6. Одномерные задачи атомной физики

6.1. Решите уравнение Шрёдингера для свободного электрона в пространстве с постоянным потенциалом.

6.2. Решите уравнение Шрёдингера для электрона в потенциальном поле, задаваемом функцией следующего вида: $U(x)=\begin{cases}0, & x<0,\\ U_0, & x\geq 0.\end{cases}$ Рассмотрите два случая: $E > U_0$ и $E < U_0$. Найдите коэффициенты отражения и пропускания потенциальной ступеньки.

6.3. Решите уравнение Шрёдингера для электрона, находящегося в прямоугольной потенциальной яме со следующими параметрами: высоты левой и правой стенок равны U_1 и U_2 соответственно, ($U_1 > U_2$), ширина ямы равна a.

6.4. Найдите собственные функции и собственные значения энергии электрона, находящегося в потенциальном ящике шириной a.

6.5. Найдите число энергетических состояний для прямоугольной потенциальной ямы, параметры которой заданы в условии задачи 6.3. Рассмотрите частные случаи симметричной ямы ($U_1 = U_2 = U_0$) и асимметричной ямы, когда $U_1 \to \infty$, $U_2 = U_0$.

6.6. Найдите собственные функции и собственные значения энергии электрона, находящегося в двумерном потенциальном ящике с линейными размерами a и b по осям x и y соответственно.

6.7. Найдите для электрона коэффициент прозрачности прямоугольного потенциального барьера высотой U_0 и шириной a. Постройте график зависимости коэффициента прозрачности от энергии электрона при $U_0 = 10$ эВ и $a = 5$ Å.

Пример решения типовой задачи

6.5. Найдите число энергетических состояний для прямоугольной потенциальной ямы, параметры которой заданы в условии задачи 6.3. Рассмотрите частные случаи симметричной ямы ($U_1 = U_2 = U_0$) и асимметричной ямы, когда $U_1 \to \infty$, $U_2 = U_0$.

Решение. Выражение для энергии стационарного состояния в прямоугольной потенциальной яме, параметры которой заданы в условии задачи 6.3, имеет вид:

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m(a+\Delta_1+\Delta_2)^2}n^2,$$

где n – номер состояния (квантовое число), n = 1, 2, 3,…; m – масса частицы, a – ширина ямы; $\Delta_{1,2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE_n}} \arcsin\sqrt{\frac{E_n}{U_{1,2}}}$ – т. н. величины проникновения гармонического решения внутрь потенциальных барьеров.

Тогда число уровней энергии N в такой яме определится целой частью от выражения:

$$n = \frac{\sqrt{2mE_n}(a + \Delta_1 + \Delta_2)}{\pi\hbar}.$$

После подстановки в последнее равенство выражений для Δ_1 и Δ_2 получим:

$$N = \left[\frac{a\sqrt{2mU_2}}{\pi\hbar} + \frac{1}{\pi}\arcsin\sqrt{\frac{U_2}{U_1}} + \frac{1}{2} \right].$$

Для симметричной ямы ($U_1 = U_2 = U_0$):

$$N_{sym} = \left[\frac{a\sqrt{2mU_0}}{\pi\hbar} + 1 \right].$$

Для асимметричной ямы с одной бесконечно высокой стенкой ($U_1 \to \infty$, $U_2 = U_0$):

$$N_{asym} = \left[\frac{a\sqrt{2mU_0}}{\pi\hbar} + \frac{1}{2} \right].$$

Таким образом, прямоугольная симметричная потенциальная яма при любых значениях параметров U_0 и a может «удержать» частицу (т. е. в такой яме имеется хотя бы одно стационарное состояние). Асимметричная яма с одной бесконечно высокой стенкой не всегда имеет хотя бы одно стационарное состояние (если $\frac{a\sqrt{2mU_0}}{\pi\hbar} < \frac{1}{2}$).