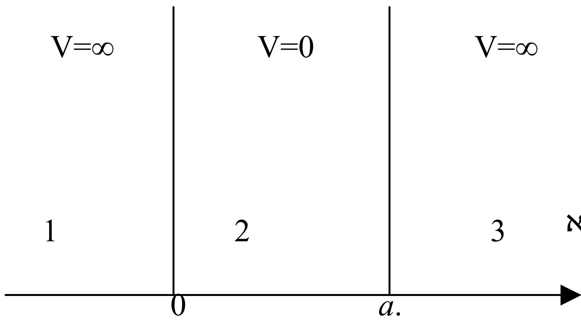
חלקיק בקופסא

כשמדרים על חלקיק בקופסא מתכוונים לחלקיק שיכול לנוע בתוך תחום מוגדר. הקופסא היא קופסא חד מימדית.



גודל הקופסא הוא בין 0 ל-a.
בקצוות הקופסא והלאה הפוטנציאל צריך להיות אינסוף על מנת שהחלקיק לא יצא מהקופסא. חלקיק קוונטי יכול לעבור מחסום אינסופי אם העובי שלו שווה לאפס, ולכן כל התחום מהגבול של הקופסא חייב להיות ∞.
פונקציית הגל של הבעיה שלנו היא סופית ונגזרותיה גם כן סופיות. אם הפוטנציאל מחוץ לקופסא הוא ∞ הדרך היחידה שמשוואת שרדינגר תתקיים היא שהפונקציה תתאפס באזורים אלו:

$$\Psi_1(x) = 0$$
$$\Psi_3(x) = 0$$
$$\Psi_2(x) \equiv \Psi(x)$$

נרשום את משוואת שרדינגר עבור האזור השני:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = E\Psi$$
$$\Psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) = 0$$

ונניח פיתרון מהצורה:

$$\Psi(x) = A\sin(\alpha x) + B\cos(\alpha x)$$
$$\sin(\alpha x) = \frac{1}{2i}\left(e^{i\alpha x} - e^{-i\alpha x}\right)$$
$$\cos(\alpha x) = \frac{1}{2}\left(e^{i\alpha x} + e^{-i\alpha x}\right)$$

נציב את הפתרון שהנחנו במשוואת שרידינגר:

$$\Psi''(x) = -A\alpha^2\sin(\alpha x) - B\alpha^2\cos(\alpha x)$$
$$\Psi''(x) = -\alpha^2\Psi(x)$$
$$-\alpha^2\Psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) = 0$$

ונקבל:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Psi(x) = A\sin\left[\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} x\right] + B\cos\left[\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} x\right]$$

את הקבועים A, B נמצא עפ"י תנאי השפה:

$$\Psi(0) = 0$$

$$\Psi(a) = 0$$

מכאן נובע:

$$\Psi(0) = A\sin 0 + B\cos 0 = B = 0$$

$$\Psi(a) = A\sin\left[\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} a\right] = 0$$

אם $A=0$ אזי פונקציית הגל כולה מתאפסת. זהו פתרון לא פיזיקלי, היות והמשמעות של פתרון זה הוא שהסיכוי למצוא את החלקיק בתוך הקופסא מתאפס, אולם החלקיק נמצא בתוך הקופסא! על מנת לקיים את תנאי השפה צריך אם כך להתקיים:

$$\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} a = n\pi$$

כלומר האנרגיה יכולה לקבל רק ערבים בדידים:

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2} \qquad n \in \mathrm{N}}$$

קיבלנו אנרגיה מקוונטטת. היות ו-n הוא מספר שלם וחיובי והאנרגיה מגיעה בכפולות של n, קיבלנו פונקציה לא רציפה.

מסקנות:

1. קיבלנו משוואת גל כפי שציפינו, עם הרבה פתרונות וערכי אנרגיה בדידים.
2. הקוונטיזציה נבעה מתנאי השפה בלבד!

את ערכו של המקדם A נמצא מנרמול הפונקציה:

$$\int_0^a \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1 \;\rightarrow\; A^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = 1 \;\rightarrow\; A^2\int_0^a \left[\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right]dx = 1 \;\rightarrow$$

$$A^2\frac{a}{2}-\frac{1}{2}A^2\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\frac{a}{2n\pi}\bigg|_0^a = 1 \;\rightarrow\; \frac{a}{2}A^2 = 1 \;\rightarrow\; A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

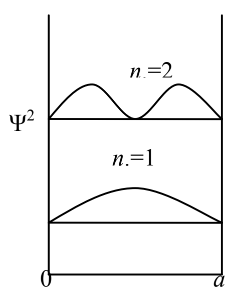
נסכם ונאמר כי קיבלנו פונקציית גל עומד עם אנרגיה מקוונטטת:

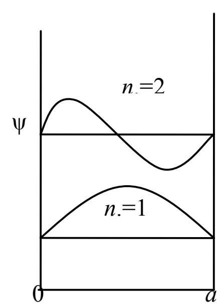
$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$E_n = \frac{h^2n^2}{8ma^2}$$

נצייר את פונקציית הגל עבור n שונים, ואת צפיפות ההסתברות למציאת החלקיק:

ניתן לראות עפ"י הציור כי הסיכוי הגדול ביותר למצוא את החלקיק בקופסא (חלקיק קוונטי) הוא במרכז הקופסא. ניתן להוכיח זאת ע"י גזירה. צפיפות ההסתברות נתונה ע"י ריבוע פונקציית הגל:





$$P(x) = |\Psi_1(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

נגזור את צפיפות ההסתברות כדי למצוא את המקסימום:

$$P'(x) = \frac{4}{a}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\frac{\pi}{a} = 0 \;\rightarrow\; \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) = 0 \;\rightarrow\; x = \frac{a}{2}$$

מבחינה פיזיקלית שמנו חלקיק קוונטי בתוך קופסא- ברמת האנרגיה הכי נמוכה n=1 , הסיכוי הכי גדול למצוא את החלקיק הוא במרכז הקופסא והסיכוי הכי נמוך (P=0) הוא בקצוות הקופסא.

אחד מהשימושים העיקריים של המודל של חלקיק הקופסא הוא לתיאור מערכות מצומדות בכימיה אורגנית. מערכת נוספת שניתן לתאר בקרוב גס בעזרת מודל זה היא המערכת של ננו חלקיקים. ניתן לתאר את המבנה האלקטרוני של גבישים ננומטריים במודל זה. האנרגיה של חלקיק בקופסא תלוי

במימדי הקופסא, כלומר האנרגיה הולכת וקטנה כמימד הקופסא בריבוע. במצב היסוד של המערכת תארנו את פונקציית הגל וראינו כי הסיכוי הגבוה ביותר למציאת החלקיק הוא במרכז הקופסא. ברמה n=2 ניתן לראות כי הפונקציה חוצה את ציר ה-0 של האנרגיה ומחליפה סימן. לנקודה זו קוראים צומת. לאנרגיית האפס אין צומת, במצב המעורר הראשון (n=2) יש צומת אחת, ובמצב הבא (n=3) יש 2 צמתים.

במצב האנרגיה n=2 הסיכוי המקסימלי למצוא את החלקיק הוא:

$$P(x)=\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \quad\rightarrow\quad P'(x)=\frac{4}{a}\frac{2\pi}{a}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)=0 \quad\rightarrow\quad x=\frac{a}{4},\frac{3a}{a}$$

לפונקצית הגל יש סימטריה מסויימת ביחס למרכז הקופסא. בהמשך ננצל סימטריה זו כדי להקל עלינו בחישוב ממוצעים שונים.

<u>מספר הערות:</u>

א) כאשר $n\rightarrow\infty$ יש n-1 צמתים וצפיפות ההסתברות P נראת כמעט כמו קו ישר, ומתקבלת תמונה דומה מאוד לגבול הקלאסי. לעקרון זה קוראים עקרון ההתאמה של בור. כאשר n מאוד גדול האנרגיה גם כן מאוד גדולה , ובאנרגיות כ״כ גדולות או בטמפרטורות מאוד גבוהות אנו חוזרים לגבול הקלאסי.

ב) $n\neq 0$ שכן אם n=0 אז פונקציית הגל שלנו מתאפסת ואז אין לנו חלקיק, וזה לא פיתרון פיזיקאלי.

ג) כאשר n=1 אנו מקבלים את האנרגיה המינימלית $E_1=\frac{h^2}{8ma^2}$ וזו נקראת אנרגיית האפס, כלומר האנרגיה המינימלית שיכולה להיות לחלקיק במערכת. לחלקיק קלאסי לעומת זאת אנרגיה מינימלית אפס. אנרגיה של חלקיק קוונטי היא סופית ולא אפס וזה נובע מכך שהגבלנו את החלקיק לנוע במרחב מסויים. כאשר $a\rightarrow\infty$ אנו חוזרים לגבול הקלאסי שכן האנרגיה תשאף לאפס גם כן. במילים אחרות ניתן לומר כי כאשר אנו לוקחים חלקיק מאוד קטן בקופסא מאוד גדולה אנו חוזרים לפתור בעיה בגבול הקלאסי.

נפתור מספר תרגילים בשימוש במודל זה:

1. <u>אלקטרון בקופסא.</u> מימדי הקופסא a=Å, נשאלת השאלה מה היא אנרגיית מצב היסוד. גודל הקופסא בבעיה זו הוא כגודל של אטום, נרצה אם כל לראות האם מודל זה מתאים לתאור של אלקטרון באטום.

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{\left(6.626\times10^{-34} J\cdot \sec\right)^2}{8\times 9.1\times10^{-31} kg\times\left(2\times10^{-13} m\right)^2} = 0.15\times10^{-17} J$$

$$E_1 = 1.5\times10^{-18} J = 9eV$$

זה נותן לנו הערכה של קישור אלקטרון באטום.

2. פרוטון בתוך קופסא הגודל של a=10^{-13}cm.

זה למעשה גודל של גרעין ולכן השאלה היא מהי אנרגיה גרעינית.

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{\left(6.626\times10^{-34} J\cdot \sec\right)^2}{8\times 1.6\times10^{-27} kg\times\left(10^{-15} m\right)^2}$$

$$E_1 = 3.4\times10^{-11} J = 2\times10^8 eV = 200 MeV$$

3. אטום הליום He בטמפרטורת החדר T=300^0k , נמצא בתוך כלי שמימדו הוא a=1cm. מהו המספר הקוונטי הממוצע, ומהי האנרגיה $E = 1/2\, kT$

$$E = \frac{h^2 n^2}{8ma^2} = \frac{1}{2}kT$$

$$n = \left(\frac{akTa^2 m}{h^2}\right)^{1/2} = 1.7\times10^8$$

כשלוקחים הליום בטמפרטורת החדר בתוך מיכל שניתן לראות בעין המספר הקוונטי הממוצע הוא 10^8, כלומר הליום בטמפרטורת החדר נמצא בגבול הקלאסי ואין צורך לתארו בצורה קוונטית.

נחשב כעת את עקרון אי הודאות עבור מודל זה , כלומר מהו $\Delta p\Delta x = ?$. נניח כי $\Delta x = a$ ונחשב את Δp מהשונות: $\Delta p = \left(<\hat{p}^2> - <\hat{p}>^2\right)^{1/2}$. נחשב תחילה את ערך התנע הממוצע:

$$<\hat{p}> = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]dx = i\hbar\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\frac{n\pi}{a}dx$$

$$<\hat{p}> = \frac{i\hbar n\pi}{a^2}\int_0^a \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)dx = -\frac{i\hbar}{a^2}n\pi\frac{a}{2n\pi}\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\Bigg|_0^a = 0$$

נחשב את הערך הממוצע של הצנע בריבוע:

$$<\hat{p}^2> = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\left[-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]dx$$

ננצל את העובדה ש- $<\hat{p}^2> = 2mE_n$ ולכן:

$$< \hat{p}^2 >= \frac{h^2 n^2}{4a^2} \quad \rightarrow \quad \Delta p = \left(\frac{h^2 n^2}{4a^2} - 0 \right)^{1/2} = \frac{hn}{2a} \quad \rightarrow \quad \Delta x \Delta P = \frac{hn}{2} = \pi \hbar n$$

עפ"י עקרון אי הוודאות של אייזנברג: $\Delta x \Delta P \geq \hbar$

ומכאן ניתן להסיק כי מודל זה מקיים את עקרון אי הודאות. כמו כן ככל שאנו עולים באנרגיה אי הודאות הולכת וגדלה, דבר הנראה לכאורה בסתירה לגבול הקלאסי, אולם צריך להיזהר כאשר לוקחים את הגבול הקלאסי!

נראה שהפונקציות העצמיות שקיבלנו הן אותוגונליות, כלומר:

$$\int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \delta_{nm}$$

כאשר

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

היא פונקציית דלתא של קרוניקר.

$$\frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{a} \int_0^a \left[\cos\left(\frac{(n-m)\pi x}{a}\right) + \cos\left(\frac{(n+m)\pi x}{a}\right) \right] dx$$

$n \neq m$:

$$= \frac{1}{a} \left[\frac{a}{(n-m)\pi} \sin\left(\frac{(n-m)\pi x}{a}\right) \Bigg|_0^a + \frac{a}{(n+m)\pi} \sin\left(\frac{(n+m)\pi x}{a}\right) \Bigg|_0^a \right] = 0$$

$n = m$:

$$= 1 + \frac{1}{a} \frac{a}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \Bigg|_0^a = 1$$