Тема 3. Решение задачи квантовой механики «о частице в яме».

П.1. Частица в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме.

П.2. Определение фазы ВФ и энергии частицы в яме

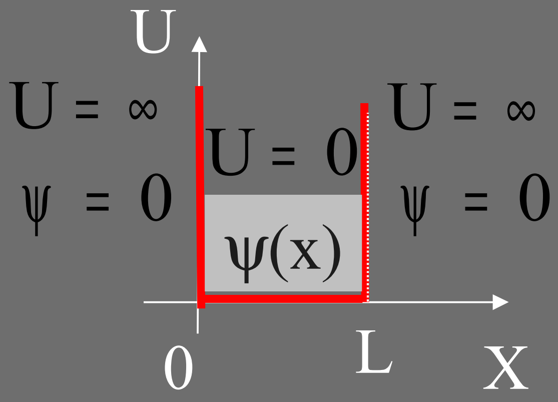
П.3. Определение амплитуды ВФ частицы в яме

П.4. Свойства ВФ частицы в яме

П.1. Частица в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме.

Проблема: Решить до конца достаточно важную, но достаточно простую задачу квантовой механики.

Решение: Таковой является задача о движении частицы внутри одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы.



Волновая функция вне ямы $\psi = 0$, т.к. невозможно попасть в область бесконечных потенциальных энергий (например, нельзя взобраться на бесконечно высокую гору).

Внутри ямы U = 0 и уравнение Шредингера выглядит так:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\cdot\psi(x) = 0.$$

Это уравнение вида $\psi''_{xx} + \mathrm{const}\cdot\psi = 0$. Обращаемся к математике, которая говорит, что мы получили дифференциальное уравнение свободных колебаний координаты x.

Его решение: $\psi(x) = A\,\mathrm{Sin}(\Omega x+\varphi_0)$, где $\Omega = \sqrt{\mathrm{const}}$.

ТЕСТ

Ответ:

Решение для частицы в яме

$$\psi(x) = \psi_0 \sin(\Omega x + \varphi_0), \quad \text{где} \quad \Omega = \sqrt{\frac{8\pi^2 m}{h^2} E}.$$

<u>Замечание</u>: Здесь 2 характеристики неизвестны – это амплитуда ψ_0 и начальная фаза φ_0. Их мы будем находить в следующих пунктах.

П.2. Определение фазы ВФ и энергии частицы в яме

Задача: Определить начальную фазу ВФ частицы в яме.

Дополнительные уравнения, возникающие из граничных условий:

1) $\psi(x=0) = 0$ – первое граничное условие.

2) $\psi(x=L) = 0$ – второе граничное условие.

Рассмотрим первое: $\psi(x=0) = \psi_0 \mathrm{Sin}(0+\varphi_0) = \psi_0 \mathrm{Sin}(\varphi_0) = 0$.

Это выполняется в двух случаях:

1. $\psi_0 = 0$, но тогда $\psi(x) = 0$ и частица вообще отсутствует, что неинтересно,

2. $\sin(\varphi_0) = 0$ и тогда $\varphi_0 = 0$.

Вопрос: Что дает второе граничное условие?

Перепишем его:

$\psi(x=L) = \psi_0 \sin(\Omega L) = 0$, отсюда $\sin(\Omega L) = 0$, что выполняется, если $\Omega_n L = n\pi$ или имеем ряд (набор чисел) $\Omega_n = n\frac{\pi}{L}$,

где $n = 1, 2, 3, \ldots$ – любые целые числа.

Но $\Omega = \sqrt{\frac{8\pi^2 m}{h^2}E}$, следовательно $\Omega_n = \sqrt{\frac{8\pi^2 m}{h^2}E_n} = n\frac{\pi}{L}$,

отсюда $E_n = \frac{h^2\Omega_n^2}{8\pi^2 m} = \frac{h^2}{8mL^2}n^2$ ***- формула квантования энергии частицы в яме.***

<u>Квантованием</u> некоторой физической характеристики называется явление, когда эта характеристика может принимать значения только из <u>определенного набора чисел</u>.

ТЕСТ

П.3. Определение амплитуды ВФ частицы в яме

Задача: Найти амплитуду волновой функции ψ_0 .

Используем: условие нормировки ВФ: $\int_0^L (\psi_n(x))^2 dx = 1.$

Подставим сюда первую ВФ частицы в яме (n = 1):

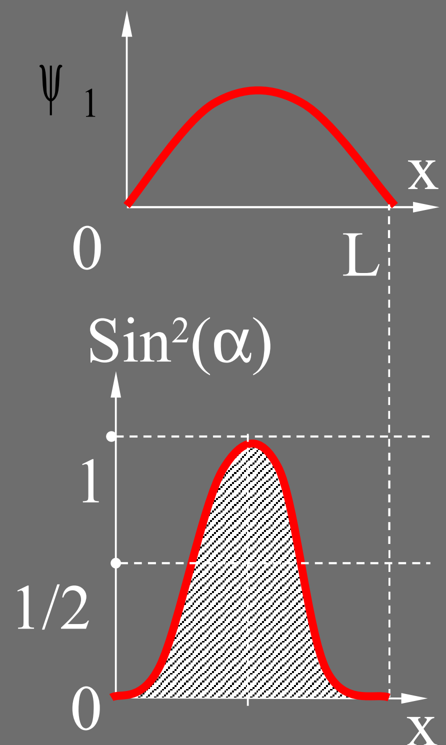
$$\psi_1(x) = \psi_0 \sin\left(1 \cdot \pi \frac{x}{L}\right):$$

$$\psi_0^2 \int_0^L \sin^2\left(\pi \frac{x}{L}\right) dx = 1.$$

Известно: $\sin^2\alpha = \frac{1}{2}\left(1 - \cos 2\alpha\right),$

Вычислим $I(\psi_n) = \int_0^L \sin^2\left(\pi \frac{x}{L}\right) dx.$

$$I(\psi_1) = \frac{1}{2}\int_0^L \left[1 - \cos\left(2\pi\frac{x}{L}\right)\right]dx = \frac{1}{2}\left[\int_0^L dx - \int_0^L \cos\left(2\pi\frac{x}{L}\right)dx\right] =$$



$$= \frac{1}{2}(L - 0) - \frac{1}{2}\int_0^L \frac{L}{2\pi}\cos\left(2\pi\frac{x}{L}\right)d\left(2\pi\frac{x}{L}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left[L - \frac{L}{2\pi}\sin\left(2\pi\frac{x}{L}\right)\Big|_0^L\right] = \frac{L}{2}$$

Используя условие нормировки, получаем:

$$\psi_0^2 \cdot \frac{L}{2} = 1 \Rightarrow \psi_0 = \sqrt{\frac{2}{L}} \Rightarrow$$

ОТВЕТ: <u>набор волновых функций</u> частицы в яме:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(n\pi\frac{x}{L}\right).$$

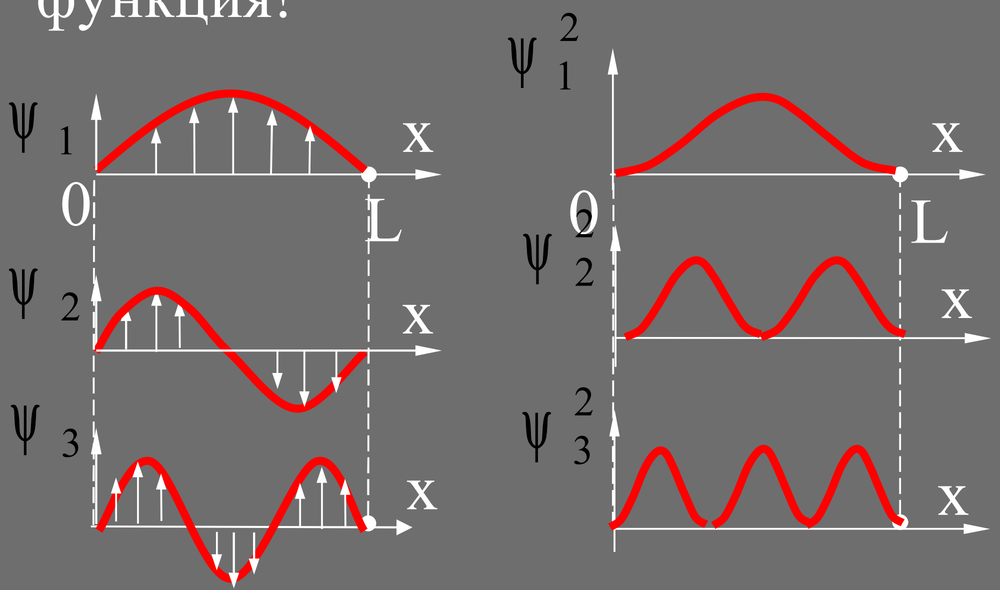
ТЕСТ

П.4. Свойства ВФ частицы в яме

Вопрос: Как ведет себя частица в яме?

Ответ: Так, как показывает ее волновая функция!

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n\pi \frac{x}{L}\right).$$



Есть «излюбленные» места пребывания частицы в яме.

__Стационарным состоянием движения__ частицы называют движение частицы, описываемой стационарной волновой функцией (которая является решением стационарного уравнения Шредингера).

<u>Стационарное движение</u> – это движение, не изменяющееся со временем.

Каждая функция ψ_n приписывается некоторому стационарному состоянию движения частицы.

Энергия частицы в каждом состоянии:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}n^2.$$

<u>Вывод:</u> $E_n \sim n^2$.

Уровни энергии расположены на разных расстояниях друг от друга или ***<u>неэквидистантно.</u>***

Значения, которыми физическая характеристика может обладать, называются <u>разрешенными</u> или <u>доступными</u>, а значения, которыми она не может обладать, называются <u>запрещенными</u>.