Задача № 45.

Частица массой m_0 находится в одномерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками во втором возбуждённом состоянии. Найдите среднее значение кинетической энергии частицы $< E_k >$, если ширина ямы равна a.

Решение:

Вид потенциальной ямы представлен на рисунке 1:

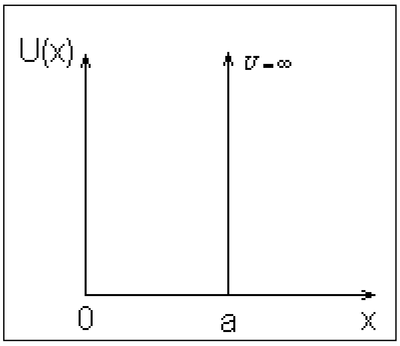

Рисунок 1

$$U(x) = \begin{cases} \infty, x < 0 \\ 0,, 0 < x < a \\ \infty, x > a \end{cases}$$

Составим уравнение Шредингера для области $0 < x < a$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

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

где $k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) \qquad (3)$$

Используем естественные условия, накладываемые на пси-функцию. Так как в области $x < 0$ потенциальная энергия равняется бесконечности, то частица находиться в области $x < 0$ не может. Следовательно, плотность вероятности, а, значит, и пси-функция в области $x < 0$ равны нулю. Из условия непрерывности пси-функции для точки $x = 0$ получим:

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow \sin\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0$$

Аналогично, из условия непрерывности пси-функции для точки $x = a$ получим:

$$\psi(a) = 0 \Rightarrow \sin ka = 0 \Rightarrow ka = \pm\pi n, n = 1, 2, 3, ...$$

Тогда пси-функции собственных состояний частицы в данной потенциальной яме имеют вид:

$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{\pi}{a}nx\right) \qquad (4)$$

Учитывая, что $k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}E$, получим:

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}E = \frac{\pi^2}{a^2}n^2 \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}n^2 \qquad (5)$$

Мы получили энергетический спектр частицы в потенциальной яме. Определим постоянную A в выражении для пси-функции (4), используя условие нормировки:

$$\int_0^a |\psi|^2 dx = 1 \Rightarrow A^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}nx\right)dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}} \qquad (6)$$

Тогда пси-функции собственных состояний имеют следующий вид:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}nx\right) \qquad (7)$$

Во втором возбуждённом состоянии $n = 3$ (так как $n = 1$ - это основное состояние, $n = 2$ - первое возбуждённое), поэтому пси-функция второго возбуждённого состояния имеет вид:

$$\psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}\cdot 3x\right) \qquad (8)$$

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

$$< Q >= \int \psi^* \hat{Q}\psi dx \qquad (9)$$

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:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{p}_y &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \qquad (10) \\ \hat{p}_z &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}$$

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

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2 \nabla^2 \qquad (11)$$

Операторы квадрата импульса и кинетической энергии связаны выражением:

$$\hat{E}_k = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \qquad (12)$$

В нашем одномерном случае оператор кинетической энергии имеет вид:

$$\hat{E}_k = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad (13)$$

Тогда среднее значение кинетической энергии во втором возбуждённом состоянии определяется выражением:

$$< E_k > = \int_0^a \psi_3^* \hat{E}_k \psi_3 dx = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a} \cdot 3x \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\sin\left(\frac{\pi}{a} \cdot 3x \right) \right) \right) dx = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} \qquad (14)$$

Ответ:

$$< E_k > = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2}.$$