

ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

**КВАНТОВАЯ ЧАСТИЦА В ОДНОМЕРНОЙ  
ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ**

Методические указания

Иркутск 2005

### Лабораторная работа №3. Электрон в одномерной потенциальной яме.

*Цель работы.* Проведение вычислительного эксперимента по изучению влияния параметров одномерной потенциальной ямы на уровни энергии, волновые функции и распределение электронной плотности для связанных состояний электрона.

*Связанные состояния в симметричной потенциальной яме.* Состояния электрона в данной задаче будут связанными (электрон не сможет уйти на бесконечность), если его полная энергия  $E$  будет в пределах  $U_1 < E < U_2$ , где  $U_1$  - потенциальная энергия на «дне» ямы;  $U_2$  - потенциальная энергия вне ее (см. рис. 1). В такой задаче удобно отсчитывать энергии от «дна» ямы, т. е. положить  $U_1 = 0$ ,  $U_2 = U_0$  (это, разумеется, не влияет на конечные результаты).

Задача сводится к нахождению совокупности  $\{\psi_n(x)\}$  физически приемлемых решений одномерного стационарного уравнения Шредингера:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi = 0 \quad (1)$$

Обеспечить ограниченность, непрерывность и гладкость  $\psi(x)$  на всей оси  $-\infty < x < \infty$  (в том числе и в точках  $x = -a$  и  $x = +a$ ) удастся лишь для двух типов решений: с четными и нечетными волновыми функциями.

*Четные волновые функции* (нечетные номера уровней энергии):

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos kx, & |x| \leq a; \\ Ce^{-\kappa x}, & x \geq a; \\ Ce^{\kappa x}, & x \leq -a, \end{cases} \quad (2)$$

где  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ,  $\kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$ . Условия «сшивания» волновой функции внутри и вне ямы, состоящие в требовании непрерывности самой функции и ее первой производной, выполняются не для всех значений энергии электрона  $E$ , а лишь для тех ее значений  $E_n$ ,  $n = 1, 3, 5, \dots$ , которые следуют из решения трансцендентного уравнения

$$\operatorname{tg} \xi = \sqrt{\frac{\rho_0^2}{\xi^2} - 1}, \quad (3)$$

где

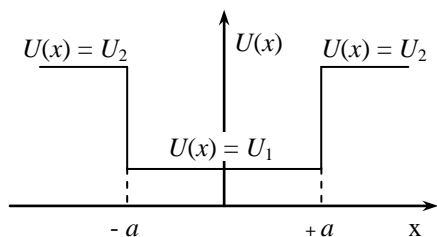


Рис. 1.

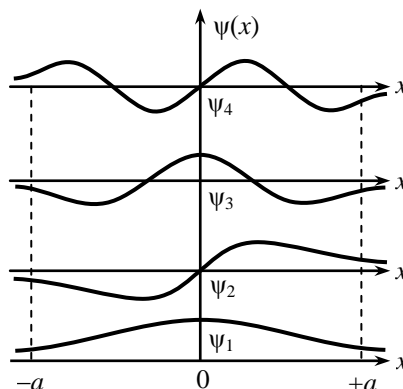


Рис. 2.

$$\xi = ka = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a; \quad \rho_0 = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}} a. \quad (4)$$

Нечетные волновые функции (четные номера уровней энергии):

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin kx, & |x| \leq a; \\ Ce^{-\kappa x}, & x \geq a; \\ -Ce^{\kappa x}, & x \leq -a. \end{cases} \quad (5)$$

Условия «сшивания» волновой функции внутри и вне ямы выполняются для тех значений энергии  $E_n$ ,  $n = 2, 4, 6, \dots$ , которые следуют из решения трансцендентного уравнения

$$\operatorname{ctg} \xi = -\sqrt{\frac{\rho_0^2}{\xi^2} - 1} \quad (6)$$

Квантование энергии является следствием того, что непрерывность волновой функции и ее первой производной на стенках ямы реализуется лишь при строго определенных значениях параметров  $k$  и  $\kappa$ . Для примера приведены (рис. 2) графики нескольких волновых функций.

Наиболее просто разрешенные значения энергии  $E_n$  могут быть найдены для бесконечно глубокой потенциальной ямы, т. е. при  $U_0 \rightarrow \infty$ . При этом  $\sqrt{\frac{\rho_0^2}{\xi^2} - 1} \rightarrow \infty$  и трансцендентные уравнения (3) и (6) принимают вид  $\operatorname{tg} \xi = \infty$ ;  $\operatorname{ctg} \xi = -\infty$ . Их решения могут быть объединены одной формулой

$$\xi = \frac{n\pi}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (7)$$

которая непосредственно приводит к выражению для квантования энергии в случае бесконечно глубокой потенциальной ямы:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8)$$

При этом, очевидно, нечётные  $n$  ( $n = 1, 3, 5, \dots$ ) соответствуют чётным волновым функциям, а чётные ( $n = 2, 4, 6, \dots$ ) – нечётным. Поскольку  $\kappa = \infty$ , то волновые функции отличны от нуля лишь внутри потенциальной ямы, т.е.  $|x| \leq a$ :

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= A \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), \quad n = 1, 3, 5, \dots; \\ \psi_n(x) &= A \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), \quad n = 2, 4, 6, \dots \end{aligned} \quad (9)$$

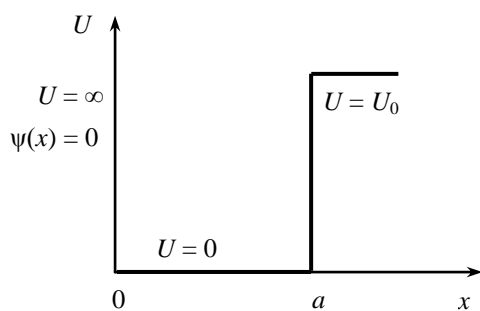


Рис. 3.

#### Асимметричная потенциальная яма.

Часть полученных результатов будет описывать поведение частицы также и в асимметричной потенциальной яме половинной ширины  $a$  с одной бесконечно высокой стенкой (рис. 3). В данном случае на бесконечно высокой стенке ( $x = 0$ ) волновая функция должна обращаться в нуль. Следовательно, граничным условиям в точке  $x = 0$  удовлетворяют решения уравнения лишь с нечётными волновыми функциями:

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin kx, & x \leq a \\ Ce^{-\kappa x}, & x \geq a \end{cases} \quad (10)$$

которым соответствуют уровни энергии с чётными номерами  $E_2, E_4, E_6, \dots$ . Именно эти состояния и реализуются в асимметричной яме.

Несколько видоизменяется условие нормировки:  $\int_0^{\infty} \psi(x) dx = 1$ .

В отличие от симметричной ямы, в которой всегда реализуется, по крайней мере, одно связанное состояние, рассматриваемая асимметричная яма не может удержать частицу, если её параметр  $\rho_0$  меньше некоторого критического значения  $\rho_{0 \min} = \pi/2$  и

$(U_0 a^2)_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$ . Таким образом, для того чтобы удержать частицу в связанном состоянии, асимметричная потенциальная яма не должна быть слишком мелкой и узкой.

Рассмотрение одномерной асимметричной потенциальной ямы с бесконечно высокой стенкой представляет непосредственный практический интерес, поскольку к ней сводятся некоторые реальные трёхмерные задачи о движении частиц в центральном силовом поле (например, задача о ядре дейтерия).

## Вычислительный эксперимент

Частица в одномерной потенциальной яме описывается стационарным уравнением Шредингера (1). Потенциал внешнего поля в данном случае имеет вид (рис. 4)

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & |x| \geq a \\ 0 & |x| < a \end{cases}.$$

Задача состоит в нахождении набора допустимых значений энергии  $\{E\}$  (называемого *спектром*) и соответствующего набора  $\{\psi_E(x)\}$  решений уравнения (1), которые обладают «правильным» поведением во всем пространстве, т.е. удовлетворяют граничным условиям при  $x \rightarrow \pm\infty$  и  $x \rightarrow \pm a$ .

Уравнение (1) в областях 1,3 имеет вид

$$\psi'' - \chi^2 \psi = 0, \quad \chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \quad (11)$$

а в области (2) –

$$\psi'' + \kappa^2 \psi = 0, \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E. \quad (12)$$

Собственные функции должны удовлетворять граничным условиям, из которых и находится спектр энергий  $\{E\}$ . Граничные условия в данном случае имеют вид:

$$\psi_{1,3} \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \pm\infty,$$

а также

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \psi_2, \quad \psi_1' = \psi_2' \text{ при } x = -d, \\ \psi_3 &= \psi_2, \quad \psi_3' = \psi_2' \text{ при } x = d. \end{aligned}$$

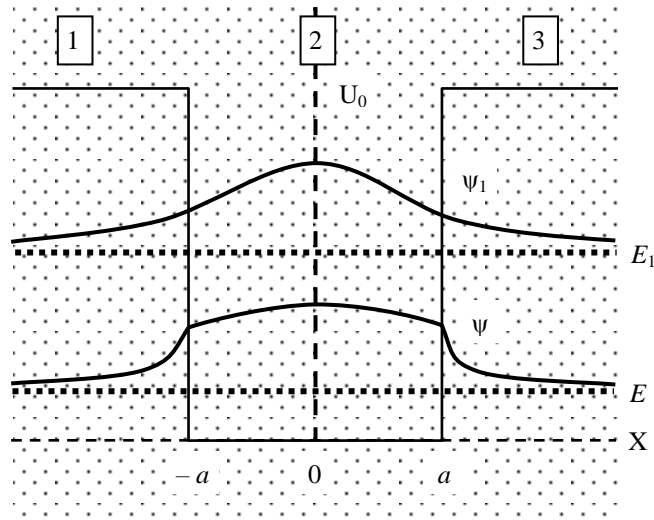


Рис. 4. Рабочее окно 1 моделирующей программы.

Горизонтальной линией изображен произвольный уровень энергии  $E$ , над ней – соответствующая волновая функция  $\psi$ , полученная из формального решения уравнения (11), с учётом граничных условий, *собственное* значение энергии  $E_1$  и соответствующая *собственная* волновая функция  $\psi_1$ , которые описывают одно из допустимых состояний квантовой частицы в одномерной потенциальной яме.

Нетрудно видеть, что уравнения (11) и (12) совпадают с уравнением (4.2) в [1] (для компонент поля в сердцевине плоского диэлектрического волновода:

$$\frac{d^2 E_0}{dx^2} + (k_0^2 n_k^2 - \beta^2) E_0 = 0, \text{ где } k_0 = \frac{\omega}{c} \text{ при замене } \psi \rightarrow E_0, \text{ и, например, для (11):}$$

$$-\frac{2m}{\hbar^2} U_0 \rightarrow k_0^2 n_k^2, \quad -\frac{2m}{\hbar^2} E \rightarrow \beta^2.$$

Отсюда следует, что квантовая частица в прямоугольной потенциальной яме ведёт себя подобно электромагнитной волне в диэлектрическом резонаторе (световоде), причём глубина ямы соответствует величине скачка показателя преломления на границе сердцевина-подложка (разумеется, с обратным знаком), а энергия частицы соответствует

энергии продольного движения кванта светового поля:  $\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} = \frac{p_z^2}{2m}$  (см. п.4.1. в [1]).

Свойства квантовой частицы будут при этом вполне аналогичны характеристикам световой волны в световоде, в частности, для нахождения собственных значений энергии и собственных значений энергии и собственных волновых функций можно использовать тот же способ, что и в п.4.1. [1].

Задания выполняются в программе **QUANT1\att.exe**

## Описание модели

В задаче находится решение уравнений (11), (12) в яме, т.е. при  $|x| < a$ , и вне ямы, т.е. при  $|x| \geq a$ . Для численных расчётов используется атомная система единиц, в которой принято  $m = \hbar = e = 1$  ( $e$  – заряд электрона), тогда линейные размеры выражаются в

единицах боровского радиуса  $r_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,5 \cdot 10^{10} \text{ м}$ , а энергия – в единицах (удвоенного)

потенциала атома водорода  $E_i = \frac{me^4}{\hbar^2} = 27,2 \text{ эВ}$

## Описание программы

Программа работает в двух вариантах. В первом варианте (см. рис. 4) пользователем задаются фиксированные параметры потенциальной ямы:

1) глубина –  $U_0$ ,

2) ширина –  $2a$ ,

и варьируется энергия частицы  $E$ . Программа для каждого значения  $E$  находит формальные решения уравнений (11) и (12) внутри и вне ямы (причем решения выбираются с «правильной», т.е. падающей на  $\pm \infty$ , асимптотикой) и сшивает их на границе ямы в точках  $x = \pm a$ . Пользователю необходимо «вручную» подобрать значения энергии, обеспечивающие *гладкую* сшивку решений в этих точках.

Во втором варианте (см. рис. 5) для заданных пользователем параметров ямы программа сама находит спектр допустимых (собственных) значений  $\{E_m\}$ , которые и определяют возможные состояния частицы в данной яме, описываемые собственными функциями  $\{\psi_E(x)\}$ .

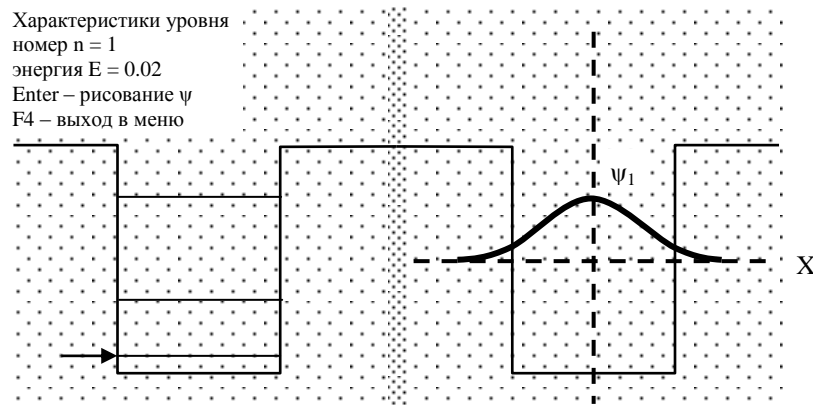


Рис. 5. Рабочее окно 2 моделирующей программы.

В левом поле рисунка горизонтальные линии показывают допустимые (собственные) значения уровней энергии  $\{E_m\}$  для данной потенциальной ямы. В правом поле изображена волновая функция для уровня, отмеченного стрелкой в левом поле.

## Задание 1

В этом задании программа работает в первом варианте.

1.1. Найдите решения уравнений (11) и (12). Выберите «правильные» (физически реальные) решения в областях 1 и 3. Сформулируйте условия для сшивки волновой функции и ее производной на границах областей в точках  $x_{1,2} = \pm a$ .

1.2. Исследуйте решение уравнения (1) с помощью компьютерной модели

Задайте параметры ямы и выберите произвольное значение энергии  $E$ . Постройте соответствующую волновую функцию  $\psi_E$ . Является ли это значение энергии допустимым? Изменяйте величину  $E$  (оставляя  $E < U_0$ ), так чтобы максимально близко подойти к допустимой величине  $E = E_1$ . Найдите эту величину, зная шаг перемещения по спектру. Сколько таких величин при заданных размерах ямы? Какой вид (непрерывный, дискретный) имеет спектр энергий в этой области? Поясните причину.

1.3. Перейдите в область  $E > U_0$ . Какой вид (непрерывный, дискретный) имеет спектр энергий в этой области? Поясните причину.

## Задание 2

В этом и последующих заданиях программа работает во втором варианте.

2.1. Исследуйте аналогию между квантовым объектом и классическим объектом, удобной моделью которого является шарик, колеблющийся без трения на дне прямоугольной ямы, упруго отражаясь от стенок.

2.1.1. Каков вид спектра энергий шарика (непрерывный, дискретный) и каково минимальное значение энергии?

2.1.2. Какой вид имеет «волновая функция» шарика? При этом считайте, что ширина ямы много больше размера шарика.

2.2. Рассмотрим теперь квазиклассический аналог – квантовый объект, представляющий собой «частицу» (массы  $m$ ) с волновыми свойствами, которая находится в «бесконечно глубокой» потенциальной яме.

2.2.1. Какова вероятность обнаружить частицу вне ямы и какие требования следуют отсюда на волновую функцию (волну де Бройля) частицы на границах ямы? Нарисуйте несколько простейших волновых функций. Используя граничные условия на волну де Бройля ( $\lambda_D = 2\pi\hbar/p$ , где  $p$  – импульс частицы), найдите спектр допустимых энергий частицы в яме

$$E_n = \frac{(\pi\hbar)^2}{(2a)^2 2m} n^2, \text{ где } n = 1, 2, \dots \quad (13)$$

Какова зависимость от ширины ямы  $2a$  минимальной энергии  $E_1$  спектра, расстояния между уровнями  $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n$  и отношения  $\Delta E_n/E_n$ ? Сравнив с результатами п.2.1, поясните, каким образом нужно менять параметры данной квантовой системы, чтобы перейти к классическому пределу.

2.3. Исследуйте этот вопрос на компьютерной модели.

2.3.1. Следите за изменением величины  $E_1$  при увеличении ширины ямы до тех пор, пока система не приобретет свойство «классической» в соответствии с результатом п.2.2, запишите значение  $a$ , при котором это происходит.

2.3.2. Выберите две пары соседних уровней и для четырёх значений  $a$  и  $U_0$  постройте зависимость величин  $\Delta E_n$  и  $\Delta E_n/E_n$  от параметров  $1/U_0$  и  $1/a^2$ . Сравните ее с полученной в п.2.2.1 оценкой. Поясните результат.

2.3.3. Поясните, при каких энергиях система ведет себя «как частица», и при каких – «как волна».

2.4. Для случая «классической» ямы зарисуйте волновые функции частицы на нижнем и верхнем уровнях. Какими свойствами классического объекта (волны или «шарика») квантовая частица обладает на этих уровнях? Поясните причину.

### Задание 3

С помощью «МЕНЮ» постройте шесть вариантов ямы, варьируя поочередно её ширину  $2a$  и глубину  $U_0$  так, чтобы параметр  $A$ , определенный как  $\frac{a\sqrt{2mU_0}}{\hbar} = A$ , оставался неизменным. Выясните, сохраняется ли для этих вариантов число энергетических уровней в яме. Увеличивая параметр  $A$  путем увеличения  $U_0$  и  $a$  наблюдайте появление новых уровней и установите значение параметра  $A$ , соответствующее одному уровню. Каков физический смысл параметра  $A$  и полученных результатов? Сформулируйте условие появления нового уровня.

### Задание 4

Исследуйте связь размеров частицы в координатном пространстве и пространстве импульсов.

4.1. Рассмотрим случай узкой ямы, когда в ней находится только один уровень, а ширина волновой функции  $\Delta x$  существенно превышает размер ямы  $a$ . При этом почти вся волновая функция частицы находится вне ямы и описывается решением уравнения (11). Покажите, что для достаточно малой ширины ямы, так что  $\chi d \ll 1$ , среднеквадратичное значение импульса частицы

$$\Delta p_x = \langle p_x^2 \rangle^{1/2} = \left[ \langle \psi^* | \hat{p}_x^2 | \psi \rangle \right]^{1/2} = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

Определив из решения (11) величину  $\Delta x$  по уровню  $1/e$  от амплитуды, найдите зависимость от энергии произведения  $\Delta x \cdot \Delta p_x$  и поясните физический смысл этого произведения в данном случае.

4.2. Исследуйте вопрос на компьютерной модели. Выберите ширину ямы в соответствии с условиями задания 4.1. Для четырех значений  $a_i$  найдите соответствующие величины  $\sqrt{U_0 - E_i}$ , определите ширину волновой функции  $\Delta_i$  и вычислите произведение  $\pi_i = \Delta_i \cdot \sqrt{U_0 - E_i}$ . Занесите результат в таблицу и постройте график зависимости  $\pi_i(a_i)$ . Поясните результат, сравнив с полученным в п.4.1, сформулируйте «принцип неопределенности» на данном примере.



### **Задание 5 (дополнительное)**

1. Если бесконечно увеличивать глубину потенциальной ямы, что происходит с собственными значениями энергии?
2. Какой вид имеют волновая функция и вероятность нахождения частицы при различных значениях  $n = 1, 2, 3, 4, 5$ ? Зарисовать.
3. Сравните квантово-механическое решение задачи с классическим.
4. Как ведёт себя волновая функция (за потенциальным барьером) при правильном подборе собственных значений энергии?
5. Сформулируйте принцип неопределённости, если частица находится в пределах отрезка длины  $\Delta l$ .

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Красов В.И., Паперный В.Л., Чумак В.В. Оптика. Компьютерный практикум: учеб. пособие: Ч.3.–Иркутск: Изд. Иркут. ун-та, 2005.
2. Практикум по атомной физике: Для физ. спец. вузов / В.Б. Авраменко, А.И. Головатый, В.Е. Граков и др. Под ред. Л.И. Киселевского. Мн.: Университетское, 1989.
3. Шпольский Э.В. Атомная физика. М.: Наука, 1984