Задача № 44.

Частица находится в двумерной квадратной потенциальной яме с непроницаемыми стенками во втором возбуждённом состоянии. Найдите среднее значение квадрата импульса частицы $< p^2 >$, если сторона ямы равна a.

Решение:

Вид потенциальной ямы представлен на рисунке 1:

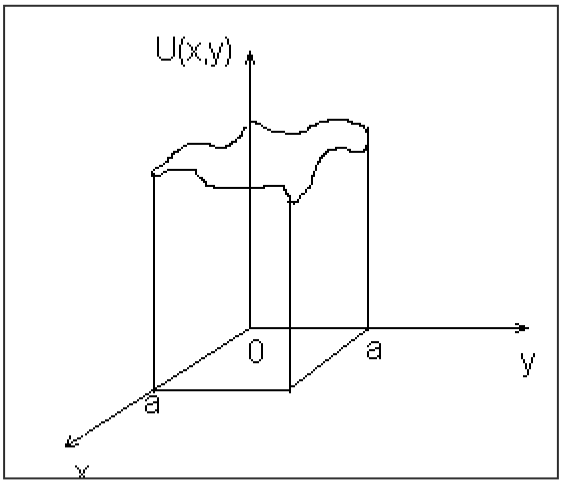

Рисунок 1

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

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

$$M(x,y)$$

Составим уравнение Шредингера для области Ω:

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

или в виде:

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

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

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

Используем естественные условия, накладываемые на пси-функцию. Вне области Ω потенциальная энергия частицы равняется бесконечности, поэтому частица вне области Ω находиться не может. Значит, плотность вероятности нахождения частицы, а, значит, и пси-функция вне области Ω равны нулю. Из условия непрерывности пси-функций:

$$\psi(0,y) = 0 \Rightarrow \sin\alpha_1 = 0 \Rightarrow \alpha_1 = 0$$
$$\psi(x,0) = 0 \Rightarrow \sin\alpha_2 = 0 \Rightarrow \alpha_2 = 0$$
$$\psi(a,y) = 0 \Rightarrow \sin k_1 a = 0 \Rightarrow k_1 a = \pm\pi n_1, n_1 = 1,2,3,...$$
$$\psi(x,a) = 0 \Rightarrow \sin k_2 a = 0 \Rightarrow k_2 a = \pm\pi n_2, n_2 = 1,2,3,...$$

Значит, пси-функция имеет вид:

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

Дважды дифференцируя выражение (4) по x и по y, получим:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} &= -k_1^2 A\sin(k_1 x)\sin(k_2 y) = -k_1^2\psi \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} &= -k_2^2 A\sin(k_1 x)\sin(k_2 y) = -k_2^2\psi\end{aligned} \qquad (5)$$

Подставим производные (5) в уравнение Шредингера (2):

$$-k_1^2\psi - k_2^2\psi + k^2\psi = 0 \Rightarrow k^2 = k_1^2 + k_2^2 \qquad (6)$$

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

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{\pi^2}{a^2}\left(n_1^2 + n_2^2\right) \Rightarrow E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_1^2 + n_2^2\right) \qquad (7)$$

Мы получили энергетический спектр частицы в двумерной квадратной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Как видно из выражения (7) энергия частицы зависит от двух квантовых чисел. В таблице 1 приведено несколько значений квантовых чисел n_1 и n_2, а также значение выражения $n_1^2 + n_2^2$, которое определяет значение энергии в данном состоянии.

Таблица 1.

№ уровня	n_1	n_2	$n_1^2 + n_2^2$
1	1	1	2
2	1	2	5
	2	1	
3	2	2	8

Как видно из таблицы во втором возбуждённом состоянии (третий энергетический уровень) $n_1 = 2, n_2 = 2$.
Определим постоянную A в выражении (4), используя условие нормировки:

$$\int_0^a\int_0^a |\psi|^2 dxdy = 1 \Rightarrow A^2\int_0^a\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}n_1 x\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}n_2 y\right)dxdy = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{4}{a^2}} = \frac{2}{a} \qquad (8)$$

Тогда пси-функции собственных состояний частицы имеют вид:

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y) = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi}{a}n_1 x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}n_2 y\right) \qquad (9)$$

Пси-функция второго возбуждённого состояния:

$$\psi_{2,2}(x,y) = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi}{a}\cdot 2x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}\cdot 2y\right) \qquad (10)$$

Из постулатов квантовой механики среднее значение какой-нибудь физической величины Q в состоянии, описываемом пси-функцией ψ, определяется следующим образом:

$$< Q > = \int \psi^* \hat{Q} \psi dx \qquad (11)$$

где $\hat{Q}$ - оператор физической величины Q, а ψ^* - функция, сопряжённая к пси-функции ψ. Операторы проекций импульса на координатные оси x,y,z имеют вид:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{p}_y &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{p}_z &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \qquad (12)$$

Формулы, связывающие физические величины в классической физике, в квантовой физике справедливы для операторов этих физических величин. Поэтому мы можем записать:

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\hbar^2\nabla^2 \qquad (13)$$

В нашем двумерном случае:

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \qquad (14)$$

Найдём среднее значение квадрата импульса частицы в состоянии, описываемом пси-функцией (10):

$$< p^2 > = \int_0^a\int_0^a \psi_{2,2}^* \hat{p}^2 \psi_{2,2} dxdy = \frac{4}{a^2}\int_0^a\int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a}\cdot 2x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}\cdot 2y\right)\left(-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\right)\left(\sin\left(\frac{\pi}{a}\cdot 2x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}\cdot 2y\right)\right)dxdy = \frac{32\pi^2\hbar^2}{a^4}\int_0^a\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}\cdot 2x\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\cdot 2y\right)dxdy = \frac{8\pi^2\hbar^2}{a^2}$$

Ответ:

$$< p^2 > = \frac{8\pi^2\hbar^2}{a^2}.$$