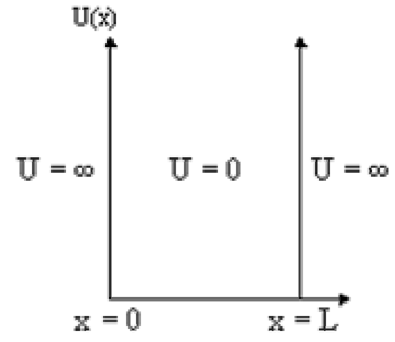
4. Потенциальная яма



Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме бесконечной глубины (рис. 1). Потенциальная энергия U удовлетворяет следующим граничным условиям

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \quad x > L \\ 0, & 0 \le x \le L \end{cases} \qquad (1)$$

Рис.1

При таких граничных условиях частица находится внутри потенциальной ямы $0 \le x \le L$ и не может выйти за ее пределы, т.е.

$$\Psi(x) = 0, \quad x < 0, \; x > L \qquad (2)$$

Условие нормировки

$$\int_0^L \psi^* \psi dx = 1. \qquad (3)$$

Используя стационарное уравнение Шредингера для случая U=0, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \qquad (4)$$

или

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + a^2\psi = 0 \qquad (5)$$

где

$$a^2 = 2mE/\hbar^2. \qquad (6)$$

Уравнение (5) описывает положение частицы внутри потенциальной ямы. Оно имеет решение

$$\Psi(x) = Ae^{+iax} + Be^{-iax}, \qquad (7)$$

представляющее собой суперпозицию двух волн, распространяющихся в противоположных направления вдоль оси x.

Постоянные A и B находятся из граничных условий (2)

$$A + B = 0 \text{ при } x = 0 \text{ т.е. } B = -A. \qquad (8)$$

Следовательно

$$\Psi(x) = A(e^{+iax} - e^{-iax}) = 2iA \sin ax. \qquad (9)$$

Условие $\Psi(L) = 0$ дает

$$2ia \sin aL = 0. \qquad (10)$$

Отсюда

$$aL = n\pi, \text{ следовательно, и } a = n\pi/L, \text{ где } n = 1, 2, 3,... \qquad (11)$$

Подставляя полученное значение a в соотношение (6), получим соотношение для энергии частицы в бесконечной прямоугольной яме

$$E_n = \hbar^2 a^2/2m = n^2\pi^2\hbar^2/2mL^2, \text{ где } n = 1, 2, 3,... \qquad (12)$$

Волновые функции (9) имеют вид

$$\Psi_n(x) = 2iA \sin(n\pi x/L); \qquad \Psi_n^*(x) = -2iA \sin(n\pi x/L). \qquad (13)$$

Константу A можно получить из условия

$$\int_0^L \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = \int_0^L 4A^2 \sin(\frac{\pi n}{L}x)dx =$$

$$= 2A^2\left[x - \frac{L}{2\pi n}\sin(\frac{\pi n}{L}x)\right]\Bigg|_0^L = 2A^2L = 1.$$

Нормированные волновые функции и собственные значения энергии для различных состояний приведены в табл.1.

Таблица 1.

n	Собственные функции Ψ	Плотности вероятности $\Psi\,\Psi^*$	Собственные значения энергии
1	$i(2/L)^{1/2}\sin(\pi x/L)$	$(2/L)\sin^2(\pi x/L)$	$\pi^2\hbar^2/2mL^2$
2	$i(2/L)^{1/2}\sin(2\pi x/L)$	$(2/L)\sin^2(2\pi x/L)$	$4\pi^2\hbar^2/2mL^2$
3	$i(2/L)^{1/2}\sin(3\pi x/L)$	$(2/L)\sin^2(3\pi x/L)$	$9\pi^2\hbar^2/2mL^2$
n	$i(2/L)^{1/2}\sin(n\pi x/L)$	$(2/L)\sin^2(n\pi x/L)$	$n^2\pi^2\hbar^2/2mL^2$

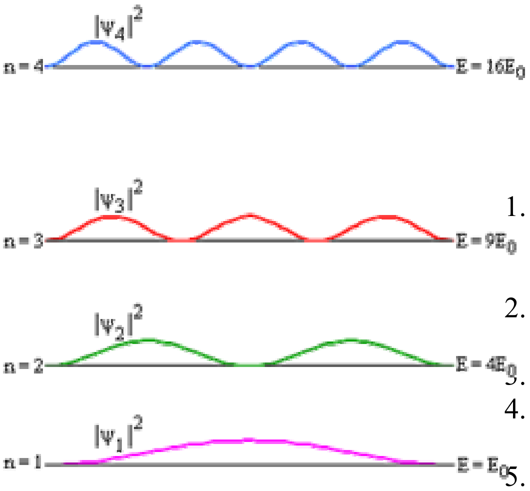


Рис.2

На рис. 2 показаны плотности вероятности обнаружения частицы в различных квантовых состояниях. Таким образом, для бесконечной одномерной потенциальной ямы имеем следующее.

1. Энергия частицы принимает определенные дискретные значения. Обычно говорят, что частица находится в определенных энергетических состояниях.
2. Частица может находиться в каком-то одном из множества энергетических состояний.
3. Частица не может иметь энергию равную нулю.
4. Каждому значению энергии E_n соответствует собственная волновая функция Ψ_n, описывающая данное состояние.
5. Для собственной функции $\Psi_1(x)$ вероятность обнаружить частицу в точке x = L/2 максимальна. Для состояния $\Psi_2(x)$ вероятность обнаружения частицы в этой точке равна 0.

В случае гармонического осциллятора потенциальная энергия U имеет вид

$$U = kx^2/2. \qquad (14)$$

Стационарное уравнение Шредингера для гармонического осциллятора имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{kx^2}{2}\psi = E\psi. \qquad (15)$$

Также как и в случае прямоугольной потенциальной ямы наблюдается дискретный спектр энергий состояний

$$E_n = (n + 1/2)h\nu = (n + 1/2)\hbar\omega, \text{ где } n = 0, 1, 2,..., \qquad (16)$$

где $\omega = (k/m)^{1/2}$. Однако в отличие от прямоугольной ямы, спектр энергий эквидистантный. Каждому энергетическому состоянию соответствует волновая функция, описываемая полиномом Эрмита H_n.

$$\Psi_n = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{1/2} H_n(ax)e^{-a2x2/2}, \qquad (17)$$

$$H_n = (-1)^n e^{\zeta^2}\frac{d^n}{d\zeta^n}(e^{-\zeta^2}), \qquad (18)$$

где $a^2 = 4\pi^2 m\nu/h$, $\zeta = ax$. В табл.2 приведены собственные значения энергии E_n и нормированные собственные функции гармонического осциллятора Ψ_n

Таблица 2

n	Собственные значения энергии E_n	Нормированные собственные функции Ψ_n
0	$E_0 = h\nu/2$	$\psi_0 = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-a2x2/2}$
1	$E_0 = 3h\nu/2$	$\psi_1 = \left(\frac{a}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} 2axe^{-a2x2/2}$
2	$E_0 = 5h\nu/2$	$\psi_2 = \left(\frac{a}{8\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} (4a^2x^2 - 2)e^{-a2x2/2}$
3	$E_0 = 7h\nu/2$	$\psi_3 = \left(\frac{a}{48\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} (8a^3x^3 - 12ax)e^{-a2x2/2}$
n	$E_n = (n + 1/2)h\nu$	$\psi_n = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} H_n(ax)e^{-a2x2/2}$

На рис.3 показана плотность распределения волновой функции гармонического осциллятора.

Классический осциллятор не может выйти за пределы значений x, в которых потенциальная энергия равна энергии E_n для данного значения квантового числа n. В квантовом случае ситуация другая - существует отличная от нуля вероятность обнаружить частицу за пределами потенциальной ямы, т.е. частица может проникать на небольшое расстояние за стенку барьера.