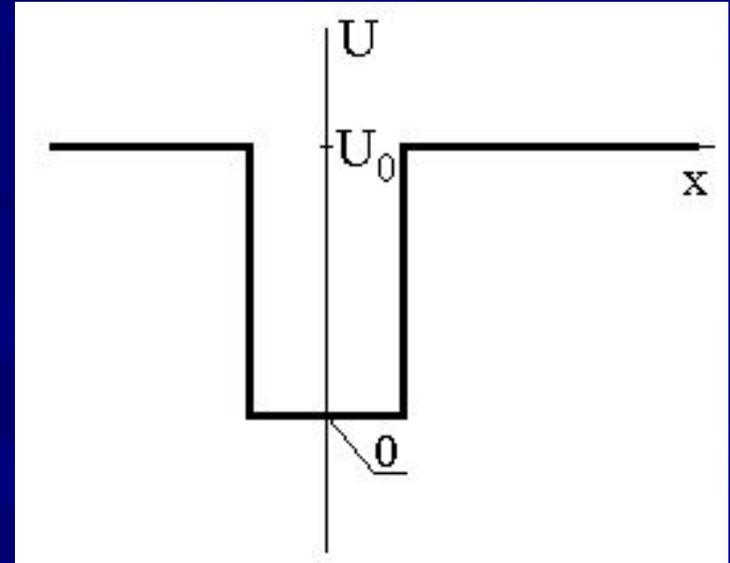


Кислицын А.А.
Физика атома, атомного ядра
и элементарных частиц

10 (2). Приложение: частица в
"потенциальной яме" ("ящике") конечной
глубины.

Одномерная прямоугольная потенциальная яма ("ящик")

Бесконечно высоких стенок не бывает ни в природе, ни в технике. Поэтому вернемся теперь к первоначальной постановке задачи: найдем решение уравнения Шредингера для частицы в одномерной области, в которой потенциальная энергия имеет вид, изображенный на рисунке.



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

Докажем прежде всего одно важное свойство собственных функций: собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны, т.е., если $m \neq n$, то:

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

Доказательство: если $m \neq n$, то интеграл

$$\begin{aligned} & A_n A_m \int_{-\infty}^{\infty} \sin \frac{\pi n x}{L} \sin \frac{\pi m x}{L} dx = \\ &= \frac{1}{2} A_n A_m \int_0^L \left[\cos \frac{\pi x}{L} (m-n) - \cos \frac{\pi x}{L} (m+n) \right] dx = 0 \end{aligned}$$

равен нулю.

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

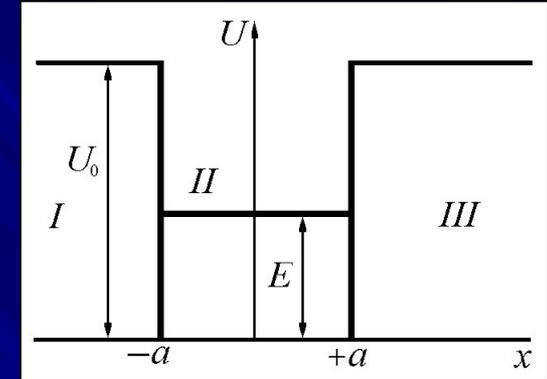
$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^2 dx = 1 &\rightarrow A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2 \frac{\pi nx}{L} dx = \frac{1}{2} A_n^2 \int_0^l \left(1 - \cos \frac{2\pi nx}{L} \right) dx = \\ &= \frac{1}{2} A_n^2 L = 1 \rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \end{aligned}$$

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

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi nx}{L} \quad (10.8)$$

Для поля, изображенного на рисунке, все пространство можно разделить на 3 области I , II , III :

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < -a \\ 0, & -a < x < a \\ U_0, & x > +a \end{cases} \quad (10.9)$$



причем $E < U_0$.

Как и раньше, требуется решить одномерное стационарное уравнение Шредингера

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\Psi = 0 \quad (9.6)$$

Подставляя в уравнение Шредингера условие (10.9), получаем для областей *I* и *III* одинаковые уравнения:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\Psi = 0 \quad (10.10)$$

а для области *II* (внутри ямы потенциальная энергия $U = 0$):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0 \quad (10.11)$$

Обозначим для краткости

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}; \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}$$

Тогда уравнение (10.10) принимает вид:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} - k_1^2 E\Psi = 0 \quad (10.12)$$

а уравнение (10.11):

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2 E\Psi = 0 \quad (10.13)$$

Для области *II* общее решение уравнения (10.13), как уже говорилось, известно и имеет вид:

$$\Psi_{II}(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

где *A* и *B* - неизвестные пока константы.

Общее решение уравнения (10.12) также известно и имеет вид:

$$\Psi = C e^{k_1 x} + D e^{-k_1 x}$$

где *C* и *D* - также неизвестные пока константы.

Учтем условие, согласно которому волновая функция не должна обращаться в бесконечность (условие ограниченности). Слева от ямы (в области I) координата $x < 0$, и уходит в $-\infty$. Справа от ямы (в области III) координата $x > 0$, и уходит в $+\infty$.

Поэтому в области I должна равняться нулю константа D , а в области III должна обратиться в нуль константа C . Таким образом, волновые функции в первой, второй и третьей областях имеют вид:

$$\Psi_I(x) = Ce^{k_1x} \tag{10.14}$$

$$\Psi_{II}(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$\Psi_{III}(x) = De^{-k_1x}$$

Итак, мы получили решения уравнения Шредингера для каждой из трех областей. Теперь эти решения надо "сшить" на границах областей так, чтобы были непрерывны сами функции Ψ , и их первые производные по x . Для левой границы $x = -a$ условие непрерывности функции Ψ имеет вид:

$$Ce^{-k_1 a} = -A \sin ka + B \cos ka \quad (10.15)$$

а условие непрерывности производной:

$$Ck_1 e^{-k_1 a} = Ak \cos ka + Bk \sin ka \quad (10.16)$$

Аналогично для правой границы $x = a$:

$$De^{-k_1 a} = A \sin ka + B \cos ka \quad (10.17)$$

$$-Dk_1 e^{-k_1 a} = Ak \cos ka - Bk \sin ka \quad (10.18)$$

Таким образом, получены 4 уравнения относительно 4 неизвестных A, B, C, D . Решить эту систему можно различными способами. Например, умножим уравнение (10.15) на k_1 и вычтем его из уравнения (10.16), исключая, таким образом, константу C :

$$A(k \cos ka + k_1 \sin ka) + B(k \sin ka - k_1 \cos ka) = 0 \quad (10.19)$$

Аналогично, умножив уравнение (10.17) на k_1 и складывая его с (10.18), исключаем константу D :

$$A(k_1 \sin ka + k \cos ka) + B(k_1 \cos ka - k \sin ka) = 0 \quad (10.20)$$

Получили систему из 2-х однородных линейных уравнений для двух неизвестных A и B . Условием существования нетривиального решения такой системы является равенство нулю ее определителя:

$$(k \cos ka + k_1 \sin ka) \cdot (k_1 \cos ka - k \sin ka) - \\ -(k \sin ka - k_1 \cos ka) \cdot (k_1 \sin ka + k \cos ka) = 0$$

Раскрывая скобки и выполняя простые тождественные преобразования, получаем уравнение:

$$(k + k_1 \cdot tgka)(k_1 - k \cdot tgka) = 0$$

откуда получаем два корня:

$$k_{11} = k \cdot tgka$$

(10.21)

и

$$k_{12} = -k \cdot ctgka.$$

(10.22)

Подставляя первый корень (10.21) в уравнение (10.19), получаем: $A = 0$. Далее, из уравнений (10.15) - (10.18) находим $D = C$, и соотношение между константами B и C :

$$B = \frac{C}{\cos ka} e^{-k_{11}a}$$

Далее, запишем условие нормировки:

$$|C|^2 \left[\int_{-\infty}^{-a} e^{2k_{11}x} dx + \frac{e^{-2k_{11}a}}{\cos^2 ka} \int_{-a}^{+a} \cos^2 kx dx + \int_{+a}^{+\infty} e^{-2k_{11}x} dx \right] = \quad (10.23)$$

$$= |C|^2 e^{-2k_{11}a} \left[\frac{1}{k_{11}} + \frac{a}{\cos^2 ka} + \frac{\sin 2ka}{2k \cos^2 ka} \right] = 1$$

и найдем из него константу C :

$$|C|^2 = \frac{e^{2ka \cdot \operatorname{tg}ka}}{\left(\frac{1}{k \cdot \operatorname{tg}ka} + \frac{a}{\cos^2 ka} + \frac{\sin 2ka}{2k \cos^2 ka} \right)} = \frac{k \sin 2ka \cdot e^{2ka \cdot \operatorname{tg}ka}}{2(1 + ka \cdot \operatorname{tg}ka)} \quad (10.24)$$

Итак, волновые функции для 1-го корня имеют вид

$$\Psi_I = Ce^{k_1 x} \quad \Psi_{III} = Ce^{-k_1 x} \quad (10.25)$$

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{-k_1 x} \frac{\cos kx}{\cos ka}$$

где константа C определяется формулой (10.24). Отметим, что первый корень приводит к четным волновым функциям, т.е. $\Psi(x) = \Psi(-x)$.

Далее, выполняя аналогичные вычисления со вторым корнем, получаем $B = 0$, $D = -C$, и соотношение между константами A и C :

$$A = -\frac{C}{\sin ka} e^{-k_1 a}$$

Из условия нормировки получаем формулу для константы C , совпадающую с формулой (10.24). Таким образом, волновые функции для 2-го корня имеют вид: Таким образом, волновые функции для 2-го корня имеют вид:

$$\Psi_I = Ce^{k_1 x} \quad \Psi_{III} = -Ce^{-k_1 x}$$

$$\Psi_{II}(x) = -Ce^{-k_1 x} \frac{\sin kx}{\sin ka} \quad (10.26)$$

где константа C , как и для 1-го корня, определяется формулой (10.24). Отметим, что второй корень приводит к нечетным волновым функциям, т.е. $\Psi(x) = -\Psi(-x)$.

Теперь надо сделать самое главное: определить спектр уровней энергии частицы в потенциальной яме. Для этого надо в формулы (10.21) и (10.22) вместо k и k_1 подставить их значения:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (10.27)$$

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (10.28)$$

Сначала займемся уравнением (10.21). Подставляя в него (10.27) и (10.28), получаем трансцендентное уравнение относительно энергии E :

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \cdot \operatorname{tg} \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \cdot a \right) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}$$

В "докомпьютерные" времена такие уравнения решали графически следующим образом. Обозначим:

$$\xi = ka, \quad \eta = k_1 a$$

Умножая обе части уравнения (10.21) на a , получаем в новых обозначениях:

$$\eta = \xi \cdot \operatorname{tg} \xi$$

Далее найдем сумму квадратов величин ξ и η :

$$\begin{aligned} \xi^2 + \eta^2 &= a^2 (k^2 + k_1^2) = \\ &= a^2 \left[\frac{2m}{\hbar^2} E + \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \right] = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (10.29)$$

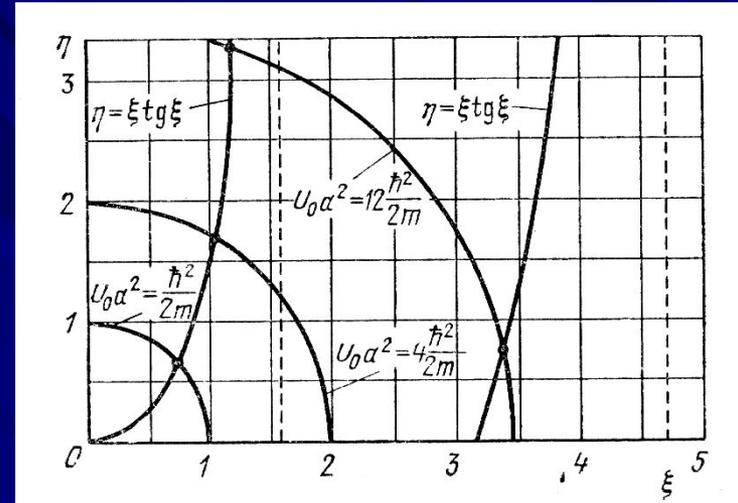
Это уравнение окружности в координатах ξ и η с радиусом

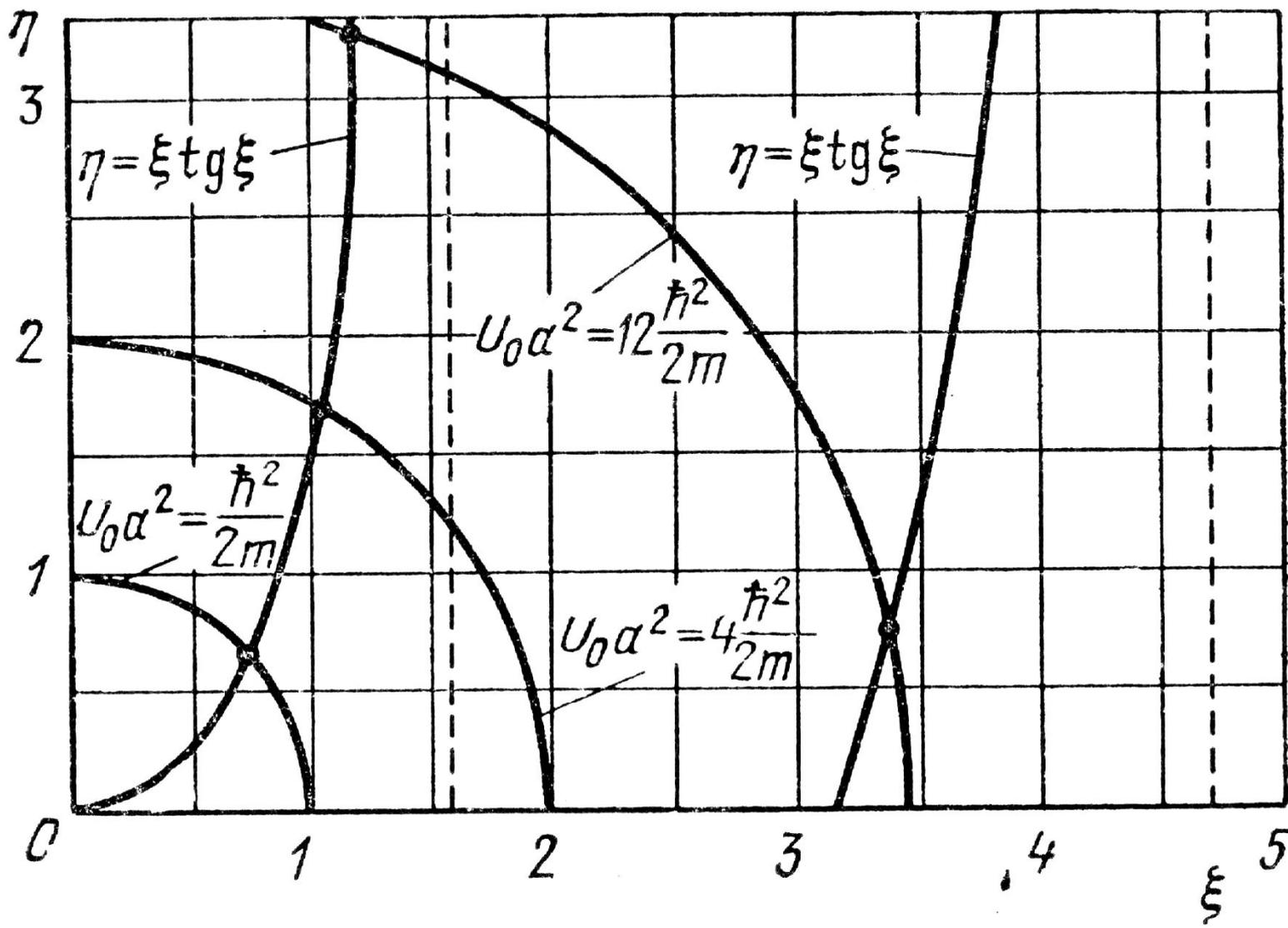
$$\frac{a}{\hbar} \sqrt{2mU_0}$$

Искомые уровни энергии можно определить, найдя точки пересечения кривой

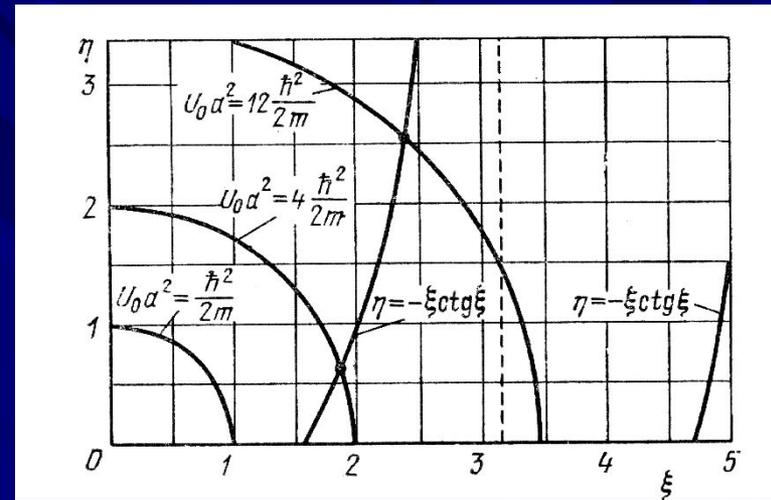
$$\eta = \xi \cdot \operatorname{tg} \xi$$

с окружностью указанного радиуса (см. рисунок). На рисунке приведены окружности для трех значений параметра глубины ямы $U_0 a^2$. Первым двум значениям соответствуют по одной точке пересечения в первом квадранте (ξ и η - положительные числа), а третьему - две точки пересечения.

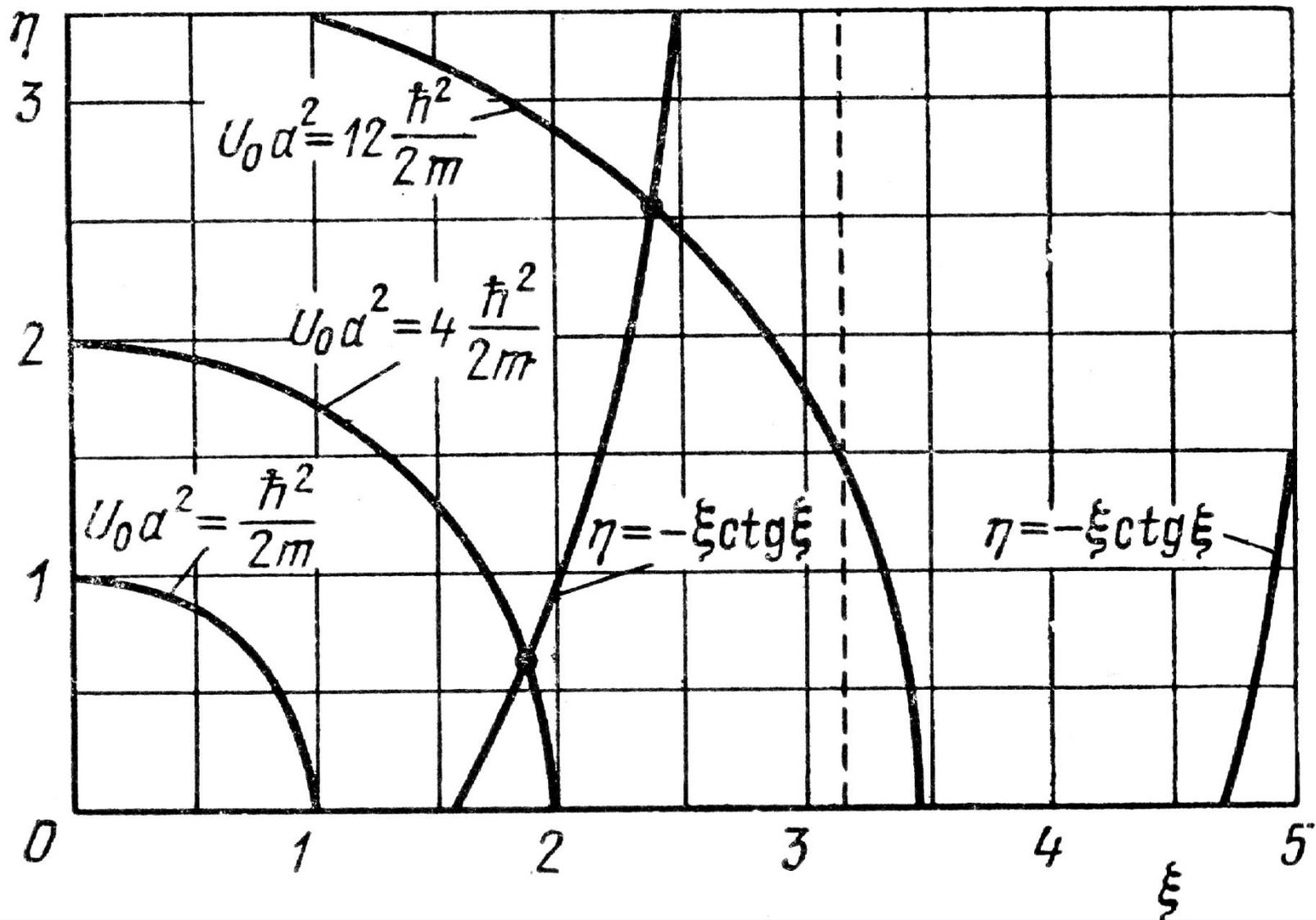




Выполняя аналогичные преобразования для формулы (10.22), получим $\eta = -\xi \cdot \text{ctg}\xi$. Соответствующие значения энергии получим, найдя точки



пересечения этой кривой с окружностью (10.29) (см. рисунок). Как видно из рисунка, для параметра глубины ямы $U_0 a^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$ пересечение отсутствует, а для следующих двух параметров глубины имеется по одному пересечению. Итак, для трех последовательных значений параметра глубины $U_0 a^2$ получаем соответственно один, два и три уровня энергии.



В настоящее время подобные уравнения решают численными методами, причем решения получают за долю секунды и с гораздо более высокой точностью. На всех современных языках программирования имеются готовые подпрограммы для решения таких уравнений. Однако графический метод имеет преимущество в наглядности.

В пределе при $U_0 \rightarrow \infty$ полученные результаты должны совпадать с формулами, найденными выше для ямы с бесконечно высокими стенками. Проверим это. Запишем формулу (10.21) в виде:

$$\operatorname{tg}ka = \frac{k_1}{k} = \sqrt{\frac{U_0 - E}{E}}$$

При $U_0 \rightarrow \infty$ правая часть этой формулы также стремится к бесконечности. Это означает, что в пределе $ka = n\pi / 2$ где n - целое нечетное число.

Подставляя сюда вместо k его значение из формулы (10.27), получаем

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

что для нечетных чисел n совпадает с формулой (10.6).

Аналогично, записывая формулу (10.22) в виде

$$\operatorname{ctg}ka = -\frac{k_1}{k} = -\sqrt{\frac{U_0 - E}{E}}$$

видим, что в пределе при $U_0 \rightarrow \infty$ правая часть этой формулы стремится к $-\infty$. Отсюда $ka = n\pi / 2$ где n - целое четное число.

Подставляя значение k из формулы (10.27), получаем

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

что также совпадает с формулой (10.6) для четных чисел n .