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:

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

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

Четные волновые функции (нечетные номера уровней энергии):

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

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, $n = 1, 3, 5, ...$, которые следуют из решения трансцендентного уравнения

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

где

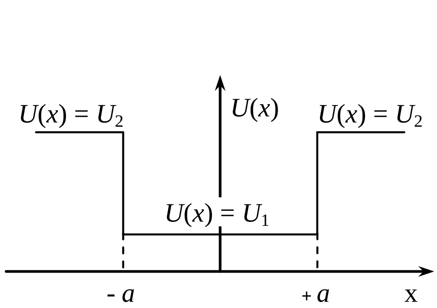

Рис. 1.

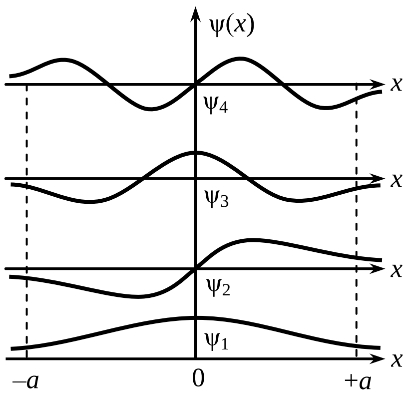

Рис. 2.

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

Нечетные волновые функции (четные номера уровней энергии):

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

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

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

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 κ. 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 $U_0 \to \infty$. При этом $\sqrt{\frac{\rho_0^2}{\xi^2} - 1} \to \infty$ и трансцендентные уравнения (3) и (6) принимают вид $tg\,\xi = \infty$; $ctg\,\xi = -\infty$. Их решения могут быть объединены одной формулой

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

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

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

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

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

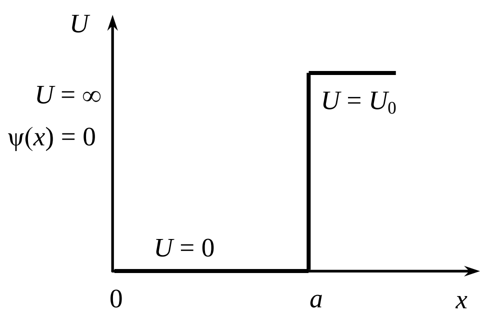

Рис. 3.

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:

$$\psi(x) = \begin{cases} A\sin kx, & x \le a \\ Ce^{-\kappa x}, & x \ge a \end{cases} \qquad (10)$$

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

Несколько видоизменяется условие нормировки: $\int\limits_0^\infty \psi(x)dx = 1$.

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 ρ_0 меньше некоторого критического значения $\rho_{0\,min} = \pi/2$ и $\left(U_0 a^2\right)_{min} = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{8m}$. 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)

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

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 $x \to \pm\infty$ и $x \to \pm a$.

Уравнение (1) в областях 1,3 имеет вид

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

а в области (2) –

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

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

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

а также

$$\psi_1 = \psi_2, \; \psi_1' = \psi_2' \text{ при } x = -d,$$

$$\psi_3 = \psi_2, \; \psi_3' = \psi_2' \text{ при } x = d.$$

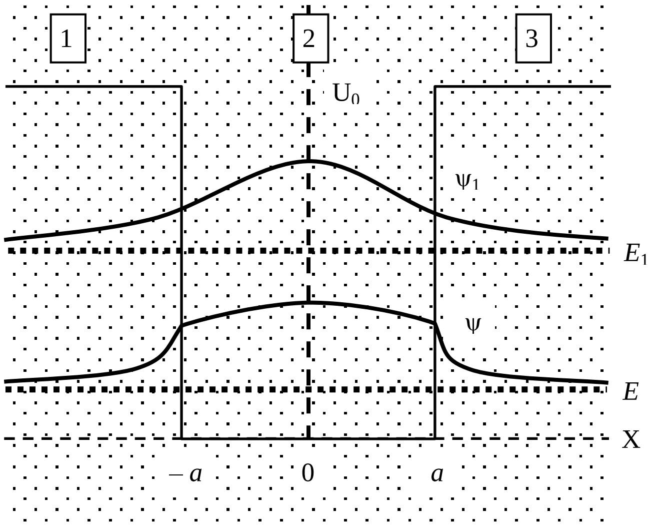

Рис. 4. Рабочее окно 1 моделирующей программы.
Горизонтальной линией изображен произвольный уровень энергии *E*, над ней – соответствующая волновая функция ψ, полученная из формального решения уравнения (11), с учётом граничных условий, *собственное* значение энергии E_1 и соответствующая *собственная* волновая функция ψ_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: $\frac{d^2E_0}{dx^2} + \left(k_0^2 n_k^2 - \beta^2\right)E_0 = 0$, где $k_0 = \frac{\omega}{c}$) при замене $\psi \to E_0$, и, например, для (11):

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

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 $|x| \ge a$. 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 $r_Б = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,5 \cdot 10^{10}$ $м$, а энергия – в единицах (удвоенного) потенциала атома водорода $E_i = \frac{me^4}{\hbar^2} = 27,2$ $эВ$

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 $\{\psi_E(x)\}$.

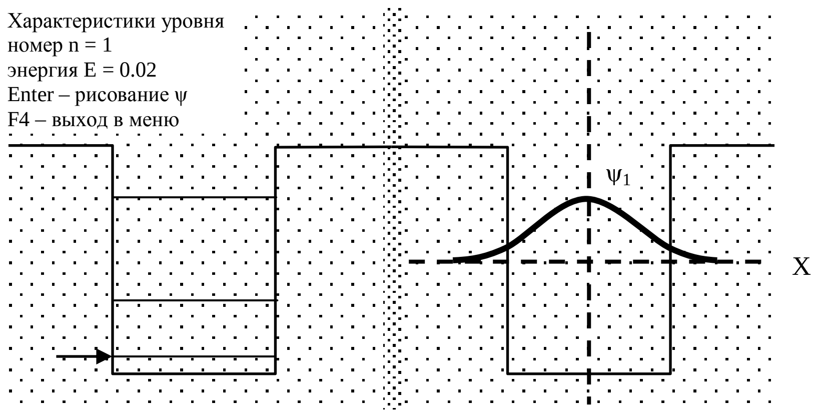

Рис. 5. Рабочее окно 2 моделирующей программы.
В левом поле рисунка горизонтальные линии показывают допустимые (собственные) значения уровней энергии $\{E_m\}$ для данной потенциальной ямы. В правом поле изображена волновая функция для уровня, отмеченного стрелкой в левом поле.

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 ψ_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

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

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 ΔE_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 поочерёдно 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 Δx 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 $\chi d << 1$, среднеквадратичное значение импульса частицы

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

Определив из решения (11) величину Δx 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 Δ_i и вычислите произведение $\Pi_i = \Delta_i \cdot \sqrt{U_0 - E}$. 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 Δl .

ЛИТЕРАТУРА

1. Красов В.И., Паперный В.Л., Чумак В.В. Оптика. Компьютерный практикум: учеб. пособие:Ч.3.–Иркутск: Изд. Иркут. ун-т, 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