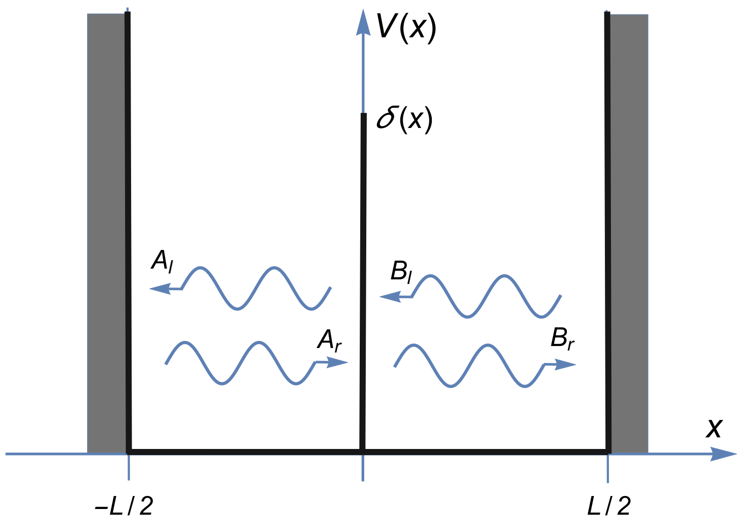
Hiukkanen laatikossa deltapotentiaalilla

Santeri Salomaa 21.8.2019



Tarkastellaan yhdessä ulottuvuudessa hiukkasen aaltofunktiota seuraavalla paloittain määritellyllä potentiaalilla ($v \in \mathbb{R}$)

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq -\frac{L}{2} \\ v\delta(x), & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \infty, & x \geq \frac{L}{2}. \end{cases}$$

Deltafunktiolla $\delta(x)$ on ominaisuudet

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0, \end{cases}$$

sekä

$$\int_a^b \delta(x) dx = 1, \qquad a < 0 < b.$$

1. Schrödingerin yhtälö

Tarkastellaan positiivisen energian ($E > 0$) hiukkasta. Viimeisissä kappaleessa tarkastelen muut tapaukset. Schrödingerin yhtälö on

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

Laatikon ulkopuolella potentiaali on ääretön, joten hiukkasen aaltofunktion tulee olla nolla näillä alueilla

$$\psi(x) = 0, \qquad x \leq -\frac{L}{2} \text{ tai } x \geq \frac{L}{2}.$$

Laatikon sisällä Schödingerin yhtälö saa muodon

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + v\delta(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{1}$$

Tarkastellaan ensin aaltofuntioita alueilla $-\frac{L}{2} < x < 0$ ja $0 < x < \frac{L}{2}$, joissa $V(x) = 0$. Tällöin (1) ratkeaa helposti ($c_1, c_2 \in \mathbb{C}$)

$$\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) \\
\iff \ &\psi(x) = c_1 e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + c_2 e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}.
\end{aligned}$$

Eli ratkaisut ovat oikealle ja vasemmalle liikkuvia tasoaaltoja. Merkitään $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$, sillä $E > 0$. Vasemmalla ja oikealla puolella origoa aaltofunktioiden ratkaisuja tulee tarkastella erikseen ($A_r, A_l, B_r, B_l \in \mathbb{C}$).

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_L(x) = A_r e^{ikx} + A_l e^{-ikx}, & -\dfrac{L}{2} < x < 0 \\ \psi_R(x) = B_r e^{ikx} + B_l e^{-ikx}, & 0 < x < \dfrac{L}{2}. \end{cases} \tag{2}$$

2. Reunaehdot

Aaltofunktion $\psi(x)$ tulee olla jatkuva kaikkialla, sekä derivaatan $\psi'(x)$ jatkuva kaikkialla paitsi äärettömän potentiaalin pisteissä. Eli tässä tapauksessa pistessä $x = 0$. Tämä asettaa monia ehtoja, joista selviää aaltofunktion luonne.

Aaltofunktion jatkuvuudesta origossa $x = 0$ seuraa ehto

$$\begin{aligned} &\psi_L(0) = \psi_R(0) \\ \iff &A_r + A_l = B_r + B_l \\ \iff &A_r + A_l - B_r - B_l = 0. \end{aligned}$$

Samoin aaltofunktion tulee olla jatkuva laatikon reunoilla, joissa aaltofunktion arvo on nolla

$$\begin{aligned} \psi_L(-L/2) &= 0 \\ \iff \quad A_r e^{-ik\frac{L}{2}} + A_l e^{ik\frac{L}{2}} &= 0 \end{aligned}$$

ja

$$\begin{aligned} \psi_R(L/2) &= 0 \\ \iff \quad B_r e^{ik\frac{L}{2}} + B_l e^{-ik\frac{L}{2}} &= 0. \end{aligned}$$

Deltapotentiaalin integraalin ominaisuuksista ja aaltofunktion käyttäytymisestä nollan ympäristössä, voimme johtaa Schrödingerin yhtälöä käyttäen neljännen ehdon ($\epsilon > 0$)

$$\begin{aligned} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + v\delta(x)\psi(x) \right) dx &= \int_{-\epsilon}^{\epsilon} E\psi(x)dx \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Big|_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi'(x) + v\psi(0) &= E\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) \\ \overset{\epsilon\to 0}{\Rightarrow} -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi'(0_+) - \psi'(0_-)\right) + v\psi(0) &= 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_R'(0) - \psi_L'(0)\right) + v\psi(0) &= 0 \\ \psi_R'(0) - \psi_L'(0) &= \frac{2mv}{\hbar^2}\psi(0) \end{aligned}$$

Lasketaan tarvittavat derivaatat

$$\begin{cases} \psi_L'(x) = ik\left(A_r e^{ikx} - A_l e^{-ikx}\right) \\ \psi_R'(x) = ik\left(B_r e^{ikx} - B_l e^{-ikx}\right). \end{cases}$$

Huomaa myös, että $\psi(0) = \psi_R(0) = \psi_L(0) = A_r + A_l$. Näin ollen saadaan

$$
\begin{aligned}
ik\left(-A_r + A_l + B_r - B_l\right) &= \frac{2mv}{\hbar^2}\left(A_r + A_l\right) \\
\left(\frac{2mv}{ik\hbar^2} + 1\right) A_r + \left(\frac{2mv}{ik\hbar^2} - 1\right) A_l - B_r + B_l &= 0.
\end{aligned}
$$

Kootaan saadut neljä reunaehtoa yhteen yhtälöryhmään

$$
\begin{cases}
A_r + A_l - B_r - B_l & = 0 \\
A_r e^{-ik\frac{L}{2}} + A_l e^{ik\frac{L}{2}} & = 0 \\
B_r e^{ik\frac{L}{2}} + B_l e^{-ik\frac{L}{2}} & = 0 \\
\left(\frac{2mv}{ik\hbar^2} + 1\right) A_r + \left(\frac{2mv}{ik\hbar^2} - 1\right) A_l - B_r + B_l & = 0
\end{cases} \tag{3}
$$

$$
\iff \begin{pmatrix}
1 & 1 & -1 & -1 \\
e^{-ik\frac{L}{2}} & e^{ik\frac{L}{2}} & 0 & 0 \\
0 & 0 & e^{ik\frac{L}{2}} & e^{-ik\frac{L}{2}} \\
\left(\frac{2mv}{ik\hbar^2} + 1\right) & \left(\frac{2mv}{ik\hbar^2} - 1\right) & -1 & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} A_r \\ A_l \\ B_r \\ B_l \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4}
$$

Merkitään yllä olevaa matriisituloa: $M\vec{a} = \vec{0}$. Triviaaliratkaisu on $A_r = A_l = B_r = B_l = 0$. Tämä ei ole kuitenkaan fysikaalinen ratkaisu, sillä tällöin $\psi(x) = 0$ kaikkialla $x \in (-\infty, \infty)$, eikä täten aaltofunktio olisi normitettu. Koska matriisitulo on homogeeninen ja lineaarinen, tulee todellisessa ratkaisussa olla $\det(M) = 0$. Eli matriisilla M ei saa olla käänteismatriisia, sillä tämä johtaisi vain triviaaliratkaisuun. Täten

$$
\begin{aligned}
&\det(M) = 0 \\
\iff &\det \begin{pmatrix}
1 & 1 & -1 & -1 \\
e^{-ik\frac{L}{2}} & e^{ik\frac{L}{2}} & 0 & 0 \\
0 & 0 & e^{ik\frac{L}{2}} & e^{-ik\frac{L}{2}} \\
\left(\frac{2mv}{ik\hbar^2} + 1\right) & \left(\frac{2mv}{ik\hbar^2} - 1\right) & -1 & 1
\end{pmatrix} = 0.
\end{aligned}
$$

Tästä laskemalla saadaan k:lle ehto

$$
\frac{mv}{k\hbar^2}\left(\cos(kL) - 1\right) = \sin(kL). \tag{5}
$$

Selkeästi $kL = 2n\pi$, ($n \in \mathbb{N}$) ovat ratkaisuita yhtälöön. Tarkastellaan $n = 0$ myöhemmin. Kun $kL \neq 2n\pi$, voidaan kirjoittaa

$$
\frac{mv}{ik\hbar^2} = \frac{1 + e^{ikL}}{1 - e^{ikL}} \tag{6}
$$

$$
\iff \frac{mv}{k\hbar^2} = -\cot\left(\frac{kL}{2}\right), \qquad \text{kun } kL \neq 2n\pi,\ (n \in \mathbb{N}). \tag{7}
$$

Yhtälöryhmästä (3) saadaan laskettua ja esitettyä muut muuttujat A_l, B_r ja B_l yhden muuttujan A_r avulla

$$\begin{cases} A_l(A_r) &= -e^{-ikL}A_r \\ B_r(A_r) &= \frac{A_r}{1-\frac{mv}{ik\hbar^2}(1-e^{ikL})} \\ B_l(A_r) &= -\frac{e^{ikL}A_r}{1-\frac{mv}{ik\hbar^2}(1-e^{ikL})}, \end{cases} \tag{8}$$

2.1. Aaltofunktio tapauksessa $kL \neq 2n\pi$

Tapauksessa $kL \neq 2n\pi$, ehto (6) on voimassa ja tämä voidaan sijoittaa edelliseen yhtälöryhmään (8), jolloin saadaan

$$\begin{cases} A_l(A_r) &= -e^{-ikL}A_r \\ B_r(A_r) &= -e^{-ikL}A_r \\ B_l(A_r) &= A_r, \end{cases} \qquad \text{kun } kL \neq 2n\pi,\ (n \in \mathbb{N}). \tag{9}$$

Sijoitetaan nämä aaltofunktion kaavoihin (2)

$$\begin{aligned} \psi_L(x) &= \left(e^{ikx} - e^{-ik(x+L)}\right)A_r \\ &= 2ie^{-ik\frac{L}{2}}A_r\left(\frac{e^{ik(x+\frac{L}{2})} - e^{-ik(x+\frac{L}{2})}}{2i}\right) \\ &= \tilde{A}\sin\left(k\left(x+\frac{L}{2}\right)\right), \qquad \text{jossa } \tilde{A} \equiv 2ie^{-ik\frac{L}{2}}A_r \in \mathbb{C}. \end{aligned}$$

Samoin saadaan

$$\psi_R(x) = -\tilde{A}\sin\left(k\left(x-\frac{L}{2}\right)\right).$$

Eli saatiin sinimuotoinen paloittain määritelty aaltofunktio

$$\psi(x) \overset{kL\neq 2n\pi}{=} \begin{cases} \psi_L(x) = \tilde{A}\sin\left(k\left(x+\frac{L}{2}\right)\right), & -\frac{L}{2} \leq x \leq 0 \\ \psi_R(x) = -\tilde{A}\sin\left(k\left(x-\frac{L}{2}\right)\right), & 0 \leq x \leq \frac{L}{2}. \end{cases}$$

Ratkaisuissa pitää päteä diskreettejä k:n arvoja antava ehto (7).

2.2. Aaltofunktio tapauksessa $kL = 2n\pi$

Sijoittamalla $kL = 2n\pi$ suoraan yhtälöryhmään (8) saadaan tällä kertaa

$$\begin{cases} A_l(A_r) & = -e^{-ikL}A_r \\ B_r(A_r) & = A_r \\ B_l(A_r) & = -e^{ikL}A_r, \end{cases} \qquad \text{kun } kL = 2n\pi, \ (n \in \mathbb{N}) \tag{10}$$

Seuraavaksi sijoitetaan nämä aaltofunktion kaavoihin (2). Aaltofunktion vasen puoli tulee näyttämään samalta kuin edellä

$$\psi_L(x) = \tilde{A}\sin\left(k\left(x + \frac{L}{2}\right)\right),$$

mutta oikea puoli saadaan seuraavan muotoon

$$\begin{aligned} \psi_R(x) &= \left(e^{ikx} - e^{-ik(x-L)}\right)A_r \\ &= 2ie^{ik\frac{L}{2}}A_r\left(\frac{e^{ik(x-\frac{L}{2})} - e^{-ik(x-\frac{L}{2})}}{2i}\right) \\ &= \tilde{A}\sin\left(k\left(x - \frac{L}{2}\right)\right), \end{aligned}$$

jossa käytin viimeiseen vaiheeseen $2ie^{ik\frac{L}{2}}A_r = e^{ikL}\tilde{A} \overset{kL=2n\pi}{=} \tilde{A}$. Huomaa, että $kL = 2n\pi$ ehdolla saadaan vain yksi aaltofunktio

$$\begin{aligned} \psi_R(x) =& \tilde{A}\sin\left(kx - \frac{kL}{2}\right) \\ =& \tilde{A}\left(\sin(kx)\cos\left(\frac{kL}{2}\right) - \cos(kx)\sin\left(\frac{kL}{2}\right)\right) \\ =& \tilde{A}\Big(\sin(kx)\cos(\pi n) - \cos(kx)\sin(\pi n)\Big) \\ =& \tilde{A}\sin(kx)\cos(\pi n) \\ =& \tilde{A}\Big(\sin(kx)\cos(\pi n) + \cos(kx)\sin(\pi n)\Big) \\ =& \tilde{A}\sin\left(k\left(x + \frac{L}{2}\right)\right) = \psi_L(x). \end{aligned}$$

3. Normitus

Selvitetään aaltofunktion kerroin $\tilde{A}$ suorittamalla normitus. Suoritetaan lasku ehdon $kL \neq 2n\pi$ aaltofunktioilla

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1 \\
\iff &\int_{-\infty}^{-L/2} |\psi(x)|^2\, dx + \int_{-L/2}^{0} |\psi(x)|^2\, dx + \int_{0}^{L/2} |\psi(x)|^2\, dx + \int_{L/2}^{\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1 \\
\iff &0 + \int_{-L/2}^{0} |\psi_L(x)|^2\, dx + \int_{0}^{L/2} |\psi_R(x)|^2\, dx + 0 = 1 \\
\iff &\int_{-L/2}^{0} |\tilde{A}|^2 \sin^2\left(k\left(x + \frac{L}{2}\right)\right) dx + \int_{0}^{L/2} |\tilde{A}|^2 \sin^2\left(k\left(x - \frac{L}{2}\right)\right) dx = 1 \\
\iff &|\tilde{A}| = \sqrt{\frac{2k}{kL - \sin(kL)}} \\
\iff &\tilde{A} = \sqrt{\frac{2k}{kL - \sin(kL)}}\, e^{i\theta}, \qquad \text{jossa } \theta \in \mathbb{R}.
\end{aligned}
$$

Kun ehto $kL = 2n\pi$ on voimassa saadaan

$$
\tilde{A} = \sqrt{\frac{2}{L}}\, e^{i\theta}.
$$

4. Aaltofunktion tarkastelu

Aaltofunktioksi saatiin siis kaksi eri tyyppistä ratkaisua riippuen siitä onko ehto $kL = 2n\pi$ voimassa. Valitaan $e^{i\theta} = 1$ eli reaaliset aaltofunktiot (valinnalla ei tässä merkitystä)

$$
\psi(x) \overset{kL \neq 2n\pi}{=} \begin{cases} \psi_L(x) = \sqrt{\dfrac{2k}{kL - \sin(kL)}} \sin\left(k\left(x + \dfrac{L}{2}\right)\right) & -\dfrac{L}{2} \leq x \leq 0 \\ \psi_R(x) = -\sqrt{\dfrac{2k}{kL - \sin(kL)}} \sin\left(k\left(x - \dfrac{L}{2}\right)\right), & 0 \leq x \leq \dfrac{L}{2}, \end{cases} \tag{11}
$$

jossa k:lle tulee päteä ehto (7). Ehdon $kL = 2n\pi$ aaltofunktio on muotoa

$$
\psi(x) \overset{kL = 2n\pi}{=} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(k\left(x + \frac{L}{2}\right)\right), \qquad -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}. \tag{12}
$$

4.1. Hiukkanen laatikossa ilman potentiaalia eli $v = 0$

Aaltofunktio $\psi(x)$, jossa $kL = 2n\pi$ on hiukkanen laatikossa (ilman deltapotentiaalia) aaltofunktio. Eli tähän ratkaisuun ei potentiaali vaikuta. Aaltofunktio saa origossa arvon nolla (näin myös todennäköisyys), missä sen derivaatta on jatkuva. Nämä ovat vasta kuitenkin parillisen kokonaisluvun moodit hiukkanen laatikossa (ilman deltapotentiaalia) tapaukselle.

Asettamalla $v = 0$, saadaan aaltofunktiosta $kL \neq 2n\pi$ hiukkanen laatikossa (ilman deltapotentiaalia) loput parittoman kokonaisluvun moodit. Ensin ehdosta (5) saadaan

$$\begin{aligned} v = 0 \implies & \sin(kL) = 0 \\ & \iff k = \frac{n\pi}{L}, \qquad (n \in \mathbb{N}). \end{aligned}$$

Parilliset n arvot johtavat aaltofunktioon ehtoon $kL = 2n\pi$. Parittomilla kokonaisluvuilla n saadaan $kL = (2n-1)\pi$ ja täten amplitudiksi

$$\begin{aligned} |\tilde{A}| &\overset{v=0}{=} \sqrt{\frac{2k}{kL - \sin((2n-1)\pi)}} \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}}, \end{aligned}$$

josta saadaan jälleen vain yksi aaltofunktio

$$\begin{aligned} \psi_R(x) &\overset{v=0}{=} -\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{(2n-1)\pi}{L}\left(x - \frac{L}{2}\right)\right) \\ &= -\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(kx - (2n-1)\frac{\pi}{2}\right) \\ &= -\sqrt{\frac{2}{L}} \left(\sin(kx)\cos\left((2n-1)\frac{\pi}{2}\right) - \cos(kx)\sin\left((2n-1)\frac{\pi}{2}\right)\right) \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \left(0 + \cos(kx)\sin\left((2n-1)\frac{\pi}{2}\right)\right) \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\sin(kx)\cos\left((2n-1)\frac{\pi}{2}\right) + \cos(kx)\sin\left((2n-1)\frac{\pi}{2}\right)\right) \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{(2n-1)\pi}{L}\left(x + \frac{L}{2}\right)\right) \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(k\left(x + \frac{L}{2}\right)\right) \overset{v=0}{=} \psi_L(x). \end{aligned}$$

Saatiin siis yleisesti tunnettu hiukkanen laatikossa (ilman deltapotentiaalia) aaltofunktio

$$v = 0 \implies \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(k\left(x + \frac{L}{2}\right)\right), \qquad -\frac{L}{2} \le x \le \frac{L}{2}, \quad k = \frac{n\pi}{L}$$

4.2. Yleisen $v \in \mathbb{R}$ tapauksen analysointi

Parittoman kokonaisluvun n aaltofunktioille pätee ehto (7) eli

$$\begin{aligned} \frac{mv}{k\hbar^2} &= -\cot\left(\frac{kL}{2}\right) \\ \frac{mv/\hbar^2}{k} &= -\cot\left(\frac{kL}{2}\right) \\ f_1(k) &= f_2(k) \end{aligned}$$

Kotangentin epäjatkuvuuspisteet ovat $kL = 2n\pi$ tapauksia ja myös ratkaisuja. Käyrien $f_1(k)$ ja $f_2(k)$ leikkauspisteiden k:n arvot tuovat loput mahdolliset k:n ratkaisut. Kuvassa 1 on ylimpänä $v > 0$ tapaus.

Kotangenttikäyrä f_2 leikkaa k-akselin aina kohdassa $k = \frac{(2n-1)\pi}{L}$. On siis yksinkertaisempaa kuvata k:n ratkaisut seuraavasti

$$\begin{cases} k_{2n-1} = \frac{(2n-1)\pi}{L} + w \\ k_{2n} = \frac{2n\pi}{L}, \end{cases} \qquad (n \in \mathbb{N}),$$

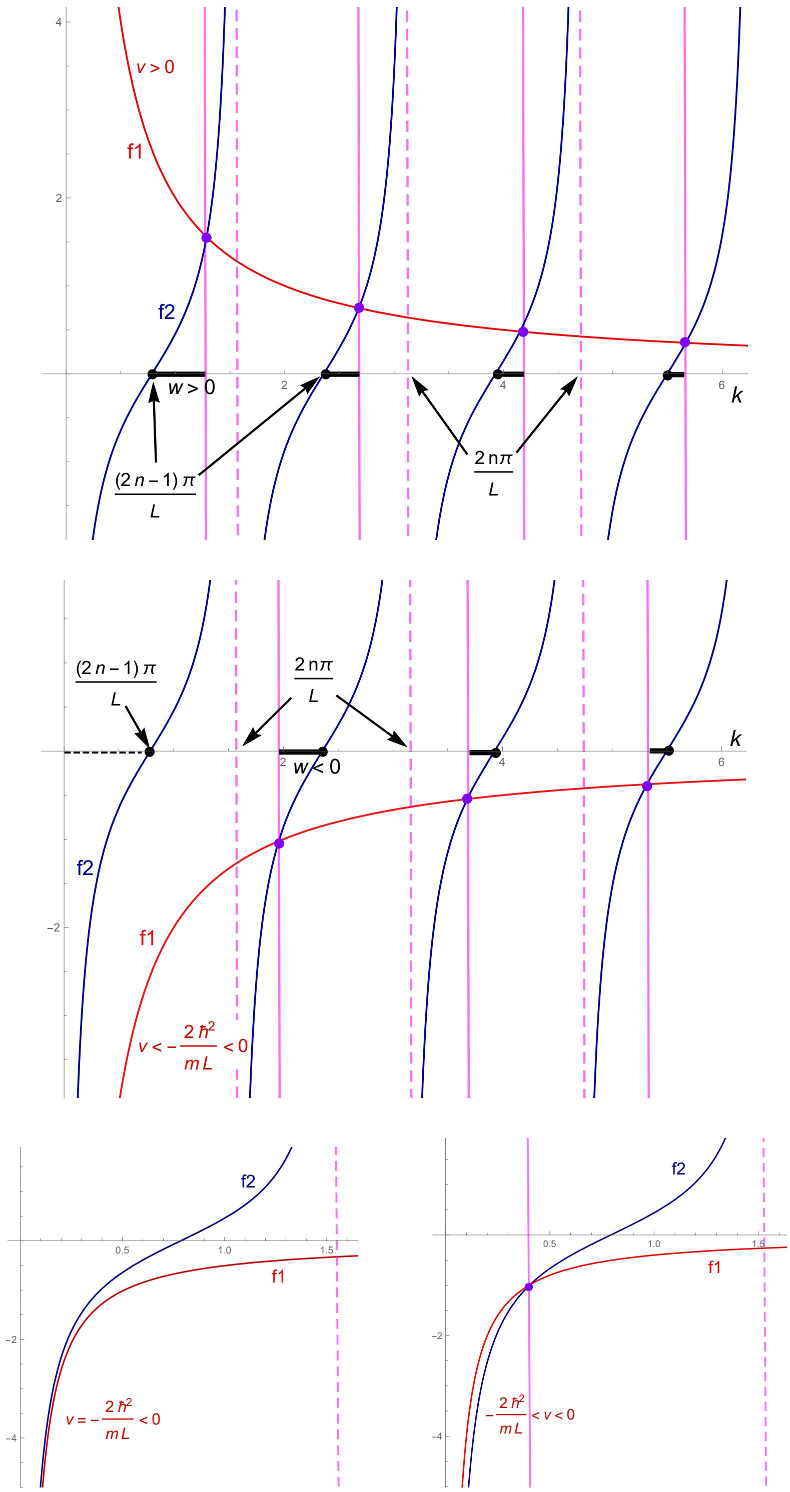
missä $w \in (-\frac{\pi}{L}, \frac{\pi}{L})$ on potentiaalin aiheuttama termi. Tämä lähenee nollaa n:n kasvaessa, eli suuremmilla aaltoluvun ratkaisuilla.

Huomaa, että aaltoluvut k_{2n-1} antavat parillisia funktioita ja k_{2n} parittomia sinifunktioita. Parittomat funktiot ovat origossa nolla, ja tästä syystä näiden aaltofunktioihin ei vaikuta potentiaali (huom. ei w termiä).

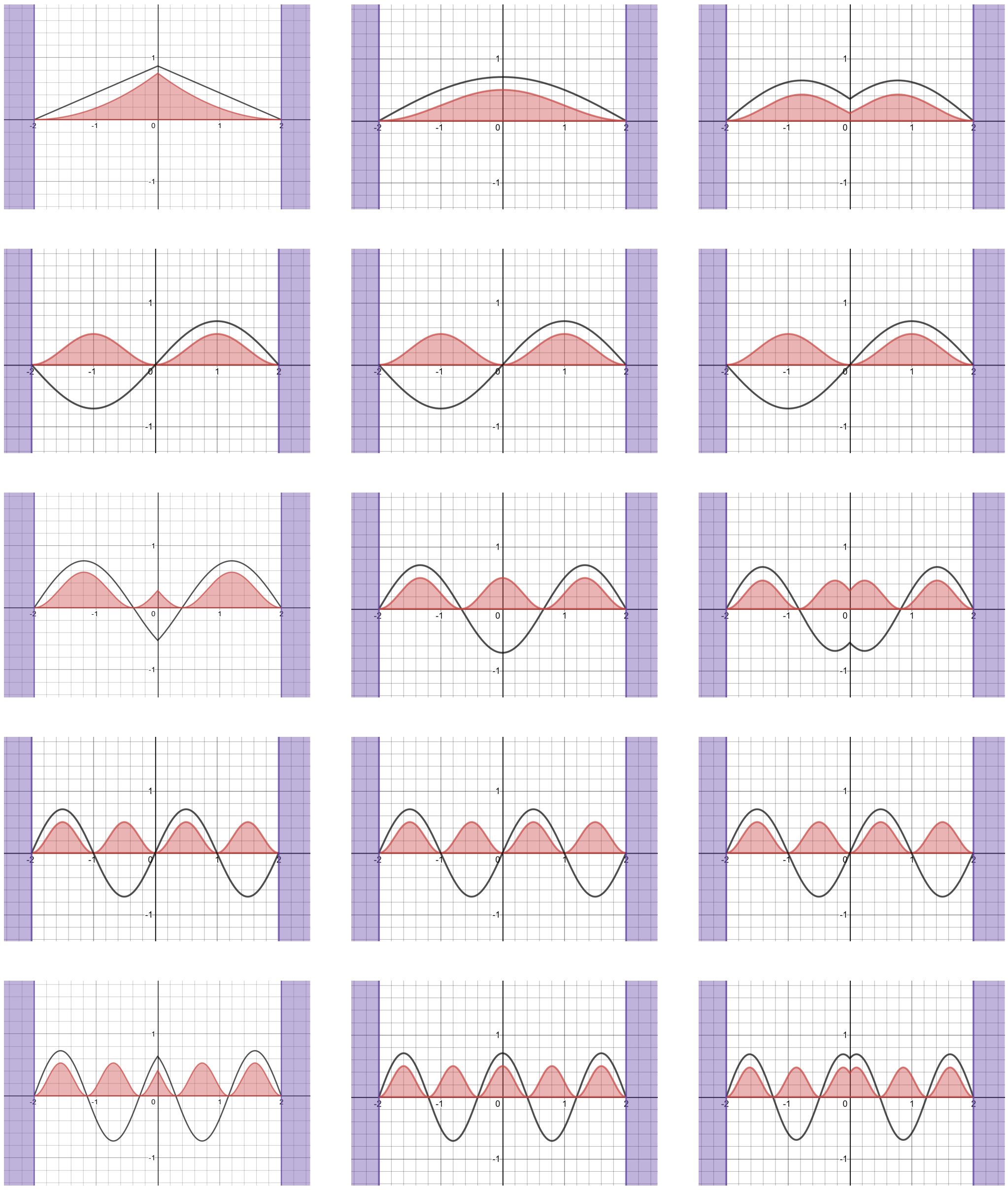
$$k = \begin{cases} k_{2n-1} = \dfrac{(2n-1)\pi}{L} + w \implies \psi(x) = \psi_{2n-1}(x) = \psi_{2n-1}(-x) \\ k_{2n} = \dfrac{2n\pi}{L} \qquad\qquad \implies \psi(x) = \psi_{2n}(x) \quad = -\psi_{2n}(-x), \end{cases}$$

ja potentiaalin raja-arvoina saadaan

$$\begin{cases} k_{2n-1} \overset{v\to-\infty}{\to} \dfrac{2(n-1)\pi}{L}, & \text{jossa} \quad w \overset{v\to-\infty}{\to} -\pi/L \\ k_{2n-1} \overset{v\to 0}{\to} \dfrac{(2n-1)\pi}{L}, & \text{jossa} \quad w \overset{v\to 0}{\to} 0 \\ k_{2n-1} \overset{v\to\infty}{\to} \dfrac{2n\pi}{L}, & \text{jossa} \quad w \overset{v\to\infty}{\to} \pi/L. \end{cases}$$



Kuva 1: Käyrien leikkauspisteet ja katkoviivalla merkityt kotangentin epäjatkuvuuskohdat ovat aaltoluvun k ratkaisut. Negatiiviselle potentiaalille on kolme eri ensimmäisen moodin tapausta.



Kuva 2: Musta käyrä on aaltofunktio $\psi(x)$ ja punainen alue kuvaa todennäköisyysjakaumaa $|\psi(x)|^2$. Vasemmalla potentiaali v on negatiivinen $(-\frac{2\hbar^2}{mL} < v < 0)$, keskellä nolla ja oikealla positiivinen.

4.2.1. Negatiivinen potentiaali $v < 0$ ja $E = 0$ tapaus

Potentiaali voi olla myös negatiivinen. Näin ollen käyrä f_1 kääntyy k-akselin alapuolelle. Kuten kuvasta 1 huomaa; käyrä f_1 ei välttämättä leikkaa kotangenttikäyrää ollenkaan ennen ensimmäistä k_2n tapausta.

Oikealla potentiaalin valinnalla f_1 voi kuitenkin leikata mielivaltaisen lähellä k:n nollakohtaa kotangenttikäyrän. Energian nolla-arvolla on siis raja-arvo, joka on esitetty kuvassa 1 vasemmalla alhaalla.

Tarkastellaan $k \to 0$ raja-arvoa tarkemmin. Lineaarinen funktio on muotoa $\psi_{lin,L} = ax + b$ vasemmalla ja oikealla $\psi_{lin,R} = -ax + b$. Tiedetään, että laatikon reunoilla lineaarinen aaltofunktio on nolla, josta saadaan $\psi_{lin,R}(L/2) = -a \cdot \frac{L}{2} + b = 0 \implies b = \frac{aL}{2}$. Täsmällisesti lineaarinen funktio $\psi_{lin}(x)$ saadaan käyttämällä toistuvasti L'Hopitalin sääntöä raja-arvoon $k \to 0$ yhtälössä (11), sekä sinin potenssisarjaa (sama tulos saadaan myös normittamalla)

$$\psi_{2n-1}(x) = \begin{cases} \psi_L(x) = \sqrt{\dfrac{2k}{kL - \sin(kL)}} \sin\left(k\left(x + \dfrac{L}{2}\right)\right) \\ \psi_R(x) = -\sqrt{\dfrac{2k}{kL - \sin(kL)}} \sin\left(k\left(x - \dfrac{L}{2}\right)\right) \end{cases}$$

$$\overset{k\to 0}{\to} \begin{cases} \psi_{lin,L}(x) = \sqrt{\dfrac{12}{L^3}}x + \sqrt{\dfrac{3}{L}} \\ \psi_{lin,R}(x) = -\sqrt{\dfrac{12}{L^3}}x + \sqrt{\dfrac{3}{L}}, \end{cases}$$

Eli $a = \sqrt{\frac{12}{L^3}}$. Aaltofunktion derivaatat ovat (huom. $H(x)$ on Heavisiden funktio)

$$\psi'_{lin}(x) = -2a\left(H(x) - \frac{1}{2}\right),$$
$$\psi''_{lin}(x) = -2a\delta(x).$$

Sijoittamalla aaltoyhtälöt $\psi_{lin}(x) = \pm ax + \frac{aL}{2}$ Schrödingerin yhtälöön (1), saamme (huom. $E \overset{k\to 0}{\to} 0$)

$$\frac{\hbar^2}{m}a\delta(x) + v\delta(x)\left(\pm ax + \frac{aL}{2}\right) = 0$$
$$\left(\frac{\hbar^2}{m} \pm vx + v\frac{L}{2}\right)\delta(x) = 0$$

Deltafunktio on aina nolla paitsi, kun $x = 0$. Koska yhtälön tulee päteä myös origossa $x = 0$, tulee olla

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{m} + v\frac{L}{2} &= 0 \\ v &= -\frac{2\hbar^2}{mL}. \end{aligned}$$

Eli nollaenergian moodi on tosiaan olemassa negatiivisen potentiaalin $v = -\frac{2\hbar^2}{mL}$ rajalla. Sama ehto potentiaalille saataisiin tarkastelemalla ehtoa (5) raja-arvolla $k \to 0$. Kuvassa 1 on esitetty tämä raja-arvo, sekä käyrien käyttäytyminen molemmilla puolella kyseistä arvoa.

Kuvassa 2 on tarkasteltu, miltä $v > 0$, $-\frac{2\hbar^2}{mL} < v < 0$ aaltofunktioiden moodit ja niiden todennäköisyysjakaumat näyttävät verrattuna hiukkanen laatikossa $v = 0$ moodeihin.

5. Negatiivinen energia $E < 0$

Tarkastellaan vielä negatiivisen energian ratkaisua $E = -\epsilon < 0$. Tällöin

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar^2} = i\frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar^2} \equiv i\kappa.$$

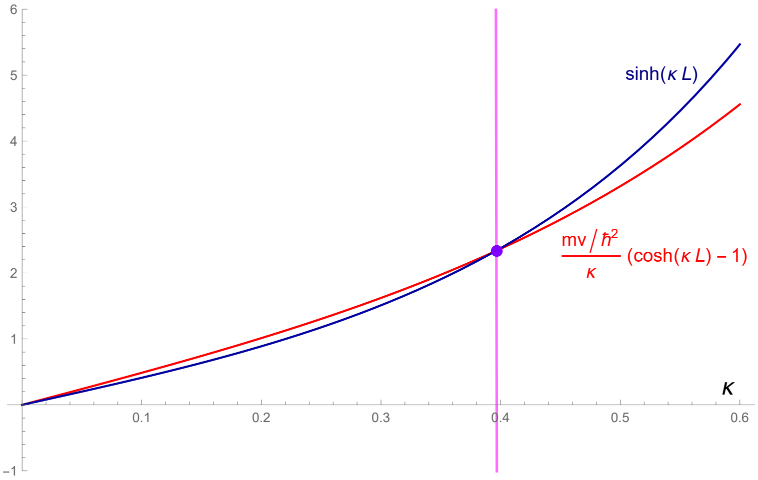
Parilliseksi aaltofunktioksi saadaan nyt yhtälöstä (11) valitsemalla jälleen reaalinen kerroin

$$\psi_{2n-1}(x) = \begin{cases} \psi_L(x) = \sqrt{\dfrac{2\kappa}{\sinh(\kappa L) - \kappa L}} \sinh\left(\kappa\left(x + \dfrac{L}{2}\right)\right) \\ \psi_R(x) = -\sqrt{\dfrac{2\kappa}{\sinh(\kappa L) - \kappa L}} \sinh\left(\kappa\left(x - \dfrac{L}{2}\right)\right). \end{cases} \tag{13}$$

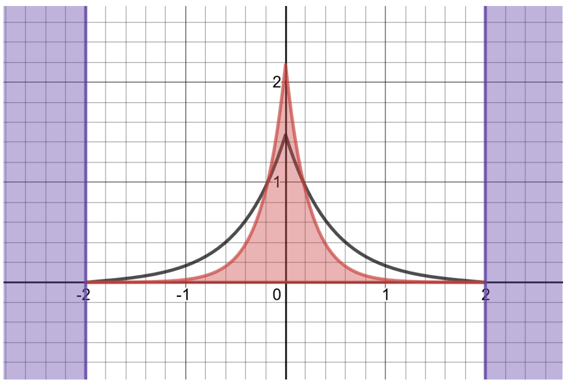
Ehdosta (5) saadaan

$$\frac{mv/\hbar^2}{\kappa}\left(\cosh(\kappa L) - 1\right) = \sinh(\kappa L). \tag{14}$$

Jos $v < -\frac{2\hbar^2}{mL}$, niin hyperboliset käyrät (14) leikkaavat positiivisella κ:n arvolla kerran. Tällöin negatiivisella energialla on yksi moodi (ks. kuva 3). Kuvassa 4 on esitetty aaltofunktio tälle moodille. Tapauksessa $v \geq -\frac{2\hbar^2}{mL}$ negatiiviselle energialle ei ole yhtään ratkaisua.



Kuva 3: Hyperoliset käyrät leikkaavat kerran, jos $v < -\frac{2\hbar^2}{mL} < 0$.



Kuva 4: Negatiivisen energian aaltofunktio $\psi(x)$
ja todennäköisyysjakauma $|\psi(x)|^2$, kun $v < -\frac{2\hbar^2}{mL} < 0$.

6. Yhteenveto lopputuloksista

Positiivisen energian tapaukselle saimme ratkaisuiksi kaksi vuorottelevaa moodia. Ensimmäinen on parillinen aaltofunktio

$$\psi_{2n-1}(x) = \begin{cases} \psi_L(x) = \sqrt{\dfrac{2k}{kL - \sin(kL)}} \sin\left(k\left(x + \dfrac{L}{2}\right)\right), & -\dfrac{L}{2} \leq x \leq 0 \\ \psi_R(x) = -\sqrt{\dfrac{2k}{kL - \sin(kL)}} \sin\left(k\left(x - \dfrac{L}{2}\right)\right), & 0 \leq x \leq \dfrac{L}{2}, \end{cases}$$

missä aaltoluku $k = k_{2n-1} = \frac{(2n-1)\pi}{L} + w$ ja w on potentiaalin aiheuttama pieni termi (ratkaisut yhtälöstä (7)). Joka toiset moodit ovat taas parittomia funktioita, joihin potentiaali ei vaikuta

$$\psi_{2n}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(k\left(x + \frac{L}{2}\right)\right), \qquad -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}.$$

Tässä $k = k_{2n} = \frac{2n\pi}{L}$.

Positiivinen potentiaali aiheuttaa origon kohdalla aaltofunktiossa pienen laskun ja negatiivinen potentiaali pienen nousun, kuten kuvasta 1 huomaa. Jos kuitenkin $v < -\frac{2\hbar^2}{mL}$, ensimmäistä moodia ei ole ollenkaan. Potentiaalin $v = -\frac{2\hbar^2}{mL}$ arvolla saadaan ensimmäiseksi moodiksi nollaenergian ratkaisu, joka on lineaarinen

$$\psi_{2n-1}(x) \overset{E=0}{=} \begin{cases} \psi_{lin,L}(x) = \sqrt{\dfrac{12}{L^3}}x + \sqrt{\dfrac{3}{L}} \\ \psi_{lin,R}(x) = -\sqrt{\dfrac{12}{L^3}}x + \sqrt{\dfrac{3}{L}}. \end{cases}$$

Negatiivinen energia $E < 0$ saa ratkaisun, jos $v < -\frac{2\hbar^2}{mL}$. Aaltoluvusta tulee imaginaarinen, jolloin merkitään $k = i\kappa$. Saadaan vain yksi moodi (huom. ehto (14)) ja aaltofunktiosta tulee hyperbolinen funktio

$$\psi_{2n-1}(x) \overset{E<0}{=} \begin{cases} \psi_L(x) = \sqrt{\dfrac{2\kappa}{\sinh(\kappa L) - \kappa L}} \sinh\left(\kappa\left(x + \dfrac{L}{2}\right)\right) \\ \psi_R(x) = -\sqrt{\dfrac{2\kappa}{\sinh(\kappa L) - \kappa L}} \sinh\left(\kappa\left(x - \dfrac{L}{2}\right)\right). \end{cases}$$