Добро пожаловать
в «Физику атома
и атомных явлений!»

Тема 7 Простейшие одномерные задачи квантовой механики: частица в потенциальной яме

1. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме: постановка задачи

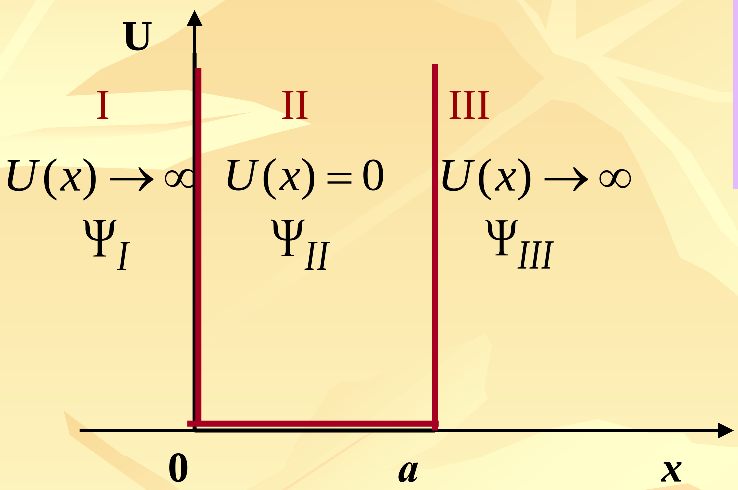
2. Решение уравнения Шрёдингера для частицы, движущейся в бесконечно глубокой потенциальной яме

3. Анализ решения уравнения Шрёдингера для частицы в потенциальной яме конечной глубины

4. Собственная функция и собственные значения энергии для гармонического осциллятора

1.Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме: постановка задачи

Потенциальная яма – ограниченная область пространства, в которой потенциальная энергия частицы меньше, чем за ее пределами



Одномерная прямоугольная потенциальная яма

***Алгоритм решения*:**

1. Записать и решить Ст УШ для каждой области пространства, где $U(x)=const$

2. Потребовать конечности и непрерывности ВФ

$$\Psi_I(0)=\Psi_{II}(0) \qquad \Psi_{II}(a)=\Psi_{III}(a)$$

3. Потребовать непрерывности $\frac{d\Psi}{dx}$

$$\left.\frac{d\Psi_I}{dx}\right/_{x=0}=\left.\frac{d\Psi_{II}}{dx}\right/_{x=0} \qquad \left.\frac{d\Psi_{II}}{dx}\right/_{x=a}=\left.\frac{d\Psi_{III}}{dx}\right/_{x=a}$$

4. Из условий **2** и **3** определить E_n

5. Из условия нормировки определить конкретный вид $\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x)|^2dx=1$ $\rightarrow$ $\Psi(x)$

2. Решение уравнения Шрёдингера для частицы, движущейся в бесконечно глубокой потенциальной яме

Стационарное УШ

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+U(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r})$$

Одномерное стационарное УШ

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\Psi}{dx^2}+U\cdot\Psi=E\cdot\Psi}$$

$$\Psi(x)=\Psi$$

Пункт 1 алгоритма

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

Области I и III:

$$\boxed{\frac{\frac{d^2\Psi}{dx^2}}{\Psi}=\frac{2m(U-E)}{\hbar^2}}$$

$$\boxed{\Psi_I=\Psi_{III}=0}$$

Область II:

$$\boxed{\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_{II}=0}$$

$$\Psi_{II} = \Psi$$

$$\boxed{\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0}$$

$$\boxed{\kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\boxed{\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \kappa^2\Psi = 0} \xrightarrow{\text{решение}} \boxed{\Psi(x) = A\sin(\kappa x) + B\cos(\kappa x)}$$

Пункт 2 алгоритма

Непрерывность $\Psi(x)$

$$\Psi(0) = 0$$

$$\boxed{\Psi(0) = A\sin(\kappa \cdot 0) + B\cos(\kappa \cdot 0) = 0}$$

При B=0

$$\boxed{\Psi(x) = A\sin(\kappa x)}$$

$$\Psi(a) = 0$$

$$\boxed{\Psi(a) = A\sin(\kappa a) = 0}$$

При $\kappa a = n\pi$

$$\boxed{\kappa_n = \frac{n\pi}{a}}$$

$$\boxed{\Psi_n = A\sin\frac{n\pi}{a}x}$$

Пункт 4 алгоритма

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

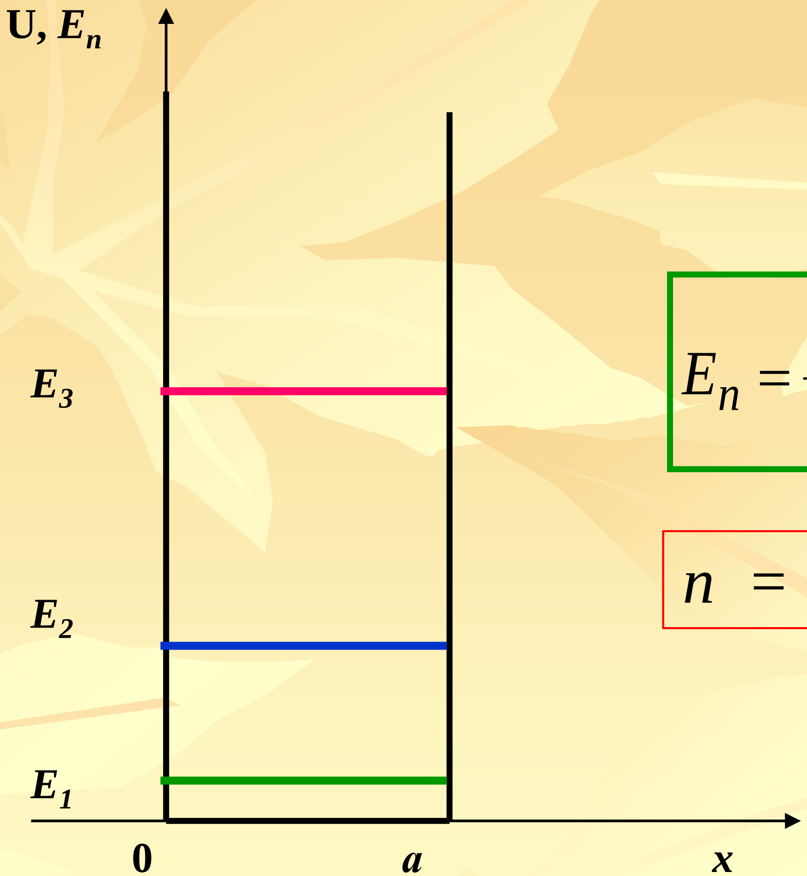
- **формула квантования полной энергии**

Пункт 4 алгоритма

$$\boxed{\int_0^a A^2\sin^2\kappa x\,dx = 1} \rightarrow \boxed{A = \sqrt{\frac{2}{a}}}$$

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

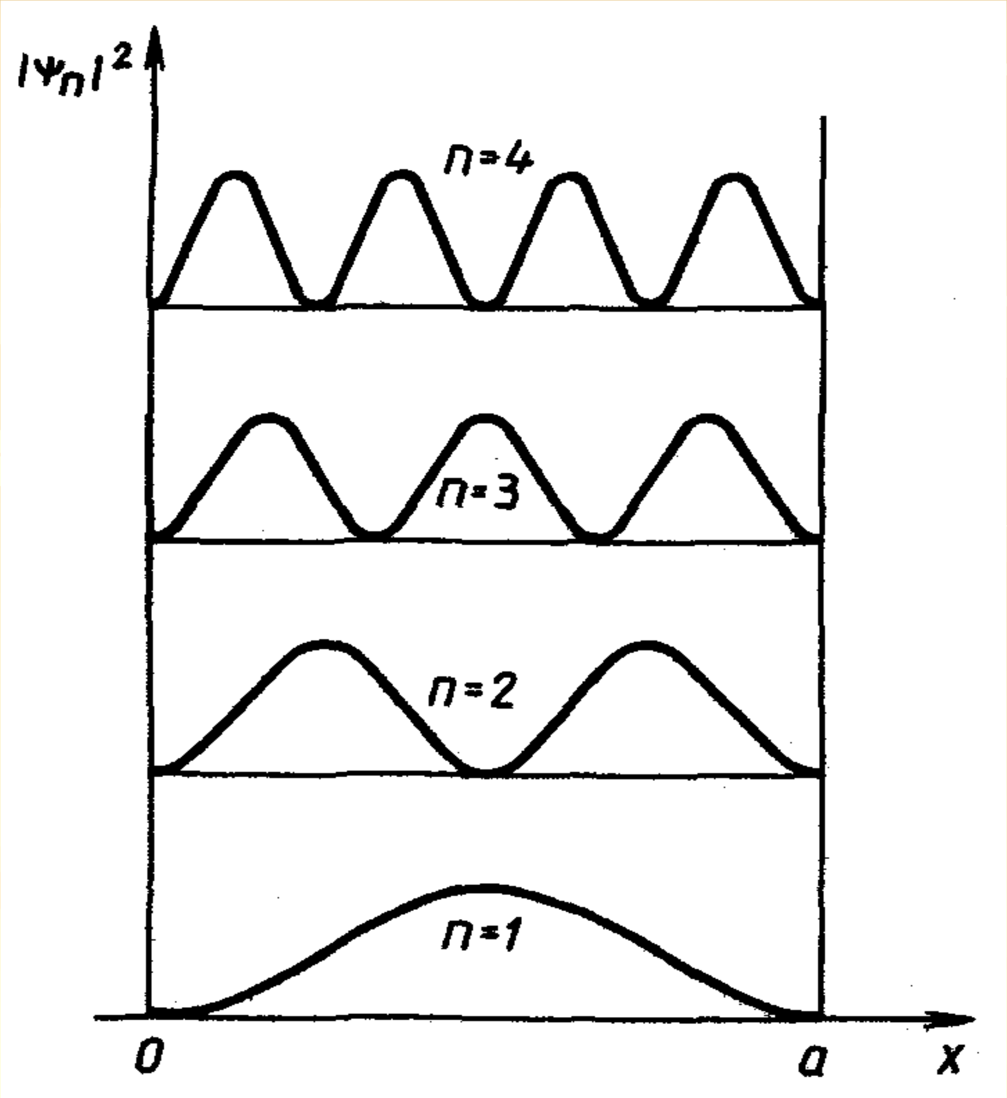
-функция состояния



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

$n = 1, 2, 3, \ldots$

Взаимное расположение энергетических уровней микрочастицы, локализованной внутри бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы



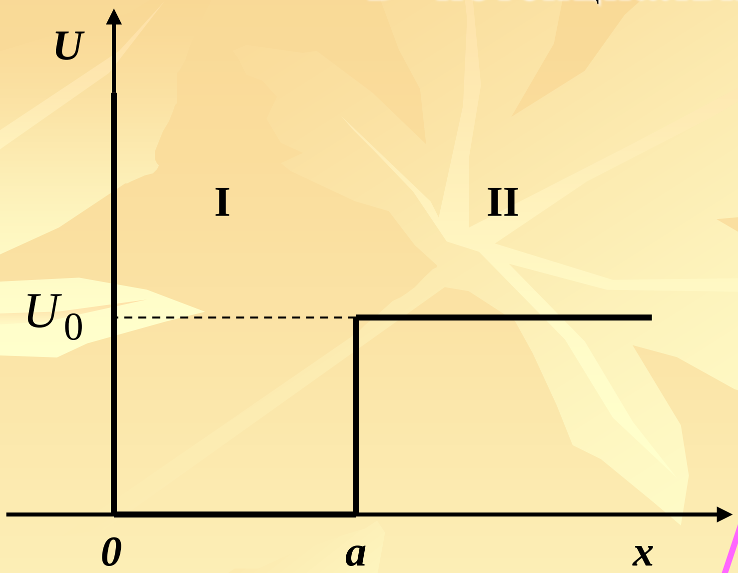
$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$|\Psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a}$$

Распределение плотности вероятности для различных состояний микрочастицы, локализованной в бесконечно глубокой потенциальной яме

3. Анализ решения уравнения Шрёдингера для частицы в потенциальной яме конечной глубины



$$\frac{d^2\Psi_I}{dx^2} + \kappa_1^2\Psi_I = 0$$

$$\kappa_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\Psi_{II} = 0$$

$$\boxed{E > U_0}$$

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + \kappa_2^2\Psi_{II} = 0$$

$$\kappa_2^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} > 0$$

$$\Psi_I(x) = A_1\sin(\kappa_1 x) + B_1\cos(\kappa_1 x)$$

$$\Psi_{II}(x) = A_2\sin[\kappa_2(x-a)] + B_2\cos[\kappa_2(x-a)]$$

$$\Psi(0) = 0 \rightarrow B_1 = 0$$

$$\Psi_I(a) = \Psi_{II}(a)$$
$$\Psi'_I(a) = \Psi'_{II}(a)$$

$$A_2 = \frac{\kappa_1 A_1}{\kappa_2}\cos(\kappa_1 a);$$
$$B_2 = A_1\sin(\kappa_1 a).$$

Выполняется при **любых** значениях κ_1

движение инфинитно

E принимает непрерывный ряд значений

$\boxed{E < U_0}$

$\kappa_1^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$

$\dfrac{d^2\Psi_I}{dx^2} + \kappa_1^2\Psi_I = 0$ → $\Psi_I = A_1 \sin(\kappa_1 x)$

$k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) > 0$

$\dfrac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - k^2\Psi_{II} = 0$ → $\Psi_{II} = C_2 e^{-kx} + D_2 e^{kx}$

При $k > 0$ и $x \to \infty$ $e^{kx} \to \infty$ → $\boxed{D_2 = 0}$

$\Psi_I(a) = \Psi_{II}(a)$
$\Psi'_I(a) = \Psi'_{II}(a)$
→
$A_1 \sin(\kappa_1 a) = C_2 \exp(-ka)$
$A_1 \kappa_1 \cos(\kappa_1 a) = -kC_2 \exp(-ka)$
→ $\boxed{\kappa_1 \mathrm{ctg}(\kappa_1 a) = -k}$

$\kappa_1 a = y$

$$\sin(\kappa_1 a) = [1 + ctg^2(\kappa_1 a]^{-\frac{1}{2}} = [1 + (k/\kappa_1]^{-\frac{1}{2}} = \left[1 + \frac{U_0 - E}{E}\right]^{-\frac{1}{2}} = (E/U_0)^{1/2}$$

$\sqrt{E} = \hbar\kappa_1/\sqrt{2m}$

$$\boxed{\sin y = \pm y\hbar/\sqrt{2ma^2U_0}}$$

$\boxed{E < U_0}$

$$\kappa_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\Psi_I}{dx^2} + \kappa_1^2\Psi_I = 0 \rightarrow \Psi_I = A_1 \sin(\kappa_1 x)$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) > 0$$

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - k^2\Psi_{II} = 0 \rightarrow \Psi_{II} = C_2 e^{-kx} + D_2 e^{kx}$$

При $k > 0$ и $x \to \infty$ $e^{kx} \to \infty$ $\rightarrow$ $\boxed{D_2 = 0}$

$$\Psi_I(a) = \Psi_{II}(a)$$
$$\Psi'_I(a) = \Psi'_{II}(a)$$

$$\rightarrow \quad A_1 \sin(\kappa_1 a) = C_2 \exp(-ka)$$
$$A_1 \kappa_1 \cos(\kappa_1 a) = -kC_2 \exp(-ka)$$

$$\rightarrow \boxed{\kappa_1 \operatorname{ctg}(\kappa_1 a) = -k}$$

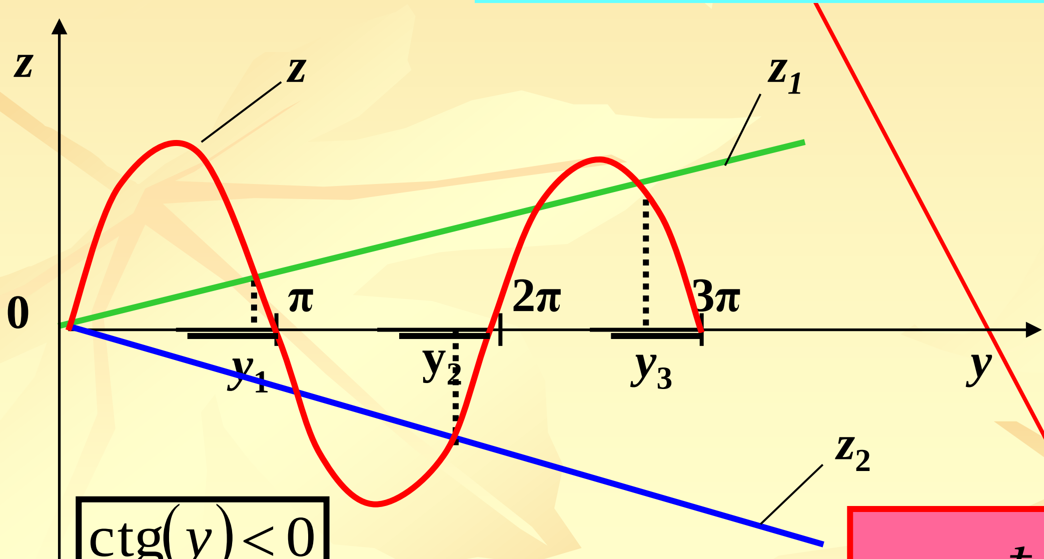
$$\kappa_1 a = y$$

$$\boxed{\sin y = \pm y\hbar / \sqrt{2ma^2U_0}}$$

$$\boxed{z_1 = y\hbar / \sqrt{2ma^2U_0}}$$

$$\boxed{z_2 = -y\hbar / \sqrt{2ma^2U_0}}$$

$$\boxed{z = \sin y}$$



$\boxed{\operatorname{ctg}(y) < 0}$

$\boxed{n = 1, 2, \ldots, n_{max}}$

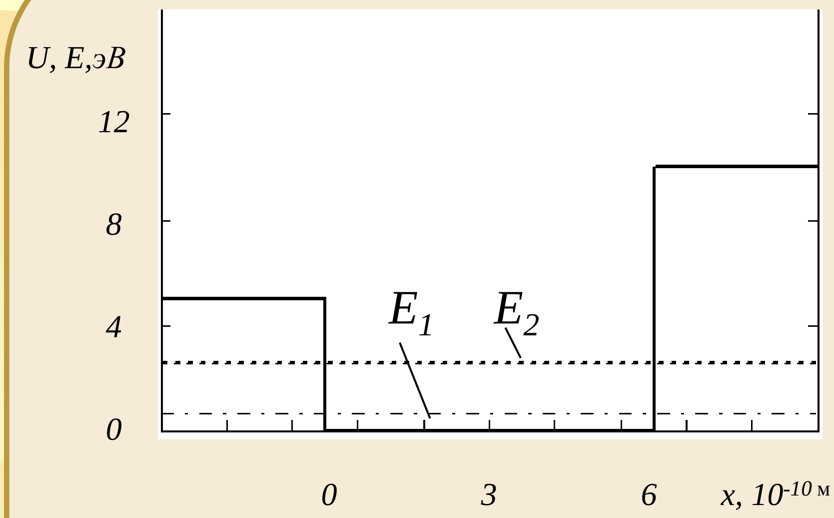
$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2(\kappa_n a)^2}{2ma^2}}$$

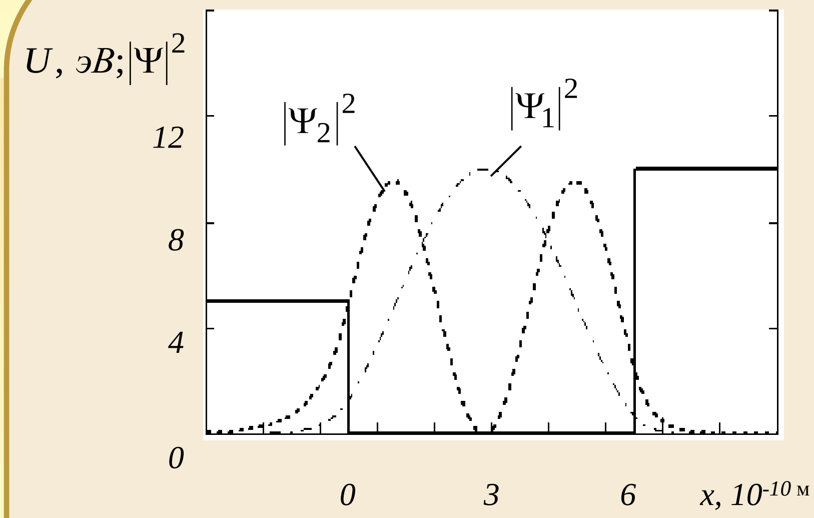
движение финитно

энергия квантована

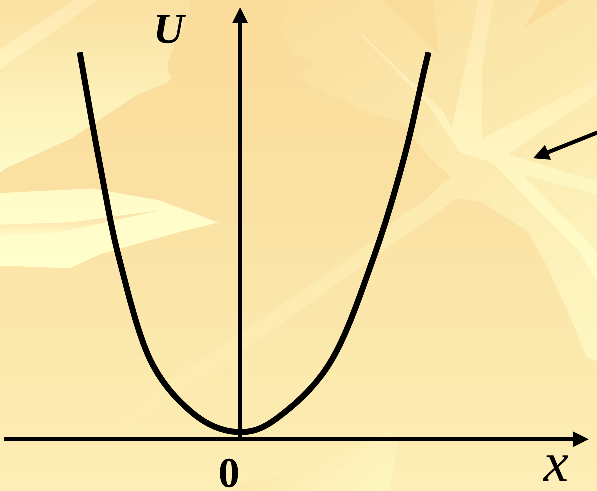
Например, для электрона, который движется в потенциальной яме, имеющей ширину $a = 0,6 \cdot 10^{-9}$ м и ограниченной потенциальными барьерами высотой $U_1 = 5$ эВ и $U_2 = 10$ эВ, имеется два решения:

$$E_1 = 0{,}67\,эВ, E_2 = 2{,}59\,эВ,$$





4. Собственная функция и собственные значения энергии для гармонического осциллятора



$$U = \frac{kx^2}{2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{kx^2}{2}\Psi = E\Psi$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$\xi = x\sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}}$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right)\Psi = 0$$

при $\xi^2 >> \lambda$

$$\Psi_{ac} = e^{\pm\xi^2/2}$$

Ψ ищем в виде

$$\Psi = \Psi_{ac} \cdot \upsilon(x) = e^{-\xi^2/2} \cdot \upsilon(x)$$

где $\upsilon(x) = a_0 + a_1 \cdot \xi + a_2 \cdot \xi^2 + \ldots + a_k \cdot \xi^k + \ldots$

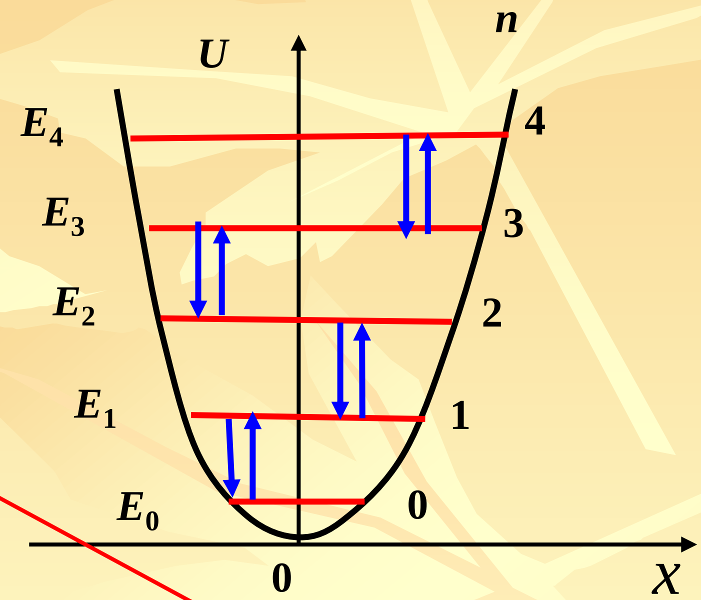
$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-2)\, a_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum_{k=1}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0$$

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-2)\,a_k\,\xi^{k-2} - 2\xi\sum_{k=1}^{\infty} k\,a_k\,\xi^{k-1} + (\lambda-1)\sum_{k=0}^{\infty} a_k\,\xi^{k} = 0$$

Приравнивая нулю сумму коэффициентов при одинаковых степенях ξ, получим:

$$a_{k+2} = a_k(2k-\lambda+1)/\left[(k+2)(k+1)\right]$$

$$k \to \infty \qquad a_{k+2}/a_k \approx 2/k \longrightarrow e^{\xi^2}$$



$$a_{n+2} = 0 \longrightarrow \lambda_n = 2n+1$$

$$\Psi = C_n \cdot P_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \qquad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$\mathrm{E}_n = \hbar\omega(\mathrm{n}+1/2)$$

$P_n(\xi)$ - полином Эрмита n -ой степени

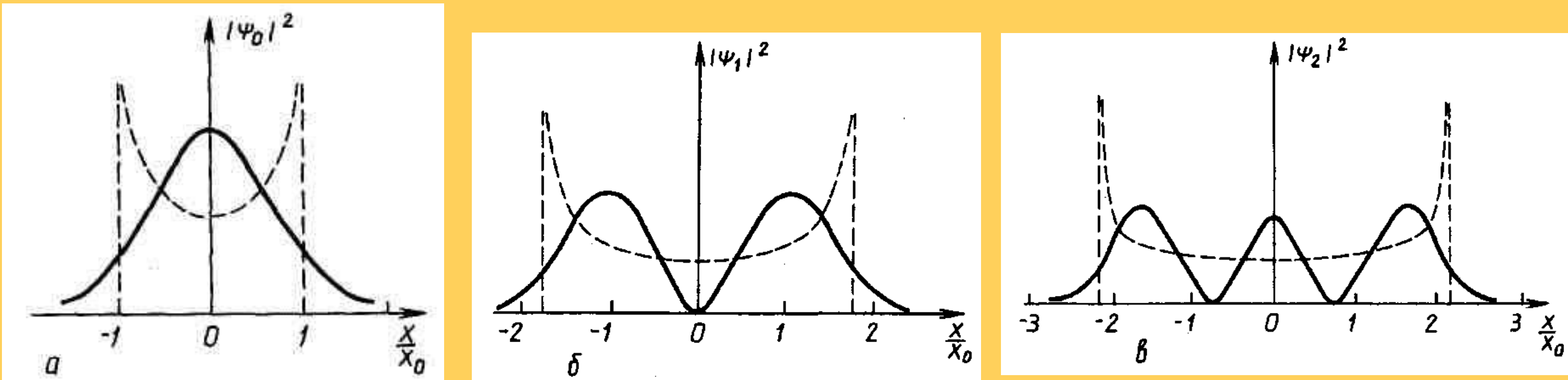
$n = 0, 1, 2, \ldots$ – **колебательное квантовое число**

Правила отбора по колебательному квантовому числу

$$\Delta n = \pm 1$$

.

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$$



Распределение плотности вероятности для гармонического осциллятора в состояниях с энергиями E_0, E_1, E_2

Вертикальные линии проведены через точки, соответствующие амплитудным значениям координат классического осциллятора с энергиями E_0, E_1, E_2 (соответственно фрагменты *а*, *б*, *в*). Штриховые линии соответствуют классическому распределению плотности вероятности $P_{\text{кл}}(x) = dW_{\text{кл}}/dx$, где $dW_{\text{кл}}$ – вероятность нахождения материальной точки на участке от x до $x + dx$, рассчитанная в соответствии с её определением в классической механике. В качестве этой вероятности взято отношение $dW_{\text{кл}} = dt/T$, где dt – время пребывания частицы на участке dx, T – период колебаний.

Вопросы для самоконтроля

Тема 7

1. Что обозначают термином «потенциальная яма»? Запишите стационарное уравнение Шрёдингера (Ст УШ) для частицы, движущейся в одномерной потенциальной яме.
2. Каков алгоритм решения Ст УШ для частицы, движущейся в одномерной прямоугольной потенциальной яме?
3. Поясните, почему частица не может быть обнаружена за пределами бесконечно глубокой прямоугольной ямы.
4. Выведите формулы для собственной функции и собственного значения полной энергии частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.
5. Определите вероятность того, что частица находится в области пространства $0 < x < \frac{a}{3}$.
6. Выведите формулу для $E_{n+1} - E_n$ и проанализируйте её применительно к потенциальным ямам разной конфигурации.
7. Какое движение частицы называют финитным (инфинитным)? В чём принципиальное отличие спектра энергии частицы в этих двух случаях?
8. Запишите Ст УШ для гармонического осциллятора.
9. Запишите формулу для собственных значений энергии гармонического осциллятора и проиллюстрируйте её графически.
10. Сформулируйте принципиально важный вывод по изученной теме.

Бенджамин Франклин,
амер. философ, ученый, журналист, издатель, политик:

Кот в перчатках мышь не поймает

Ключ, которым часто пользуются, всегда блестит, как новый

Мастер находить оправдания редко бывает мастером в чём-либо ещё

Человек жив не тем, что он съедает, а тем, что переваривает. Положение это одинаково справедливо относится к уму и к телу

Желаю успешной работы с материалом темы 7 и удовлетворения от результатов вашего трудолюбия!