3.3. Частица в потенциальной яме

3.3.1. Одномерная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками

Пусть частица совершает одномерное движение вдоль оси x в потенциальной яме, изображенной на рис. 3.1. Математически одномерный потенциал записывается в виде:

$$U=\begin{cases}0 & 0\le x\le a\\ \infty & x>a,\ x<0\end{cases} \qquad (3.3.1)$$

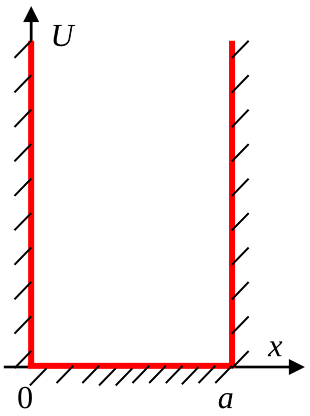

Рис. 3.1.

Стационарное уравнение Шредингера имеет вид:

$$\hat{H}\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi+U\Psi=E\Psi \qquad (3.3.2)$$

Запишем это уравнение для области внутри ямы, где потенциальная энергия равна нулю:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)=E\Psi(x) \qquad (3.3.3)$$

Преобразуем уравнение к виду:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2}+k^2\Psi=0 \quad \text{или} \quad \Psi''+k^2\Psi=0 \qquad (3.3.4)$$

где ввели волновое число:

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (3.3.5)$$

Решения вне ямы не существует, поскольку там потенциальная энергия равна бесконечности, и частица не может находиться вне ямы. Для учета этого обстоятельства введем граничные условия, запрещающие частице находиться на левой и правой стенках потенциальной ямы:

$$\Psi(0)=\Psi(a)=0 \qquad (3.3.6)$$

Общее решение уравнения (3.3.4) представляем в виде:

$$\Psi=A\sin kx+B\cos kx \qquad (3.3.7)$$

Для определения коэффициентов в решении (3.3.7) используем граничные условия:

при x = 0, $\Psi(0)=B=0$, откуда получаем коэффициент B = 0.

при x = a, $\Psi(a)=A\sin ka=0$, откуда получаем, что $\sin ka=0$, и $ka=\pm n\pi$ (коэффициент $A\neq 0$, иначе внутри вообще нет частицы), где n = 1,2,3,...

Фактически полученное равенство

$$ka=\pm n\pi \qquad (3.3.8)$$

есть *условие квантования уровней энергии* в потенциальной яме с бесконечными стенками, поскольку решения отличные от нуля имеются только при определенном наборе волновых чисел.

Итак, получаем окончательно решение уравнения (3.3.4):

$$\Psi_n=A\sin\frac{n\pi}{a}x \qquad (3.3.9)$$

Эти функции являются собственными функциями гамильтониана из уравнения (3.3.2) при данных граничных условиях (3.3.6).

Примечание 1. Вместо решения (3.3.7) можно было записать общее решение в виде экспонент:

$$\Psi=A\exp(ikx)+B\exp(-ikx)$$

Используя те же граничные условия (3.3.6), получаем то же условие квантования (3.3.8) и решение (3.3.9).

Примечание 2. Об импульсе. Внутри ямы гамильтониан равен $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$ и казалось бы коммутатор оператора импульса с гамильтонианом равен нулю $\left[\hat{p},\hat{H}\right]=\left[\hat{p},\frac{\hat{p}^2}{2m}\right]=0$. При этом получаем, что энергия E и импульс p для электрона в бесконечной потенциальной яме одновременно измеримы. Однако, это не так. Собственная волновая функция импульса $\psi_p = C\,exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)$ не удовлетворяет поставленным граничным условиям. Импульс только по модулю имеет постоянное значение, но сам импульс p не имеет определенного значения.

Подставляя условие квантования в уравнение (3.3.5), получаем уровни энергии:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \tag{3.3.10}$$

Итак, *энергия частицы в потенциальной яме принимает дискретные значения*. Состояние частицы описывается соответствующими волновыми функциями (3.3.9). При этом постоянную A находим из условия нормировки:

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

Отсюда получаем коэффициент A:

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \tag{3.3.11}$$

Окончательно запишем собственные функции и собственные энергии:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$
$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \tag{3.3.12}$$

где квантовое число $n = 1,2,3,...$определяет номер состояния. На рисунке 3.2 построены графики энергии, волновых функций (рис. 3.2 А) и плотности вероятности (рис. 3.2 Б) нахождения частицы внутри ямы для различных значений n:

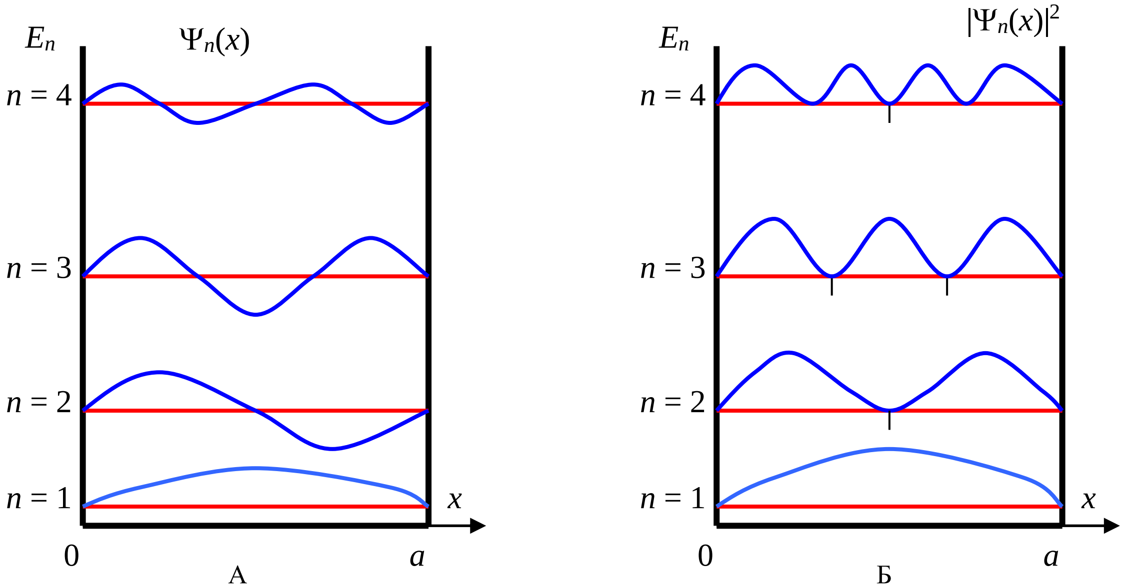

Рис. 3.2.

При $n = 1$ мы имеем низшее значение энергии частицы

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{3.3.13}$$

Наименьшее значение энергии можно оценить так же из соотношения неопределенностей: $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$. Здесь $\Delta x = a$, $\Delta p \sim p = \sqrt{2mE}$, тогда получаем:

$$a \cdot \sqrt{2mE} \geq \hbar$$

и отсюда

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \qquad (3.3.14)$$

Примечание 3. В этой простой задаче те же значения энергии можно так же получить исходя из правил квантования Бора-Зоммерфельда (или что то же самое, из стоячих волн де Бройля): $\oint p_x dx = n2\pi\hbar$. Считая интеграл от 0 до a и обратно, получаем:

$$2a \cdot \sqrt{2mE} = n2\pi\hbar \qquad (3.3.15)$$

откуда получаем то же выражение для энергии (3.3.12).

Расстояние между соседними уровнями равно:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n+1) \qquad (3.3.16)$$

При больших значениях номера уровня n ($n >> 1$), имеем:

$$\Delta E_n \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} n \qquad (3.3.17)$$

Оценим расстояние между уровнями для нескольких случаев:

1). Атомы или молекулы находятся в сосуде с размерами $a \sim 1$ *см*. Масса молекулы $m \sim 10^{-23}$ *г*. Энергии квантованы, но какое расстояние между уровнями энергии:

$$\Delta E_n \sim \frac{(3.14)^2 \cdot (1.05)^2 10^{-54}}{1 \cdot 10^{-23}} n \sim 10^{-30} n \quad (\textit{эрг}) \qquad (3.3.18)$$

Т.е. расстояние между уровнями чрезвычайно мало, уровни расположены очень густо. Для наших приборов они представляют практически сплошной спектр. Дискретность уровней никак не сказывается на движении молекул в таком сосуде.

2). Примерно те же условия имеем для электронов в металле. Свободные или валентные электроны находятся в “потенциальной яме”, размеры которой пусть также порядка $a \sim 1$ *см*. Тогда расстояние между уровнями (при массе электронов $m \sim 10^{-27}$ *г*) равно:

$$\Delta E_n \sim 10^{-26} n\ (\textit{эрг}) \approx 10^{-14} n\ (\textit{эВ}) \qquad (3.3.19)$$

Рис. 3.3.

Расстояние между уровнями также чрезвычайно мало, и дискретность уровней не сказывается на движении электронов в металле.

3). Иное дело для электронов, находящихся в яме с размерами порядка размеров атома $a \sim 10^{-8}$ *см*. В этом случае расстояние между уровнями весьма существенно:

$$\Delta E_n \sim 10^{-10} n\ (\textit{эрг}) \approx 10^2 n\ (\textit{эВ}) \qquad (3.3.20)$$

Поэтому в объектах с подобными размерами необходимо учитывать дискретность энергетических уровней.

Дополнение 1. Рассмотрим 3-х мерную прямоугольную яму с бесконечными стенками. Пусть размеры ямы равны: a, b, c. Внутри ямы потенциальная энергия равна нулю: $U = 0$ при $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$, $0 \leq z \leq c$. На границах $U = \infty$. Движение частицы в яме происходит независимо вдоль осей x, y и z. Тогда волновая функция может быть представлена в виде произведения функций, отдельно зависящих от каждой из координат, и полная функция имеет вид:

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\frac{n_1\pi}{a} x \cdot \sin\frac{n_2\pi}{b} y \cdot \sin\frac{n_3\pi}{c} z \qquad (3.3.21)$$

При этом энергия равна сумме энергий движений по всем трем осям:

$$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right) \qquad \text{при} \qquad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, ... \tag{3.3.22}$$

Когда размеры ямы: a, b, c соизмеримы, либо $a = b$ ($b = c$), либо $a = b = c$ возникают вырожденные уровни энергии. Это когда одному и тому же значению энергии соответствуют несколько состояний, описываемых различными функциями.

3.3.2. Одномерная потенциальная яма с конечными стенками

Рассмотрим одномерную прямоугольную яму со стенками конечной высоты (см рис. 3.4). Определим возможные значения энергии и волновые функции частицы в такой яме. Расположим начало координат на дне ямы симметрично относительно стенок:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ U_0, & x > \frac{a}{2};\ x < -\frac{a}{2} \end{cases} \tag{3.3.23}$$

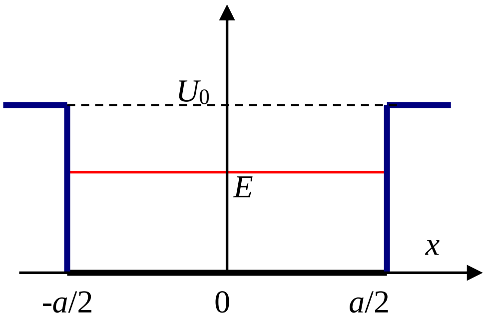

Рис. 3.4.

Это симметричная яма $U(x) = U(-x)$, и при решении задачи этим воспользуемся ниже.

Решения уравнения Шредингера рассмотрим в 2-х областях отдельно: внутри и вне ямы. Для этих областей мы получаем различные решения. Для получения общего решения необходимо “сшивать” эти решения на границе ямы в силу непрерывности волновой функции и ее производных. Для этого необходимо приравнять значения волновой функции и их производных на границах.

1). При энергии частицы $E > U_0$ имеем непрерывный спектр энергий, – частица пролетает над ямой и может иметь любую энергию. В самом деле, в области координат самой ямы имеем уравнение типа (3.3.4):

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \tag{3.3.24}$$

Вводя волновое число, как и ранее в (3.3.5) $k_0' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$, записываем решение в этой области:

$$\psi(x) = A_1 \cos k_0'x + B_1 \sin k_0'x \tag{3.3.25}$$

В областях вне ямы имеем уравнение:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0 \tag{3.3.26}$$

Вводя новое волновое число $k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)}$, получаем аналогичное решение вне ямы:

$$\psi(x) = A\cos k_0 x + B\sin k_0 x \tag{3.3.27}$$

Далее сшиваем эти решения (3.3.25) и (3.3.27) на границе $x = \pm\frac{a}{2}$, то есть на границе приравниваем сами функции и их производные. При этом в силу симметрии достаточно рассмотреть эти соотношения только при одной границе, например при $x = \frac{a}{2}$.

$$A_1 \cos\frac{k_0'a}{2} + B_1 \sin\frac{k_0'a}{2} = A\cos\frac{k_0a}{2} + B\sin\frac{k_0a}{2}$$

$$-A_1k_0' \sin\frac{k_0'a}{2} + B_1k_0' \cos\frac{k_0'a}{2} = -Ak_0 \sin\frac{k_0a}{2} + Bk_0 \cos\frac{k_0a}{2}$$

Из полученных уравнений определяются коэффициенты при осциллирующих функциях, и оказывается, что система уравнений имеет решения при любых k_0'. Это означает, что любые энергии частицы разрешены. Таким образом, при $E > U_0$ имеем сплошной спектр.

2). Рассмотрим подробнее случай, когда энергия частицы меньше высоты ямы $E < U_0$. В этом случае мы получаем дискретный спектр энергий, т.е. связанные состояния, когда волновая функция $\psi \to 0$ при удалении ее от ямы. Для двух областей имеем следующие уравнения и их решения:

1). $|x| < a/2$ $\quad \psi'' + k^2\psi = 0, \quad k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2},$

$$\psi_< = A\sin kx + B\cos kx \tag{3.3.28}$$

2). $|x| > a/2$ $\quad \psi'' - \alpha^2\psi = 0, \quad \alpha^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = \kappa^2 - k^2, \quad \kappa^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}U_0$

$$\psi_> = C_1 e^{-\alpha x} + C_2 e^{\alpha x} \tag{3.3.29}$$

Здесь удобно ввести понятие *четности состояний*. Введем оператор четности $\hat{P}$ с помощью соотношения:

$$\hat{P}\psi(x) = \lambda\psi(-x). \tag{3.3.30}$$

Собственные числа оператора четности могут быть получены, если повторно подействовать оператором четности $\hat{P}$ на уравнение (3.3.30). При этом получаем исходную волновую функцию:

$$\hat{P}\hat{P}\psi(x) = \lambda^2\psi(x) = \psi(x)$$

Откуда получаем значения собственных чисел $\lambda = \pm 1$. Когда $\lambda = 1$, то получаем “*четное*” состояние, если $\lambda = -1$, то имеем “*нечетное*” состояние. Легко видеть, что оператор четности коммутирует с гамильтонианом рассматриваемой задачи, поскольку $U(x) = U(-x)$:

$$\left[\hat{P}, \hat{H}\right] = 0. \tag{3.3.31}$$

Таким образом получаем, что четность и энергия одновременно могут иметь определенные значения, значит, все получающиеся состояния имеют определенную четность: *либо нечетные, либо четные*. Рассмотрим эти состояния поочередно.

Нечетные состояния.

Запишем решения уравнений (3.3.28) $\psi_<$ и (3.3.29) $\psi_>$ для нечетных состояний

$$\psi_< = A\sin kx$$

$$\psi_> = \begin{cases} C\,exp(-\alpha x), & x > a/2 \\ -C\,exp(\alpha x), & x < -a/2 \end{cases} \tag{3.3.32}$$

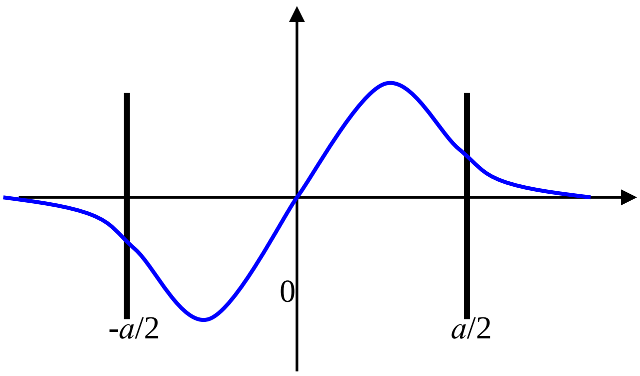

Рис. 3.5.

Бесконечно растущие решения в областях за пределами ямы не подходят, поскольку волновая функция стремится к бесконечности при $x \to \pm\infty$. Поэтому в (3.3.32) оставляем только затухающие решения. Таким образом, видно, что частица проникает в области вне ямы, при этом $L \sim 1/\alpha$ – глубина проникновения частицы под барьер.

Из условия непрерывности волновой функции и ее производной на границе $x = a/2$ получаем следующие соотношения :

$$\begin{cases} A\sin\dfrac{ka}{2} = C\,exp\left(-\dfrac{\alpha a}{2}\right) \\ kA\cos\dfrac{ka}{2} = -\alpha C\,exp\left(-\dfrac{\alpha a}{2}\right) \end{cases} \tag{3.3.33}$$

Простейшее решение (3.3.32) изображено на рисунке 3.5. Делением верхнего уравнения (3.3.33) на нижнее уравнение получаем:

$$tg\frac{ka}{2} = -\frac{k}{\alpha} \tag{3.3.34}$$

Это уравнение, следующее из граничных условий, определяет энергии разрешенных состояний. То же самое уравнение получим в силу симметрии из граничного условия при $x = -a/2$, поэтому его не рассматриваем. Введем следующее обозначение:

$$t = \frac{ka}{2},$$

тогда для правой части (3.3.34) получаем из (3.3.29):

$$\frac{k}{\alpha} = \frac{t}{\left(\frac{a\alpha}{2}\right)} = \frac{t}{\sqrt{\left(\frac{\kappa a}{2}\right)^2 - \left(\frac{ka}{2}\right)^2}} = \frac{t}{\sqrt{\tau^2 - t^2}},$$

где введен параметр *мощности ямы*:

$$\tau = \frac{a}{\hbar}\sqrt{\frac{mU_0}{2}}. \qquad (3.3.35)$$

Итак, для определения спектра (разрешенных уровней энергии) будем решать трансцендентное уравнение:

$$tgt = -\frac{t}{\sqrt{\tau^2 - t^2}} \qquad (3.3.36)$$

Рассмотрим решение этого уравнения графически (см рис. 3.6): построим отдельно правую и левую части уравнения. Точки пересечения дают корни этого уравнения. Из рисунка 3.6 видно, решения имеются не при всех τ. Чем больше мощность ямы τ, тем больше корней уравнения – больше разрешенных уровней энергии.

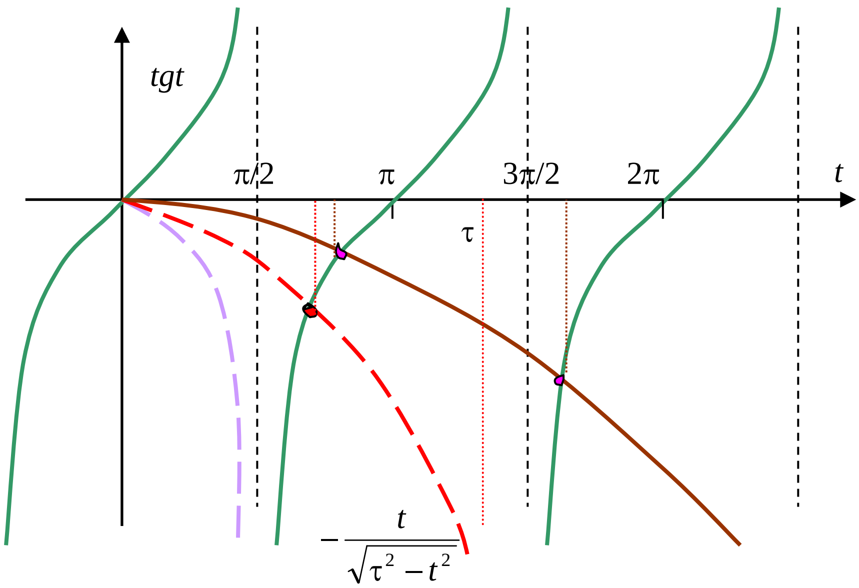

Рис. 3.6.

При уменьшении τ число корней уменьшается. А при мощности $\tau < \pi/2$, т.е. при следующих значениях

$$mU_0 a^2 < 2\frac{\pi^2}{4}\hbar^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2},$$

корней соответствующих нечетным состояниям нет вовсе. При этом напомним, что $t_0 = 0$ и $E_0 = 0$ не являются корнями, т.к. при этом решение внутри ямы равно $\psi_< = Ax$, которое не удовлетворяет граничным условиям.

Итак, касаясь нечетных состояний, получаем следующее:

А) При мощности ямы $\tau < \pi/2$ нет дискретных состояний

Б) При мощности ямы $\pi/2 < \tau < 3\pi/2$ получаем 1 нечетное состояние

В) При мощности ямы $3\pi/2 < \tau < 5\pi/2$ имеем 2 нечетных состояний

и так далее.

Четные состояния.

Запишем теперь решения уравнений (3.3.28) $\psi_<$ и (3.3.29) $\psi_>$ для четных состояний:

$$\begin{cases} \psi_< = B\cos kx \\ \psi_> = D\exp(-\alpha|x|) \end{cases} \tag{3.3.37}$$

На границе ямы при $x = a/2$ запишем условия непрерывности для функции и производной:

$$\begin{cases} B\cos\dfrac{ka}{2} = D\exp\left(-\dfrac{\alpha a}{2}\right) \\ -kB\sin\dfrac{ka}{2} = -\alpha D\exp\left(-\dfrac{\alpha a}{2}\right) \end{cases} \tag{3.3.38}$$

Откуда получаем новое трансцендентное уравнение:

$$tg\frac{ka}{2} = \frac{\alpha}{k} \tag{3.3.39}$$

В силу симметрии то же уравнение дают граничные условия при $x = -a/2$. Введя те же обозначения: $t = \dfrac{ka}{2}$ и $\tau = \dfrac{a}{\hbar}\sqrt{\dfrac{mU_0}{2}}$, получаем следующее уравнение для определения спектра:

$$tgt = \frac{\sqrt{\tau^2 - t^2}}{t} \tag{3.3.40}$$

Рассмотрим также графически решение этого уравнения, построив отдельно правую и левую части уравнения на рис. 3.7. Точки пересечения дают корни этого уравнения. Правая функция уменьшается от бесконечного значения при $t = 0$ и обрывается при $t = \tau$. Из рисунка видно, что при всех возможных

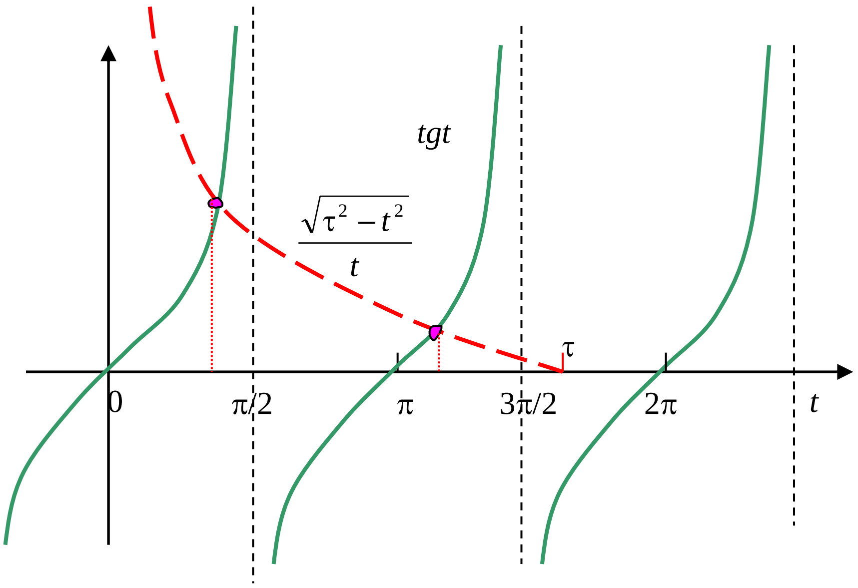

Рис. 3.7.

значениях параметра τ хоть одно решение есть всегда. Чем больше мощность ямы τ, тем больше четных решений. Итак, получаем:

1) при мощности ямы $\tau < \pi$ имеем 1 четное решение,
2) при мощности $\pi < \tau < 2\pi$ получаем 2 четных решения,

3) при мощности $2\pi < \tau < 3\pi$ получаем 3 четных решения,
и так далее.

Для того чтобы яснее понять появление уровней в яме, рассмотрим “мелкую” яму, т.е. для которой параметр $\tau << 1$. Для такой ямы достаточно легко найти энергию единственного четного состояния $(t \le \tau << 1)$. Из (3.3.40) имеем, разложив тангенс в ряд:

$$tgt \approx t = \frac{\sqrt{\tau^2 - t^2}}{t}$$

Решая это уравнение и учитывая, что t и τ одного порядка, имеем:

$$t^2 = \tau^2 - t^4 \approx \tau^2 - \tau^4$$

Далее вспоминая, что введенные параметры равны $t = \frac{ka}{2}$ и $\tau = \frac{a}{\hbar}\sqrt{\frac{mU_0}{2}}$, записываем для квадрата волнового числа:

$$k^2 = \frac{4}{a^2}t^2 \approx \frac{4}{a^2}\frac{a^2}{\hbar^2}\frac{mU_0}{2}\left(1 - \frac{a^2}{\hbar^2}\frac{mU_0}{2}\right) = \frac{2mU_0}{\hbar^2}\left(1 - \frac{a^2}{\hbar^2}\frac{mU_0}{2}\right)$$

Для энергии получаем:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2m}{\hbar^2}U_0\left(1 - \frac{ma^2}{2\hbar^2}U_0\right) = U_0\left(1 - \frac{ma^2}{2\hbar^2}U_0\right) \tag{3.3.41}$$

Получаем, что первый (четный) уровень энергии в мелкой яме $\tau << 1$ находится у самого “верха” ямы. Иначе говоря $E \approx U_0$, хотя и чуть меньше этого значения на малую величину $\tau^2 = \frac{ma^2}{2\hbar^2}U_0^2$.

Подытожим полученное. Число уровней в одномерной яме с конечными стенками – конечно, но при этом всегда существует хотя бы одно связанное состояние. При малой глубине и ширине (мощности) ямы в яме имеется только один уровень – четный уровень. С ростом U_0 и a растет мощность ямы, и появляются новые уровни при прохождении параметром τ значений $\tau = \frac{\pi}{2}n$, где n – целое число. Четные и нечетные уровни появляются по очереди, причем вначале четные. Уровни энергии E_n в спектре нумеруется главными квантовыми числами $n = 1,2,3,...$. Причем нечетным значениям n соответствуют четные состояния, а четным n – нечетные.

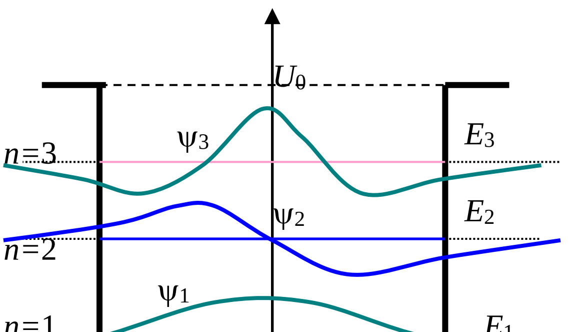

Рис. 3.8.

Качественное поведение волновых функции низших состояний показано на рисунке 3.8. Возводя в квадрат эти волновые функции, получаем плотность вероятности нахождения частицы при данной координате.

Важно отметить, что частица может некоторое время существовать в классически запретной зоне, где $U_0 > E$.

Примечание 3. В одномерной потенциальной яме хотя бы один уровень существует всегда, но это не так в трехмерной потенциальной яме. Для нее существование хотя бы одного уровня зависит от “мощности” потенциальной ямы: $a^2 U_0$, где U_0 – глубина ямы, а a – ее размер. При малых мощностях ямы энергия частицы тоже должна быть малой, т.е. частица имеет большую длину волну де Бройля, и она как бы не “помещается” внутри ямы.
