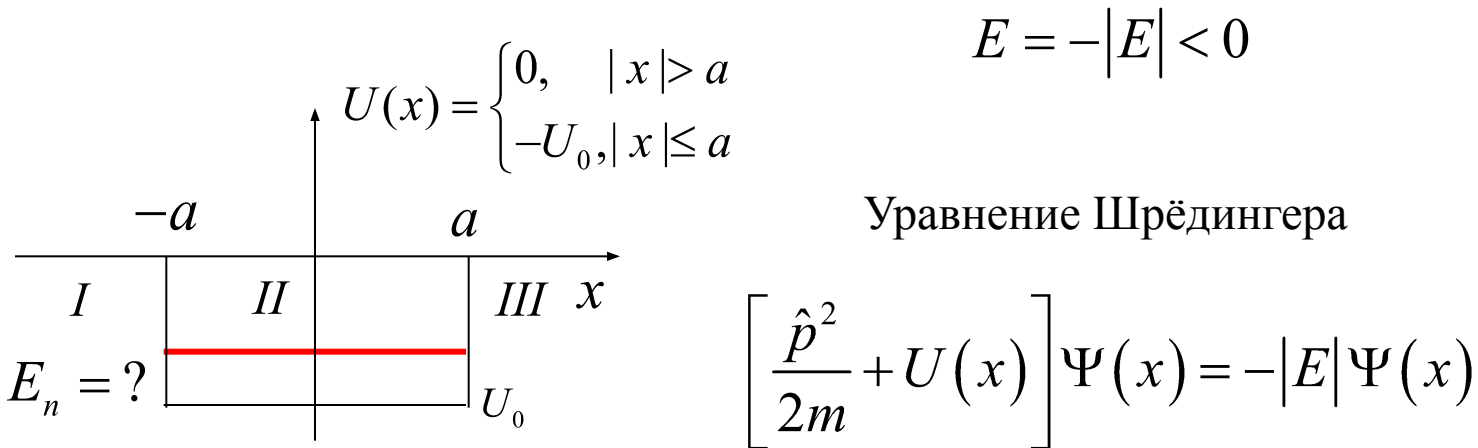


Найти возможные значения энергии в прямоугольной яме конечной глубины

Рассматриваем случай финитного движения (в классической механике)



Уравнение Шрёдингера в разных областях

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

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

Схема решения в общем случае

Волновая функция в разных областях

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

$$II: \Psi = B_1 \cdot \cos kx + B_2 \cdot \sin kx$$

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

Как определить неизвестные коэффициенты?

Неизвестные коэффициенты можно найти из граничных условий на бесконечности

$$\Psi(|x| \rightarrow \infty) = 0$$

и условий сшивки в точках скачка потенциала!

Условия сшивки в точках скачка потенциала

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

Вычислить предел?

Условия сшивки в точках скачка потенциала

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

$$\int_{a-\delta}^{a+\delta} dx [(U(x) + |E|)\Psi(x)] \Bigg|_{\delta \rightarrow 0} = 0$$

Условия сшивки в точках скачка потенциала

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

## Схема решения в общем случае

Волновая функция в разных областях

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

$$II: \Psi = B_1 \cdot \cos kx + B_2 \cdot \sin kx$$

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

Граничные условия и условия сшивки

$$\Psi(|x| \rightarrow \infty) = 0$$

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

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

Из граничных условий

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

$$II: \Psi = B_1 \cdot \cos kx + B_2 \cdot \sin kx$$

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

Оставшиеся коэффициенты вычисляются с помощью условий сшивки.

Результативно надо решить однородную систему из четырёх уравнений!

Поступим иначе. Вычислить

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

Результат

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

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

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

$$II: \Psi = B \cdot \cos kx$$

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



Условия сшивки в явном виде

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

Уравнение для энергии

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

Или

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

---

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

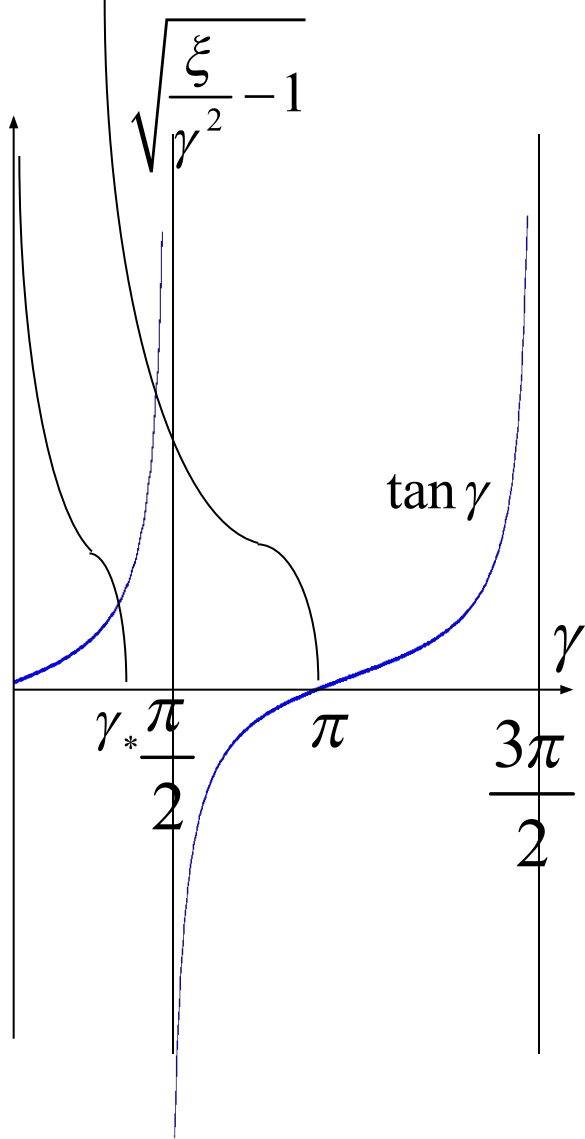
$$\gamma = \kappa a = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2} (U_0 - |E|)} = \sqrt{\xi - k^2 a^2}$$

Или

$$\kappa a = \sqrt{\xi - \gamma^2}$$

Характеристическое уравнение

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



Характеристическое уравнение

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

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

Условие появления второго чётного уровня?

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

«Мелкая» яма

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

Условие появления второго чётного уровня

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

Написать нечётное решение уравнения Шрёдингера?

Нечётное решение

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

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

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

Условия сшивки в явном виде

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

Уравнение для энергии

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

Или

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

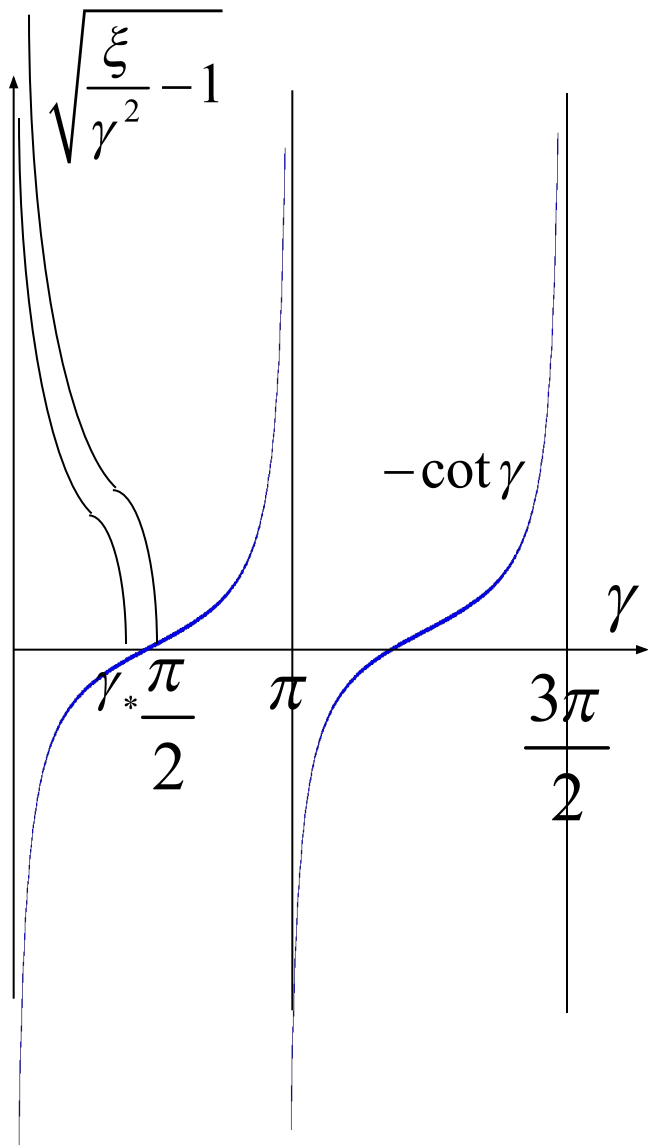
---

Ввести безразмерные переменные

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

и найти графическое решение характеристического уравнения.

Указание. Записать величину  $\kappa a$  через новые безразмерные переменные.



Характеристическое уравнение

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

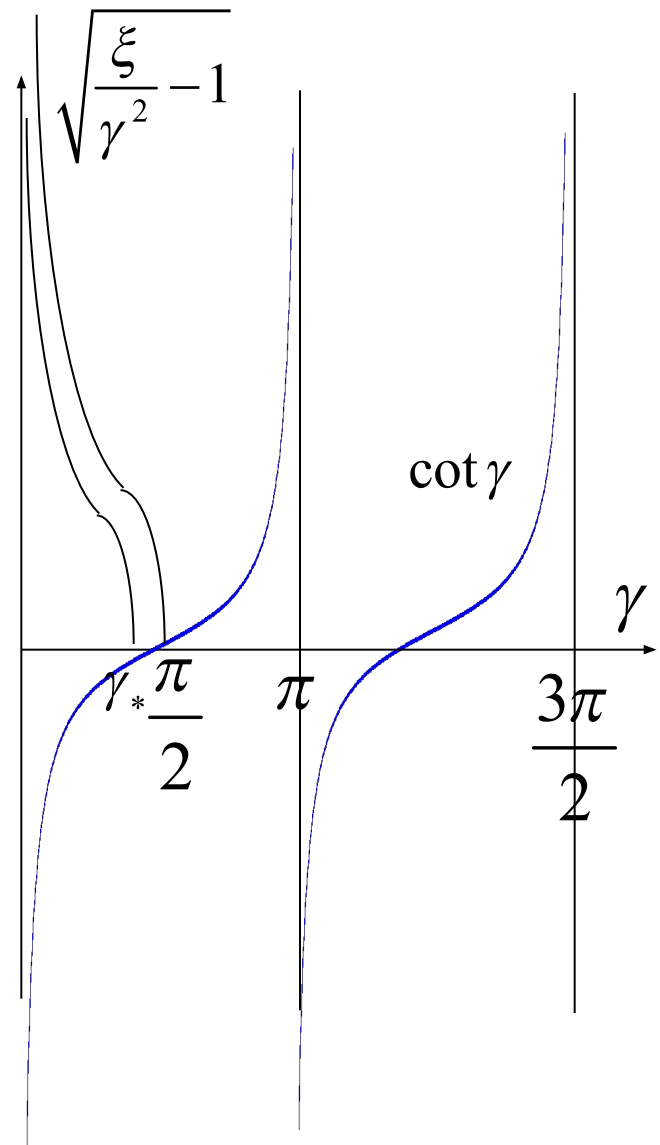
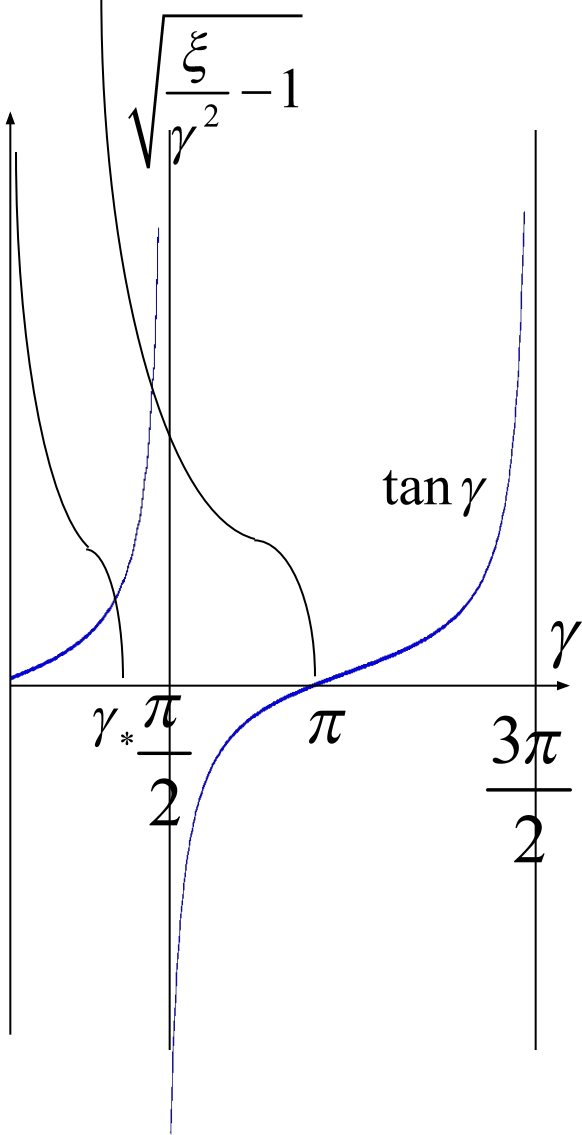
Условие появления нечётного уровня?

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!