

Глава 3

Едномерни стационарни задачи

3.2 Едномерна крайна правоъгълна потенциална яма

Сега ще разгледаме задачата за крайна правоъгълна потенциална яма, потенциалната енергия на която е изобразена на фигура 3.1 и се задава по следния начин:

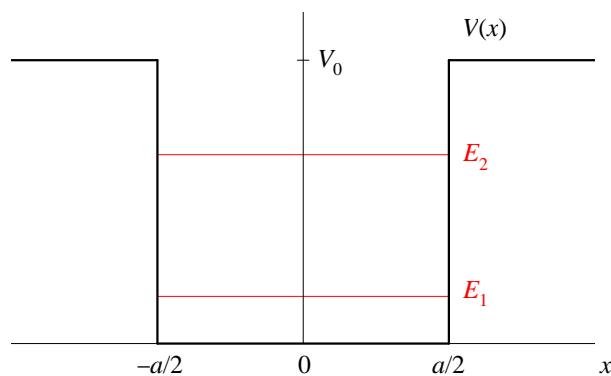
$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| > a/2, \\ 0, & |x| \leq a/2. \end{cases} \quad (3.1)$$

Търсим решения на стационарното уравнение на Шрьодингер

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\Psi(x) = 0. \quad (3.2)$$

за енергии $E > 0$. Формата на потенциала $V(x)$ показва, че има три различни области на решението:

1. област I: $x < -a/2$, където $V(x) = V_0$;
2. област II: $-a/2 \leq x \leq a/2$, където $V(x) = 0$;
3. област III: $x > a/2$, където $V(x) = V_0$.



Фигура 3.1: Потенциалната енергия на крайна правоъгълна потенциална яма.

Да разгледаме най-напред решението в областите I и III, където $V(x) = V_0$. Уравнение (3.2) добива вида:

$$\Psi''(x) - \kappa^2 \Psi(x) = 0, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} > 0. \quad (3.3)$$

Общите решения са суперпозиции от експоненти:

$$\psi_I(x) = A_+ e^{\kappa x} + A_- e^{-\kappa x} \quad (x < -a/2), \quad (3.4)$$

$$\psi_{III}(x) = C_+ e^{\kappa x} + C_- e^{-\kappa x} \quad (x > a/2), \quad (3.5)$$

където A_{\pm} и C_{\pm} са интеграционни константи. Някои от членовете в решенията обаче нямат физически смисъл, понеже не удовлетворяват изискването за квадратична интегруемост на вълновата функция, което изисква $\Psi(\pm\infty) = 0$. По тази причина отпадат членовете $A_- e^{-\kappa x}$ и $C_+ e^{\kappa x}$, които дивергират съответно при $t \rightarrow -\infty$ и $t \rightarrow \infty$.

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

$$\Psi''(x) + k^2 \Psi(x) = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0. \quad (3.6)$$

Общото решение на това уравнение е суперпозиция от две плоски вълни, разпространяващи се в противоположни посоки:

$$\psi_{II}(x) = B_+ e^{ikx} + B_- e^{-ikx}, \quad (3.7)$$

където B_+ и B_- са интеграционни константи. Решението може да се представи в тригонометричния вид

$$\psi_{II}(x) = B \sin(kx) + D \cos(kx). \quad (3.8)$$

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

$$\psi_I(-a/2) = \psi_{II}(-a/2), \quad (3.9a)$$

$$\psi'_I(-a/2) = \psi'_{II}(-a/2), \quad (3.9б)$$

$$\psi_{II}(a/2) = \psi_{III}(a/2), \quad (3.9в)$$

$$\psi'_{II}(a/2) = \psi'_{III}(a/2). \quad (3.9г)$$

Задачата ни се опростява, ако приложим *теорема 1* от предишната глава, 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 ще използваме тригонометричната форма на решението (3.8), понеже $\cos(x)$ е четна, а $\sin(x)$ е нечетна функция.

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

$$\psi_I(x) = A_+ e^{\kappa x} \quad (x < -a/2), \quad (3.10a)$$

$$\psi_{II}(x) = D \cos(kx) \quad (-a/2 \leq x \leq a/2), \quad (3.10б)$$

$$\psi_{III}(x) = C_- e^{-\kappa x} \quad (x > a/2), \quad (3.10в)$$

като четността изисква $A_+ = C_-$.

Условията за непрекъснатост (3.9) в точката $x = -a/2$ в този случай изискват:

$$A_+ e^{-\varkappa a/2} = D \cos(ka/2), \quad (3.11a)$$

$$\varkappa A_+ e^{-\varkappa a/2} = kD \sin(ka/2). \quad (3.11b)$$

Лесно се вижда, че аналогични условия се получават и в другата точка $x = a/2$, което е следствие от четността на вълновата функция.

От последните две условия получаваме:

$$\varkappa = k \tan(ka/2). \quad (3.12)$$

От дефинициите на \varkappa и k , формули (3.3) и (3.6), следва, че това уравнение включва енергията E , дълбочината V_0 и ширината a на потенциалната яма, както и масата на частицата m . Следователно уравнение (3.12) може да се разглежда като условие върху енергията E при зададени V_0 , a , и m .

Уравнение (3.12) е трансцендентно уравнение, което не може да се реши точно чрез елементарни функции. То може да се реши числено, приблизително или графично. Ние ще го изследваме графично, понеже така могат да се получат важни качествени свойства на решението. От формули (3.3) и (3.6) намираме

$$\varkappa^2 + k^2 = K^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \quad (3.13)$$

В равнината $k\varkappa$ последното равенство представлява уравнение на окръжност с радиус K .

Графичното решение на уравнение (3.12) е изобразено на фигура (3.2) (вляво). Решенията k_n представляват пресечните точки на функциите $k \tan(ka/2)$ и $\varkappa = \sqrt{K^2 - k^2}$. От фигурата е ясно, че винаги има поне едно решение, т.е. поне едно енергетично състояние, отговарящо на четна вълнова функция. Броят на решенията, т.е. броят на позволените енергетични нива в потенциалната яма, се определя от стойността на K , т.е. от V_0 . При плитка яма (малко V_0) съществува само едно енергетично ниво, а с нарастването на V_0 се появяват все повече нива: колкото по-дълбока е ямата, т.е. колкото по-голяма е стойността на V_0 , съответно на K , толкова по-голям е броят на възможните енергетични състояния.

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

$$\psi_I(x) = A_+ e^{\varkappa x} \quad (x < -a/2), \quad (3.14a)$$

$$\psi_{II}(x) = B \sin(kx) \quad (-a/2 \leq x \leq a/2), \quad (3.14b)$$

$$\psi_{III}(x) = C_- e^{-\varkappa x} \quad (x > a/2), \quad (3.14в)$$

като нечетността изисква $A_+ = -C_-$.

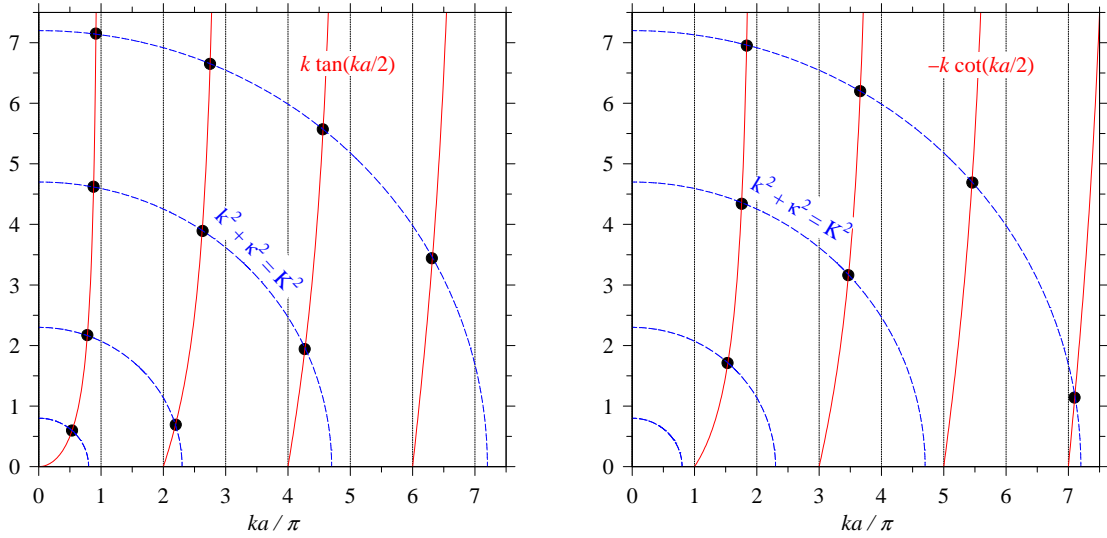
Условията за непрекъснатост (3.9) в точката $x = -a/2$ в този случай изискват:

$$A_+ e^{-\varkappa a/2} = -B \sin(ka/2), \quad (3.15a)$$

$$\varkappa A_+ e^{-\varkappa a/2} = kB \cos(ka/2). \quad (3.15b)$$

Аналогични условия се получават и в точката $x = a/2$, което е следствие от нечетността на вълновата функция. От тези две условия получаваме:

$$\varkappa = -k \cot(ka/2), \quad (3.16)$$



Фигура 3.2: **Вляво:** Графично решаване на уравнение (3.12). Непрекъснатите криви показват функцията $k \tan(ka/2)$, а пунктирните изобразяват окръжността $\varkappa = \sqrt{K^2 - k^2}$ за различни стойности на $K = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$. Пресечните точки представляват решенията k_n на уравнението (3.12). **Вдясно:** Графично решаване на уравнение (3.16). Непрекъснатите криви показват функцията $-k \cot(ka/2)$, а пунктирните изобразяват окръжността $\varkappa = \sqrt{K^2 - k^2}$ за различни стойности на $K = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$. Пресечните точки представляват решенията k_n на уравнението (3.16).

което представлява условие върху енергията E при зададени V_0 , a , и m . Отново прилагаме графичния метод за решаването и на това уравнение.

Графичното решение на уравнение 3.16 е изобразено на фигура (3.2) (вдясно). Решенията k_n представляват пресечните точки на функциите $-k \cot(ka/2)$ и $\varkappa = \sqrt{K^2 - k^2}$. Фигурата показва, че не винаги има решение, т.е. при малки стойности на V_0 няма нито едно енергетично състояние, отговарящо на нечетна вълнова функция. Броят на решенията, т.е. броят на позволените енергетични нива, се определя от стойността на V_0 : колкото по-дълбока е ямата, толкова по-голям е броят на възможните енергетични 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 и нейната производна в точките на прекъснатост на потенциалната енергия. Енергиите се задават с

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} k_n^2 \quad (n = 1, 2, \dots, N). \quad (3.17)$$

2. Броят на квантуваните състояния N се определя от дълбочината на потенциалната яма V_0 :

$$Ka/\pi < N < Ka/\pi + 1, \quad (3.18)$$

където $K = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$. Очевидно при безкрайно дълбока яма ($V_0 \rightarrow \infty$) боят на дискретните състояния клони към безкрайност, $N \rightarrow \infty$, в потвърждение на резултата за безкрайна потенциална яма.

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, а при разширяване на ямата енергиите се снижават надолу.
5. Най-ниската енергия — енергията на основното състояние — 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-... Поне едно четно състояние съществува винаги, докато нечетно състояние съществува само при $ka > \pi$.
7. Вероятността частицата да проникне в стените е различна от нула, за разлика от класическата механика и безкрайната потенциална яма.