

# Quantum particles

Katarzyna Olender, Gabriela Godek i Karol Maziarka

6 listopada 2020

## 1 Wiązanie cząstek kwantowych

Chcemy ustalić, czy zasady mechaniki kwantowej mają zastosowanie wewnątrz jądra. Dokładniej mówiąc, w szkole dowiedzieliśmy się, że jądra zawierają neutrony i protony (nukleony) o masie  $mc^2 \simeq MeV$  i jądrze wielkości około 2 femtometry. Musimy sprawdzić, czy te fakty są zgodne z mechaniką kwantową i z obserwacją mówiącą, że istnieje typowy odstęp kilku milionów elektronowoltów (MeV) między stanem podstawowym i wzbudzonym w jądrach.

Ten problem wymaga od nas rozwiązania problemu wartości własnej stanu związanego dla niezależnego od czasu równania Schrodingera. Mimo że to równanie jest równaniem różniczkowym, które dobrze umiemy rozwiązać, dodatkowe wymaganie, które musimy rozwiązać dla stanów związanych, sprawia, że jest to problem wartości własnej. W szczególności wymóg stanu związanego narzuca warunki brzegowe na formę rozwiązania, co z kolei oznacza, że rozwiązanie istnieje tylko dla określonych energii, energii własnych lub wartości własnych.

## 2 Kwantowy problem wartości własnej

Mechanika kwantowa opisuje zjawiska zachodzące w skalach atomowych lub subatomowych. Jest to teoria statystyczna, w której prawdopodobieństwo, że cząstka znajduje się w obszarze  $dx$  wokół punktu  $x$ , wynosi  $P = |\psi(x)|^2 dx$ , gdzie  $\psi(x)$  nazywamy funkcją falową. Jeśli cząstka o określonej energii  $E$  poruszająca się w jednym wymiarze doświadcza potencjału  $V(x)$ , jej funkcja falowa jest określona przez zwykłe równanie różniczkowe (lub cząstkowe równanie różniczkowe dla więcej niż jednego wymiaru), znane jako niezależne od czasu równanie Schrodingera:

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

Chociaż mówimy, że rozwiązujemy równanie dla energii  $E$ , w praktyce rozwiązujemy wektor falowy  $\kappa$ . Energia jest ujemna dla stanów związanych, więc łączymy je za pomocą:

$$\kappa^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E = \frac{2m}{\hbar^2} |E|.$$

Równanie Schrodingera przyjmuje postać:

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

Kiedy widzimy, że cząstka jest związana, mówi się, że jest ograniczona jakimś skończonym obszarem przestrzeni. Jedynym sposobem, aby mieć  $\psi(x)$  z całą skończoną, jest rozkładanie się wykładniczo jako  $x \rightarrow \pm\infty$  (gdzie potencjał zanika):

$$\psi(x) \rightarrow \begin{cases} e^{-\kappa x} & \text{gdy } x \rightarrow +\infty \\ e^{+\kappa x} & \text{gdy } x \rightarrow -\infty \end{cases}$$

Podsumowując, chociaż łatwo jest rozwiązać ODE za pomocą klasycznych technik, to musimy również wymagać, aby rozwiązanie  $\psi(x)$  jednocześnie spełniało warunki brzegowe. Ten dodatkowy warunek zmienia problem ODE w problem wartości własnej, który ma rozwiązania (wartości własne) tylko dla niektórych wartości energii  $E$ . Energia stanu podstawowego odpowiada najmniejszej (najbardziej ujemnej) wartości własnej. Funkcja falowa stanu podstawowego (funkcja własna), którą musimy określić, aby znaleźć jej energię, nie może zawierać węzłów i musi wynosić około  $x = 0$ . Stany wzbudzone mają wyższe (mniej ujemne) energie i funkcje falowe, które mogą być nieparzyste (antysymetryczne).

## 2.1 Model: Nucleon in a Box

Opisywane przez nas metody numeryczne są w stanie obsłużyć najbardziej realistyczne potencjalne kształty. Jednak aby nawiązać połączenie ze standardowym przypadkiem podręcznikowym i pozwolić na pewne analityczne sprawdzenie, użyjemy prostego modelu, w którym potencjał  $V(x)$  jest skończoną kwadratową studnią:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 = -83\text{MeV} & \text{gdy } |x| \leq a = 2\text{fm} \\ 0 & \text{gdy } |x| > a = 2\text{fm} \end{cases}$$

gdzie wartości 83 MeV dla głębokości i 2 fm dla promienia są typowe dla jąder (są to jednostki, w których rozwiązujemy problem). Z tym potencjałem równanie Schrodingera wygląda następująco:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2m}{\hbar^2}V_0 - \kappa^2\right), \text{ gdy } |x| \leq a,$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \kappa^2\psi(x) = 0, \text{ gdy } |x| > a = 2$$

Aby oszacować stosunek stałych, wstawiamy  $c^2$ , prędkość światła do kwadratu, zarówno do licznika, jak i mianownika:

$$\frac{2m}{\hbar c^2} = \frac{2mc^2}{(hc)^2} \simeq \frac{2 \times 940\text{MeV}}{(197,32\text{MeV fm})^2} = 0,0483\text{MeV}^{-1}\text{fm}^{-2}$$

### 3 Podwójne algorytmy

Rozwiązanie problemu z wartością własną łączy numeryczne rozwiązanie równania różniczkowego zwyczajnego z poszukiwaniem metodą prób i błędów funkcji falowej, która spełnia warunki brzegowe. Odbyna się to w kilku krokach:

1. Zaczynając od skrajnie lewej strony  $x = -X_{max} \simeq -\infty$ , gdzie  $X_{max} \gg a$ . Ponieważ w tym obszarze  $V = 0$ , analitycznym rozwiązaniem jest  $e^{\pm\kappa x}$ . W związku z tym założymy, że funkcja falowa spełnia tam warunek brzegowy lewej ręki:

$$\psi_L(x = -X_{max}) = e^{+\kappa x} = e^{-\kappa X_{max}}.$$

2. Można użyć dowolnej metody rozwiązania ODE, aby wykonać krok  $\psi_L(x)$  w kierunku początku (od prawej) od  $x = -X_{max}$  do osiągnięcia pasującego promienia  $x_{match}$ . Dokładna wartość tego promienia dopasowania nie jest ważna, a nasze ostateczne rozwiązanie powinno być od niego niezależne.
3. Zaczynając od skrajnie prawej strony, czyli od  $x = +X_{max} \simeq +\infty$  z funkcją falową, która spełnia prawostronny warunek brzegowy:

$$\psi_R(x = +\kappa X_{max}) = e^{-\kappa x} = e^{-\kappa X_{max}}$$

4. Używając dowolnej metody rozwiązywania ODE do kroku  $\psi_R(x)$  w kierunku początku (po lewej) od  $x = +X_{max}$  do osiągnięcia pasującego promienia  $x_{match}$ . Oznacza to, że przeszliśmy przez studnię potencjału.
5. Aby prawdopodobieństwo i prąd były ciągłe przy  $x = x_{match}$ ,  $\psi(x)$  i  $\psi'(x)$  muszą być ciągłe w tym punkcie. Warunkiem koniecznym jest aby stosunek  $\frac{\psi'(x)}{\psi(x)}$ , zwany pochodną logarytmiczną, był ciągły, zamykał oba warunki ciągłości w jednym warunku i był niezależny od normalizacji  $\psi$ .
6. Choć nie wiemy z wyprzedzeniem, które wartości energii  $E$  lub  $\kappa$  są wartościami własnymi, nadal potrzebujemy wartości początkowej energii, aby móc korzystać z naszej metody rozwiązania ODE. W takim przypadku rozwiązanie zaczynamy od oszacowania energii. Dobrym przypuszczeniem dla energii w stanie podstawowym byłaby wartość nieco wyższa od wartości na dnie studni,  $E > -V_0$
7. Obliczamy różnicę funkcję prawej i lewej fali aby sprawdzić niezgodność:

$$\Delta(E, x) = \frac{\frac{\psi'_L(x)}{\psi_L(x)} - \frac{\psi'_R(x)}{\psi_R(x)}}{\frac{\psi'_L(x)}{\psi_L(x)} + \frac{\psi'_R(x)}{\psi_R(x)}} \Big|_{x=x_{max}}$$

gdzie mianownik jest używany w celu uniknięcia zbyt dużych lub małych liczb.

## 4 Nasz projekt

Użyjemy równania falowego, aby rozwiązać problem cząstki w pudełku:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{\hbar}(E - V)\varphi = 0$$

gdzie:

$\varphi$  - funkcja falowa lub funkcja własna

$x$  - współrzędna w przestrzeni

$m$  - masa

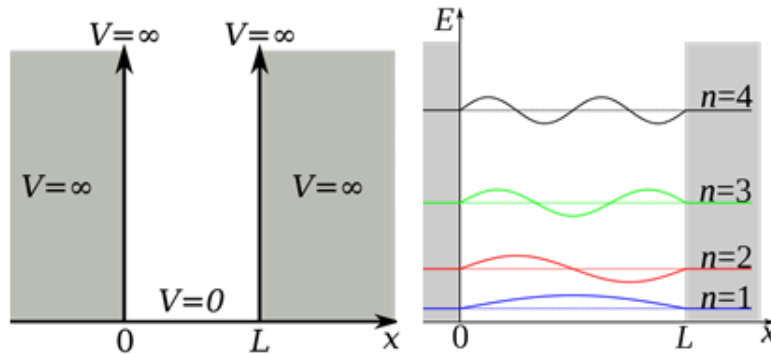
$\hbar$  - stała Plancka

$E$  - całkowita energia lub wartość własna

$V$  - energia potencjalna.

### 4.1 Wizualizacja cząstek w pudełku

Teraz, aby uprościć nasze równanie, założmy, że cząstka znajduje się w pudełku



Cząstka W Pudełku

Problem cząstki w pudełku nie odpowiada żadnemu prawdziwemu systemowi chemicznemu. Jego użyteczność w naszym kontekście polega na tym, że ilustruje kilka cech mechaniki kwantowej. Energia potencjalna na barierze jest ustawiona na nieskończoność (tj. Cząstka nie może uciec), a energia potencjalna wewnątrz bariery jest ustawiona na 0. W tych warunkach mechanika klasyczna przewiduje, że cząstka ma równe prawdopodobieństwo znalezienia się w dowolnej części pudełka, a energia kinetyczna cząstki może mieć dowolną wartość. Biorąc pod uwagę to założenie, otrzymujemy różne równania na energię cząstki przy przegrodzie i wewnątrz pudełka.

Na barierze  $V$  jest nieskończone, a zatem cząstka nie istnieje:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{\hbar^2}(E - \infty)\varphi = 0$$

Wewnątrz pudełka  $V$  wynosi zero, a zatem fala może mieć dowolną wartość skończoną:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{\hbar^2}(E - 0)\varphi = 0$$

Wewnątrz pudełka możemy zmienić układ równania w następujący sposób:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{8\pi^2m}\right)\frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi$$

Jak widać powyżej, funkcja falowa byłaby taka, że gdyby była różniczkowana dwukrotnie, to powinna dawać tę samą funkcję pomnożoną przez  $E$ . Funkcja sinus zachowuje się w ten sposób:

$$\varphi = A \sin(ax)$$

$$\frac{\hbar^2 a^2}{8\pi^2 m} \varphi = E \varphi$$

$$E = \frac{\hbar^2 a^2}{8\pi^2 m}$$

Teraz musimy oszacować wartości stałych,  $\alpha$  i  $A$ . Dla  $\alpha$  używamy równań falowych na barierach, gdzie funkcje falowe są równe 0.

$$\varphi = A \sin ax = 0$$

$$a = \frac{n\pi}{L}$$

Teraz wstawimy wartość dla  $\alpha$ :

$$\varphi_n = A \sin \frac{n\pi x}{L}$$

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$$

Możemy określić wartość  $A$ , wymagając znormalizowania funkcji falowej. Dzieje się tak, ponieważ cząstka musi istnieć gdzieś w pudełku. Stąd suma prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w pudełku wynosi 1:

$$\int_0^L \varphi^* \varphi dx = 1$$

$$A^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx = 1$$

$$A^2 = \left(\frac{L}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$A = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Po wstawieniu wartości, końcowe równania fali i energii to:

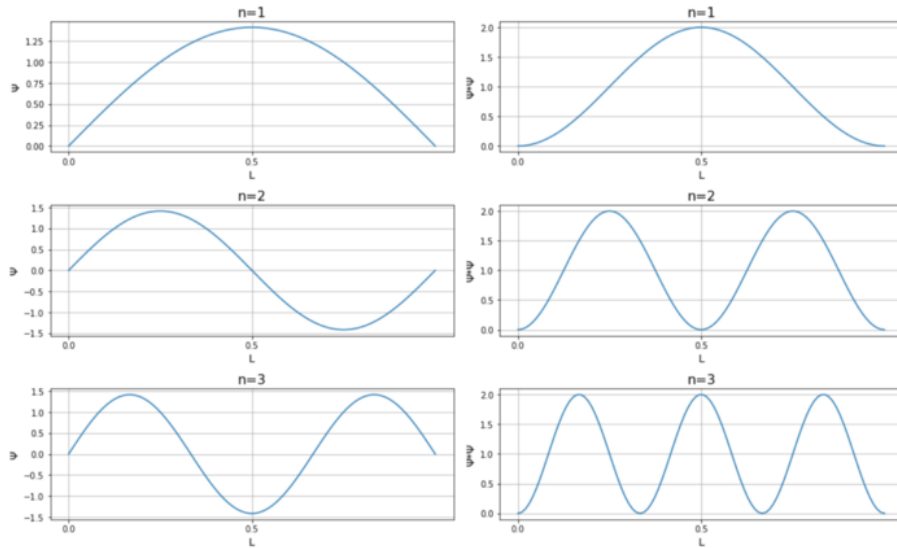
$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$$

$$\varphi = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

Nasz kod wygląda następująco:

```
main.py x QuantumParticles.py x
3 #Constants
4 h = 6.626e-34
5 m = 9.11e-31
6 #Values for L and x
7 x_list = np.linspace(0,1,100)
8 L = 1
9 def psi(n,L,x):
10     return np.sqrt(2/L)*np.sin(n*np.pi*x/L)
11 def psi_2(n,L,x):
12     return np.square(psi(n,L,x))
13 plt.figure(figsize=(15,10))
14 plt.suptitle("Funkcja falowa", fontsize=18)
15 for n in range(1,4):
16     #Empty lists for energy and psi wave
17     psi_2_list = []
18     psi_list = []
19     for x in x_list:
20         psi_2_list.append(psi_2(n,L,x))
21         psi_list.append(psi(n,L,x))
22     plt.subplot(3,2,2*n-1)
23     plt.plot(x_list, psi_list)
24     plt.xlabel("L", fontsize=13)
25     plt.ylabel("Ψ", fontsize=13)
26     plt.xticks(np.arange(0, 1, step=0.5))
27     plt.title("n="+str(n), fontsize=16)
28     plt.grid()
29     plt.subplot(3,2,2*n)
30     plt.plot(x_list, psi_2_list)
31     plt.xlabel("L", fontsize=13)
32     plt.ylabel("Ψ*Ψ", fontsize=13)
33     plt.xticks(np.arange(0, 1, step=0.5))
34     plt.title("n="+str(n), fontsize=16)
35     plt.grid()
36 plt.tight_layout(rect=[0, 0.03, 1, 0.95])
```

Wynik jaki otrzymujemy:



## 5 Wnioski

Istnieją regiony, w których zarówno  $\Psi$ , jak i  $\Psi^* \Psi$  są równe zero w tych samych regionach. Nazywa się to węzłem. Poziomy energii orbitali nie są ciągle. Występują na dyskretnych poziomach, na co wskazuje lokalizacja węzłów. Wraz ze wzrostem wartości  $n$  wzrasta również gęstość fali wewnątrz pudełka.