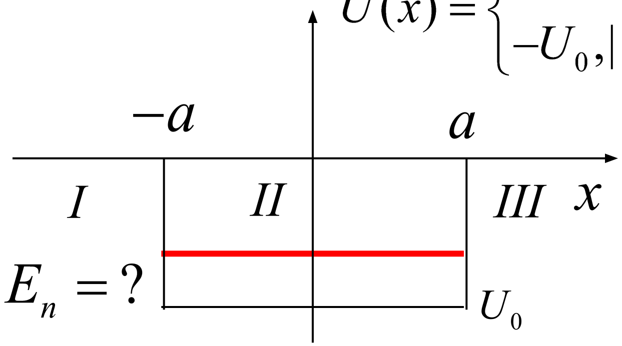
Найти возможные значения энергии в прямоугольной яме конечной глубины

Рассматриваем случай финитного движения (в классической механике)

$$E = -\left|E\right| < 0$$

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a \\ -U_0, & |x| \le a \end{cases}$$



Уравнение Шрёдингера

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + U\left(x\right)\right]\Psi\left(x\right) = -\left|E\right|\Psi\left(x\right)$$

Уравнение Шрёдингера в разных областях

$$I, III: \ \Psi'' - k^2\Psi = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2m\left|E\right|}{\hbar^2}}$$

$$II: \quad \Psi'' + \kappa^2\Psi = 0, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(U_0 - \left|E\right|\right)}$$

Схема решения в общем случае

Волновая функция в разных областях

$$I: \quad \Psi = C_1 \cdot e^{kx} + C_2 \cdot e^{-kx}$$

$$II: \quad \Psi = B_1 \cdot \cos \kappa x + B_2 \cdot \sin \kappa x$$

$$III: \quad \Psi = A_1 \cdot e^{kx} + A_2 \cdot e^{-kx}$$

Как определить неизвестные коэффициенты?

Неизвестные коэффициенты можно найти из граничных условий на бесконечности

$$\Psi\left(|x| \to \infty\right) = 0$$

и условий сшивки в точках скачка потенциала!

Условия сшивки в точках скачка потенциала

$$\int_{a-\delta}^{a+\delta} dx \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \left(U(x) + |E|\right)\Psi(x) \right]\Bigg|_{\delta \to 0} = 0$$

Вычислить предел?

Условия сшивки в точках скачка потенциала

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_{a-\delta}^{a+\delta} dx\left[\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}\right]\Bigg|_{\delta\to 0} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Psi'(a+0)-\Psi'(a-0)\right]$$

$$\int\limits_{a-\delta}^{a+\delta} dx\left[\left(U(x)+|E|\right)\Psi(x)\right]\Bigg|_{\delta\to 0} = 0$$

Условия сшивки в точках скачка потенциала

$$\Psi'(a+0)-\Psi'(a-0)=0$$

Схема решения в общем случае

Волновая функция в разных областях

$$I: \quad \Psi = C_1 \cdot \mathrm{e}^{kx} + C_2 \cdot \mathrm{e}^{-kx}$$

$$II: \quad \Psi = B_1 \cdot \cos \kappa x + B_2 \cdot \sin \kappa x$$

$$III: \quad \Psi = A_1 \cdot \mathrm{e}^{kx} + A_2 \cdot \mathrm{e}^{-kx}$$

Граничные условия и условия сшивки

$$\Psi\left(|x| \to \infty\right) = 0$$

$$\Psi\left(a+0\right) - \Psi\left(a-0\right) = 0$$

$$\Psi'\left(a+0\right) - \Psi'\left(a-0\right) = 0$$

Из граничных условий

$$I: \quad \Psi = C \cdot \mathrm{e}^{kx}$$

$$II: \quad \Psi = B_1 \cdot \cos \kappa x + B_2 \cdot \sin \kappa x$$

$$III: \quad \Psi = A \cdot \mathrm{e}^{-kx}$$

Оставшиеся коэффициенты вычисляются с помощью условий сшивки.

Результативно надо решить однородную систему из четырёх уравнений!

Поступим иначе. Вычислить

$$\left[\hat{H}, \hat{I}\right] = ?$$

Результат

$$\left[\hat{H},\hat{I}\right]=0$$

Собственные функции гамильтониана должны быть собственными функциями оператора чётности!

Для собственных функций оператора чётности достаточно удовлетворить условиям сшивки только в одной и точек разрыва потенциала!

Написать чётное решение уравнения Шрёдингера?

Чётное решение

$$I, III: \quad \Psi = A \cdot \mathrm{e}^{-k|x|}$$

$$II: \quad \Psi = B \cdot \cos \kappa x$$

Записать условия сшивки в явном виде в точке a и получить уравнение для возможных значений энергии?

Условия сшивки в явном виде

$$\begin{cases} A \cdot \mathrm{e}^{-ka} - B \cdot \cos \kappa a = 0 \\ -kA \cdot \mathrm{e}^{-ka} + \kappa B \cdot \sin \kappa a = 0 \end{cases}$$

Уравнение для энергии

$$\kappa \cdot \sin \kappa a - k \cdot \cos \kappa a = 0$$

Или

$$\frac{k}{\kappa} = \tan \kappa a$$

Ввести безразмерные переменные

$$\gamma = \kappa a, \quad \xi = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}$$

и найти графическое решение характеристического уравнения.

Указание. Записать величину ka через новые безразмерные переменные.

Промежуточная формула

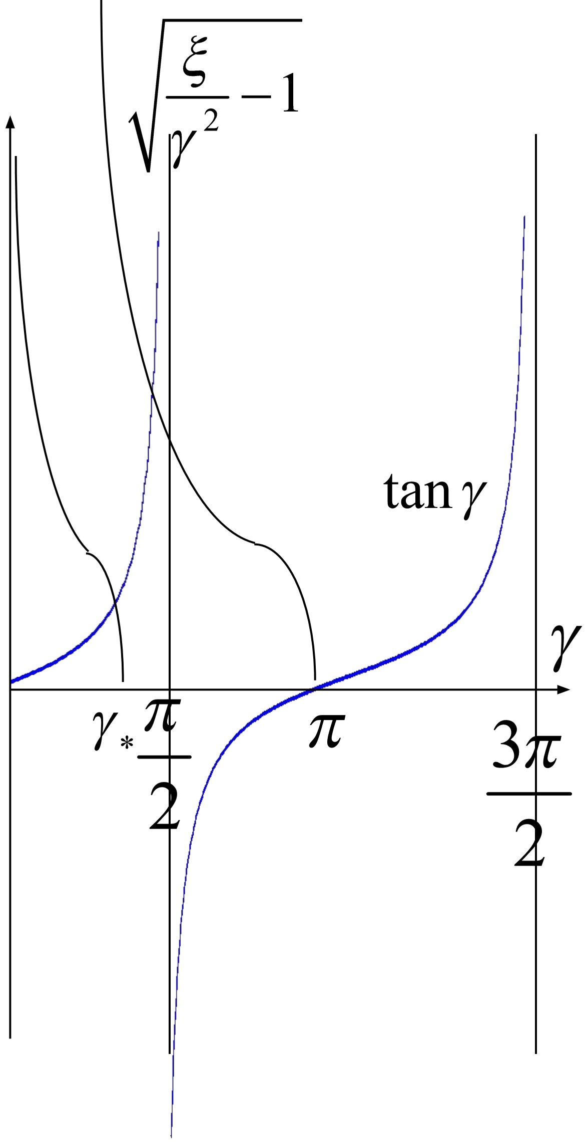
$$\gamma = \kappa a = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}\left(U_0 - |E|\right)} = \sqrt{\xi - k^2 a^2}$$

Или

$$ka = \sqrt{\xi - \gamma^2}$$

Характеристическое уравнение

$$\frac{k}{\kappa} = \frac{ka}{\kappa a} = \tan \kappa a \quad \Rightarrow \quad \sqrt{\frac{\xi}{\gamma^2} - 1} = \tan \gamma$$



Характеристическое уравнение

$$\sqrt{\frac{\xi}{\gamma^2}-1}=\tan\gamma$$

Всегда ли существует «связанное» состояние?
«Связанное» состояние описывается затухающей на бесконечности волновой функцией

Условие появление второго чётного уровня?

«Связанное» состояние существует в прямоугольной яме любой глубины.
Даже в «мелкой» яме!

«Мелкая» яма

$$\xi = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \ll 1$$

Условие появления второго чётного уровня

$$\sqrt{\frac{\xi}{\pi^2} - 1} = 0 \quad \Rightarrow \quad \xi = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = \pi^2$$

Написать нечётное решение уравнения Шрёдингера?

Нечётное решение

$$I, III: \quad \Psi = \pm A \cdot \mathrm{e}^{-k|x|}$$

$$II: \quad \Psi = B \cdot \sin \kappa x$$

Записать условия сшивки в явном виде в точке a и получить уравнение для возможных значений энергии?

Условия сшивки в явном виде

$$\begin{cases} A \cdot \mathrm{e}^{-ka} - B \cdot \sin \kappa a = 0 \\ -kA \cdot \mathrm{e}^{-ka} - \kappa B \cdot \cos \kappa a = 0 \end{cases}$$

Уравнение для энергии

$$\kappa \cdot \cos \kappa a + k \cdot \sin \kappa a = 0$$

Или

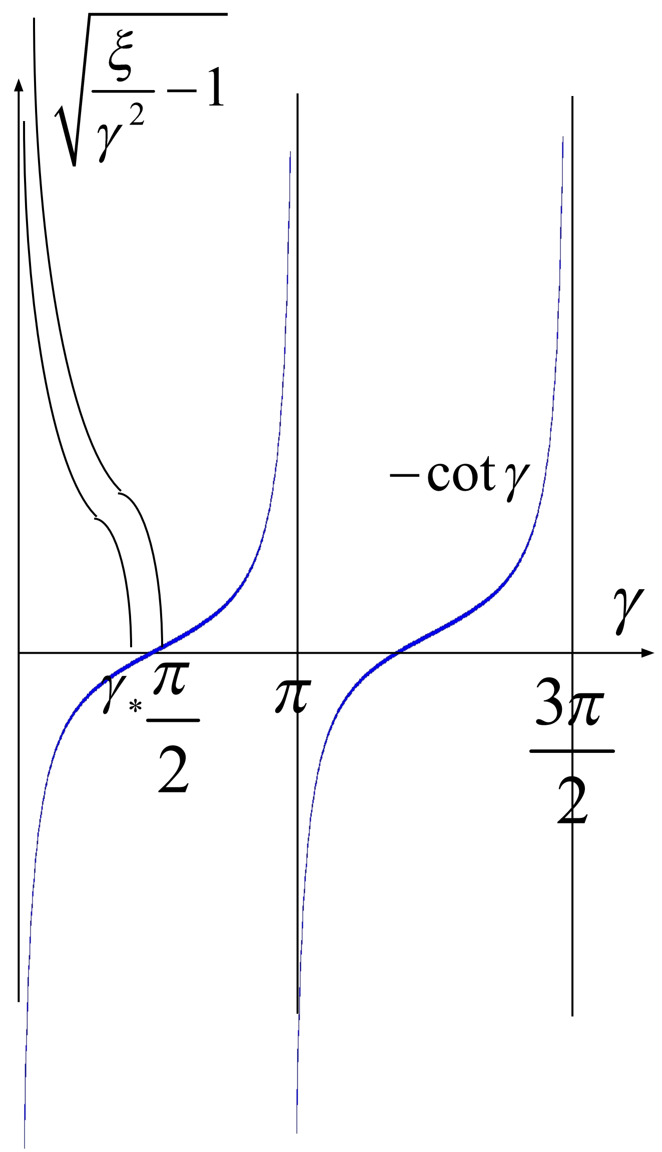
$$\frac{k}{\kappa} = -\cot \kappa a$$

Ввести безразмерные переменные

$$\gamma = \kappa a, \quad \xi = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}$$

и найти графическое решение характеристического уравнения.

Указание. Записать величину ka через новые безразмерные переменные.



Характеристическое уравнение

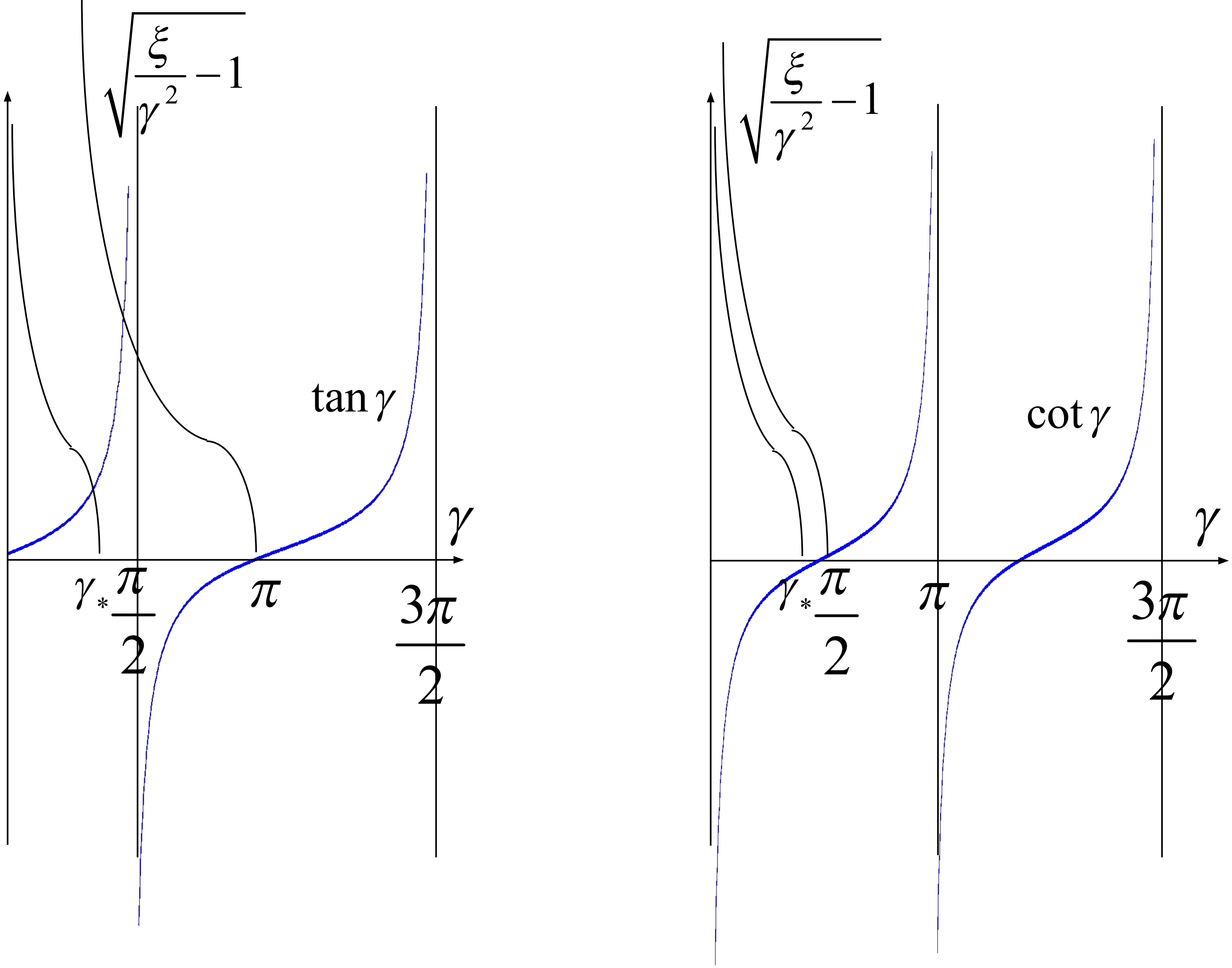
$$\sqrt{\frac{\xi}{\gamma^2}-1}=-\cot\gamma$$

Условие появления нечётного уровня?

Условие появления нечётного уровня

$$\sqrt{\frac{\xi}{(\pi/2)^2}-1}=0 \quad \Rightarrow \quad \xi=\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}=\frac{\pi^2}{4}$$

Классификация появляющихся уровней по мере увеличения глубины ямы?



По мере увеличения глубины ямы чётность уровней чередуется. Основное состояние (состояние с наименьшей алгебраической энергией) всегда чётное!