Атомная физика

Лекция 15

М.Ю. Рябикин

канд. физ.-мат. наук, в.н.с. ИПФ РАН

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, ВШОПФ

2025

Потенциальные ямы и барьеры

(часть 1)

Общие свойства одномерного движения

Если потенциальная энергия частицы зависит только от одной координаты (пусть это будет координата x), то ВФ можно искать в виде произведения функции от y, z (она определяется уравнением Шредингера свободного движения) на функцию только от x, которая находится из решения одномерного (1D) уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(x)\right]\psi=0\,. \qquad (15.1)$$

Пример – заряженная частица в конденсаторе.

Рассмотрим некоторые общие свойства одномерного движения.

Отсутствие вырождения дискретных уровней.

Предположим, что уровни энергии дискретного спектра в 1D случае могут быть вырожденными. ψ_1, ψ_2 – две различные собственные функции, соответствующие одному и тому же E. $\to$

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1}=+\frac{2m}{\hbar^2}\left[U-E\right]=\frac{\psi_2''}{\psi_2}$$

или $\psi_1''\psi_2-\psi_1\psi_2''=0 \to \frac{d}{dx}\left(\psi_1'\psi_2-\psi_1\psi_2'\right)=0\,.$

Интегрируем $\rightarrow \psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = \text{const}$.

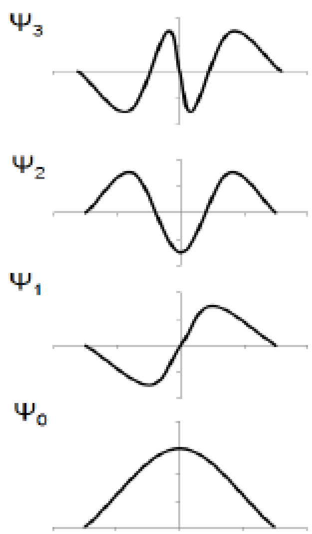
На бесконечности должно быть $\psi_1 = \psi_2 = 0 \rightarrow \text{const}=0$, т.е.

$\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = 0$.

Поделим на $\psi_1\psi_2 \rightarrow \frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} \rightarrow \frac{d}{dx}(\ln\psi_1 - \ln\psi_2) = 0 \rightarrow \frac{d}{dx}\ln\frac{\psi_1}{\psi_2} = 0 \rightarrow \ln\frac{\psi_1}{\psi_2} = \text{const}$

$\downarrow$

$\psi_1 = \text{const} \times \psi_2 \rightarrow$ Обе функции по существу совпадают.

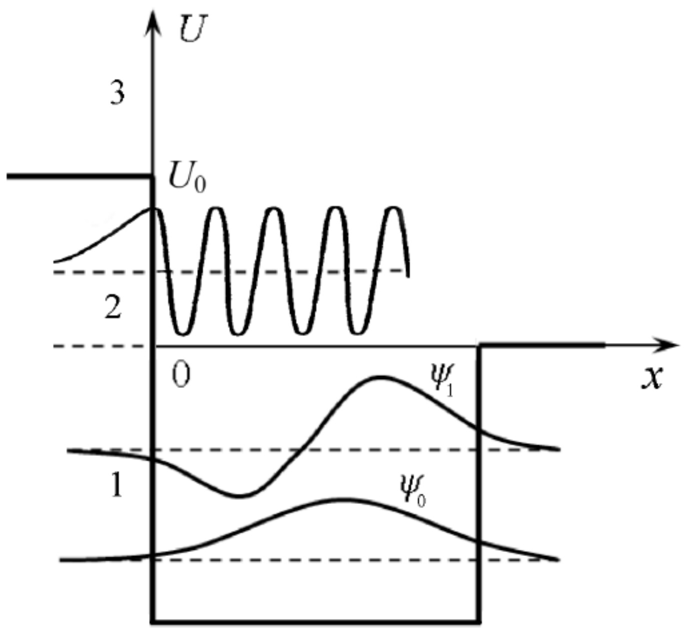


Осцилляционная теорема.

Функция $\psi_n(x)$, соответствующая n+1-му по величине собственному значению E_n, обращается в нуль, меняя знак (при конечных значениях x) n раз.

Несимметричная яма. Спектры энергии и общий вид ВФ.

Пусть $U(x)$ стремится при $x \to \pm\infty$ к конечным пределам. Предел $U(+\infty)$ примем за начало отсчета энергии; $U(-\infty)$ обозначим как U_0. Будем считать, что $U_0 > 0$.



1. В области 1 частица не может уйти на бесконечность, т.к. энергия меньше обоих пределов $U(\pm\infty)$, т.е. отрицательна:

$$E < 0. \qquad (15.2)$$

Спектр энергии в этой области – дискретный.

Заметим: (а) $E > U_{\min}$; (б) выполняется осцилляционная теорема; (в) ВФ затухает вглубь классически недоступной области.

2. Область 2:

$$0 < E < U_0. \qquad (15.3)$$

В области 2 спектр непрерывный, движение частицы инфинитное (частица может уходить в сторону $x=+\infty$). Уровни энергии в этой области тоже невырожденные (для доказательства, приведенного выше для дискретного спектра, достаточно, чтобы функции ψ_1 и ψ_2 обращались в ноль хотя бы на одной из бесконечностей (в данном случае при $x \to -\infty$)).

При достаточно больших положительных x в уравнении Шредингера можно пренебречь $U(x)$:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0. \qquad (15.4)$$

Это уравнение имеет вещественные решения вида стоячей плоской волны:

$$\psi = a\cos(kx + \delta), \qquad (15.5)$$

где a и δ – постоянные, а волновое число равно $k = p/\hbar = \sqrt{2mE}/\hbar$. Этой формулой определяется асимптотический вид ВФ при $x \to +\infty$ в области энергий (15.3).

В другой асимптотике ($x \to -\infty$) уравнение Шредингера запишется как

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

Решение, не обращающееся при $x \to -\infty$ в бесконечность, есть

$$\psi = be^{\kappa x}, \qquad \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}. \qquad (15.6)$$

Это есть асимптотический вид ВФ при $x \to -\infty$. ВФ (15.6) экспоненциально затухает вглубь области с $E < U$ (см. рисунок).

3. Наконец, в области 3:

$$E > U_0 \tag{15.7}$$

спектр будет непрерывным, а движение – инфинитным в обе стороны. В этой области все уровни энергии двукратно вырождены. Это следует из того, что в данном случае оба независимых решения уравнения (15.1), являющегося уравнением 2-го порядка, удовлетворяют должным условиям на бесконечности (в предыдущих случаях решения, не убывающие на бесконечности, отбрасывались). Асимптотический вид ВФ при $x \to +\infty$ имеет вид

$$\psi = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx} \tag{15.8}$$

и аналогично для $x \to -\infty$.

Учитывая временной множитель для стационарных состояний, перепишем (15.8) как

$$\Psi = a_1 e^{i\left(kx - \frac{E}{\hbar}t\right)} + a_2 e^{-i\left(kx + \frac{E}{\hbar}t\right)}. \tag{15.9}$$

Очевидно, что первое слагаемое соответствует частице, движущейся вправо, а второе – частице, движущейся влево.

Чётность.

Пусть $U(x)$ – чётная функция:

$U(-x)=U(x)$.

Тогда при изменении знака координаты уравнение Шредингера (15.1) не меняется. $\to$

Если $\psi(x)$ – некоторое решение этого уравнения, то и $\psi(-x)$ – тоже есть решение, совпадающее с $\psi(x)$ с точностью до постоянного множителя: $\psi(-x)=c\,\psi(x)$. Меняем знак x ещё раз $\to$ $\psi(x)=c^2\,\psi(x)$ $\to$ $c=\pm 1$. $\to$ При симметричной относительно $x=0$ потенциальной энергии ВФ-и стационарных состояний могут быть либо ***чётными***:

$$\psi(-x)=\psi(x) \qquad (15.10)$$

либо ***нечётными***:

$$\psi(-x)=-\psi(x). \qquad (15.11)$$

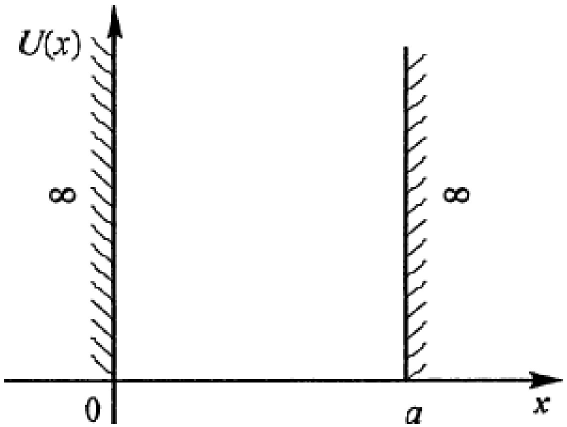
В частности, ВФ основного состояния – чётная: она не может иметь узлов, а нечётная функция во всяком случае обращается в ноль при $x=0$ [$\psi(0)=-\psi(0)=0$].

Бесконечно глубокая прямоугольная потенциальная яма

Ряд общих свойств стационарных состояний выявляется уже на самых простых одномерных задачах.

Рассмотрим бесконечно глубокую прямоугольную потенциальную яму:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant x \leqslant a, \\ \infty, & x < 0, \quad x > a\,. \end{cases} \qquad (15.12)$$



В **классической физике** аналогом данной системы является движение частицы внутри горизонтального ящика с высокими упругими стенками и гладким дном; движение такой частицы является финитным, а спектр энергии – непрерывным. Т.е. энергия частицы в такой яме может принимать любые значения.
В частности, при E=0 она покоится на дне ямы, а при $E > 0$ совершает колебания между стенками.

Найдём сначала вероятность нахождения частицы в различных точках внутри потенциальной ямы. Разобьём ось координат на элементарные отрезки длиной dx. Тогда искомая вероятность будет определяться как

$$dP(x) = \frac{2\,dt}{T} = \frac{2\,dx}{T|v(x)|}. \qquad (15.13)$$

Здесь dt – время, за которое частица проходит отрезок длиной dx, T – период колебаний частицы в потенциальной яме, v – скорость частицы. Множитель 2 учитывает двукратное прохождение отрезка dx за период колебаний. Внутри ямы потенциал постоянен (=0) $\rightarrow$ у частицы в потенциальной яме (15.12) скорость не зависит от координаты x (только при достижении стенок знак скорости меняется на противоположный) $\rightarrow$ вероятности (15.13) одинаковы для всех точек внутри ямы. Т.обр., в классической механике в данной задаче частица может находиться с равной вероятностью в окрестности любой точки своей траектории.

В **квантовой механике** для определения вероятности нахождения частицы в различных точках необходимо решить уравнение Шредингера. Гамильтониан частицы в рассматриваемом случае содержит лишь оператор кинетической энергии и имеет вид

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}. \qquad (15.14)$$

Уравнение Шредингера для стационарных состояний можно преобразовать к виду

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, \qquad (15.15)$$

или

$$\psi'' + k^2\psi = 0. \qquad (15.16)$$

Здесь

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \tag{15.17}$$

Решение однородного уравнения (15.16) запишем в виде

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \tag{15.18}$$

где A и B – постоянные.

Стенки в нашей задаче являются бесконечно высокими $\rightarrow$ частица не может проникнуть в области за пределами ямы (для этого необходимо совершить бесконечную работу). $\rightarrow$ Для ВФ имеем соотношения $\psi(x<0) = \psi(x>a) = 0$, откуда в силу непрерывности ВФ следуют граничные условия

$$\psi(x=0) = \psi(x=a) = 0. \tag{15.19}$$

Из первого граничного условия следует, что постоянная B в (15.18) равна нулю. Второе условие даёт важное соотношение

$$\sin(ka) = 0. \tag{15.20}$$

$\rightarrow$ Величина k может принимать лишь дискретный ряд значений:

$$k_n = \frac{\pi}{a}n, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{15.21}$$

Значение n=0 мы отбросили, так как при этом k=0, и ВФ тождественно равна 0, что противоречит условию нормировки на 1.

(15.17), (15.21) → Значения энергии $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ в потенциальной яме (15.12) имеют дискретный спектр:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, \ldots . \tag{15.22}$$

Каждому значению энергии E_n соответствует своя ВФ:

$$\psi_n(x) = A \sin(k_n x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{15.23}$$

Коэффициент A находится из условия нормировки

$$\int_0^a |\psi_n(x)|^2 \, dx = A^2 \int_0^a \sin^2(k_n x) \, dx = 1. \tag{15.24}$$

Т.обр., стационарные состояния частицы, находящейся в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме, описываются дискретным набором волновых функций

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{15.25}$$

Т.обр., на рассмотренном примере мы убеждаемся в выполнении ранее отмеченного общего свойства квантовых систем: финитному движению соответствует дискретный спектр стационарных состояний. Для сравнения следует вспомнить, что, согласно классической физике, частица в потенциальной яме может иметь любую энергию из непрерывного множества значений.

Полные волновые функции $\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{\pi n x}{a} \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$ рассматриваемых стационарных состояний представляют собой стоячие волны. Дискретный набор волновых чисел $k_n = \frac{\pi}{a} n$ ($n = 1, 2, 3, \ldots$) делает эти функции в математическом смысле аналогичными стоячим волнам в кубе, которые мы получили ранее для электромагнитных волн при выводе формулы Релея-Джинса.

Кроме дискретности спектра, отметим ещё ряд важных свойств квантовомеханических состояний частицы в рассматриваемом потенциале.

Отметим, что, в отличие от классической частицы, энергия квантовой частицы в рассмотренной потенциальной яме не может быть равной нулю, т.е. квантовая частица не может покоиться на дне потенциальной ямы.

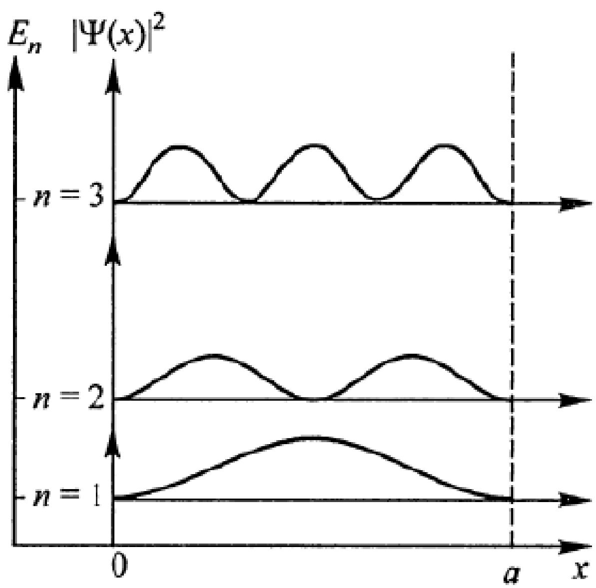
Пусть $n = 1$. Это состояние с наименьшей энергией

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \qquad (15.26)$$

т.е. основное состояние. Оно характеризуется волновой функцией

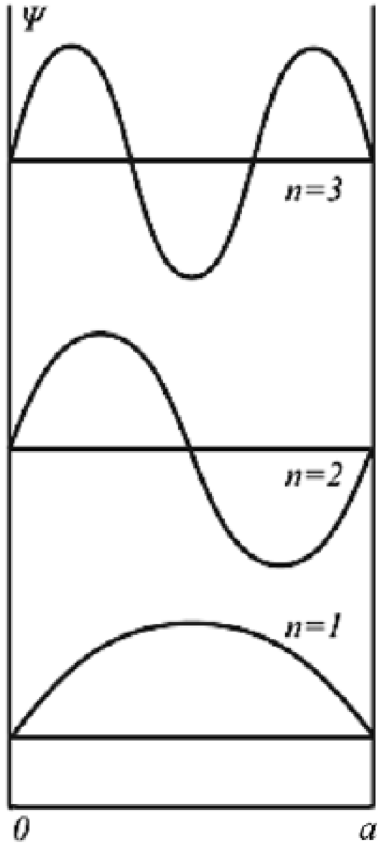
$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right). \qquad (15.27)$$

Плотность вероятности обнаружения частицы в какой-либо точке внутри рассматриваемой потенциальной ямы выражается тригонометрической функцией координаты x:



$$|\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right). \qquad (15.28)$$

Видно, что в случае основного состояния плотность вероятности максимальна в центре ямы и спадает к её краям. В случае 1-го возбужденного состояния ($n = 2$) распределение вероятностей ещё более удивительно: вероятность обнаружения частицы в центре ямы равна нулю! В этом принципиальное отличие квантовомеханического распределения от классического случая, в котором все значения координаты равновероятны.



Волновые функции.

Отметим, во-первых, что для всех найденных волновых функций выполняется осцилляционная теорема.

Во-вторых, отметим, что все ВФ-и в данном случае испытывают скачок производной на границах ямы, что, вообще говоря, противоречит общим требованиям на волновые функции. Говоря о нефизичном поведении производных от ВФ-й, следует, однако, иметь в виду нефизичность самой модели бесконечно глубокой ямы. В реальности все потенциальные ямы имеют конечную глубину. Для прямоугольной ямы конечной глубины никаких скачков производной не наблюдается (см. далее).

О симметрии ВФ.

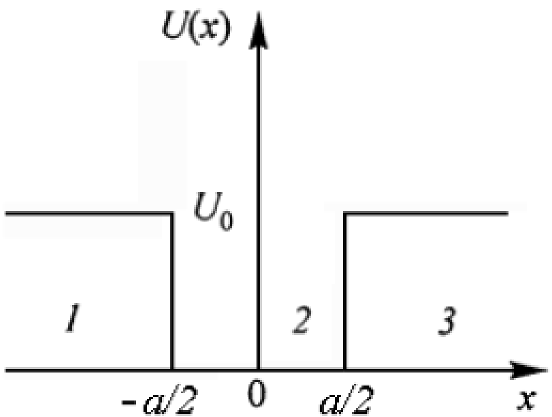
Следует отметить, что найденные волновые функции обладают определенной симметрией. В этом можно убедиться, если перенести начало координат в точку $x = a/2$ (т.е. в центр ямы).

В новой системе координат $x' = x - a/2$ потенциал станет симметричным относительно преобразования инверсии ($x' \to -x'$). Тогда решения будут обладать определенной чётностью (ψ_1 – чётная функция, ψ_2 – нечётная и т.д.). Использование свойства чётности облегчает в ряде случаев нахождение решений для стационарных состояний в потенциальных ямах (см. далее).

Одномерная прямоугольная потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим прямоугольную потенциальную яму следующего вида:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -a/2 \le x \le a/2 \\ U_0, & x < -a/2, x > a/2 \end{cases}. \tag{15.29}$$



В отличие от предыдущей задачи, для потенциальной ямы конечной глубины возможны две ситуации:

1) $E<U_0$. Движение финитное.

2) $E>U_0$. Движение инфинитное.

Рассмотрим 1-й случай. Удобно разбить весь бесконечный интервал изменения координаты на три области (см. рисунок). Гамильтониан в этих областях имеет вид

$$\widehat{H} = \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} & \text{для области 2,} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2} + U_0 & \text{для областей 1 и 3.} \end{cases} \tag{15.30}$$

Получим два уравнения Шредингера для различных областей:

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \quad \text{для области 2,}$$
$$\psi'' - \varkappa^2\psi = 0 \quad \text{для областей 1 и 3,} \qquad (15.31)$$

где $k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}, \ \varkappa = \sqrt{\dfrac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}.$ (15.32)

Этим областям соответствуют решения в виде, соответственно, синусов и косинусов (область 2) и растущей и затухающей экспонент (области 1 и 3).

Рассмотрим поочередно случаи чётных и нечётных состояний.

а) **Чётные** состояния: $\psi(x) = \psi(-x)$. Отбрасывая решения, растущие вглубь классически недоступной области и требуя симметричности (чётности) ВФ, приходим к решению вида

область 1: $\psi_1(x) = A\exp(\kappa x)$,

область 2: $\psi_2(x) = B\cos(kx)$,

область 3: $\psi_3(x) = A\exp(-\kappa x)$. (15.33)

Сшиваем функции (15.33) и их первые производные в точке $x=a/2$ →

$$B\cos(ka/2) = A\exp(-\kappa a/2), \qquad (15.34а)$$

$$kB\sin(ka/2) = \kappa A\exp(-\kappa a/2). \qquad (15.34б)$$

Делим (15.34б) на (15.34а) →

$$k\,\mathrm{tg}(ka/2) = \kappa.$$

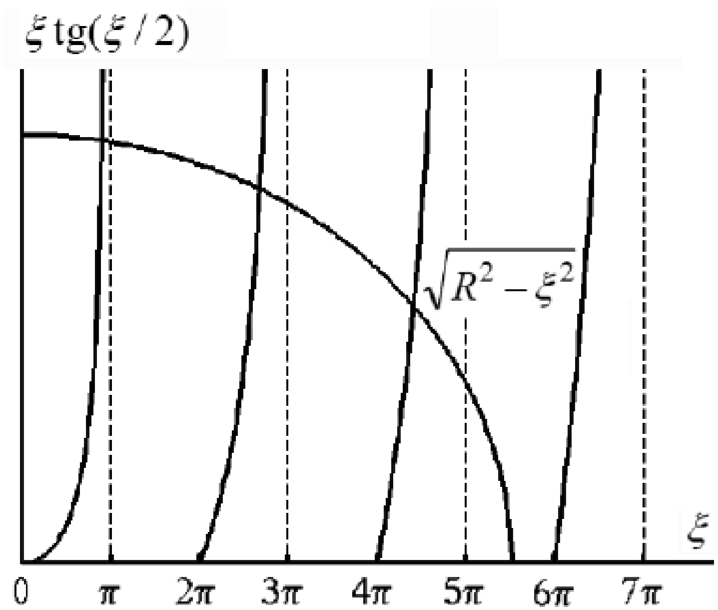
Умножим на a и воспользуемся выражениями (15.32) для параметров k и κ →

$$ka\,\mathrm{tg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}. \qquad (15.35)$$

Введем обозначения $\xi = ka$, $R = \sqrt{\dfrac{2mU_0a^2}{\hbar^2}}$ →

$$\xi\,\mathrm{tg}(\xi/2) = \sqrt{R^2 - \xi^2}. \qquad (15.36)$$

Будем анализировать решение уравнения (15.36) графически. Корни уравнения могут быть определены как абсциссы точек пересечения функции $\xi\,\mathrm{tg}(\xi/2)$ и дуги окружности $\sqrt{R^2-\xi^2}$. Получаемый дискретный набор точек пересечения этих кривых соответствует дискретному набору уровней энергии. Как видно из рисунка, сколь бы малым ни был радиус R, всегда есть хотя бы одна точка пересечения дуги окружности с кривой $\xi\,\mathrm{tg}(\xi/2)$. $\rightarrow$ Всегда существует хотя бы одно четное связанное состояние.



В случае глубокой ямы в пределе $U_0 \rightarrow \infty$ получаем уравнение

$$ka\,\mathrm{tg}(ka/2) = \infty,$$

решение которого есть

$$\frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \dots,$$

или

$$k_n = \frac{\pi}{a} n \quad (n = 1, 3, 5, \dots),$$

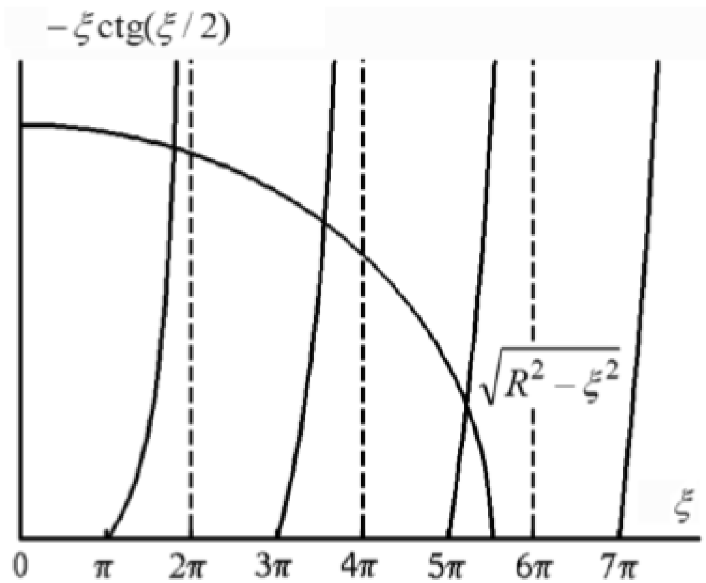
что соответствует четным состояниям в бесконечно глубокой яме (см. выше).

б) **Нечётные** состояния: $\psi(-x) = -\psi(x)$. Решение, не растущее вглубь классически недоступной области и обладающее свойством антисимметричности (нечётности), имеет вид

область 1: $\psi_1(x) = A\exp(\kappa x)$,

область 2: $\psi_2(x) = B\sin(kx)$,

область 3: $\psi_3(x) = -A\exp(-\kappa x)$. (15.37)



Из условия непрерывности волновой функции и её первой производной получаем уравнение для определения значений энергий нечётных состояний:

$$-ka\,\mathrm{ctg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}\,, \tag{15.38}$$

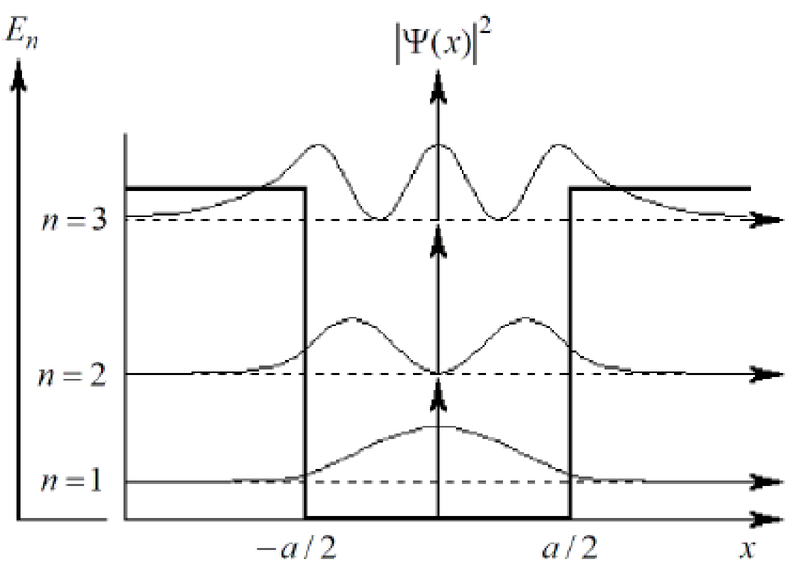
или

$$-\xi\,\mathrm{ctg}(\xi/2) = \sqrt{R^2 - \xi^2} \tag{15.39}$$

Из предыдущего рисунка видно, что при достаточно малом радиусе R не будет ни одного пересечения дуги окружности с кривой $-\xi \operatorname{ctg}(\xi/2)$. → Существуют условия, при которых не возникает ни одного нечетного связанного состояния. Условием возникновения первого такого состояния является неравенство $R \geq \pi$, или

$$\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \geq \pi^2. \qquad (15.40)$$

Из этого условия видно, что для того, чтобы в яме конечной глубины возникало хотя бы одно нечетное связанное состояние, ширина и глубина этой ямы должны быть достаточно большими.



На рисунке слева приведены распределения плотности вероятности нахождения частицы в яме конечной глубины для нескольких низших состояний. Заметим, что, хотя вид ВФ-й в данном случае похож на вид ВФ-й в случае бесконечно глубокой ямы, скачков производной ВФ, имевшихся для бесконечно глубокой ямы, здесь не наблюдается. ВФ-и не обращаются строго в ноль на границах ямы, а экспоненциально затухают вглубь классически недоступной области.