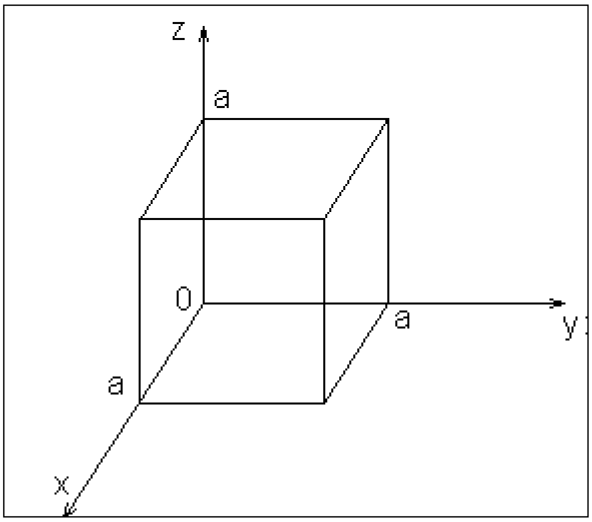
Задача № 26.

Частица массой m_0 находится в кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Найдите длину ребра куба, если разность энергий 6-ого и 5-ого уровней равна ΔE. Чему равна кратность вырождения 6-ого и 5-ого уровней?

Решение:

Потенциальная яма имеет вид (рисунок 1):



$$U = \begin{cases} \infty, M \notin \Omega \\ 0, M \in \Omega \end{cases}$$

$$\Omega = \begin{cases} 0 < x < a \\ 0 < y < a \\ 0 < z < a \end{cases}$$

$M(x, y, z)$

Рисунок 1

Составим уравнение Шредингера для области Ω:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + k^2 \psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x, y, z) = A\sin(k_1 x + \alpha_1)\sin(k_2 y + \alpha_2)\sin(k_3 z + \alpha_3) \qquad (3)$$

Используем естественные условия, накладываемые на пси-функцию. Вне области Ω частица находиться не может, значит, плотность вероятности, а значит, и пси-функция вне области Ω равны нулю. Учитывая этот факт и условие непрерывности пси-функций, получим:

$$\psi(0, y, z) = 0 \Rightarrow \sin\alpha_1 = 0 \Rightarrow \alpha_1 = 0$$
$$\psi(x, 0, z) = 0 \Rightarrow \sin\alpha_2 = 0 \Rightarrow \alpha_2 = 0$$
$$\psi(x, y, 0) = 0 \Rightarrow \sin\alpha_3 = 0 \Rightarrow \alpha_3 = 0$$

$$\psi(a,y,z)=0 \Rightarrow \sin k_1 a = 0 \Rightarrow k_1 a = \pm\pi n_1, n_1 = 1,2,3,...$$
$$\psi(x,a,z)=0 \Rightarrow \sin k_2 a = 0 \Rightarrow k_2 a = \pm\pi n_2, n_2 = 1,2,3,...$$
$$\psi(x,y,a)=0 \Rightarrow \sin k_3 a = 0 \Rightarrow k_3 a = \pm\pi n_3, n_3 = 1,2,3,...$$

В этом случае пси-функция примет вид:

$$\psi(x,y,z) = A\sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z = A\sin\left(\frac{\pi}{a}n_1 x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}n_2 y\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}n_3 z\right) \qquad (4)$$

Найдём частные производные от выражения (4) по x, y и z:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k_1^2 A\sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z = -k_1^2\psi$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = -k_2^2 A\sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z = -k_2^2\psi$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -k_3^2 A\sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z = -k_3^2\psi$$

и подставим их в уравнение Шредингера (2), получим:

$$-k_1^2\psi - k_2^2\psi - k_3^2\psi + k^2\psi = 0 \Rightarrow k^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 \qquad (5)$$

Учитывая, что $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, получим:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{\pi^2}{a^2}n_1^2 + \frac{\pi^2}{a^2}n_2^2 + \frac{\pi^2}{a^2}n_3^2 = \frac{\pi^2}{a^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \qquad (6)$$

Отсюда получим энергетический спектр частицы:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \qquad (7)$$

Энергия частицы зависит от трёх квантовых чисел n_1, n_2, n_3. Составим таблицу (таблица 1), в которой рассмотрим несколько первых энергетических уровней (сумма квадратов трёх квантовых чисел $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ определяет энергию частицы):

Таблица 1:

№ уровня	n_1	n_2	n_3	$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$
1	1	1	1	3
2	1	1	2	6
	1	2	1	
	2	1	1	
3	1	2	2	9
	2	1	2	
	2	2	1	
4	1	1	3	11
	1	3	1	

	3	1	1	
5	2	2	2	12
6	1	2	3	14
	1	3	2	
	2	1	3	
	2	3	1	
	3	1	2	
	3	2	1	

Как видно из таблицы, может существовать несколько состояний частицы, описываемых различными пси-функциями, но в которых частица имеет одно и то же значение энергии. Такие энергетические уровни называются вырожденными, а число квантовых состояний, в которых частица имеет одно и тоже значение энергии называется кратностью вырождения. Значит, 5-ый энергетический уровень не вырожден, потому что существует только одно состояние, в котором частица имеет такое значение энергии, а 6-ой уровень имеет кратность вырождения 6. Определим разность энергий 6-ого и 5-ого уровней:

$$\Delta E = E_6 - E_5 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\cdot 14 - \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\cdot 12 = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} \qquad (8)$$

Отсюда найдём ребро куба:

$$a = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{m\Delta E}} \qquad (9)$$

Ответ:

$$a = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{m\Delta E}}$$

5-ый уровень не вырожден, кратность вырождения 6-ого уровня равна 6.