§ 8. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме

Прежде чем перейти к рассмотрению реальных атомных систем, обсудим общие свойства решений уравнения Шредингера на некоторых простейших моделях. Рассмотрим прежде всего одномерное движение частицы в потенциальном поле, определенном следующим образом:

$$U(x)=\begin{cases} 0 & \text{при } 0<x<l, \\ \infty & \text{при } x\leqslant 0 \text{ и } x\geqslant l. \end{cases}$$

Подобное потенциальное поле мы будем именовать бесконечно глубокой потенциальной ямой. Ясно, что в такой яме частица может двигаться только в области пространства $0\leqslant x\leqslant l$.

На границе ямы на частицу действуют сколь угодно большие силы, которые не позволяют ей выйти наружу, так что частица как бы заключена в некоторой области пространства, ограниченной идеально отражающими стенками. Оказывается, что на таком простейшем примере можно будет установить ряд свойств квантовомеханических систем. Существенно, что эти свойства не связаны с моделью, а имеют общий характер. Кроме того, интерес к этой задаче определяется также и тем, что модель потенциальной ямы часто с успехом используется для грубого описания ряда систем, например электронов в металле или нуклонов в ядре.

Решение уравнения Шредингера следует написать в двух областях: вне потенциальной ямы и внутри нее. Поскольку частица не может находиться вне потенциальной ямы, ее волновая функция равна нулю вне промежутка $0<x<l$. Из условия непрерывности следует, что она равняется нулю также и в точках $x=0$ и $x=l$, т. е.

$$\psi(0)=\psi(l)=0. \tag{8,1}$$

Требование (8, 1) служит граничным условием для решения уравнения Шредингера внутри потенциальной ямы. В области $0<x<l$ уравнение Шредингера для стационарных состояний (6,6) имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi. \tag{8,2}$$

Решение последнего уравнения можно, очевидно, записать как

$$\psi=A\sin(kx+\alpha), \tag{8,3}$$

где $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Используем теперь граничные условия (8,1). Из соотношения $\psi=0$ при $x=0$ следует $\alpha=0$. Условие

$\psi(l)=0$ дает

$$kl = n\pi, \tag{8,4}$$

где n — любое целое число, большее нуля. В дальнейшем оно будет именоваться квантовым числом. При $n=0$ мы имели бы $\psi \equiv 0$, что означало бы отсутствие частицы во всем пространстве. Условие (8, 4) позволяет найти возможные значения энергии частицы

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} n^2. \tag{8,5}$$

Мы видим, что уравнение Шредингера имеет решения, удовлетворяющие граничным условиям только при дискретных значениях квантового числа n. Таким образом, энергия частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме оказывается квантованной. Дискретность энергии возникла естественным образом, без каких-либо дополнительных предположений. В данном случае она оказалась непосредственно следующей из граничных условий, налагаемых на волновую функцию на концах промежутка интегрирования. Состояние частицы с наименьшей возможной энергией будет в дальнейшем именоваться нормальным или основным, все остальные состояния — возбужденными. Энергия нормального состояния частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме получается из формулы (8,5) при $n=1$:

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}. \tag{8,6}$$

Заметим, что значение минимальной энергии частицы находится в соответствии с принципом неопределенности. Действительно, неопределенность координаты частицы $\Delta x \sim l$. Неопределенность импульса Δp порядка $\frac{\hbar}{l}$. Так как $p \geqslant \Delta p$, то минимальная энергия частицы оказывается равной

$$\frac{p^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2ml^2},$$

что по порядку величины совпадает с (8, 6).

Определим теперь расстояние между соседними уровнями энергии ($\Delta n = 1$):

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1).$$

Расстояние между уровнями увеличивается с уменьшением массы частицы и размеров области ее движения l. Так, например, для электрона ($m \sim 10^{-27}$ *г*), заключенного в области $l \sim 5\cdot 10^{-8}$ *см*, находим $\Delta E \sim 1$ *эв*. Напротив, в случае молекулы с $m \sim 10^{-23}$ *г*, движущейся, например, в области $l \sim 10$ *см*, расстояние между уровнями составляет $\Delta E \sim 10^{-20}$ *эв*. Это расстояние настолько мало, например, по сравнению с $kT = 0{,}025$ *эв*, что практически энергию молекулы можно считать непрерывно изменяющейся величиной.

Найдем отношение $\frac{\Delta E_n}{E_n}$, т. е. относительное расстояние между уровнями энергии. Мы видим, что $\frac{\Delta E_n}{E_n} \sim \frac{1}{n}$ и стремится к нулю при очень больших n. Дискретность квантовых состояний перестает проявляться при больших квантовых числах и фактически наступает переход к непрерывному изменению энергии.

Рассмотрим несколько подробнее свойства волновых функций частицы в потенциальной яме. Волновая функция, отвечающая n-му уровню энергии, имеет вид

$$\psi_n = A_n \sin \frac{\pi n}{l} x. \tag{8,7}$$

Постоянную A_n определим из условия нормировки

$$\int_0^l |\psi_n|^2 dx = 1.$$

Тогда

$$|A_n|^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi}{l} x\, dx = |A_n|^2 \int_0^l \frac{1}{2}\left(1 - \cos \frac{2n\pi}{l} x\right) dx = |A_n|^2 \frac{l}{2} = 1.$$

Отсюда

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{l}}. \tag{8,8}$$

Таким образом, значение постоянной не зависит от квантового числа n.

Плотность вероятности $|\psi|^2$ нахождения частицы в различных точках внутри ямы иллюстрируется на рис. 2. В классической механике частица, движущаяся в потенциальной яме, с равной вероятностью может находиться в любой точке внутри ямы (прямая на рис. 2). Действительно, вероятность $dW_{\text{кл}}$ обнаружения частицы в интервале dx пропорциональна времени dt нахождения частицы в этом интервале:

$$dW_{\text{кл}} \sim dt = \frac{1}{v} dx.$$

Поскольку на частицу внутри ямы никакие силы не действуют, она движется с постоянной скоростью v и, следовательно, $dW_{\text{кл}}$ не зависит от x. При увеличении квантового числа n

(энергии частицы) максимумы распределения вероятностей стремятся сблизиться друг с другом. В пределе $n \to \infty$ распределение вероятностей, получаемое из квантовомеханического расчета, приводит к тем же результатам, что и классическое распределение. Это следует из того, что функция $\sin^2 \frac{\pi n}{l} x$ быстро осциллирует при изменении x и при интегрировании по любому конечному интервалу может быть заменена на $^1/_2$. Таким образом, рассмотрение простейшей квантовомеханической системы приводит нас к следующим выводам, имеющим, как мы убедимся в дальнейшем, совершенно общий характер:

1) энергия микрочастицы, движущейся в потенциальной яме, пробегает дискретный ряд значений;

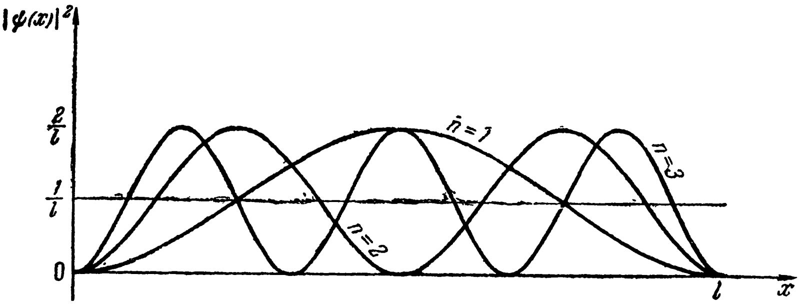

Рис. 2.

2) даже при $E = E_1$ (нормальное состояние) частица не находится в состоянии полного покоя с кинетической энергией, равной нулю;

3) дискретный характер энергетических уровней проявляется при малой массе частиц и малых размерах области, в которой происходит движение;

4) при больших значениях квантовых чисел квантовомеханические соотношения переходят в формулы классической физики. Последнее утверждение является частным случаем общего принципа соответствия, с которым мы будем еще неоднократно встречаться.

В дальнейшем при рассмотрении квантового осциллятора или атомных систем мы увидим, что квантование состояний может иметь место в системах, не ограниченных какими-либо непроницаемыми стенками. Вместе с тем мы увидим, что наличие дискретных энергетических состояний не является непременным признаком квантовомеханических систем. В некоторых случаях квантовомеханические системы обладают непрерывным спектром.