Лекція № 3

На минулій лекції «вивели» РШ для частинки в зовнішньому полі та утримали наслідок із цього рівняння – рівняння безперервності. Знайшли вектор щільності потоку ймовірності для вільної частинки (плоскої монохроматичної хвилі). Розглянули важливий особливий випадок дійсної ХФ. Для неї, очевидно, немає потоку частинок: $\vec{j} = 0$.

ПРИКЛАДИ РОЗВ'ЯЗКУ СТАЦІОНАРНОГО РШ

Розглянемо кілька простих прикладів розв'язку стаціонарного РШ для частинки в постійному зовнішньому полі, яке має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (1)$$

Це рівняння в частинних похідних. Такі рівняння вирішують методом поділу змінних. **Виконаємо поділ змінних у декартових координатах.**

Нехай потенціальна енергія – сума трьох доданків

$$U(\vec{r}) = U(x) + U(y) + U(z).$$

Виділимо спочатку в рівнянні (1) частину, яка залежить тільки від координати *x*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U(x)\psi = E\psi - \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + U(y)\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + U(z)\psi\right];$$

$$\psi(x,y,z) = \psi(x)\psi(y,z);$$

Ділимо обидві частини на $\psi(x)\psi(y,z)$:

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi}{\psi(x)} = E - \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(y,z)}{dy^2} + U(y)\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial z^2} + U(z)\psi(y,z)\right]}{\psi(y,z)} = E_1. \quad (2)$$

Ліва та права частини (2) розділилися. Ліва частина (2) залежить тільки від координати *x*, права – тільки від координат *y*, *z*. Ці вирази дорівнюють одне одному при будь-яких значеннях *x*, *y*, *z*. Отже, обидві частини є сталими. Позначили константу E_1. Маємо:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E_1\psi(x);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial y^2}+U(y)\psi(y,z)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial z^2}+U(z)\psi(y,z)=(E-E_1)\psi(y,z).$$

Можна продовжити поділ координат *y* і *z*. Ми просто «догадаємося», оскільки усі координати рівноправні, то повинно бути так

$$E=E_1+E_2+E_3;\quad \psi(x,y,z)=\psi(x)\psi(y)\psi(z)$$

Отримуємо три незалежні рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x_i)}{dx_i^{\;2}}+U(x_i)\psi(x_i)=E_i\psi(x_i);\quad i=1,2,3,\quad x_1=x,\,x_2=y,\,x_3=z.$$

Частинка в одномірній прямокутній нескінченно глибокій потенційній ямі

Стаціонарне РШ для одновимірного руху в декартових координатах

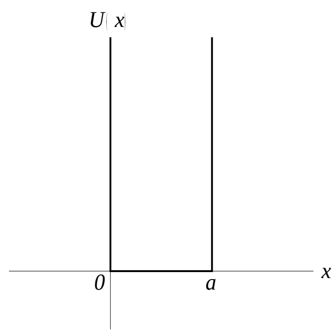
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x);$$

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

Ця задача має пряме відношення до поведінки електронів у металі й нуклонів у ядрі. В область з нескінченною потенціальною енергією частинка потрапити не може. Імовірність її виявити в цих областях дорівнює 0. ХФ зобов’язана бути безперервною, отже, у точках 0 та *a* ХФ звертається в нуль.

Вирішуємо РШ в області $0\le x\le a$

$$\psi''+k^2\psi=0,\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2},\quad E\ge 0\quad (3)$$



із двома граничними умовами

$$\psi(0)=0,\psi(a)=0.\quad (4)$$

Маємо нескінченний розрив потенціальної енергії, тому безперервна тільки хвильова функція, а перша похідна в точках розриву потенціальної енергії має стрибок.

Рівняння (3) – це лінійне однорідне диференціальне рівняння другого порядку з постійними коефіцієнтами. Воно має два лінійно незалежні розв’язки та містить дві довільні сталі. Ці розв’язки можна записати різними способами

$$\begin{aligned} \psi(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx} = A_1 \sin kx + B_1 \cos kx = \\ = C_1 \sin(kx + \varphi_1) = C_2 \cos(kx + \varphi_2). \end{aligned} \qquad (5)$$

Важливо, що в цьому випадку число довільних сталих дорівнює числу граничних умов. Так сталося через те, що рух відбувається в обмеженій області простору (фінітний рух). Виберемо, наприклад, розв’язок у вигляді $C_1 \sin(kx + \varphi_1)$. Із граничних умов (4) випливає, що

$$C_1 \sin \varphi_1 = 0, \quad C_1 \neq 0, \varphi_1 = 0;$$

$$\sin(ka) = 0, \quad ka = \pi(n+1), n = 0,1,.2,...$$

При $n = -1$ ми мали б $k = 0$ і $\psi(x) = 0$, що означало б відсутність частинки у всьому просторі. З $ka = \pi(n+1)$ випливає, що

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n+1)^2. \qquad (6)$$

Ми бачимо, що РШ має розв’язок, який задовольняє граничним умовам, тільки при дискретних значеннях квантового числа n . Таким чином, енергія частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі виявляється квантованою. Дискретність енергії виникла природно, без будь-яких додаткових припущень. У цьому випадку вона випливає безпосередньо із граничних умов, які накладаються на хвильову функцію на кінцях проміжку інтегрування. Стан частинки з найменшою можливою енергією буде надалі називатися нормальним або основним, усі інші стани – збудженими. Енергія основного стану частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі виходить із формули (6) при $n = 0$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \qquad (7)$$

Повторюємо, що основний стан (groundstate) – це стан з мінімальною енергією.

Нормуємо ХФ на одиницю:

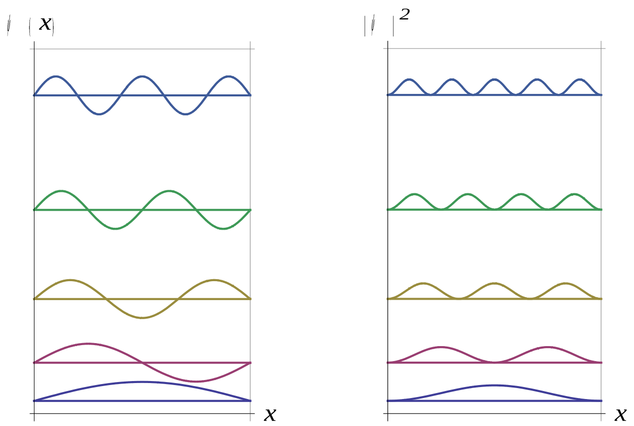
$$\int_0^a |\psi(x)|^2\,dx = 1, \quad |C_1|^2 \int_0^a \sin^2 kx dx = 1, \quad |C_1|^2 \frac{1}{2}\int_0^a (1-\cos 2kx)dx = 1;$$

$$|C_1| = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Розв'язок

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n+1)^2; \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi(n+1)x}{a}. \qquad (8)$$

Графіки ХФ та функції розподілу по координаті



(а) (б)

Загальні висновки:

1. E_n пробігає в потенціальній ямі ряд дискретних значень;

2. При E_0 – в основному стані – частинка продовжує рух;

3. Енергія частинки обернено пропорційна масі та обернено пропорційна квадрату ширини ями (області локалізації частинки). Дискретність проявляється для частинок малої маси у випадку сильної локалізації.

У класичній механіці частинка, яка рухається в потенціальній ямі, з рівною ймовірністю може перебувати в будь-якій точці усередині ями (пряма на мал.1(б)).

Дійсно, ймовірність $dW_{классич.}$ виявлення частинки в інтервалі dx пропорційна часу dt знаходження частинки в цьому інтервалі $dW_{классич.} \sim dt = \frac{1}{\mathrm{v}} dx$.

Оскільки на частинку усередині ями ніякі сили не діють, вона рухається з постійною швидкістю v й, отже, $dW_{классич.}$ не залежить від x. При збільшенні квантового числа n (енергії частинки) максимуми розподілу ймовірностей зближуються. У граничному випадку $n \to \infty$ розподіл імовірностей, який виведено із квантовомеханічного розрахунку, приводить до тих же результатів, що й класичний розподіл. Це випливає з того, що функція $\sin^2 \frac{\pi n x}{a}$ швидко осцилює при зміні x та при інтегруванні по будь-якому кінцевому інтервалу може бути замінена на $1/2$

Хвильова функція (8) має певну парність відносно точки $x = \frac{a}{2}$:

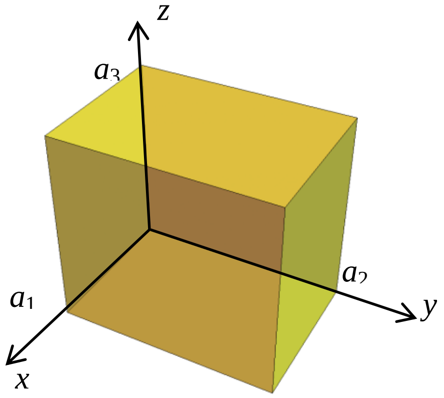
$$\psi_n(x) = (-1)^n \psi_n(a-x); \quad x' = x - \frac{a}{2}; \quad \psi_n(-x') = (-1)^n \psi_n(x')$$

Основному стану завжди відповідає парна ХФ.

При $n \gg 1$ відстань між сусідніми рівнями йде до нуля, і дискретність рівнів зникає в класичній границі (правило відповідності)

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{n+3}{(n+1)^2} \sim \frac{1}{n} \to 0, n \gg 1$$

Частинка в тривимірній потенціальній ямі нескінченної глибини (тривимірний потенціальний ящик)



$$U(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a_1, 0 \le y \le a_2, 0 \le z \le a_3; \\ \infty, x<0, x>a_1, y<0, y>a_2, z<0, z>a_3. \end{cases}$$

Задача нами фактично вже вирішена. Після поділу змінних у декартових координатах

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_i(x_i)}{dx_i^2}+U(x_i)\psi_i(x_i)=E_i\psi_i(x_i);$$

вирішуємо задачу про одновимірну яму нескінченної глибини

$$\psi_i''(x_i)+k_i^2\psi_i(x_i)=0; \quad k_i^2=\frac{2mE_i}{\hbar^2};$$

$$\psi_i(0)=\psi_i(a_i); \quad i=1,2,3.$$

$$\psi_{n_i}(\mathrm{x}_i)=\sqrt{\frac{2}{a_i}}\sin\frac{\pi(n_i'+1)x_i}{a_i}=\sqrt{\frac{2}{a_i}}\sin\frac{\pi n_i x_i}{a_i}; \quad n_i'+1=n_i;$$

$$n_i=1,2,3....$$

і записуємо розв'язок

$$\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z)=\psi_{n_1}(x)\cdot\psi_{n_2}(y)\cdot\psi_{n_3}(z)=\left(\frac{2^3}{a_1a_2a_3}\right)^{1/2}\sin\frac{\pi n_1x_1}{a_1}\sin\frac{\pi n_2x_2}{a_2}\sin\frac{\pi n_3x_3}{a_3};$$

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a_1^2}+\frac{n_2^2}{a_2^2}+\frac{n_3^2}{a_3^2}\right); \quad n_i=1,2,3....$$

Нехай $a_1=a_2=a_3=a$ – «кубічний ящик»

$$\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z)=\psi_{n_1}(x)\cdot\psi_{n_2}(y)\cdot\psi_{n_3}(z)=\left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}\sin\frac{\pi n_1x_1}{a}\sin\frac{\pi n_2x_2}{a}\sin\frac{\pi n_3x_3}{a};$$

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\hbar^2}{2ma}\left(n_1^2+n_2^2+n_3^2\right); \quad n_i=1,2,3....$$

Основний стан із квантовими числами $n_1=n_2=n_3=1$ є невиродженим.

У випадку кубічного ящика значенням квантових чисел $n_1=n_2=1; n_3=2$, $n_1=1; n_2=2; n_3=1$ або $n_1=2; n_2=n_3=1$ відповідає одна і та ж сама енергія, але три різні хвильові функції. Рівень енергії трикратно вироджений. Випадкове виродження в кубічному ящику – збіг енергій станів з різною симетрією. Наприклад, $n_1=n_2=1; n_3=5; \quad n_1=n_2=n_3=3, \quad 5^2+1+1=3\times3^2=27.$