Потенциальные ямы

Здесь мы будем решать стационарное уравнение Шрёдингера для одной частицы с данным потенциалом:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(\vec{r}))\psi = 0$$

Одномерная прямоугольная потенцальная яма с бесконечно высокими стенками

Уравнение принимает вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, \qquad x = (0, l), \psi(0) = 0, \psi(l) = 0$$

Очевидное решение:

$$\psi = A\sin(kx)$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$kl = \pi n, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

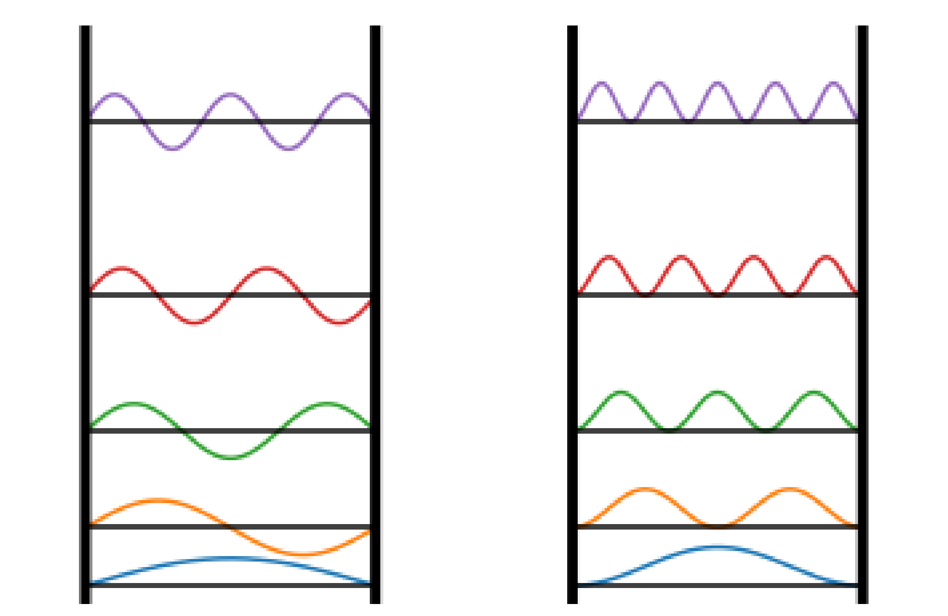
В результате:

1. Спектр дискретный и бесконечный:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ml^2}$$

1. Волновые функции - суперпозиция двух волн де Бройля:

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



Трёхмерная прямоугольная потенцальная яма с бесконечно высокими стенками

Теперь нам дан ящик со сторонами l_x, l_y, l_z. Сквозь грани частица также пройти не может. Найдём спектр для данного случая. Очевидно, что задача разрешима методом Фурье (разделения переменных):

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{l_x l_y l_z}}\sin\left(\frac{\pi n_x x}{l_x}\right)\sin\left(\frac{\pi n_y y}{l_y}\right)\sin\left(\frac{\pi n_z z}{l_z}\right)$$

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{l_x^2} + \frac{n_y^2}{l_y^2} + \frac{n_z^2}{l_z^2}\right)$$

При этом хотя бы одно из чисел n_x, n_y, n_z должно быть отлично от нуля.

Сферическая потенциальная яма с бесконечно высокими стенками

Пусть задана сфера радиуса a за пределами которой потенциальная энергия бесконечна. Частица через потенциальный барьер проникнуть не может. Уравнение Шрёдингера:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\alpha^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

Соответственно решение можно представить в виде:

$$\psi = R(r)Y_l^m(\theta, \alpha)$$

l, m - соответственно орбитальное и магнитное квантовые числа. Найдём уравнение для $R(r)$, учитывая, что:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_l^m}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y_l^m}{\partial\alpha^2} = -l(l+1)Y_l^m$$

Тогда:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}R + \frac{2mE}{\hbar^2}R = 0$$

Раскрываем первое слагаемое, умножаем на r^2:

$$r^2\frac{d^2R}{dr^2} + 2r\frac{dR}{dr} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2}r^2 - l(l+1)\right)R = 0$$

Видно, что задача легко масштабируется:

$$x = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}r$$

$$x^2\frac{d^2R}{dx^2} + 2x\frac{dR}{dx} + \left(x^2 - l(l+1)\right)R = 0$$