Глава 3

Едномерни стационарни задачи

3.1 Едномерна безкрайна правоъгълна потенциална яма

В тази глава ще разгледаме най-простия едномерен потенциал: безкрайна правоъгълна потенциална яма. Преди това ще докажем две важни свойства на едномерните потенциали: четност и неизроденост на спектъра.

Четност и оператор на четността

Операторът на четността $\hat{P}$ сменя знака (извършва инверсия) на координатата:

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x), \qquad \hat{P}\hat{H}(x) = \hat{H}(-x). \tag{3.1}$$

Нека да намерим собствените стойности p и собствените функции $\psi(x)$ на оператора $\hat{P}$,

$$\hat{P}\psi(x) = p\psi(x). \tag{3.2}$$

От дефиницията на $\hat{P}$ следва,че

$$\hat{P}^2\psi(x) = \hat{P}\hat{P}\psi(x) = \hat{P}p\psi(x) = p\hat{P}\psi(x) = p^2\psi(x). \tag{3.3}$$

От друга страна имаме

$$\hat{P}^2\psi(x) = \hat{P}\psi(-x) = \psi(x). \tag{3.4}$$

Следователно собствените стойности на $\hat{P}$ удовлетворяват $p^2 = 1$, откъдето $p = \pm 1$. В двата случая получаваме

$$p = 1: \qquad \hat{P}\psi(x) = \psi(x) = \psi(-x); \tag{3.5а}$$

$$p = -1: \qquad \hat{P}\psi(x) = -\psi(x) = \psi(-x). \tag{3.5б}$$

Следователно собствената стойност $p = 1$ отговаря на четни собствени функции [$\psi(-x) = \psi(x)$], а собствената стойност $p = -1$ отговаря на нечетни собствени функции [$\psi(-x) = -\psi(x)$].

Напомняме, че функциите се делят на

- четни (симетрични), за които $f(-x) = f(x)$ [например $f(x) = x^2$];
- нечетни (антисиметрични), за които $f(-x) = -f(x)$ [например $f(x) = x$];
- нито четни, нито нечетни (асиметрични), за които $f(-x)$ не може да се изрази чрез $f(x)$ [например $f(x) = x + x^2$].

Теорема 1. Ако потенциалната енергия е четна (симетрична) функция на координатата x $[\hat{V}(-x) = \hat{V}(x)]$, то собствените функции на Хамилтониана $\hat{H}(x)$ имат четност, т.е. те са или четни (симетрични), или нечетни (антисиметрични) функции на x.

Доказателство. Най-напред отбелязваме, че ако $\hat{V}(-x) = \hat{V}(x)$, то и $\hat{H}(-x) = \hat{H}(x)$, понеже:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{3.6}$$

Следователно намираме за *произволно* избрана функция $\psi(x)$

$$\hat{P}\hat{H}(x)\psi(x) = \hat{H}(-x)\psi(-x) = \hat{H}(x)\psi(-x) = \hat{H}(x)\hat{P}\psi(x), \tag{3.7}$$

откъдето следва, че Хамилтонианът комутира с оператора на четността:

$$\hat{P}\hat{H}(x) = \hat{H}(x)\hat{P} = 0. \tag{3.8}$$

Оттук следва, че двата оператора имат едни и същи собствени функции, откъдето следва, че собствените функции на $\hat{H}(x)$ имат определена четност, т.е. са или четни, или нечетни.

Теорема 2. Всеки едномерен потенциал $V(x)$ има неизроден енергетичен спектър.

Доказателство. Допускаме, че за някаква собствена стойност E на Хамилтониана $\hat{H}(x)$ имаме 2 различни собствени функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$:

$$\hat{H}(x)\psi_1(x) = E\psi_1(x), \tag{3.9а}$$
$$\hat{H}(x)\psi_2(x) = E\psi_2(x). \tag{3.9б}$$

или

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_1(x) = E\psi_1(x), \tag{3.10а}$$
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_2(x) = E\psi_2(x). \tag{3.10б}$$

Умножаваме първото уравнение с ψ_2, а второто с ψ_1 и ги приравняваме:

$$\psi_2(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_1(x) = \psi_1(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_2(x), \tag{3.11}$$

откъдето намираме

$$\psi_2(x)\psi_1''(x) - \psi_1(x)\psi_2''(x) = 0. \tag{3.12}$$

Това уравнение може да се представи по следния начин:

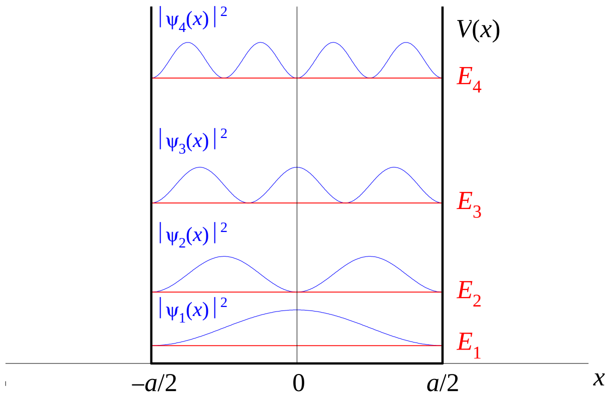
$$\frac{d}{dx}\left[\psi_2(x)\psi_1'(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x)\right] = 0, \tag{3.13}$$

след интегриране на което получаваме

$$\psi_2(x)\psi_1'(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x) = C = \text{const}. \tag{3.14}$$

Това равенство следва да е валидно за всяко x, включително при $x \to \infty$, където имаме $\psi_{1,2}(x \to 0) = 0$; следователно $C = 0$ и

$$\psi_2(x)\psi_1'(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} = \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)}. \tag{3.15}$$



Фигура 3.1: Потенциалната енергия на безкрайна правоъгълна потенциална яма.

Интегрираме двете страни на последното равенство като отчитаме, че

$$\int \frac{\psi_k'(x)}{\psi_k(x)} dx = \ln \psi_k(x) + \ln b_k \qquad (k = 1, 2), \tag{3.16}$$

където b_k са интеграционни константи, и така намираме

$$\ln \psi_2(x) = \ln \psi_1(x) + \ln b_1 - \ln b_2 = \ln[b\psi_1(x)], \qquad b = b_1/b_2. \tag{3.17}$$

Следователно имаме $\psi_2(x) = b\psi_1(x)$, т.е. функциите $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ са равни с точност до константен множител (който изчезва при нормиране) и следователно те описват едно и също енергетично състояние. С това допускането, че $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ описват различни състояния, е опровергано, откъдето следва, че собствените енергии са неизродени.

Безкрайна правоъгълна потенциална яма

Потенциалната енергия на безкрайна правоъгълна потенциална яма, изобразена на фигура 3.1, се задава по следния начин:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & |x| > a/2, \\ 0, & |x| \leqq a/2. \end{cases} \tag{3.18}$$

Ще търсим решения на стационарното уравнение на Шрьодингер

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{3.19}$$

за енергии $E > 0$. Хамилтонианът е сума от кинетичната и потенциалната енергия,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \tag{3.20}$$

и стационарното уравнение на Шрьодингер добива вида

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\Psi(x) = 0. \tag{3.21}$$

Формата на потенциала $V(x)$ показва, че има три различни области на решението:

1. област I: $x < -a/2$, където $V(x) = \infty$;
2. област II: $-a/2 \leqq x \leqq a/2$, където $V(x) = 0$;
3. област III: $x > a/2$, където $V(x) = \infty$.

Да разгледаме най-напред решението в областите I и III, където $V(x) = \infty$. Разходимостта на потенциала води до разходимост на втория член в уравнение (3.21). Единственият начин да удовлетворим уравнението е ако вълновата функция $\Psi(x)$ е тъждествено нула:

$$\psi_I(x) = \psi_{III}(x) = 0. \tag{3.22}$$

В областта II потенциалната енергия е нула, $V(x) = 0$; имаме

$$\Psi''(x) + k^2\Psi(x) = 0, \tag{3.23}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0. \tag{3.24}$$

Това е обикновено линейно хомогенно диференциално уравнение от втори ред. Неговите решения имат вида $\psi_{II}(x) = e^{\lambda x}$, където $\lambda = \text{const}$. Имаме $\psi'_{II}(x) = \lambda e^{\lambda x}$ и $\psi''_{II}(x) = \lambda^2 e^{\lambda x}$ и след заместване в (3.23) намираме $(\lambda^2 + k^2)\psi_{II}(x) = 0$ и следователно $\lambda = \pm ik$.

Така намираме, че общото решение на уравнение (3.23) има вида

$$\psi_{II}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \tag{3.25}$$

където A и B са интеграционни константи. Решението може да се представи и в следните форми

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= C\sin(kx) + D\cos(kx) && (3.26\text{а}) \\ &= F\sin(kx + \phi), && (3.26\text{б}) \end{aligned}$$

където с използването на тригонометричните формули $\sin z = (e^{iz} - e^{-iz})/2i$ и $\cos z = (e^{iz} + e^{-iz})/2$ могат да се намерят връзките между константите:

$$\begin{aligned} 2A &= D - iC, \qquad 2B = D + iC, && (3.27\text{а}) \\ 2A &= -iFe^{i\phi}, \qquad 2B = iFe^{-i\phi}. && (3.27\text{б}) \end{aligned}$$

Интеграционните константи се намират от условието за непрекъснатост на вълновата функция в точките на прекъснатост на $V(x)$, $x = \pm a/2$:

$$\begin{aligned} \psi_I(-a/2) &= \psi_{II}(-a/2), && (3.28\text{а}) \\ \psi_{II}(a/2) &= \psi_{III}(a/2). && (3.28\text{б}) \end{aligned}$$

Задачата ни се опростява, ако приложим *теорема 1*, според която, поради четността на $V(x)$, вълновата функция на всяко състояние е или четна, или нечетна функция на x. Ще разгледаме случаите на четни и нечетни вълнови функции поотделно. За целта е най-удобно да се използва тригонометричната форма на решението (3.26а), понеже $\cos(x)$ е четна, а $\sin(x)$ е нечетна функция.

1. Четна вълнова функция. Ако вълновата функция е четна, то решението е

$$\psi_{II}(x) = D\cos(kx). \tag{3.29}$$

Условията за непрекъснатост (3.28) в този случай изискват:

$$D\cos(-ka/2) = 0, \qquad D\cos(ka/2) = 0. \tag{3.30}$$

Поради четността на $\cos(x)$ тези две условия водят до едно и също условие:

$$ka = (2n+1)\pi \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots). \tag{3.31}$$

От дефиницията (3.24) на k следва, че това условие представлява условие за квантуване на енергията:

$$E_{2n+1} = \frac{\hbar^2\pi^2(2n+1)^2}{2ma^2} \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots). \tag{3.32}$$

Вълновата функция се дава експлицитно с

$$\psi_{II}(x) = D\cos\frac{(2n+1)\pi x}{a}. \tag{3.33}$$

2. Нечетна вълнова функция. Ако вълновата функция е нечетна, то решението е

$$\psi_{II}(x) = C\sin(kx). \tag{3.34}$$

Условията за непрекъснатост (3.28) в този случай налагат:

$$C\sin(-ka/2) = 0, \qquad C\sin(ka/2) = 0, \tag{3.35}$$

които отново, този път поради нечетността на $\sin(x)$, представляват всъщност само едно условие, което изисква

$$ka = 2n\pi \qquad (n = 1, 2, \ldots). \tag{3.36}$$

В този случай $n = 0$ дава тривиално решение, $\psi_{II}(x) \equiv 0$. От дефиницията (3.24) на k следва отново, че това условие квантува енергията:

$$E_{2n} = \frac{\hbar^2\pi^2(2n)^2}{2ma^2} \qquad (n = 1, 2, \ldots). \tag{3.37}$$

Вълновата функция е

$$\psi_{II}(x) = C\sin\frac{2n\pi x}{a}. \tag{3.38}$$

Изразите (3.32) и (3.37) на енергията за четни и нечетни състояния могат да бъдат обединени в един израз:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots). \tag{3.39}$$

Интеграционните константи C и D се определят от условието за нормиране на вълновите функции:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2\, dx = \int_{-a/2}^{a/2} |\Psi_{II}(x)|^2\, dx = 1. \tag{3.40}$$

За нечетните функции имаме:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-a/2}^{a/2} |C|^2 \sin^2\frac{2n\pi x}{a} dx = \frac{|C|^2}{2}\int_{-a/2}^{a/2}\left[1 - \cos\frac{4n\pi x}{a}\right] dx \\ &= \frac{|C|^2}{2}\left[a - \frac{a}{4n\pi}\sin\frac{4n\pi x}{a}\Big|_{-a/2}^{a/2}\right] = \frac{|C|^2}{2}a, \end{aligned} \tag{3.41}$$

откъдето намираме $|C| = \sqrt{2/a}$. Аналогично се намира, че $|D| = \sqrt{2/a}$.

Като резюмираме всички резултати по-горе, стигаме до окончателните изрази за вълновите функции и енергиите на възможните състояния в безкрайната правоъгълна потенциална яма:

$$\psi_{2n+1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\frac{(2n+1)\pi x}{a}, \qquad E_{2n+1} = \frac{\hbar^2\pi^2(2n+1)^2}{2ma^2} \quad (n = 0, 1, 2, \ldots), \tag{3.42а}$$

$$\psi_{2n}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{2n\pi x}{a}, \qquad E_{2n} = \frac{\hbar^2\pi^2(2n)^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, \ldots). \tag{3.42б}$$

Плътността на вероятността на тези състояния има вида:

$$P_{2n}(x) = |\psi_{2n}(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\frac{2n\pi x}{a}, \tag{3.43а}$$

$$P_{2n+1}(x) = |\psi_{2n+1}(x)|^2 = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos^2\frac{(2n+1)\pi x}{a} \tag{3.43б}$$

и е показано на фигура 3.1 за първите няколко състояния.

И така, стигнахме до следните важни изводи:

1. Енергията на състоянията се квантува, като това свойство произлиза от условието за непрекъснатост на вълновата функция.

2. Квантуваните енергии не са еквидистантни, а са пропорционални на n^2, където квантовото число $n = 1, 2, \ldots$ номерира съответното квантово състояние.

3. Квантуваните енергии са обратно пропорционални на масата на частицата, т.е. в една и съща потенциална яма по-тежките частици имат по-ниски енергии.

4. Квантуваните енергии са обратно пропорционални на квадрата на ширината на ямата, т.е. при стесняване на ямата енергиите се повдигат нагоре. Обратно, при разширяване на ямата енергиите се снижават надолу, като при безкрайно широка яма енергиите се сливат в непрекъснат спектър.

5. Най-ниската енергия — енергията на основното състояние $\psi_1(x)$ — е винаги по-голяма от нула, т.е. частицата не може да лежи на дъното на ямата.

6. Вълновите функции имат определена четност, като започват от четна и се редуват: четна-нечетна-четна-...

7. Вълновата функция $\psi_n(x)$ има $n-1$ еквидистантни възела, т.е. точки x_k, в които $\psi_n(x_k) = 0$ и пльтността на вероятността там е нула.

8. Стените на потенциалната яма са недостъпни, както и в класическата механика (но тук това е поради безкрайно големия потенциал в стените).