ЛЕКЦИЯ 4

ЧАСТИЦА В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Для описания эволюции системы, мы используем уравнение Шредингера

$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U)\psi = E\psi.$$

При решении такого уравнения получаются собственные значения оператора Гамильтона.

Мы рассмотрели проникновение частицы через барьер конечной ширины и научились решать уравнение Шредингера.

Мы выяснили, что волновая функция должна обладать следующими свойствами:

1. конечна — $W = |\psi|^2$, т. е. она должна убывать на бесконечности;

2. непрерывна — $\psi(a-\delta) = \psi(a+\delta)$;

3. гладкая — $\psi'(a-\delta) = \psi(a+\delta)$.

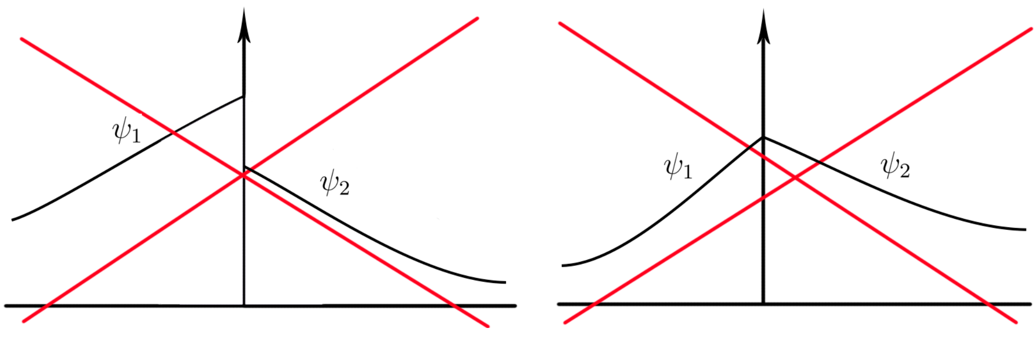

Рис. 4.1

Случаи, изображённые на рис. 4.1, невозможны.

Теперь мы можем рассмотреть частицу массы m в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (см. рис. 4.2).

Запишем уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2\psi}{sx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0,$$

$$U = 0 \quad \text{при } 0 < x < a,$$

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0,$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

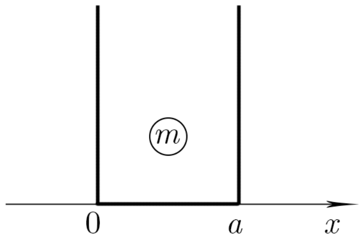

Рис. 4.2

Хочется сказать, что это бегущие волны налево и направо, но на самом деле это же стационарное состояние, ничего никуда не бежит. k — это не волновое число.

Теперь сделаем сшивку:

$$\psi|_{x=0,a} = 0 \Rightarrow \psi = A\sin(kx) + \underbrace{B\cos(kx)}_{0},$$

$$\psi = C\sin(kx).$$

В силу граничного условия получается:

$$ka = n\pi(k = \frac{2\pi}{\lambda},$$

$$2a = n\lambda.$$

Из-за граничных условий получается квантование.

Можно представить, что имеется струна, и рассмотреть различные моды колебаний (см. рис. 4.3). В зависимости от граничных условий получается различный результат.

Но получается, что:

$$\psi(x = 0 - \delta) \neq \psi(x = 0 + \delta)$$

— это следствие того, что на самом деле не бывает бесконечно высоких стенок ямы. На самом деле стенки конечны и волновая функция экспоненциально затухает (см. рис. 4.4). Мы же определяем бесконечные стенки, как предел конечных.

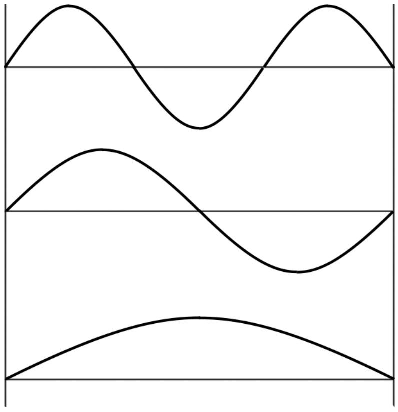

Рис. 4.3

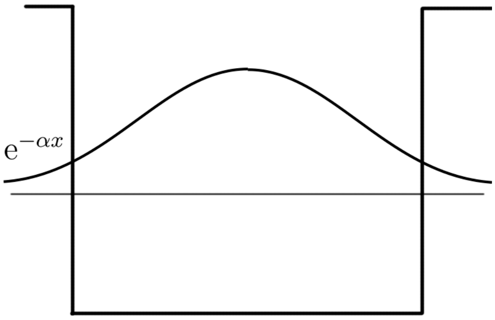

Рис. 4.4

Но еще нужна нормировка:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1,$$

$$C^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} (\sin^2 kx dx) = C^2 \int\limits_{0}^{a} (1 - \cos^2 kx) dx = \frac{C^2}{2k} ka = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Тогда волновая функция:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(kx)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

Частица в яме может занимать фиксированные уровни энергии, которые пропорциональны n^2.

Чем больше число n, тем больше осцилляций ψ^2. Количество нулей — это $n - 1$. Это называется осцилляционная теорема. На рис. 4.5 изображены графики функций $|\psi|^2$ при различных n.

Если взять очень большое n, то число осцилляций большое (см. рис. 4.6), а значит распределение вероятности нахождения частицы практически одинаковые для разных положений. Переход к большим квантовым числам означает переход от квантовой физики к классической.

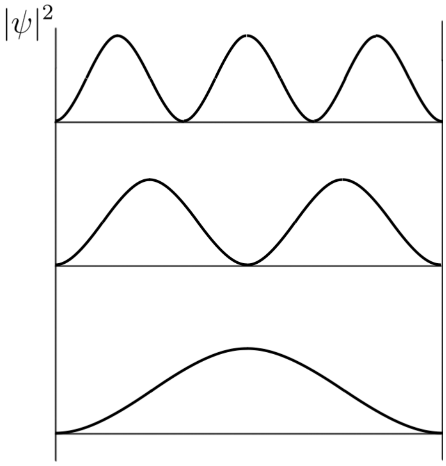

Рис. 4.5

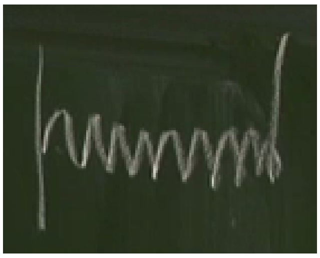

Рис. 4.6

1. Важно понимать, что в стационарном состоянии k — это не волновое число. Состояние не зависит от времени. Если бы было движение туда-обратно, то это значит, что система обладала бы фиксированным импульсом, но в силу соотношения неопределенностей это не так.

2. **Дискретность энергии** — это прямое следствие граничных условий, того, что на стенках волновая функция равна нулю.

3. **Спектр возбуждения** — то есть какие энергии возможны у частицы. $E_n \propto n^2$.

4. $E(n=1) \neq 0 \rightarrow$ нулевая энергия. Она возникает из соотношения неопределенностей:

$$\Delta x \sim a$$

,

$$\Delta p_x \sim \hbar/a, \qquad \Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

Здесь важно понимать, что это средняя энергия.

5. Принцип соответствия Бора. При $n \to \infty \to$ Классическое описание.

Классический период:

$$T_{\text{кл}} = \frac{2a}{v} \Rightarrow \omega_{\text{кл}} = \frac{2\pi}{T} = \frac{\pi v}{a}$$

Переход из $(n+1)$-ого состояния в n-ое состояние связан с поглощением (испусканием) кванта: $\Delta E_n = \hbar\omega$

$$\hbar\omega = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n^2+2n+1-n^2) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n+1) = \frac{\pi\hbar}{a}\sqrt{\frac{2E_n}{m}}(1+\frac{1}{2n}),$$

$$n\to\infty \qquad \Rightarrow \qquad \hbar\omega = \frac{\pi\hbar v}{a}.$$

То есть мы получили решение одинаковое и для классики и для квантовой физики.

Посмотрим, что будет, если поле сферически симметричен, т. е. $U = U(r)$.

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + U,$$

$$\Delta_r = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{[}h]\frac{d}{dr}.$$

Замена переменных:

$$\psi = \frac{\xi}{[}h],$$

$$\frac{d\psi}{dr} = \frac{1}{[}h]\frac{d\xi}{dr} - \frac{\xi}{r^3},$$

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = \frac{1}{r}\frac{d^2\xi}{dr^2} \underbrace{-\frac{1}{r^2}\frac{d\xi}{dr} - \frac{1}{r^2}\frac{d\xi}{dr}}_{-\frac{1}{r^2}\frac{d\xi}{dr}} + \frac{2\xi}{r^3},$$

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{d^2\xi}{dr^2} - \frac{2}{r^2}\frac{d\xi}{dr} + \frac{2\xi}{r^3} + \frac{2}{r^2}\frac{d\xi}{dr} - \frac{2\xi}{r^2} = \frac{1}{r}\frac{d^2\xi}{dr^2},$$

$$\frac{1}{[}h]\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\xi}{dr^2} + (E-U)*\frac{\xi}{[}h] = 0,$$

$$\xi(0) = 0.$$

Получается, что движение в трехмерном сферически симметричном поле аналогично движению частицы в одномерной яме (см. рис. 4.7).

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\xi}{dr^2} + (E-U)\xi = 0.$$

$$\frac{d\psi^2}{dx^2} + \frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\psi = 0.$$

Рассмотрим решение.

В первой области $U = 0$; во второй — $U = U_0$ (см. рис. 4.8)

$$\psi_1 = A\sin k_1 x, \qquad k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

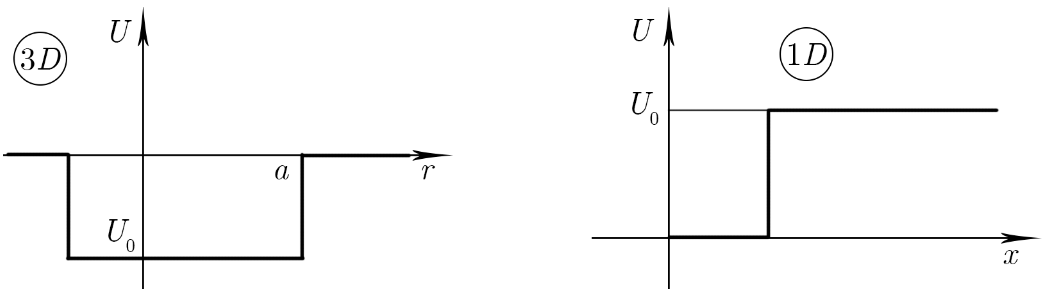

Рис. 4.7

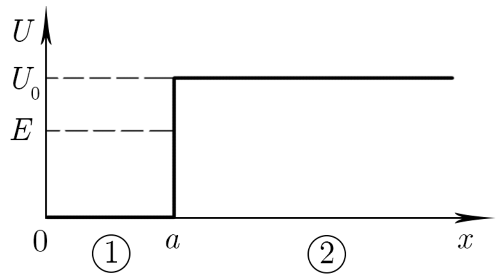

Рис. 4.8

$$\psi_2 = Be^{-k_2 x}$$
$$k_2^2 = \frac{2m(U-E)}{\hbar^2}.$$

Сделаем сшивку:

$$\left.\begin{aligned} \psi_1(a) = \psi_2(a), \\ \psi_1'(a) = \psi_2'(a). \end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned} A\sin k_1 a = Be^{-k_2 a}, \\ k_1 A\cos k_1 a = -k_2 Be^{-k_2 a}. \end{aligned}\right\}$$

$$\operatorname{tg} k_1 a = -\frac{k_1}{k_2} \Rightarrow k_1 a > \frac{\pi}{2}.$$

Для того, чтобы существовало стационарное состояние,должно выполняться такое условие:

$$k_1^2 a^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} a^2 \geqslant \frac{\pi^2}{4},$$

$$U_0 > E \geqslant \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \quad \text{— мощность ямы.}$$

Получается, несмотря на существование ямы, совсем необязательно, что частица будет там находиться. Если выполняется условие

$$U_0 a^2 \geqslant \frac{\pi^2\hbar^2}{8m},$$

то в яме есть стационарный уровень для частицы.

То есть яма должна быть достаточно глубокой и широкой (см. рис. 4.9).

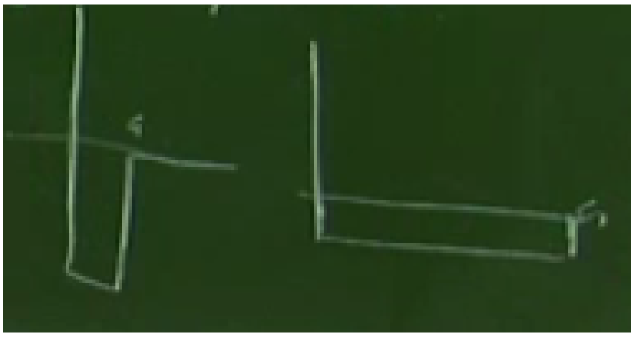

Рис. 4.9

1. Одномерный случай

Пусть имеется потенциальная яма, изображённая на рис. 4.10, а энергия частицы совсем немного меньше нуля, связь очень слабая:

$$E = -\varepsilon_0$$

Сразу обозначим условие для ямы:

$$\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \ll 1$$

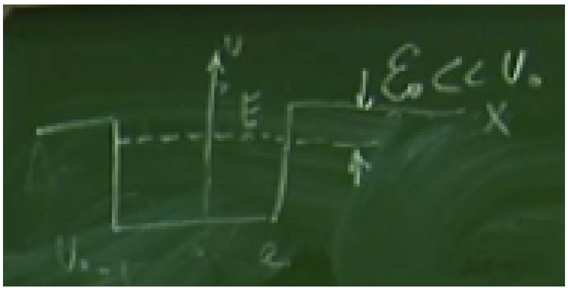

Рис. 4.10

В первой области может быть только так, потому что вне ямы — ноль:

$$\psi_1 = A\cos kx, \qquad k^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2},$$

$$E \ll U_0,$$

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi.$$

— здесь пренебрежем E.

$$k^2a^2 = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \ll 1$$

Это означает, что волновая функция почти постоянна:

$$\psi \approx \text{const}(-a < x < a).$$

Теперь во второй области:

$$\psi_2'' - \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_0)\psi_2 = 0.$$

Понятно, что вне ямы волновая функция должна экспоненциально затухать, поскольку барьер конечный:

$$\psi_2 = e^{-\kappa x}, \quad \text{где } \kappa^2 = \frac{2m\varepsilon_0}{\hbar^2}$$

На рис. 4.11 в области внутри ямы волновая функция практически постоянна, а за

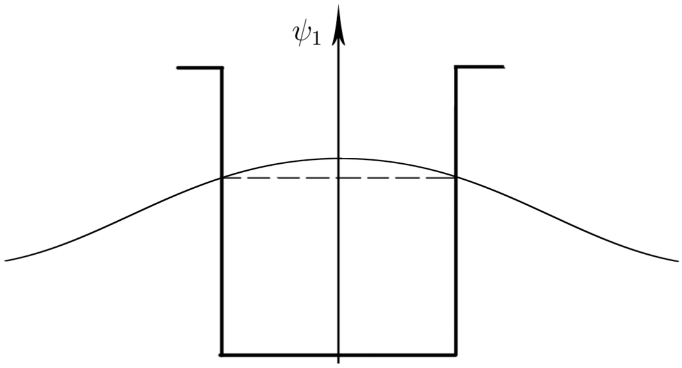

Рис. 4.11

стенками экспоненциально затухает.

Теперь делаем сшивку:

$$\left.\begin{aligned} A\cos ka &= Be^{-\kappa a}, \\ -kA\cos ka &= -\kappa Be^{-\kappa a}. \end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned} \cos ka &\simeq 1, \\ \sin ka &\simeq ka. \end{aligned}\right\}$$

$$k^2 a = \kappa,$$

$$\frac{2m}{\hbar^2} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

$$\varepsilon_0 = \frac{2mU_0^2 a^2}{\hbar^2} = \left(\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}\right) U_0 \ll U_0.$$

Получается, что в одномерной потенциальной яме с конечными стенками, существует энергетический уровень связанного состояния. В двухмерном случае также. То есть если движение двумерное или одномерное, то оно квантуется и существуют стационарные уровни энергии.