§ 9. Частица в трехмерной прямоугольной потенциальной яме

Рассмотрим теперь более сложный случай движения частицы в трехмерной бесконечно глубокой потенциальной яме. Будем считать, что область пространства, в которой движется частица, определяется неравенствами $0 < x < l_1$; $0 < y < l_2$; $0 < z < l_3$. Волновое уравнение в этом случае можно записать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)=E\psi. \tag{9,1}$$

Граничные условия аналогичны (8,1) и имеют вид

$$\begin{aligned}\psi(0, y, z)&=\psi(x, 0, z)=\psi(x, y, 0)=\\&=\psi(l_1, y, z)=\psi(x, l_2, z)=\psi(x, y, l_3)=0.\end{aligned} \tag{9,2}$$

Решение уравнения (9,1) запишем в виде

$$\psi = B\sin k_1x \sin k_2y \sin k_3z. \tag{9,3}$$

Подставляя ψ в уравнение, получаем соотношение

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_1^2+k_2^2+k_3^2\right)=E. \tag{9,4}$$

Из граничных условий (9,2) следует

$$\begin{aligned}k_1l_1&=n_1\pi,\\k_2l_2&=n_2\pi,\\k_3l_3&=n_3\pi,\end{aligned} \tag{9,5}$$

где n_1, n_2 и n_3 — целые числа.

Подставляя значения k_1, k_2 и k_3 в (9,4) и (9,3), получаем выражения для энергии и волновой функции

$$E_{n_1,\, n_2,\, n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{l_1^2}+\frac{n_2^2}{l_2^2}+\frac{n_3^2}{l_3^2}\right), \tag{9,6}$$

$$\psi_{n_1n_2n_3}=B\sin\frac{\pi n_1x}{l_1}\sin\frac{\pi n_2y}{l_2}\sin\frac{\pi n_3z}{l_3}. \tag{9,7}$$

Постоянная B опять определяется из условия нормировки

$$\int\limits_V |\psi_{n_1n_2n_3}|^2\,dx\,dy\,dz=1$$

и равна

$$B=\sqrt{\frac{8}{l_1l_2l_3}}. \tag{9,8}$$

Рассмотрим, в частности, частицу, движущуюся в потенциальной яме кубической формы, т. е. случай $l_1 = l_2 = l_3 = l$. Энергия частицы в этом случае равна

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right). \tag{9,9}$$

Из формулы (9,9) легко увидеть, что одно и то же значение энергии может осуществляться при помощи различных комбинаций чисел n_1, n_2 и n_3. Это означает, что несколько различных квантовых состояний с разными волновыми функциями отвечают одному и тому же значению энергии. Такие уровни энергии называются вырожденными, а число различных состояний, отвечающих данному уровню энергии, — кратностью вырождения.

Рассмотрим, например, уровень энергии

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \cdot 6,$$

где $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 6$. Так как каждое из n — целое число, большее нуля, то этому равенству можно удовлетворить тремя различными комбинациями чисел n_1, n_2, n_3:

$$\begin{aligned}
&1)\ n_1 = 2, \quad n_2 = 1, \quad n_3 = 1,\\
&2)\ n_1 = 1, \quad n_2 = 2, \quad n_3 = 1,\\
&3)\ n_1 = 1, \quad n_2 = 1, \quad n_3 = 2.
\end{aligned}$$

Таким образом, данному уровню энергии отвечают 3 различных состояния ψ_{211}, ψ_{121}, ψ_{112}. Следовательно, кратность вырождения данного уровня равна трем. С явлением вырождения мы часто будем сталкиваться при рассмотрении более сложных систем, например, атомов.

§ 10. Линейный осциллятор

Переходя к более сложным квантовомеханическим системам, мы остановимся на теории линейного гармонического осциллятора. Такой осциллятор представляет квантовый аналог частицы, совершающей малые линейные колебания около положения равновесия. Примером малых колебаний в атомных системах могут служить малые колебания атомов в молекуле (ср. § 41 ч. III).

Не менее важным примером может служить также тепловое движение кристалла, которое может быть представлено в виде совокупности линейных гармонических осцилляторов. С задачей о гармоническом осцилляторе мы встретимся также и в квантовой электродинамике, где произвольное электромагнитное поле