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

1. Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме: постановка задачи.

2. Алгоритм решения уравнения Шредингера для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме

3. Анализ решения уравнения Шредингера

4. Собственная функция и собственные значения энергии для гармонического осциллятора

Рассмотрим некоторые модельные задачи, в которых представляется возможным без особых математических трудностей найти строгое решение уравнения Шрёдингера для стационарных состояний. Такими моделями можно пользоваться при описании реальных систем в первом приближении. Исследование простых модельных систем позволяет более полно понять методы квантовой механики и проанализировать логику решения квантово-механической задачи. Кроме того, результаты, полученные при решении этих задач, сами по себе вызывают интерес.

Точные аналитические решения уравнения Шрёдингера для стационарных состояний могут быть найдены только для некоторого ограниченного круга задач, в которых зависимость потенциальной энергии от координат имеет вполне определенный вид. Среди них наиболее простыми являются задачи, в которых потенциальная энергия постоянна во всем пространстве (свободное движение) или имеет разные постоянные значения в отдельных областях пространства, переходя скачком от одного значения к другому на поверхностях, разделяющих такие области. На поверхностях разрыва потенциала волновая функция должна быть непрерывной, чтобы плотность вероятности была непрерывна. Если энергия частицы ограничена и скачок потенциальной энергии на поверхности конечный, то на поверхности разрыва должна быть непрерывной и производная волновой функции.

Рассмотрим решение стационарного уравнения Шредингера для частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме.

Потенциальная яма – ограниченная область пространства, которая определяется физической природой взаимодействия частиц и в которой потенциальная энергия частицы меньше, чем за ее пределами. Термин «потенциальная яма» происходит от вида графика, изображающего зависимость потенциальной энергии U частицы в силовом поле от ее положения в пространстве (в случае одномерного движения – от координаты x). Такая форма зависимости возникает в поле сил притяжения. Основное свойство потенциальной ямы – способность удерживать частицу, полная энергия E которой меньше глубины потенциальной ямы U_0; такая частица внутри потенциальной ямы будет находиться в связанном состоянии.

Пусть одномерная бесконечно глубокая потенциальная яма имеет ширину a и заключена в интервале $(0,a)$ (рисунок 7.1). Поле потенциальных сил таково, что

$U(x)=0$ при $0 \le x \le a$ (область II)

$U(x) \to \infty$ при $x<0$ (область I) и при $x>a$ (область III).

Найдем волновые функции и значения энергии, отвечающие возможным состояниям частицы в рассматриваемом потенциальном поле. Для этого найдем решения одномерного стационарного уравнения Шрёдингера

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\Psi=0 \qquad (7.1)$$

в каждой из трёх областей пространства.

Так как потенциальная энергия в областях одномерного пространства I и III бесконечно велика, частица не может выйти за пределы области пространства II, то есть за пределы потенциальной ямы. Поэтому $\Psi_I(x)\equiv 0, \Psi_{III}(x)\equiv 0$, и вероятность нахождения частицы вне ямы равна нулю.

Вследствие того, что волновая функция непрерывна на границах областей с разными значениями потенциальной энергии, справедливы равенства:

$$\Psi_{II}(x=0)=0 \quad \text{и} \quad \Psi_{II}(x=a)=0. \qquad (7.2)$$

Уравнения (7.2) выражают *граничные условия*.

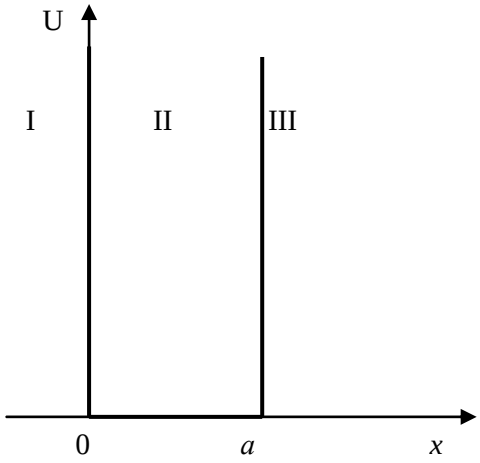

Рисунок 7.1 – Одномерная прямоугольная потенциальная яма

Запишем уравнение (7.1) для области пространства *II*, обозначая функцию состояния в этой области $\Psi_{II}=\Psi$.

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

или

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\kappa^2\Psi=0, \qquad (7.3)$$

где

$$\kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \qquad (7.4)$$

Общим решением уравнения (7.3) является функция

$$\Psi(x) = A\sin(\kappa x) + B\cos(\kappa x). \qquad (7.5)$$

Проанализируем (7.5), воспользовавшись граничными условиями (7.2). Из условия $\Psi(0) = 0$ следует, что $B = 0$, из условия $\Psi(a) = 0$ вытекает, что

$$A\sin(\kappa a) = 0, \qquad (7.6)$$

и при $A \neq 0$ из (7.6) получаем, что $\kappa a = n\pi$ и, следовательно,

$$\kappa_n = \frac{n\pi}{a}. \qquad (7.7)$$

Так как $\kappa \neq 0$ и $a \neq 0$, то и $n \neq 0$: $n = 1, 2, 3\ldots$

Таким образом, решение уравнения Шредингера в области II имеет вид:

$$\Psi_n = A\sin(\frac{n\pi x}{a}). \qquad (7.8)$$

Сопоставляя выражения (7.4) и (7.7), найдем возможные значения энергии частицы:

$$E_n = \frac{\hbar^2\kappa_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2; \qquad n = 1, 2, 3. \qquad (7.9)$$

Выражение (7.9) является условием квантования энергии частицы. На рисунке 7.2 горизонтальными линиями показано положение энергетических уровней. В соответствии с формулой (7.9) интервал энергий, заключенный между двумя соседними энергетическими уровнями увеличивается с увеличением номера стационарного состояния по правилу

$$E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \cdot (2n+1).$$

Из формулы 7.9 следует, что существует некоторая минимальная энергия, не равная нулю:

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}; \qquad (7.10)$$

она соответствует *основному состоянию* движения частиц. Как следует из (7.8), волновая функция этого состояния

$$\Psi_1 = A\sin\frac{\pi x}{a} \qquad (7.11)$$

ни в какой точке внутри ямы в нуль не обращается; она может быть равной нулю только на границах ямы.

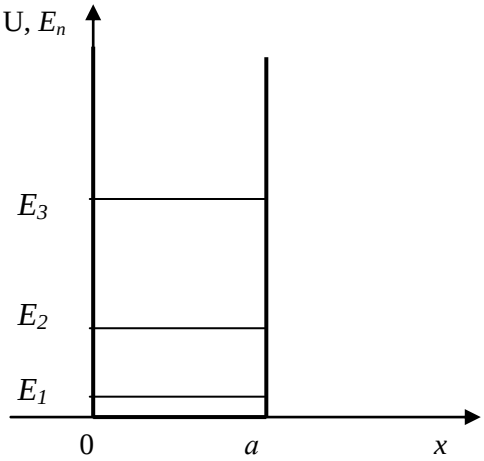

Рисунок 7.2 – Взаимное расположение энергетических уровней микрочастицы, локализованной внутри бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы

Анализируя формулу (7.10) видим, что с уменьшением ширины ямы a минимальная энергия E_1 растет. Следовательно**,** уменьшение размеров области локализации частиц неизбежно сопровождается возрастанием их энергии. Это одно из проявлений принципа неопределенностей.

Так как частица может находиться только внутри ямы, условие нормировки волновой функции $\Psi(x)$ имеет вид:

$$\int_0^a \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$$

или, с учетом (7.8),

$$\int_0^a A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{A^2 a}{2} = 1.$$

Из этого условия найдем нормирующий множитель: $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

Таким образом, волновая функция имеет вид:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right). \qquad (7.12)$$

Выражение (7.12) представляет систему собственных функций, соответствующих возможным состояниям частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме. Эти функции обращаются в нуль, $\Psi_n(x) = 0$, как на границах потенциальной ямы, так и в *узловых точках* внутри нее; соответствующие им значения координаты x определяются из условия $\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = 0$. Распределение плотности вероятности обнаружения частицы в различных точках в состояниях, которым соответствуют n = 1, 2, 3, 4, представлено на рисунке 7.3.

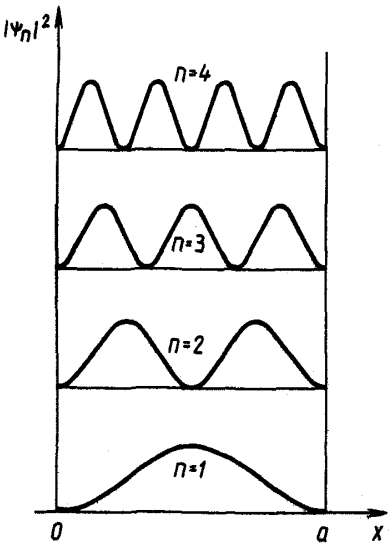

Рисунок 7.3 – Распределение плотности вероятности для различных состояний микрочастицы, локализованной в бесконечно глубокой потенциальной яме

Рассмотрим теперь состояния частицы, находящейся в потенциальной яме, представленной на рисунке 7.4. Силовое поле взаимодействия таково, что частица имеет в нем следующие значения потенциальной энергии:

$$U(x) \to \infty, \quad x \le 0;$$
$$U(x) = 0, \quad 0 < x < a; \tag{7.13}$$
$$U(x) = U_0, \quad x \ge a.$$

Первое из условий (7.13) означает, что частица не может проникнуть в область $x \le 0$ и, следовательно, $\Psi(x \le 0) = 0$. Поэтому достаточно найти волновую функцию в областях *I* и *П* при $x > 0$, замечая, что из-за непрерывности функции $\Psi(x)$ ее значение $\Psi(0) = 0$.

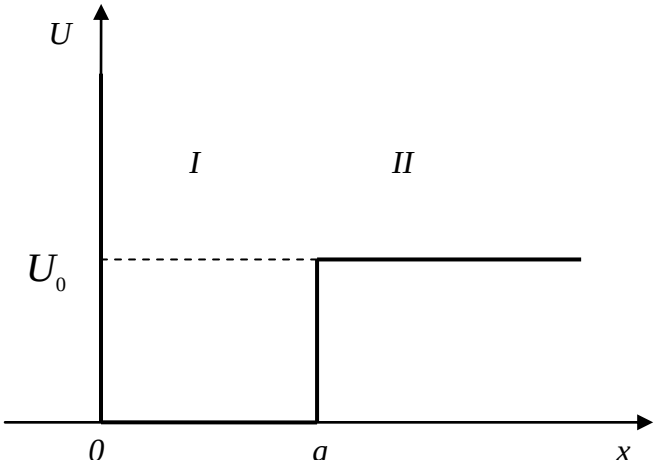

Рисунок 7.4 – Потенциальная яма конечной глубины

В области I уравнение Шрёдингера имеет вид:

$$\frac{d^2\Psi_I}{dx^2} + \kappa_1\Psi_I = 0, \tag{7.14}$$

где $\kappa_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$; (7.15)

в области *II* –

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\Psi_{II} = 0. \tag{7.16}$$

В зависимости от соотношения между энергией частицы E и потенциальной энергией U_0 множитель перед волновой функцией во втором слагаемом уравнения (7.16) может оказаться положительным ($E - U_0 > 0$) или отрицательным ($E - U_0 < 0$). Рассмотрим каждый из этих случаев отдельно.

1. $E > U_0$. Тогда уравнению (7.16) можно придать форму

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + \kappa_2^2\Psi_{II} = 0; \tag{7.17}$$

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

а в области *I* по-прежнему справедливо уравнение (7.14).

В общем виде решения уравнений (7.14) и (7.17) можно представить соответственно следующими выражениями:

$$\Psi_I(x) = A_1\sin(\kappa_1 x) + B_1\cos(\kappa_1 x), \tag{7.18}$$

$$\Psi_{II}(x) = A_2\sin[\kappa_2(x-a)] + B_2\cos[\kappa_2(x-a)]. \tag{7.19}$$

Из граничного условия $\Psi_I(0) = 0$ следует, что $B_1 = 0$.

Так как на границах потенциальной ямы должны быть непрерывны волновые функции $\Psi_i(x)$ и их производные $\Psi_i'(x)$ (здесь $i = I, II$), то при $x = a$ должны выполняться равенства:

$$\Psi_I(a) = \Psi_{II}(a); \tag{7.20}$$

$$\Psi_I'(a) = \Psi_{II}'(a). \tag{7.21}$$

Записав уравнения (7.20) и (7.21) с учетом (7.18) и (7.19) при $B_1 = 0$, выразим коэффициенты A_2 и B_2 через коэффициент A_1:

$$A_2 = \frac{\kappa_1 A_1}{\kappa_2}\cos(\kappa_1 a); \qquad B_2 = A_1\sin(\kappa_1 a). \tag{7.22}$$

Эти условия могут быть всегда удовлетворены (то есть при любом значении κ_1). Поэтому если $E > U_0$, спектр энергии непрерывен и частица в своем движении не локализована в конечной области пространства (ее движение инфинитно).

2. Допустим теперь, что $E < U_0$. В этом случае уравнение Шрёдингера для второй области может быть представлено в форме

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} - k^2\Psi_{II} = 0, \qquad (7.23)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) > 0.$ (7.24)

В области I, как и ранее, уравнение Шрёдингера имеет вид (7.14).

Решения уравнений (7.14) и (7.23) могут быть представлены соответственно выражениями:

$$\Psi_I = A_1 \sin(\kappa_1 x); \qquad (7.25)$$

$$\Psi_{II} = C_2 e^{-kx} + D_2 e^{kx}. \qquad (7.26)$$

Так как функция e^{kx} при $k > 0$ и $x > 0$ неограниченно растет, а функция состояния $\Psi(x)$ должна быть везде конечной, необходимо в (7.26) положить $D_2 = 0$.

Воспользовавшись граничными условиями (7.20) и (7.21), получим:

$$A_1 \sin(\kappa_1 a) = C_2 \exp(-ka), \qquad (7.27)$$

$$A_1 \kappa_1 \cos(\kappa_1 a) = -kC_2 \exp(-ka). \qquad (7.28)$$

Разделив (7.28) на (7.27), найдем

$$\kappa_1 ctg(\kappa_1 a) = -k. \qquad (7.29)$$

Обозначив $\kappa_1 a = y$, это соотношение с учетом (7.15) и (7.24) можно свести к уравнению

$$\sin y = \pm y\hbar / \sqrt{2ma^2 U_0}. \qquad (7.30)$$

Корни уравнения (7.30) можно найти графическим путем, построив в координатных осях (z, y) прямые $z_1 = y\hbar / \sqrt{2ma^2 U_0}$, $z_2 = -y\hbar / \sqrt{2ma^2 U_0}$ и синусоиду $z = \sin y$ (рисунок 7.5) и найдя точки пересечения синусоиды с прямыми. Для того чтобы полученные графически решения удовлетворяли уравнению (7.29), необходимо выбирать только те из них, которые “попадают” в область аргумента y, где $ctg(y)$<0.

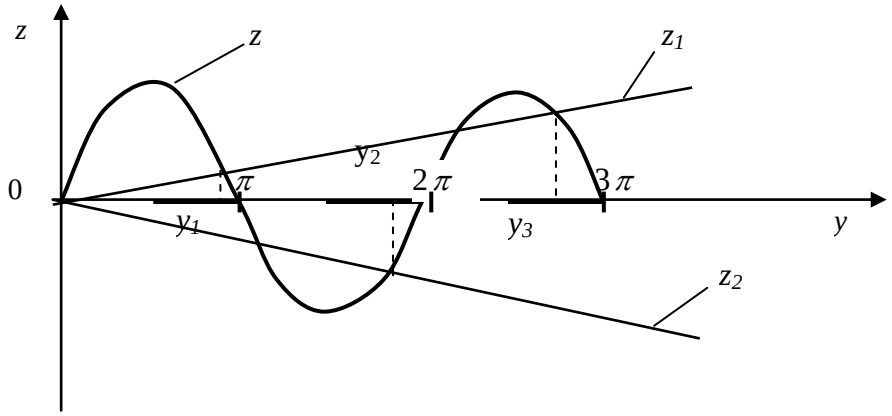

Рисунок 7.5 - К определению корней уравнения (7.30)

На рисунке 7.5 эти области аргумента выделены. Очевидно, что число корней окажется конечным и зависящим от глубины ямы U_0, определяющей тангенсы углов наклона прямых z_1 и z_2.

Корням уравнения (7.30) соответствуют энергии

$$E_n = \frac{\hbar^2(\kappa_n a)^2}{2ma^2}. \qquad (7.31)$$

Здесь $n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots,\ n_{\max}$, при этом $n_{\max}$ соответствует наибольшему номеру точки пересечения синусоиды ($z = \sin y$) с прямыми z_1 и z_2 (рисунок 7.5).

Таким образом, в потенциальной яме конечной глубины имеется конечное число собственных значений энергии. При этом уровни энергии частицы дискретны. Однако такая дискретность уровней становится заметной только для систем, имеющих микроскопические размеры и массы. По порядку величины расстояние ΔE между уровнями для частицы массы m в «глубокой» яме ширины a определяется величиной $\Delta E \sim \hbar^2 / ma^2$. Самый глубокий (основной) уровень энергии лежит выше дна потенциальной ямы.

Если глубина ямы U_0 слишком мала, то может оказаться, что внутри ямы нет ни одного собственного значения энергии – нет стационарного движения частицы в конечной области.

В классической теории частица с энергией $E < U_0$ не может из области I попасть в область II. В квантовой механике такой переход допускается. При $x = a$ функция $\Psi_2(x) \neq 0$ (формула (7.26)) и быстро убывает с возрастанием x в области $x > a$. Это означает, что вероятность проникновения частицы с энергией $E < U_0$ в область $x > a$ отлична от нуля.

Более близкой к реальности модельной задачей является задача о гармоническом осцилляторе.

В классической физике гармоническим осциллятором называют частицу, на которую действует сила, прямо пропорциональная величине отклонения частицы от положения равновесия и направленная к нему. В классической механике возможно решение задачи о гармоническом осцилляторе на основе второго закона Ньютона (динамическое описание). В квантовой механике понятие силы не используется, и информацию о состояниях гармонического осциллятора получают в результате решения уравнения Шрёдингера, в котором оператор потенциальной энергии имеет вид, соответствующий поставленной задаче.

Пусть осциллятор одномерен и положению его равновесия соответствует точка $x = 0$. Тогда потенциальная энергия гармонического осциллятора (и явный вид оператора потенциальной энергии) определяется функцией

$$U = \frac{kx^2}{2}, \qquad (7.32)$$

где k – коэффициент упругости. В положении равновесия потенциальная энергия минимальна $\left(U(x=0)=0\right)$.

Следовательно, в квантовой механике задачу о гармоническом осцилляторе можно свести к проблеме частицы, движущейся в параболической потенциальной яме (рисунок 7.6).

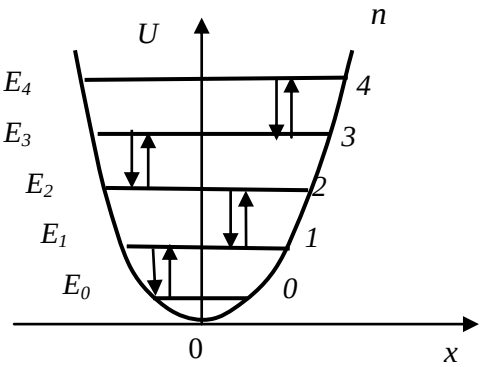

Рисунок 7.6 – Потенциальная яма, соответствующая гармоническому осциллятору

В таком подходе уравнение Шрёдингера для стационарных состояний одномерного осциллятора имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{kx^2}{2}\Psi=E\Psi\,. \qquad (7.33)$$

Введем новые переменные

$$\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}; \qquad \xi=x\sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}} \qquad (7.34)$$

и преобразуем (7.33):

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}+\left(\lambda-\xi^2\right)\Psi=0\ . \qquad (7.35)$$

При условии $\xi^2 >> \lambda$ асимптотическое решение уравнения (7.35) имеет вид

$$\Psi_{ac}=e^{\pm\xi^2/2}, \qquad (7.36)$$

Решение со знаком (+) следует отбросить как противоречащее требованию конечности волновой функции. Волновую функцию Ψ будем искать в виде

$$\Psi=\Psi_{ac}\quad \upsilon(x)=e^{\ \xi^2/2}\quad \upsilon(x)\ , \qquad (7.37)$$

а функцию $\upsilon(x)$ представим в виде ряда

$$\upsilon(x)=a_0+a_1\cdot\xi+a_2\cdot\xi^2+...+a_k\cdot\xi^k+... \qquad (7.38)$$

С использованием выражений (7.37) и (7.38) уравнение (7.35) приобретает вид:

$$\sum_{k=2}^{\infty}k(k-2)a_k\xi^{k-2}-2\xi\sum_{k=1}^{\infty}ka_k\xi^{k-1}+(\lambda-1)\sum_{k=0}^{\infty}a_k\xi^k=0. \qquad (7.39)$$

Приравнивая нулю сумму коэффициентов при одинаковых степенях ξ в последнем уравнении, получаем следующие рекуррентные соотношения:

$$a_{k+2} = a_k(2k-\lambda+1)/[(k+2)(k+1)]. \qquad (7.40)$$

При $k \to \infty$ получаем

$$a_{k+2}/a_k \approx 2/k.$$

Это означает, что функция (7.38), представляемая бесконечным рядом, растет как e^{ξ^2}. Тогда функция (7.37) при $\xi \to \infty (x \to \infty)$ стремится к бесконечности. Чтобы волновая функция оставалась во всем пространстве конечной, необходимо оборвать ряд (7.38) на n-м члене, то есть потребовать, чтобы при $a_n \neq 0$ выполнялось условие $a_{n+2} = 0$. Тогда из (7.40), приравнивая его правую часть к нулю, получим

$$\lambda_n = 2n+1. \qquad (7.41)$$

Комбинируя выражения для λ_n (7.41) и (7.34) можно получить выражение для собственных значений энергии:

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2), \qquad (7.42)$$

где n = 0, 1, 2, ….

Из (7.42) следует, что спектр энергий гармонического осциллятора дискретен (т.е. энергия квантована) и энергетические уровни эквидистантны (рисунок 7.6). Кроме того, из выражения для энергии следует, что при $n = 0$ осциллятор имеет отличную от нуля минимальную (так называемую «нулевую») энергию: $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$; то есть осциллятор не может находиться на дне ямы. Можно показать, что величина E_0 – наименьшее значение энергии, совместимое с соотношением неопределенностей.

Сравнивая диаграммы энергетических уровней для частиц, находящихся в бесконечно глубокой потенциальной яме, потенциальной яме конечной глубины и для гармонического осциллятора видим, что спектр возможных энергий микрообъекта зависит от формы потенциальной кривой $U(x)$.

Волновая функция Ψ_n, принадлежащая собственному значению энергии E_n, выражается формулой:

$$\Psi = C_n \cdot P_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \qquad (7.43)$$

где $P_n(\xi)$ – полином Эрмита n-й степени, C_n – нормировочные коэффициенты [1].

На рисунке 7.7 сплошными кривыми изображены распределения плотности вероятности обнаружения микрочастицы в состояниях $\Psi(x)$ при n = 0, 1, 2. Вертикальные линии проведены через точки, соответствующие амплитудным значениям координат классического осциллятора с энергиями

[1] Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – М.: Наука, 1977. – 742 с.

E_0, E_1, E_2 (соответственно фрагменты *а*, *б*, *в* на рисунке 7.7). Штриховые кривые соответствуют классическому распределению плотности вероятности $P_{кл}(x) = dw_{кл}/dx$, где $dw_{кл}$ – вероятность нахождения материальной точки на участке от x до $x + dx$, рассчитанная в соответствии с ее определением в классической механике. В качестве этой вероятности взято отношение $dw_{кл} = dt/T$, где dt – время пребывания частицы на участке dx, T – период колебаний.

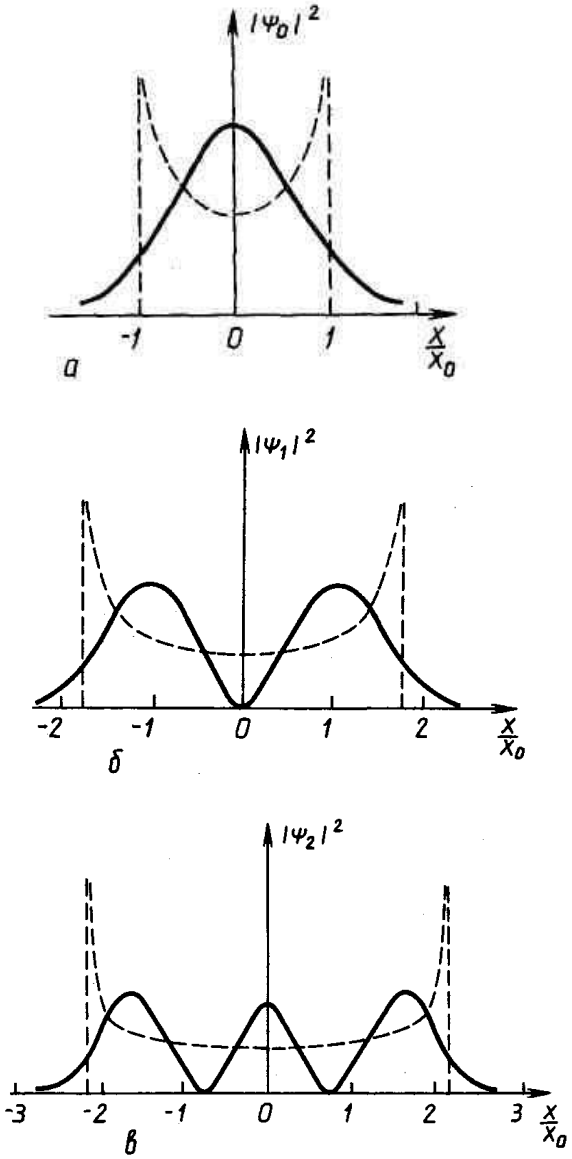

Рисунок 7.7 – Распределение плотности вероятности для гармонического осциллятора в состояниях с энергиями E_0, E_1, E_2

Примером частиц, совершающих малые колебания, могут быть атомы и молекулы в твердом теле. Экспериментально удается доказать наличие нулевой энергии и нулевых колебаний атомов путем наблюдения рассеяния света кристаллами. Рассеяние света обусловлено колебаниями атомов. По мере уменьшения температуры амплитуда колебаний, согласно классической теории, должна неограниченно уменьшаться, а вместе с тем должно исчезать

и рассеяние света. Между тем на опыте установлено, что интенсивность рассеянного света по мере уменьшения температуры стремится к некоторому предельному значению. Это означает, что и при температуре абсолютного нуля колебания атома не прекращаются. Тем самым подтверждается наличие нулевых колебаний атомных систем.

Классический осциллятор колеблется с циклической частотой $\omega = \sqrt{k/m}$, где m – масса частицы, и излучает свет лишь с одной частотой ω. Казалось бы, что в соответствии с правилом частот Бора в квантовом случае вследствие эквидистантности энергетических уровней возможно излучение со всевозможными кратными частотами $N\omega$ (N– целое число). В действительности этого не происходит. Возможность кратных частот исключается *правилами отбора* по *колебательному квантовому числу* n. Разрешенными являются только квантовые переходы, в которых это квантовое число изменяется на единицу (смотри рисунок 7.6):

$$\Delta n = \pm 1. \qquad (7.44)$$

В квантовой механике это правило выводится при расчете вероятностей переходов между стационарными состояниями осциллятора.

Задачи по теме лекции 7

Лабораторная работа
Стационарные состояния электрона в одномерных потенциальных ямах (теория и задание, компьютерное моделирование)

Программа для решения уравнения Шрёдингера для одномерной прямоугольной потенциальной ямы