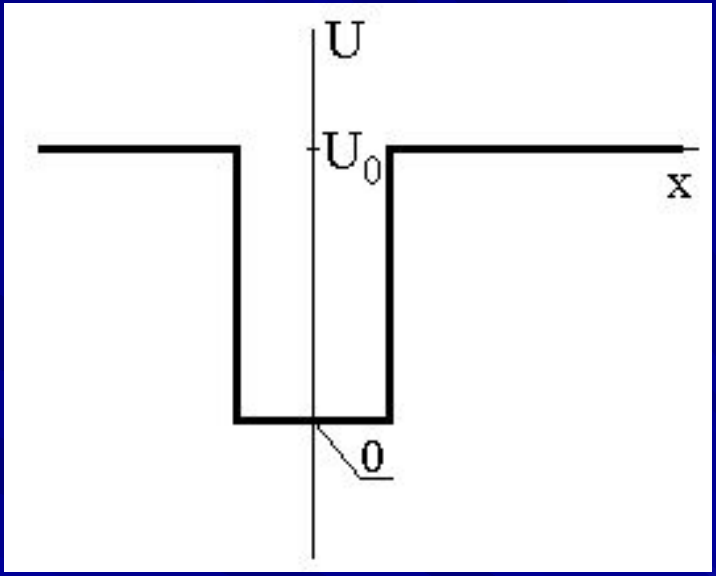
Физика атома, атомного ядра и элементарных частиц

9 (2). Простейшие задачи квантовой механики.

Частица в "потенциальной яме" ("ящике")

Одномерная прямоугольная потенциальная яма ("ящик")

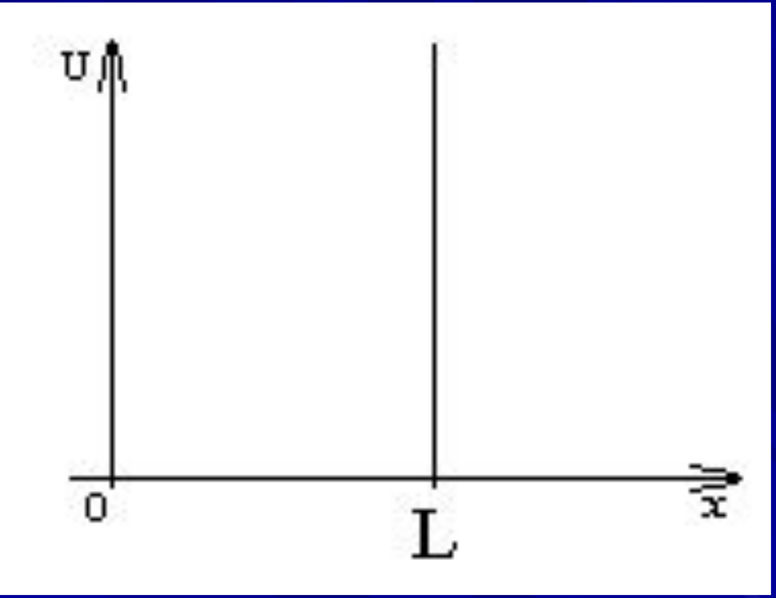
Так называется одномерная область, в которой потенциальная энергия имеет вид, изображенный на рисунке. Для этой области легко получить точное решение уравнения Шредингера и рассмотреть задачу о квантовании энергии.



Потенциальная энергия равна нулю на дне ямы ("ящика"), и равна U_0 вне стенок "ящика".

Одномерная прямоугольная потенциальная яма (ящик) с бесконечно высокими стенками

- Наиболее простым в математическом отношении является решение для потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками. Иногда ее называют ямой с идеально отражающими стенками.



$$U = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le L \\ \infty, & x < 0, x > L \end{cases}$$

Ширина ямы (ящика) равна L, на дна ямы потенциальная энергия равна нулю, высота стенок бесконечно велика.

- В этом случае внутри ямы частица движется свободно, но выйти за ее пределы не может, т.е. за пределами ямы волновая функция должна обратиться в нуль. Но волновая функция должна быть непрерывна, поэтому она должна быть равна нулю в точках $x = 0$ и $x = L$:

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0 \qquad (9.1)$$

- это граничные условия для волновой функции Ψ.

- Стационарное уравнение Шредингера (8.6)

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

внутри ямы принимает вид (т.к. U = 0):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0 \qquad (9.2)$$

Общее решение этого уравнения хорошо известно:

$$\Psi(x) = A\sin\frac{\sqrt{2Em}}{\hbar}x + B\cos\frac{\sqrt{2Em}}{\hbar}x \qquad (9.3)$$

Из условия (9.1) Ψ(0) =0 следует, что B = 0.

Из второго граничного условия Ψ(L) =0 следует, что

$$A \sin \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} L = 0$$

откуда

$$\frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} L = n\pi$$

или

$$\frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} = n \frac{\pi}{L} \qquad (9.4)$$

где n = 1, 2, 3, ... - целое число

Таким образом, собственными функция-ми уравнения Шредингера в рассматри-ваемой задаче являются волновые функции вида

$$\Psi_n = A_n \sin n \frac{\pi x}{L} \qquad (9.5)$$

Собственные значения энергии найдем из формулы (9.4):

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \qquad (9.6)$$

- дискретный спектр собственных значений энергии.

Таким образом, частица (например, электрон) в потенциальной яме может иметь не произвольные, а лишь дискретные, квантованные значения энергии.

Рассмотрим некоторые свойства собственных функций.

1). Собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны, т.е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m(x)\Psi_n(x)\,dx = 0$$

Доказательство

$$A_n A_m \int_{-\infty}^{\infty} \sin\frac{\pi nx}{L} \sin\frac{\pi mx}{L} dx = \frac{1}{2} A_n A_m \int_0^L \left[\cos\frac{\pi x}{L}(m-n) - \cos\frac{\pi x}{L}(m+n)\right] dx = 0 \tag{9.7}$$

если m ≠ n

Если m = n, то интеграл (9.7) не равен 0, и из условия нормировки можно найти коэффициент A_n:

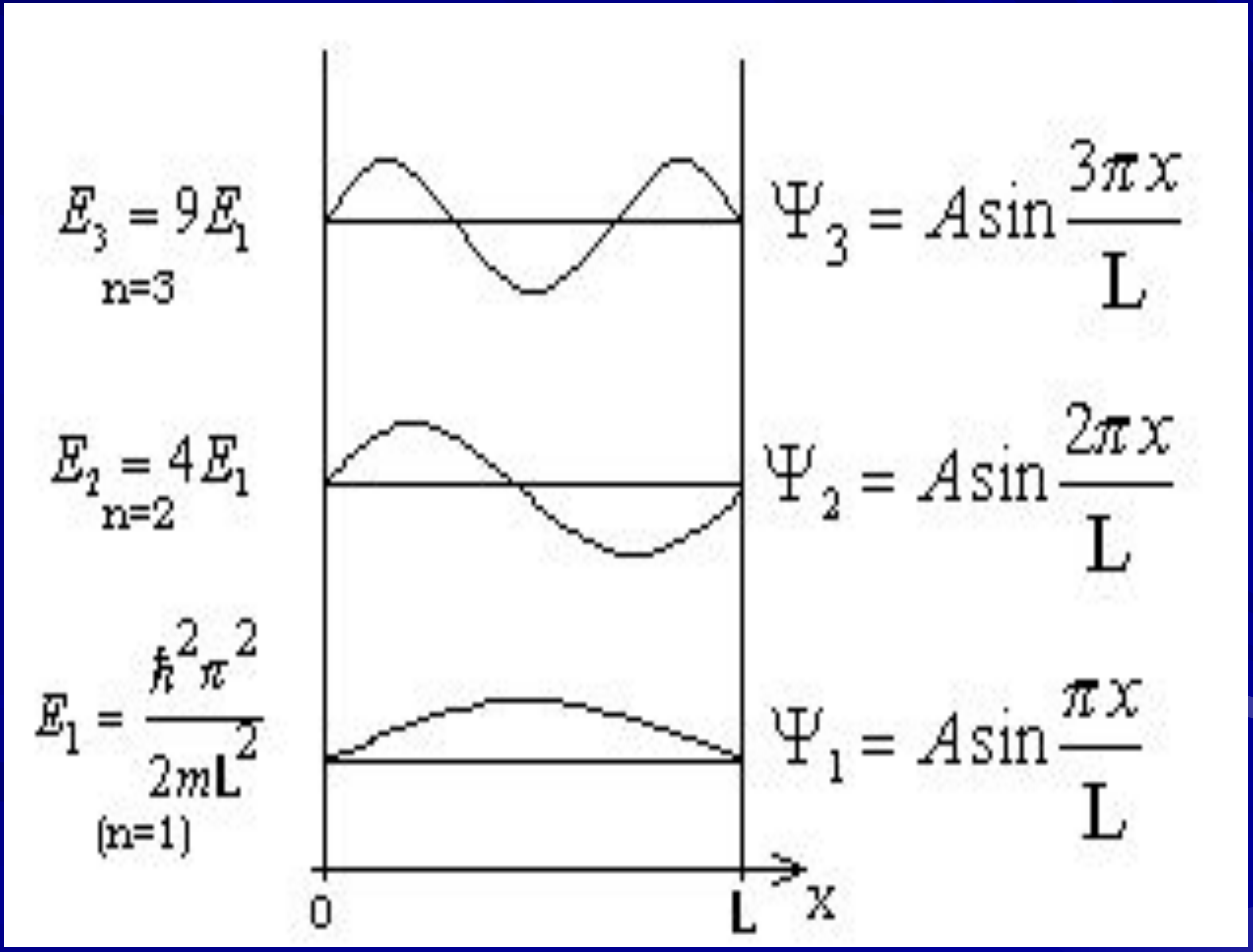
$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^2 dx = 1 \rightarrow A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2 \frac{\pi n x}{L} dx = \frac{1}{2} A_n \int_0^l \left(1 - \cos \frac{2\pi n x}{L}\right) dx =$$

$$= \frac{1}{2} A_n^2 L = 1 \quad \rightarrow \quad A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

т.е. нормирующий множитель у всех собственных функций одинаков. Поэтому

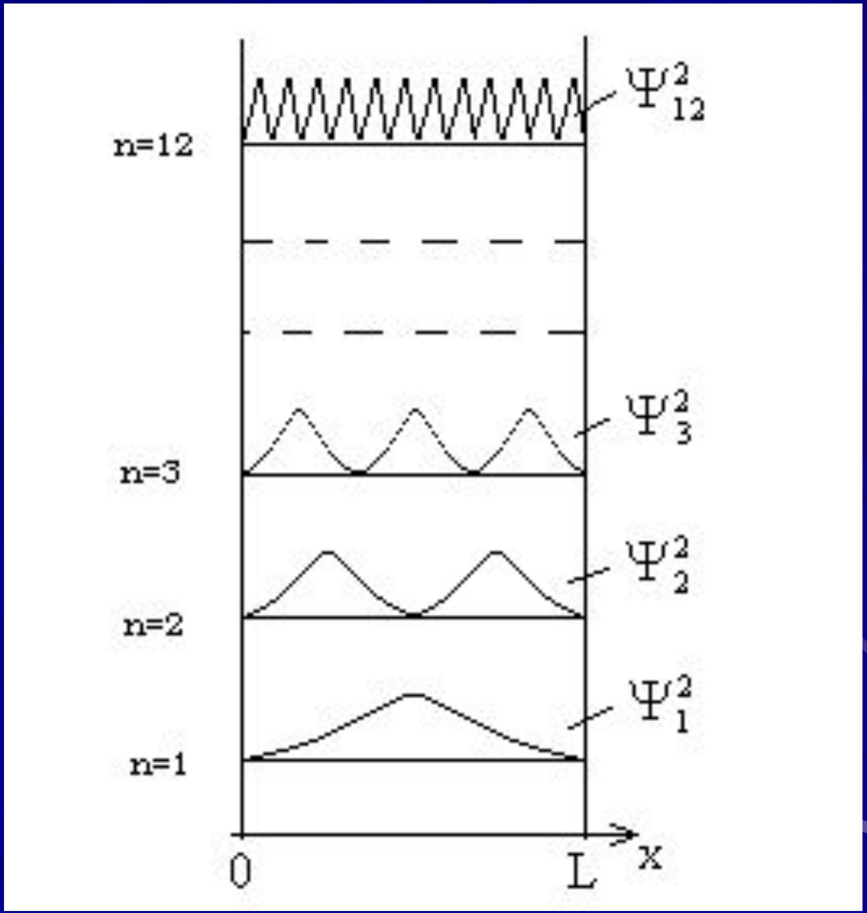
$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n x}{L} \qquad (9.8)$$

Графики первых трех собственных функций



Плотность вероятности распределения частиц

По физическому смыслу квадрат модуля собст-венной функции – это плотность вероятности распределения частиц по пространству. В низшем состоянии с наибольшей вероятностью можно най-ти частицу около середи-ны ящика; вероятность найти ее у стенок равна нулю.



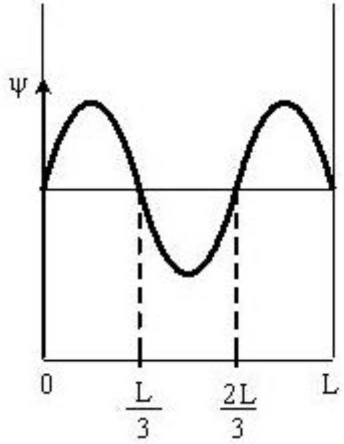
Этот результат резко отличается от классического: в классической механике нахождение частицы в ящике с зеркальными стенками равновероятно в любом месте ящика. Однако при больших n максимумы кривой Ψ_n^2 располагаются все ближе друг к другу и к стенкам; при n $\rightarrow \infty$ Ψ_n^2 близка к прямой, параллельной оси x, т.е. для больших n получается распределение, соответствующее классической частице.

Интернет-экзамен

Задание N 28.

Вероятность обнаружить электрон на участке (a,b) одномерного потенциального ящика с бесконечно высокими стенками

вычисляется по формуле $W = \int_a^b \omega \, dx$, где ω – плотность вероятности, определяемая ψ-функцией. Если ψ-функция имеет вид, указанный на рисунке, то вероятность обнаружить электрон на участке $\frac{L}{6} < x < \frac{5L}{6}$ равна…



Варианты ответа:

- $\frac{1}{2}$
- $\frac{5}{6}$
- $\frac{2}{3}$
- $\frac{1}{3}$

Интернет-экзамен

Задание N 20

Волновая функция частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками шириной L имеет вид: $\psi = A\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$.

Величина импульса в первом возбужденном состоянии ($n = 2$) равна:

Варианты ответов

- $\frac{2\hbar\pi}{3L}$
- $\frac{3\hbar\pi}{2L}$
- $\frac{2\hbar\pi}{L}$
- $\frac{\hbar\pi}{2L}$