Dvoudimenzionální kruhová potenciálová jáma

Zadání: Uvažujme částici, která se může pohybovat ve dvou rozměrech a její pohyb je omezen na plochu kruhu, tj. její potenciální energie je nulová, pokud je ve vzdálenosti $r \leq L$, kde L je pevně zadaná vzdálenost. Pokud je dále od počátku souřadného systému, tak její potenciální energii uvažujeme jako nekonečnou. Najděte stacionární vlnové funkce pro takovou částici.

Řešení:

Na první pohled by se nám mohl zdá, že tuto úlohu můžeme řešit stejně jako dvoudimenzionální obdélníkovou jámu, vždyť se liší jen okrajovými podmínkami. Zde nám okrajové podmínky říkají, že vlnová funkce na kružnici o poloměru L musí být nulová. Pokud bychom tak postupovali a úlohu řešili v kartézských souřadnicích, tak právě splnění okrajových podmínek by se ukázalo jako velmi obtížné.

Úlohu tedy budeme řešit v souřadnicích, které mnohem lépe odpovídají symetrii úlohy, tj. v souřadnicích polárních r, θ. V oblasti $r < L$ platí

$$\hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2M}\triangle = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right),$$

což je vyjádření laplaceova operátoru v polárních souřadnicích. Hmotnost částice je označena jako M. Vidíme, že hamiltonián není zcela separovaný na součet dvou hamiltoniánů, který by každý závisel jen na jedné souřadnici, ale velmi se tomu blíži. Budeme se tedy inspirovat postupem, kterým bychom řešili problém v separovaném případě a budeme nejprve hledat řešení, tj. vlnovou funkci ve tvaru $\psi(r,\theta) = R(r)Y(\theta)$. Schrödingerova rovnice tedy má tvar:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right)R(r)Y(\theta) = ER(r)Y(\theta).$$

Rovnici vynásobíme výrazem $\frac{2mr^2}{\hbar^2 R(r)Y(\theta)}$ a převedeme členy s proměnnou r na levou stranu a členy s proměnnou *theta* na pravou stranu:

$$\frac{r}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2Mr^2E}{\hbar^2} = -\frac{1}{Y(\theta)}\frac{\partial^2 Y(\theta)}{\partial \theta^2}.$$

Protože se nám podařilo rovnici rozdělit na dvě části a každá závisí jen na jedné proměnné, tak oba tyto výrazy musí být rovny stejné konstantě, kterou označíme jako λ. Dostáváme tedy dvě rovnice:

$$\frac{r}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2Mr^2E}{\hbar^2} = \lambda,$$

$$\frac{\partial^2 Y(\theta)}{\partial \theta^2} = -\lambda Y(\theta).$$

Řešme nejprve druhou (jednodušší) z nich:

$$\frac{\partial^2 Y(\theta)}{\partial \theta^2} + \lambda Y(\theta) = 0,$$

řešení má obecný tvar

$$Y(\theta) = \mathrm{e}^{\pm\sqrt{-\lambda}\theta}.$$

Pozn. O konstantě λ zatím nic nevím, oni její znaménko, koneckonců nemusí být ani reálná.

Vzhledem k tomu, že souřadnice θ má význam úhlu v polárních souřadnicích, nutně požadujeme, aby funkce $Y(\theta)$ byla 2π-periodická. To ale znamená, že $\sqrt{-\lambda} = \mathrm{i}m$, kde m je libovolné celé číslo. Odtud plyne $\lambda = m^2$ a máme tedy dvě řešení pro danou hodnotu λ

$$Y_m(\theta) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\theta}, \qquad Y_{-m}(\theta) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\theta},$$

které můžeme přepsat na jiné dvě řešení

$$Z_{m1}(\theta) = \frac{1}{2}\left(Y_m(\theta) + Y_{-m}(\theta)\right) = \cos m\theta, \qquad Z_{m2}(\theta) = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(Y_m(\theta) - Y_{-m}(\theta)\right) = \sin m\theta,$$

pak vidíme, že nám stačí $m = 0, 1, 2, ...$ a pro každou hodnotu m máme dvě nezávislá řešení.

Vraťme se teď k rovnici pro radiální část $R(r)$

$$\frac{r}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2Mr^2E}{\hbar^2} = \lambda,$$

a upravme ji

$$r^2\frac{\partial^2 R(r)}{\partial r^2} + r\frac{\partial R(r)}{\partial r} + \frac{2Mr^2E}{\hbar^2}R(r) - m^2R(r) = 0.$$

Přejdeme k bezrozměrným proměnným $x = \frac{r}{r_0}$, postupně odvodíme, že

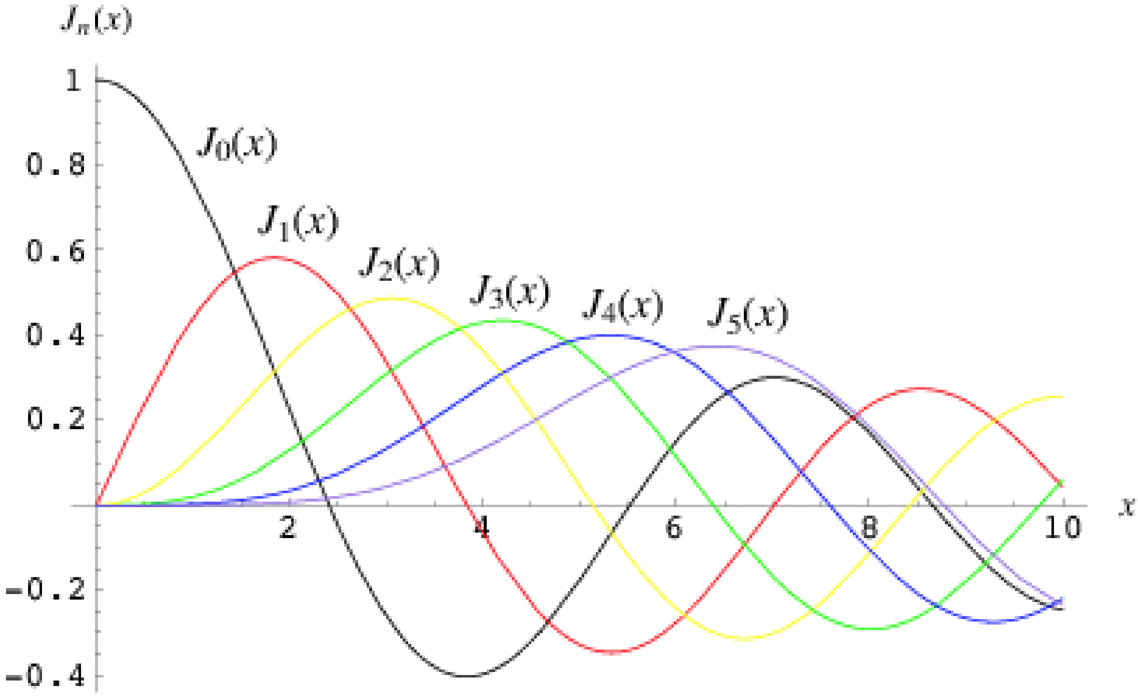
$$r = r_0 x, \qquad \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r_0}\frac{\partial}{\partial r}, \qquad \frac{\partial^2}{\partial r^2} = \frac{1}{r_0^2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

a dosadíme to uvedené rovnice

$$x^2 r_0^2 \frac{1}{r_0^2}\frac{\partial^2 R(x)}{\partial x^2} + x r_0 \frac{1}{r_0}\frac{\partial R(x)}{\partial x} + \left(\frac{2ME}{\hbar^2}r_0^2 x^2 - m^2\right)R(x) = 0.$$

Pokud zvolíme $r_0 = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ME}}$ dostaneme rovnici

$$x^2 R'' + xR' + (x^2 - m^2)R = 0.$$



Obrázek 1: Besselovy funkce 1. druhu

Jedná se o obyčejnou diferenciální rovnici a po troše hledání[1] zjistíme, že jejím řešením jsou tzv. Besselovy funkce. Pokud je $m = 0, 1, 2, \ldots$ jedná se o Besselovy funkce 1. typu označované jako $J_m(x)$, které nedivergují pro $r \to 0$ (viz obr. 1), pro ostatní hodnoty m (rovnice je řešitelná pro libovolnou komplexní hodnotu m) jsou řešením Besselovy funkce 2. druhu, které v počátku divergují, což je pro vlnovou funkci nepřípustné.

Uvažujme tedy konkrétní m, pro něj máme řešení ve tvaru $R(r) = J_m\left(\frac{r}{r_0}\right)$ a teď nám ještě chybí nastavit okrajovou podmínku, což zařídíme vhodnou volbou energie E. Zvolíme si konkrétní nulový bod J_m, označíme ho jako $x_{m,n}$ (n-tý nulový bod m-té Besselovy funkce) a zvolíme r_0 tak, aby právě tento nulový bod odpovídal okraji jámy, tj. $J_m(x_{m,n}) = R(L)$. To znamená, že musí platit

$$\frac{L}{r_0} = x_{m,n} \quad \Rightarrow \quad L = x_{m,n}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2ME}} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 x_{m,n}^2}{2L^2}.$$

Máme tedy řešení, které popisujeme dvěma kvantovými čísly
– číslo m určuje, kolik period sinu či kosinu je na „kružnici okolo počátku“, hodnotu m tedy mohu určit tak, že si spočítám do kolika směrů je vlnová funkce nulová (tj. pro kolik

[1]https://cs.wikipedia.org/wiki/Besselova_funkce,
http://mathworld.wolfram.com/BesselFunction.html

hodnot θ) a vydělím dvěma,
– číslo n mi udává, „jak velkou část příslušné Besselovy funkce“ chci „nacpat“ do jámy, takže hodnota tohoto kvantového čísla je rovna počtu nulových bodů podél jedné polopřímky vedoucí z počátku.

Řešení si můžete interaktivně zobrazit pomocí
– http://demonstrations.wolfram.com/ParticleInAnInfiniteCircularWell/ nebo
– https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/simulations_html5/sims/2DCircularWell/infinite%20circular%20well5.html