Квантование уровней в одномерной симметричной потенциальной яме.

<u>Задача:</u> Найти уровни энергии для одномерной квантовомеханической задачи с потенциалом $U(x)=\begin{cases} 0, |x|>a \\ -U_0, |x|<a \quad (U_0>0) \end{cases}$ (рис. 1)

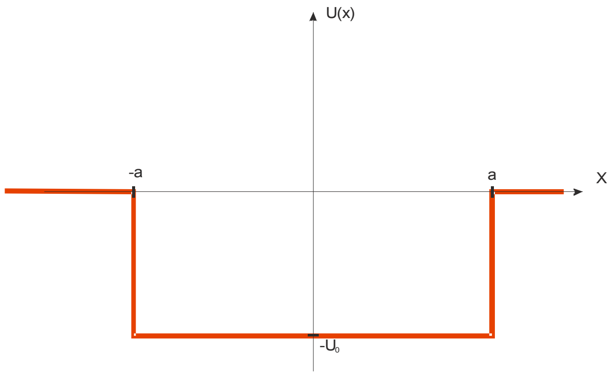

Рисунок 1: График U(x).

<u>Необходимые утверждения из теории:</u>

1. Волновая функция подчиняется стационарному уравнению Шредингера $\hat{H}\psi=E\psi$
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right)\psi=E\psi$$
2. При $U=const$ решениями уравнения Шредингера являются:
   - для $E>U$ $\psi=e^{\pm ikx}$, $E-U=\dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$
   - для $E<U$ $\psi=e^{\pm \kappa x}$, $U-E=\dfrac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$
3. При «сшивании» решений для волновой функции, полученных в разных областях пространства необходима напрерывность и гладкость волновой функции (гладкость нарушается только на бесконечных скачках потенциала)

<u>Решение:</u>

Дисретные уровни энергии возникнут при $E<0$ для состояний локализованных в потенциальной яме (в классической физике частица с $E<0$ существует только в яме).

Решение уравнения Шредингера в разных областях пространства:

при $x<-a$ $\psi=Ae^{\kappa a}$

при $-a<x<a$ $\psi=B_1 e^{ikx}+B_2 e^{-ikx}$

при $x>a$ $\psi=Ce^{-\kappa x}$

где $k=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+U_0)}$; $\kappa=\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E}$

Решения при $|x|>a$ оставлены только затухающие от ямы, растущие на бесконечности решения физического смысла не имеют.

В принципе, из соображений симметрии (потенциал симметричен относительно $x=0$, поэтому и $|\psi|^2$ должен быть симметричен относительно нуля координаты) можно заключить, что решения будут либо чётными либо нечётными, поэтому решения с мнимыми экспонентами будут группироваться либо в синус либо в косинус от аргумента kx. Мы решим в общем виде.

Записываем условия сшивки волновых функций на двух границах:

$$\begin{cases} A e^{-\kappa a}=B_1 e^{-ika}+B_2 e^{ika} \\ \kappa A e^{-\kappa a}=ik\left(B_1 e^{-ika}-B_2 e^{ika}\right) \\ C e^{-\kappa a}=B_1 e^{ika}+B_2 e^{-ika} \\ -\kappa C e^{-\kappa a}=ik\left(B_1 e^{ika}-B_2 e^{-ika}\right) \end{cases}$$

откуда, попарно складывая и вычитая:

$$\begin{cases} 2B_1 e^{-ika}=A\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right)e^{-\kappa a} \\ 2B_2 e^{ika}=A\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right)e^{-\kappa a} \\ 2B_1 e^{ika}=C\left(1+i\frac{\kappa}{k}\right)e^{-\kappa a} \\ 2B_2 e^{-ika}=C\left(1-i\frac{\kappa}{k}\right)e^{-\kappa a} \end{cases}$$

перемножая первое с третьим и второе с четвёртым уравнения легко увидеть, что $B_1^2=B_2^2$, т. е. $B_1=\pm B_2$ и, действительно, решения имеют форму синуса либо косинуса.

Если $B_1=B_2$, то $A=C$ (это видно непосредственно из системы, либо следует из чётности всей волновой функции по соображениям симметрии) и

$$\begin{cases} 4B_1\cos ka=2Ae^{-\kappa a} \\ 4iB_1\sin ka=2i\frac{\kappa}{k}Ae^{-\kappa a} \end{cases}$$

откуда $tg\, ka=\frac{\kappa}{k}>0$ и $\cos ka=\pm\frac{1}{\sqrt{1+tg^2(ka)}}=\pm\frac{1}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{k^2}}}=\pm\frac{ka}{\sqrt{\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}}}$

Если $B_1=-B_2$, то $A=-C$ и

$$\begin{cases} -4iB_1\sin ka=2Ae^{-\kappa a} \\ 4B_1\cos ka=-2i\frac{\kappa}{k}Ae^{-\kappa a} \end{cases}$$

откуда $tg\, ka=-\frac{k}{\kappa}<0$ и $\sin ka=\pm\frac{1}{\sqrt{1+ctg^2(ka)}}=\pm\frac{1}{\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{k^2}}}=\pm\frac{ka}{\sqrt{\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}}}$

Уравнения не имеют общего решения, их надо решать численно или графически. При построении графика можно объединить все случаи на одном графике и отразить отрицательные части синуса и косинуса в верхнюю полуплоскость. Итоговый график имеет вид, показанный ниже на рис.2

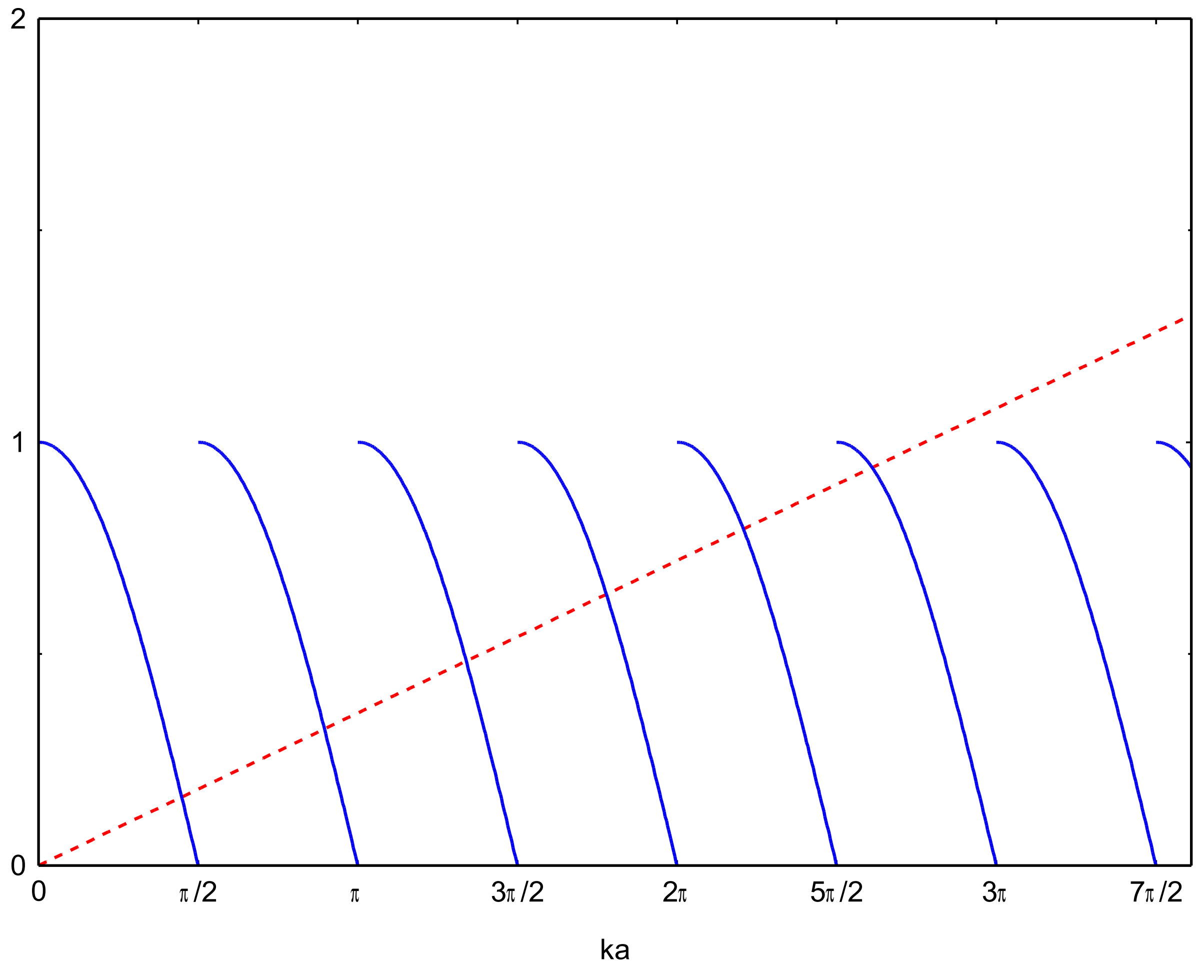

Рисунок 2: Графическое решение уравнения на ka

Свойства решения:

1. Решения есть всегда (прямая всегда пересекает какие-то из «зубцов»)
2. Решений всегда конечное число (рано или поздно прямая уйдёт выше $y=1$)
3. Существует единственное решение при $\sqrt{\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}}<\frac{\pi}{2}$ (прямая становится настолько крутой, что пересекает только первый «зубец»).