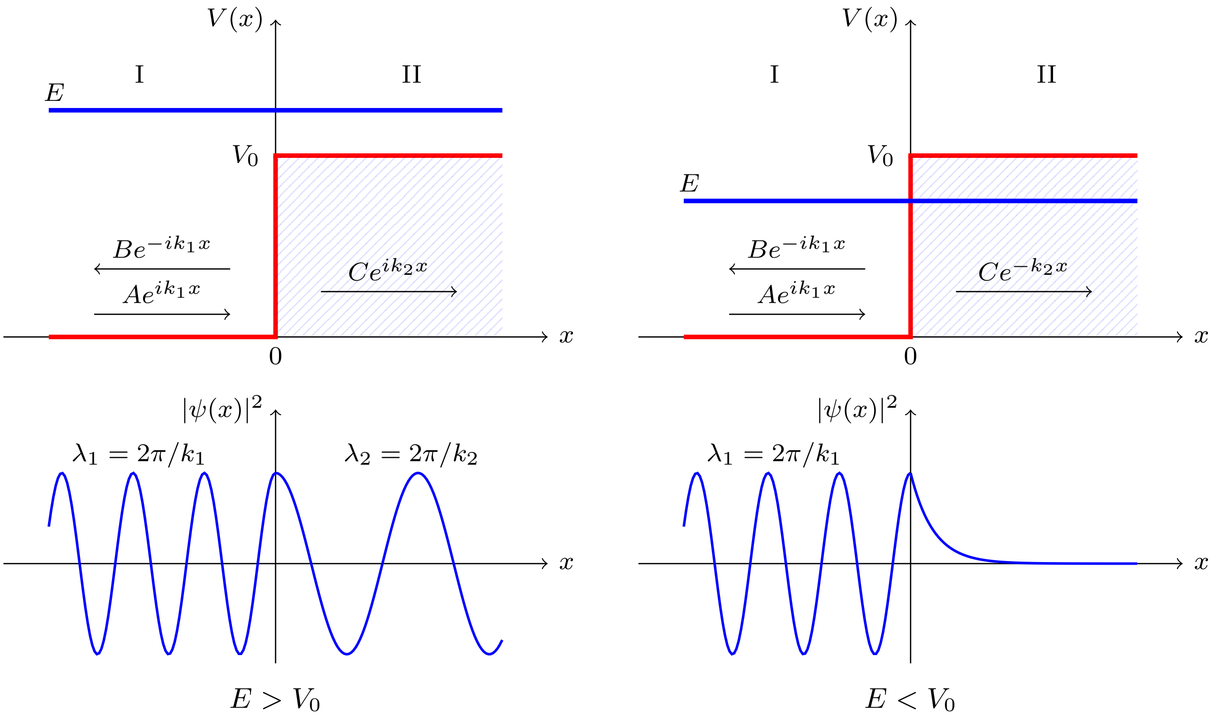
$$\begin{aligned} &\text{I:} && -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = E\psi_1(x) && -\infty < x < 0, \\ &\text{II:} && -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + V_0\psi_2(x) = E\psi_2(x) && 0 < x < +\infty. \end{aligned}$$

а) Случај $E > V_0$.

Овакве диференцијалне једначине смо већ решавали, решења су линеарне комбинације:

$$\begin{aligned} &\text{I:} && \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} && k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar, \\ &\text{II:} && \psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} && k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar. \end{aligned}$$

Израз Ae^{ik_1x} представља упадни талас, који се креће у позитивном смеру x осе у области I, Be^{-ik_1x} представља талас рефлектован баријером, који се креће у негативном смеру x осе у области I. Израз Ce^{ik_1x} је талас који је прошао кроз баријеру и креће се у позитивном смеру x осе у области II, док би се талас представљен изразом De^{-ik_1x} кретао у негативном смеру x осе у области II. Међутим овај талас нема физичког смисла, па константу D изједначавамо са 0, тако да таласна функција у другој области постаје $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x}$.



Слика 3. Пролаз честице кроз потенцијалну баријеру: лево $E > V_0$, десно $E < V_0$.

Коефицијент пропустљивости, T, је однос пропуштеног и упадног таласа и представља део од укупног броја честица који пролази у област II. Коефицијент рефлексије, R, је однос одбијеног и упадног таласа, и представља део честица који се одбије од баријере. Њихов збир мора бити једнак јединици. Може се показати да R и T износе:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \qquad \text{и} \qquad T = \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2}.$$

Однос константи се налази на основу услова непрекидности таласне функције и њених извода на почетку баријере:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \qquad \text{и} \qquad \psi_1'(0) = \psi_2'(0).$$

На основу тога налазимо да је коефицијент рефлексије:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}}\right)^2,$$

а коефицијент пропустљивости:

$$T = \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\sqrt{1 - V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2}.$$

б) Случај $E < V_0$.
Решења Шредингерове једначине за овај случај су:

$$\begin{aligned} &\text{I:} \qquad \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \qquad && k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar, \\ &\text{II:} \qquad \psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \qquad && k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar. \end{aligned}$$

Таласна функција у области II нема осцилаторни већ експоненцијални облик (нема i у експоненту), и да би била коначна мора бити $C = 0$, тако је $\psi_2(x) = De^{-k_2x}$ (експоненцијално опадајућа функција - корисно је запамтити ово решење). Сличним поступком као у првом случају налазимо R и T:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|k_1 - ik_2|^2}{|k_1 + ik_2|^2} = \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1^2 + k_2^2} = 1 \qquad \text{и} \qquad T = 1 - R = 0.$$

У оба случаја таласне функције су непрекидне и коначне за било које вредности $E > 0$, тако да је спектар континуалан.

Задатак 11. Решити временски независну Шредингерову једначину за честицу масе m која се креће у позитивном смеру x-осе, и у тачки $x = 0$ наилази на правоугаону потенцијалну баријеру висине V_0, и коначне ширине a. Наћи коефицијент пропустљивости баријере ако је енергија честица $E < V_0$. Потенцијална енергија је дата следећим изразом:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\infty < x < 0 \\ V_0, & 0 < x < a \\ 0, & a < x < +\infty. \end{cases}$$

Решење:

Временски независна Шредингерова једначина за области I, II и III са слике 4 је:

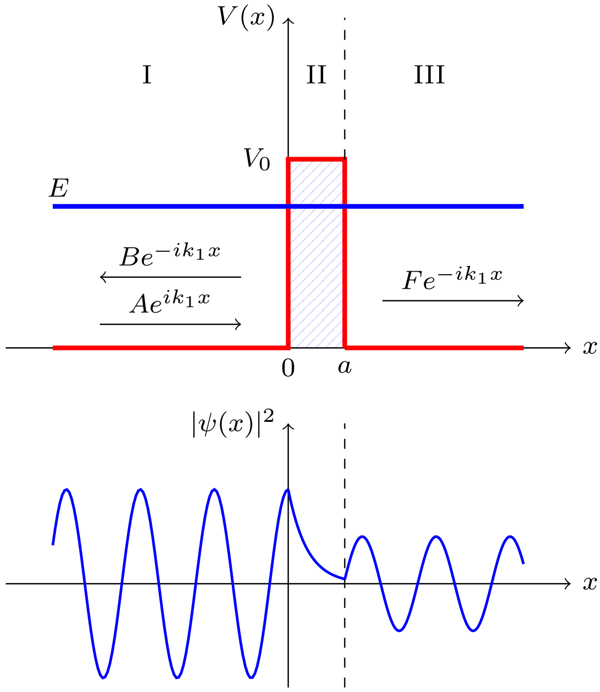
$$
\begin{aligned}
\text{I:} \qquad & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = E\psi_1(x), \\
\text{II:} \qquad & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + V_0\psi_2(x) = E\psi_2(x), \\
\text{III:} \qquad & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} = E\psi_3(x).
\end{aligned}
$$

Решења ових једначина су:

$$
\begin{aligned}
\text{I:} \qquad & \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \\
& \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar, \\
\text{II:} \qquad & \psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \\
& \quad k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar, \\
\text{III:} \qquad & \psi_3(x) = Fe^{ik_1x} \\
& \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar.
\end{aligned}
$$

Члан који садржи e^{-ik_1x} у $\psi_3(x)$ је изостављен из физичких разлога. И у овом случају спектар је континуалан. На основу услова непрекидности таласне функције и њених извода на почетку и крају баријере долазимо до израза за коефицијент пропустљивости:

$$
T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2\sinh^2(k_2a) + 4k_1^2k_2^2}.
$$



Слика 4. Пролаз честице кроз потенцијалну баријеру ширине a.

У великом броју случајева, када разлика између k_1 и k_2 није велика, последњи израз се може апроксимирати следећом једноставнијом релацијом:

$$
T = e^{-2k_2a} = e^{-2a\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar}.
$$

Према класичној механици, честица би се са сигурношћу рефлектовала, јер да би ушла унутар баријере потребно је да има негативну кинетичку енергију. Али овде постоји другачији феномен: будући да је коефицијент трансмисије експоненцијално опадајућа функција и није једнака нули, постоји вероватноћа да ће честица проћи баријеру и ући у област III. Ово је пример *тунел ефекта*. Он је важан само уколико $k_2a \sim 1$. У класичном лимиту када $\hbar \to 0$, T тежи нули.

Задатак 12. Израчунати коефицијенте пропустљивости и рефлексије за електрон који наилази на потенцијалну баријеру висине $V_0 = 20$ eV, ако је:
а) енергија електрона $E = 24$ eV и баријера бесконачне ширине.
б) енергија електрона $E = 17$ eV и баријера бесконачне ширине. Одредити ефективну дубину продирања d, која представља растојање од баријере до тачке у којој густина вероватноћа налажења честице опадне e пута.
в) енергија електрона $E = 17$ eV и баријера има коначну ширину $a = 1$ Å. ***Решење:***

а) Енергија електрона је већа од енергије баријере на коју наилази, па је (задатак 7.11. под а):

$$T = \frac{4\sqrt{1 - V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2} = \frac{4\sqrt{1 - 20 \text{ eV}/24 \text{ eV}}}{(1 + \sqrt{1 - 20 \text{ eV}/24 \text{ eV}})^2} = 0{,}82,$$

$$R = 1 - T = 1 - 0{,}82 = 0{,}18.$$

б) Енергија електрона је мања од енергије баријере на који наилази, па су коефицијенти рефлексије и пропустљивости заправо независни од ових енергија (задатак 7.11. под б):

$$R = 1 \qquad \text{и} \qquad T = 0.$$

Да бисмо израчунали ефективну дубину продирања у баријеру, d, потребно је наћи густину вероватноће $\psi_2^*(x)\psi_2(x) = |\psi_2(x)|^2$, где је $\psi_2(x) = De^{-k_2 x}$, у тачкама $x = 0$ и $x = d$. Њихов однос треба да буде једнак e. Тако је:

$$e = \frac{|\psi_2(x)|^2_{x=0}}{|\psi_2(x)|^2_{x=d}} = \frac{e^0}{e^{-2k_2 d}} = e^{2k_2 d} \qquad \Rightarrow \qquad 1 = 2k_2 d,$$

$$d = \frac{1}{2k_2} = \frac{1{,}055 \cdot 10^{-34}\text{Js}}{2\sqrt{2 \cdot 9{,}109 \cdot 10^{-31}\text{kg } (20 - 17)\text{eV} \cdot 1{,}602 \cdot 10^{-19}\text{J/eV}}} = 0{,}56 \text{ Å}.$$

в) Енергија електрона је мања од енергије баријере, али баријера има коначну ширину, тако да је (задатак 7.12):

$$T = e^{-2a\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar} = e^{-2\cdot 1\cdot 10^{-10}\text{m}\sqrt{2\cdot 9{,}109\cdot 10^{-31}\text{kg } (20-17)\text{eV}\cdot 1{,}602\cdot 10^{-19}\text{J/eV}}/1{,}055\cdot 10^{-34}\text{Js}} = 0{,}17,$$

$$R = 1 - T = 1 - 0{,}17 = 0{,}83.$$

Задатак 13. На основу резултата из претходног задатка, упоредите понашање класичне и квантне честице исте масе $m = m_e$ и енергије E при наиласку на потенцијалне баријере.

Решење:

Према законима класичне механике, када је енергија честице већа од енергије баријере (слика 3 са леве стране), честица са кинетичком енергијом $E = \hbar^2 k^2/2m$, у области I креће се константом брзином $\hbar k/m$, и кад наиђе на баријеру у $x = 0$, она изгуби део кинетичке енергије и наставља да се креће смањеном брзином $\sqrt{(\hbar k/m)^2 - 2V_0 m}$. Коефицијенти пропустљивости и рефлексије су $T = 1$ и $R = 0$, редом. Користећи законе квантне механике добија се $T = 0{,}82$ и $R = 0{,}18$ (за $E - V_0 = 4$ eV). То значи да постоји вероватноћа да се честица ипак рефлектује, иако има већу енергију од потенцијалне енергије баријере. Ако прође баријеру честица има мању кинетичку енергију, тј. већу таласну дужину, $\lambda_2 > \lambda_1$, као што је приказано на 3.

Када је енергија честице мања од енергије баријере, а ширина баријере бесконачна, и класична и квантна механика дају исте резултате за коефицијенте пропустљивости и рефлексије, $T = 0$ и $R = 1$. Међутим постоји једна битна разлика, квантна механика предвиђа да густина вероватноће налажења честице у области II (слика 3 десно) није једнака нули, и стога можемо рећи да се честица не рефлектује обавезно на самој границе баријере. Класична честица не може да прође баријеру у тачки $x = 0$, јер би то значило да се у области II креће са негативном кинетичком енергијом, што није могуће.

Када је енергија честице мања од енергије баријере, а ширина баријере коначна, по класичној механици је и даље $T = 0$ и $R = 1$, док квантна механика предвиђа да је $T = 0{,}17$ и $R = 0{,}83$ (за $V_0 - E = 3$ eV и ширину баријере од 1 Å). Дакле, коефицијент пропустљивости није једнак 0 и постоји вероватноћа да честица прође кроз баријеру. Смањење густине вероватноће налажења честице у области III (слика 4) огледа се у мањој амплитуди таласа (материје). Овај ефекат проласка честица кроз класично непропусну баријеру, назива се тунел ефекат.

Треба напоменути да горе описани ефекти нису специфично квантно-механички феномени, и да се јављају код свих таласа (оптичких, звучних или механичких). Међутим квантно-механички аспект је опис „класичних честица” помоћу таласа.

Предност квантне механике је што даје резултате који се поклапају са експерименталним подацима и стога кажемо да добро описују стварност. У случајевима када $\hbar \to 0$, резултати класичне се поклапају са резултатима квантне механике, међутим у већини случајева код микроскопских система овај услов није испуњен и нужно је користити квантну теорију.