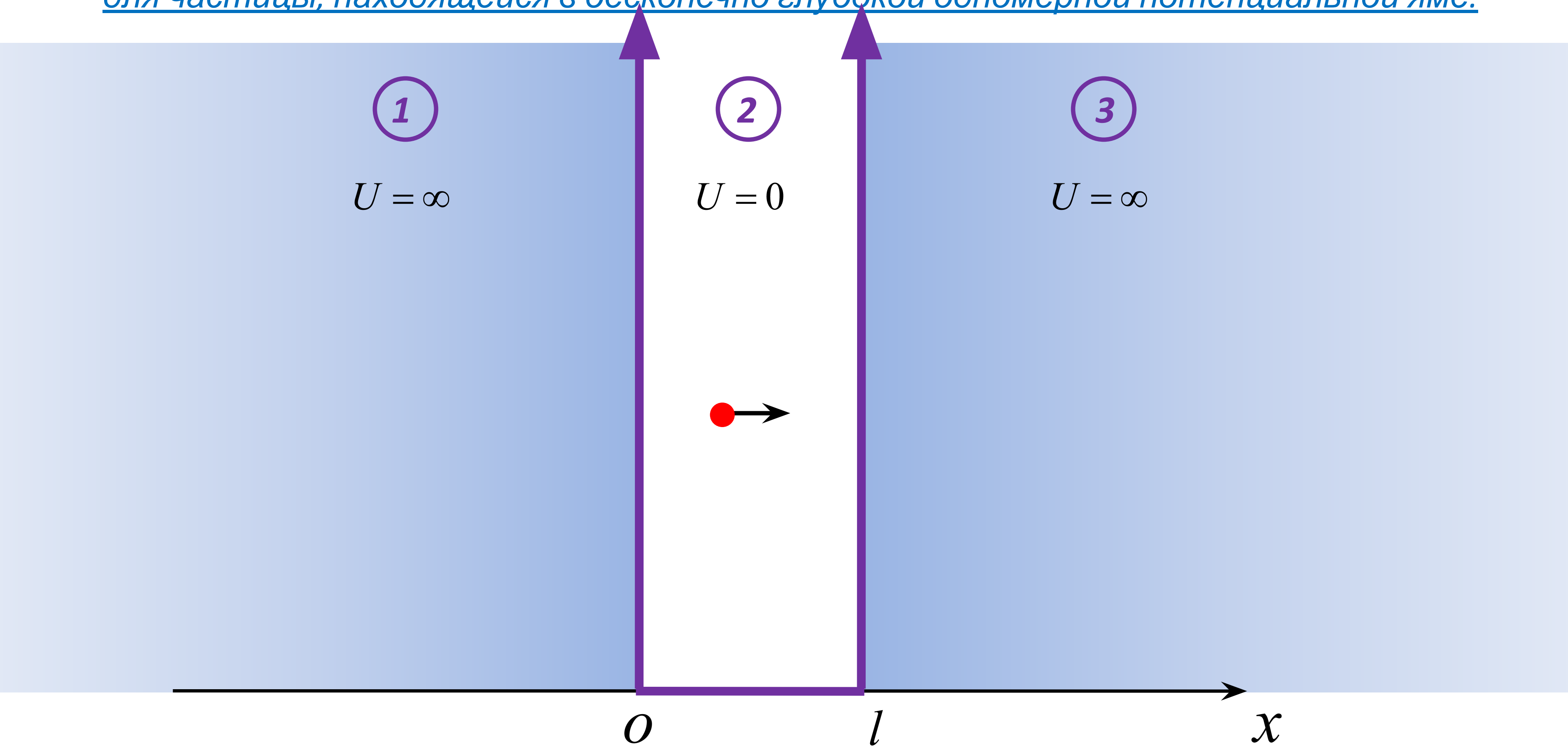
5.Частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме.

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x,y,z)+(E-U)\psi(x,y,z)=0$$

$$\Delta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Найдем собственные значения энергии и соответствующие им собственные функции для частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме.



U – потенц.энергия частицы

$0 \le x \le l \Rightarrow \quad U = 0$

$x < 0 \; x > l \Rightarrow \quad U = \infty$

m – масса частицы

E – полная энергия частицы

l - ширина одномерной потенциальной ямы

X – координата частицы

В 1-ой и 3-ей областях:

$$|\psi|^2 = 0 \Rightarrow \psi = 0$$

Во 2-ой области:

$$\psi \neq 0$$

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

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

$$\boxed{\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) = 0}$$

Обозначим: $\frac{2m}{\hbar^2}E = \omega^2$

Уравнение гармонического осциллятора

$$\psi''(x) + \omega^2\psi(x) = 0$$

Вид решения

$$\psi(x) = a\sin(\omega x + \alpha)$$

$$a - ?\ \omega - ?\ \alpha - ?$$

Из **непрерывности** волновой функции следуют **граничные условия :**

$$\psi\big|_{x=0} = \psi\big|_{x=l} = 0$$

Условие нормировки :

$$\int_0^l \psi\psi^* dx = 1$$

Стандартные условия

1). $\psi\big|_{x=0} = 0 \Rightarrow a\sin\alpha = 0 \Rightarrow \boxed{\alpha = 0}$

2). $\psi\big|_{x=l} = 0 \Rightarrow a\sin\omega l = 0 \Rightarrow \omega l = \pm n\pi \quad n = 1, 2...$

$$\boxed{\omega^2 = \frac{\pi^2}{l^2} \cdot n^2}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\omega^2 \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot n^2$$

Собственнные значения энергии

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1)$$

Расстояние между соседними энергетическими уровнями

$$\psi(x) = \psi_n(x) = a\sin\frac{n\pi}{l}x$$

3). $$\int_0^l \psi\psi^* dx = 1 \Rightarrow a^2\int_0^l (\sin^2\frac{n\pi}{l}x)dx = a^2 l\left\langle \sin^2\frac{n\pi}{l}x \right\rangle = a^2 l\cdot\frac{1}{2} = 1 \Rightarrow a = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

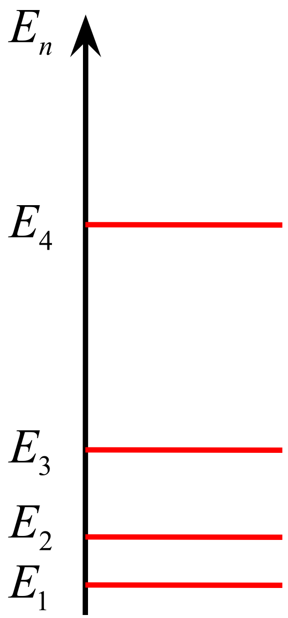
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi}{l}x$$

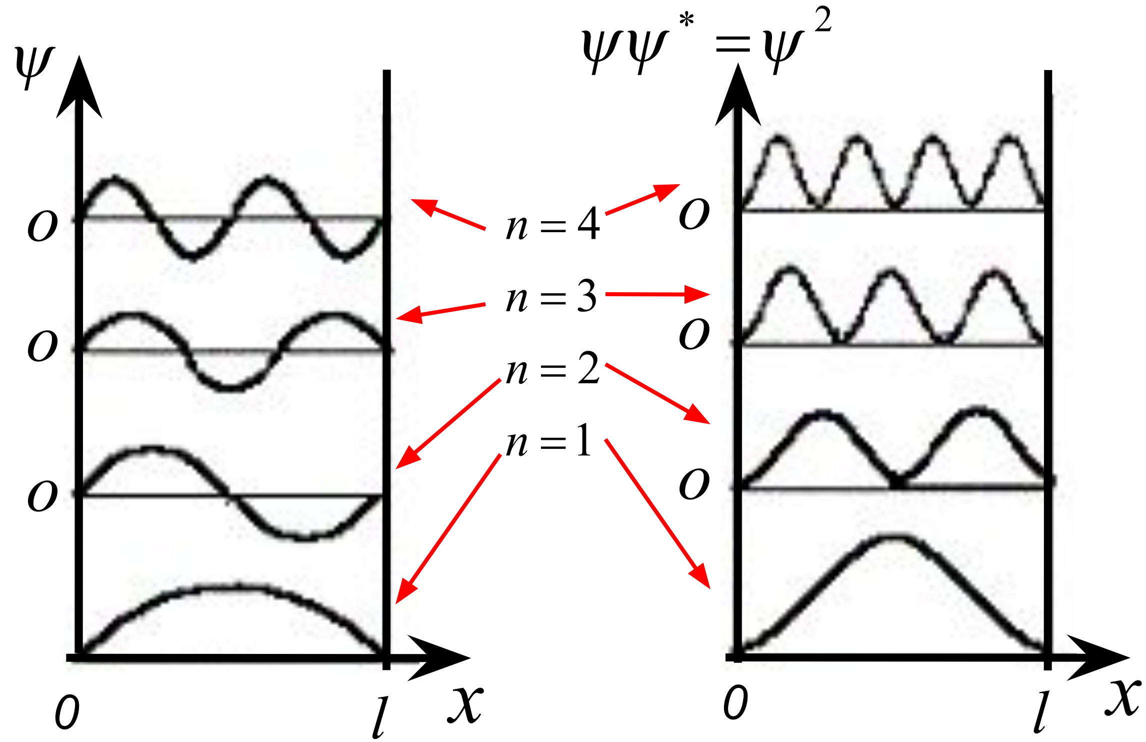
Собственнные функции

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

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x$$

$$\psi^2(x) = \frac{2}{l} \sin^2 \frac{n\pi}{l} x$$





$$\Delta E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}(2n+1)$$

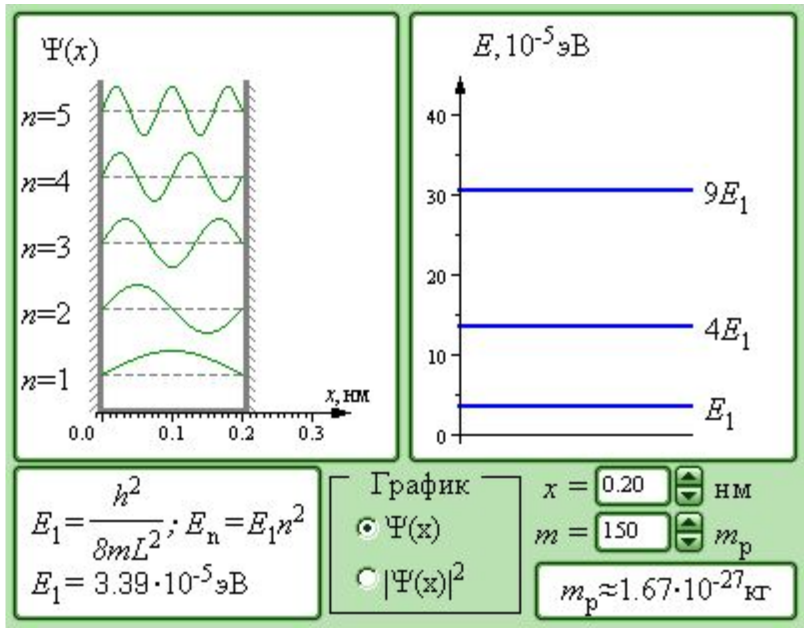
$$\left.\begin{matrix} m \to \infty\ldots \\ l \to \infty\ldots \end{matrix}\right] \Rightarrow \text{Классическая физика}$$

ВЫВОДЫ:

Квантование энергии – следствие «волновых» свойств частиц – получается из основных положений квантовой механики без каких-либо дополнительных предположений (постулатов).

Результат решения: информация о распределении вероятности нахождения частицы с определенным (дискретным) значением энергии в соответствующем квантовом состоянии с номером n.

Увеличение массы частицы, или увеличение линейных размеров пространства приводит к переходу от дискретного спектра энергии к непрерывному, т.е. квантовая механика не противоречит классической физике, а является более общей теорией.



Ψ(x)
n=5
n=4
n=3
n=2
n=1
x, нм
0.0
0.1
0.2
0.3
E, 10^-5 эВ
40
30
20
10
0
9E1
4E1
E1
E1 = h^2 / 8mL^2 ; En = E1n^2
E1 = 3.39·10^-5 эВ
График
Ψ(x)
|Ψ(x)|^2
x = 0.20 нм
m = 150 mp
mp≈1.67·10^-27 кг