

Работа 6 СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ОДНОМЕРНЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЯМАХ

Цель работы Численное решение одномерного стационарного уравнения Шредингера на компьютере, отбор физически приемлемых решений, изучение влияния формы и параметров потенциальной ямы на уровни энергии и волновые функции связанных состояний.

6.1 Уравнение Шредингера и его решения

Стационарное уравнение Шредингера является уравнением на собственные значения оператора Гамильтона $\hat{H}$

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (6.1)$$

где для одномерных задач

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x). \quad (6.2)$$

Таким образом, волновая функция $\Psi(x)$ согласно (6.1) и (6.2) удовлетворяет дифференциальному уравнению второго порядка:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\Psi(x) = 0. \quad (6.3)$$

Здесь $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h – постоянная Планка, m – масса, $U(x)$ – потенциальная, E – полная энергия частицы (электрона).

Специфика конкретной физической задачи заключена в потенциальной функции $U(x)$. Иначе говоря, одна физическая задача отличается от другой видом потенциальной функции $U(x)$, включаемой в уравнение Шредингера.

Решить дифференциальное уравнение Шредингера – это значит найти множество удовлетворяющих ему волновых функций $\Psi(x)$. В принципе, уравнение Шредингера может быть решено при любых значениях полной энергии E , но не все такие математические решения физически приемлемы. Поэтому условие физической приемлемости является существенной частью каждой рассматриваемой задачи.

Физический смысл имеют лишь те решения, для которых волновая функция $\Psi(x)$ является *однозначной, ограниченной, непрерывной и гладкой*. В частности, требование ограниченности связано с *вероятностной интерпретацией* волновой функции, согласно которой выражение $|\Psi(x)|^2 dx$ имеет смысл вероятности обнаружить частицу в промежутке от x до $x + dx$. Это и делает решения, для которых модуль волновой функции $|\Psi(x)|$ неограниченно возрастает при $x \rightarrow \pm \infty$, неприемлемыми.

Значения энергии E , при которых стационарное уравнение Шредингера имеет физически приемлемые решения, – *уровни энергии* – являются собственными значениями оператора Гамильтона. Соответствующие волновые функции являются *собственными функциями* этого оператора.

Можно доказать, что в случае *финитного (ограниченного) движения* энергия E не может быть произвольной, т.е. спектр энергии оказывается дискретным. Случай финитного движения соответствует связанной частице, например, электрону в атоме или нуклону в ядре. В то же время при *инфинитном движении* физически приемлемые решения стационарного уравнения Шредингера получаются для некоторого непрерывного интервала значений энергии E , так что спектр энергии оказывается сплошным. Инфинитное движение, в частности, совершает электрон, оторванный от атома в результате ионизации.

Таким образом, из уравнения Шредингера естественно вытекает важнейшая особенность поведения атомных систем, резко отличающая их от систем, подчиняющихся законам классической механики: ***существование дискретных уровней энергии.***

Отметим также, что волновые функции стационарных состояний, принадлежащих дискретному спектру энергии, можно нормировать на единицу, т.е. путем умножения на нормировочный множитель добиться выполнения условия нормировки вида

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1. \quad (6.4)$$

6.2 Решение уравнения Шредингера с помощью компьютера

При заданных массе частицы m , потенциальной энергии $U(x)$, полной энергии E и определённых граничных условиях, т.е. при выборе численных значений волновой функции $\Psi(x)$ и её производной $\frac{d\Psi}{dx} = \Psi'(x)$ при некотором $x = x_1$:

$$\Psi(x_1) = \Psi_1, \quad \Psi'(x_1) = \Psi'_1$$

на компьютере с помощью соответствующих численных методов можно найти функцию $\Psi(x)$ в достаточно большом интервале значений x , аппроксимирующую (с требуемой точностью) непрерывное, гладкое, однозначное решение уравнения Шредингера.

Существенно, однако, что при произвольно выбранных граничных значениях волновой функции Ψ_1 , её производной Ψ'_1 и полной энергии E эти решения будут практически всегда неограниченно растущими при $x \rightarrow \infty$ или при $x \rightarrow -\infty$.

Можно строго доказать, что в случае финитного движения в симметричной потенциальной яме $U(x) = U(-x)$ все физически приемлемые решения уравнения Шредингера будут либо чётными $\Psi(x) = \Psi(-x)$, либо нечётными $\Psi(x) = -\Psi(-x)$. Это делает возможным (и удобным практически) использование следующих граничных условий:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \Psi_0, & \Psi'(x) &= 0 & (\text{для чётных решений}), \\ \Psi(x) &= 0, & \Psi'(x) &= \Psi'_0 & (\text{для нечётных решений}). \end{aligned}$$

После этого ограниченность или расходимость $\Psi(x)$ будет всецело зависеть от полной энергии E .

Программа позволяет визуализировать процесс поиска физически приемлемых решений уравнения Шредингера и спектра энергии. В окне вывода отображаются:

- потенциальная кривая $U(x)$,
- положение уровня полной энергии E (на фоне кривой $U(x)$),
- графики волновых функций $\Psi(x)$ или их квадратов $|\Psi(x)|^2$ (построенные с использованием уровня энергии E в качестве оси абсцисс).

6.3 Линейный гармонический осциллятор

Как известно, в классической механике частица массы m , находящаяся в силовом поле с потенциальной энергией

$$U(x) = \frac{kx^2}{2}, \quad (6.5)$$

при любом значении $E > 0$ совершает гармонические колебания с частотой

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (6.6)$$

Согласно квантовой механике поведение частицы в тех же условиях определяется уравнением Шредингера. Для стационарных состояний линейного гармонического осциллятора в соответствии с (6.3) и (6.5) оно имеет вид:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{kx^2}{2} \right] \Psi(x) = 0. \quad (6.7)$$

Данное уравнение можно точно решить аналитически. Спектр энергии при этом описывается формулой:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (6.8)$$

Аналитическое решение даёт возможность оценить точность численных методов решения этого уравнения на компьютере.

6.4 Прямоугольная симметричная потенциальная яма

Прямоугольная симметричная потенциальная яма характеризуется своей глубиной U_0 и шириной $L = 2a$. Картина уровней энергии и волновых функций будет особенно простой, если $U_0 \rightarrow \infty$ (яма бесконечной глубины). В этом случае легко найти, что согласно уравнению Шредингера уровни энергии определяются выражением:

$$E_n = E_1 n^2, \quad (6.9a)$$

где

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}, \quad n = 1, 2, 3... \quad (6.96)$$

Вне бесконечной ямы волновые функции равны нулю, а внутри её описываются формулами (6.10а) и (6.10б). Графики этих волновых функций изображены на Рисунке 6.1.

$$\Psi_n(x) = A \cos \frac{\pi x}{2L} n \quad \text{при } n = 1, 3, 5... \quad (6.10a)$$

$$\Psi_n(x) = A \sin \frac{\pi x}{2L} n \quad \text{при } n = 2, 4, 6... \quad (6.10б)$$

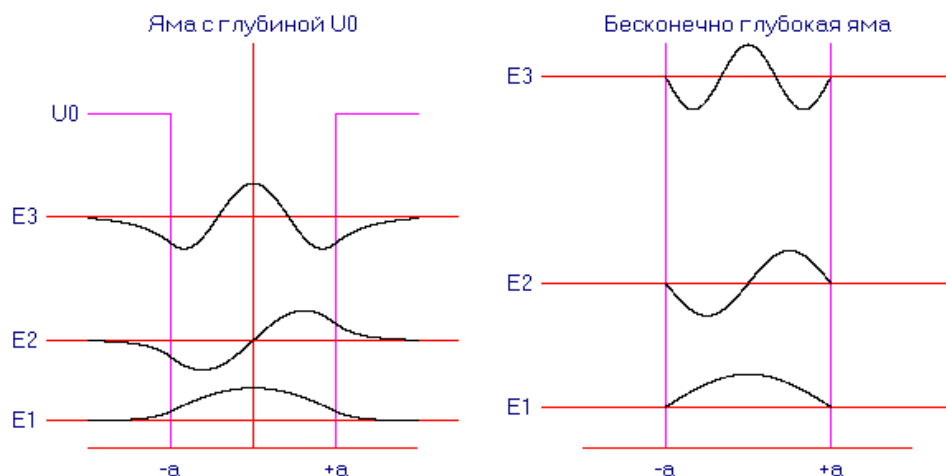


Рис. 6.1

Картины уровней и волновых функций для ям конечной и бесконечной глубины некоторых деталях отличаются друг от друга. Решение на компьютере позволяет проследить за этими отличиями.

6.5 Порядок выполнения работы

6.5.1 Проверочные вопросы

Чтобы перейти к выполнению лабораторной работы, необходимо ответить на несколько проверочных вопросов. Кнопка **“Основные вопросы теории и как управлять программой”** открывает файл

справки, который нужно прочесть при первом знакомстве с программой.

Каждый вопрос находится на отдельной закладке, имя которой соответствует номеру вопроса. Переключая закладки, можно получить доступ к любому вопросу. После того, как вы ответили на все вопросы, нужно нажать кнопку **”Готово”**. Если вы ответили на все вопросы правильно, то откроется главное окно программы, и вы можете приступить к выполнению работы. Если вы ответили неправильно хотя бы на один вопрос, то вы не сможете выполнять работу до тех пор, пока не найдёте и не исправите ошибку.

Ответ на вопрос заключается в том, чтобы поставить значок возле всех правильных вариантов ответа (их может быть несколько).

6.5.2 Управление программой

При запуске программы появляется заглавное окно, после чего, нажав кнопку **“Ok”**, следует ответить на проверочные вопросы. После этого открывается главное окно программы, в котором слева находится панель ввода данных, справа – окно вывода, сверху – меню и панель инструментов.

Программа может работать в двух режимах: ручном и автоматическом. В ручном режиме студент самостоятельно задаёт значение энергии E , а программа строит волновую функцию, соответствующую этому значению энергии E . В автоматическом режиме программа сама находит уровни энергии E и строит соответствующие им волновые функции. Значения этих уровней энергии выводятся в таблицу. Для автоматического нахождения уровней программа использует данные, введённые в ручном режиме, а именно: полуширину и глубину ямы. Чтобы изменить эти параметры, необходимо вернуться в ручной режим.

Чтобы автоматический режим стал доступен, нужно найти несколько уровней энергии E самостоятельно.

Процесс поиска уровня энергии E заключается в следующем: величину энергии E изменяют до тех пор, пока при значении E чуть меньше предыдущего волновая функция не будет расходиться (т.е. стремиться либо к $+\infty$, либо к $-\infty$) в одном направлении, а при значении E чуть больше предыдущего – в противоположном направлении. Ширину этой “вилки” энергий сужают настолько, чтобы она сравнялась с требуемой точностью определения собственного значения E (четыре знака после запятой).

Панель ввода данных состоит из переключателя режимов, группы “Параметры” и группы “Чётность функции”. Группа “Параметры” состоит из трёх полей для ввода значений, последнее из которых недоступно в первой части работы. Однако после перехода ко второй части ввод данных будет возможен во всех полях.

Для ввода значения энергии E следует набрать некоторое вещественное число и нажать клавишу “Enter”. Аналогично осуществляется ввод остальных параметров.

В группе “Чётность функции” переключение осуществляется с помощью мыши или управляющих клавиш: “Стрелка вправо” или “Стрелка влево”. Переключаться между группами можно с помощью клавиши “Tab” или мыши.

Окно вывода предназначено для отображения одного или нескольких графиков волновой функции. Используя команду “Размещать окно в экране” в меню “Настройки”, можно увеличить размер окна, а следовательно, и масштаб графиков. При этом изображение можно прокручивать или “таскать” мышкой. Это удобно, если вы хотите рассмотреть мелкие детали. Если флажок с команды меню “Размещать окно в экране” снят, то размер окна можно менять, используя команду “Размер окна”.

Меню “Программа” состоит из команд:

- “Справка” – открывает файл справки (теория, задание, управление программой);
- “Описание” – открывает диалог с описанием лабораторной работы;
- “Выход” – выход из программы.

Меню “Настройки” состоит из команд:

- “Квадрат волновой функции” – строит графики квадрата волновой функции;
- “Сравнить с бесконечно глубокой ямой” – отображает две ямы: конечной и бесконечной глубины вместе с волновыми функциями (команда доступна только в автоматическом режиме второй части лабораторной работы);
- “Сравнить с ямами удвоенной глубины и ширины” – отображаются три ямы вместе с волновыми функциями для сравнения (команда доступна только в автоматическом режиме второй части лабораторной работы);
- “Размещать окно в экране” – позволяет изменять размеры окна вывода следующей за ней командой;
- “Размеры окна” – изменяет размер окна;

– “**Масштабировать на всё окно**” – при снятии флажка с этой команды изображение будет выводиться на экран с фиксированным коэффициентом масштабирования по вертикали, что позволяет менять форму потенциальной ямы.

Меню “Работа” позволяет осуществлять переход между частями лабораторной работы. Ко второй части можно переходить, если в первой несколько уровней энергии E найдено самостоятельно.

Меню “Изображение”. Команда “**Сохранить в файл**” позволяет сохранять имеющееся в окне вывода изображение на диске в виде файла. Для этого необходимо ввести имя файла и сохранить его. Команда “**Распечатать**” позволяет распечатать изображение из окна вывода на принтер.

6.6 Задание

1. Для линейного гармонического осциллятора с заданным коэффициентом жесткости (значение k задает преподаватель) найти уровни энергии и волновые функции основного и нескольких ближайших к нему возбуждённых состояний. Самостоятельно нужно найти два значения энергии, при которых волновая функция будет ограничена, затем можно перейти в автоматический режим и найти остальные уровни.

Зарисовать графики собственных функций и их квадратов вместе с графиком параболической потенциальной ямы (это удобно делать в автоматическом режиме). Обратить внимание на проникновение частицы в классически запрещенную область.

Сравнить найденные собственные значения с рассчитанными по формуле (6.8)

$$E_n = \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

положив в ней $\hbar = 1$ и $m = 1$. Сделать выводы о точности использованного численного метода решения уравнения Шредингера.

2. Провести численное решение уравнения Шредингера для связанных состояний трёх прямоугольных потенциальных ям, две из которых имеют одинаковую ширину, и две – одинаковую глубину (параметры ямы задает преподаватель). Найти все дискретные уровни энергии E_n и соответствующие волновые функции $\Psi_n(x)$ для этих ям. Для каждой ямы зарисовать графики собственных функций $\Psi_n(x)$ и их

квадратов $|\Psi_n(x)|^2$, расположив их друг над другом и отметив на них координаты стенок ямы. Оценить глубину проникновения частицы в классически запрещенную область.

3. Построить в масштабе диаграммы уровней энергии для всех трех ям и выяснить, как влияют на положение уровней ширина и глубина ямы.

Сравнить найденные значения уровней энергии с уровнями энергии бесконечно глубокой ямы той же ширины. Дать качественное объяснение их различия. Выяснить характер зависимости глубины проникновения от положения уровня энергии и дать ей объяснение.

4. Найти значения ширины в нанометрах для "реальных" ям, удерживающих электрон, приняв, что глубина этих ям и расположенные в них уровни, выраженные в электронвольтах, численно совпадают с соответствующими значениями для исследованных "безразмерных" ям (т.е. со значениями, вычисленными при $\hbar = 1$ и $m = 1$).

5. Из условия нормировки (6.4) с помощью выражений (6.10а), (6.10б) найти значения амплитудных коэффициентов A для бесконечно глубокой ямы.

6. Выяснить связь между номером уровня энергии и числом узлов соответствующей волновой функции для всех рассмотренных случаев.

6.7 Контрольные вопросы

1. Какому дифференциальному уравнению и каким условиям должна удовлетворять волновая функция стационарного состояния электрона?

2. В каких случаях спектр энергии дискретен, а в каких – непрерывен?

3. В чем состоит вероятностная интерпретация волновой функции? В каком случае волновую функцию можно нормировать на единицу?

4. Что такое собственные функции и собственные значения оператора? Какой смысл они имеют для оператора Гамильтона $\hat{H}$?

5. Какой вид имеет оператор Гамильтона для одномерных задач? Для линейного гармонического осциллятора? Для прямоугольной потенциальной ямы?

6. В чем состоит процедура нахождения волновых функций и уровней энергий с помощью персонального компьютера?

7. Какие значения принимает волновая функция и ее первая производная при $x = 0$ для симметричной потенциальной ямы?
8. Какой формулой описывается расположение уровней энергии в прямоугольной потенциальной яме бесконечной высоты? В параболической потенциальной яме?
9. Какую механическую систему называют линейным гармоническим осциллятором?
10. Как из уравнения Шредингера вывести формулы (9) и (10)?
11. Как ведут себя разности энергий соседних уровней энергии для линейного гармонического осциллятора и для прямоугольной потенциальной ямы? Как зависит их густота от ширины и глубины ямы, от массы частицы, от коэффициента жесткости k ?