Раздел 3.

Задачи по квантовой механике

1. Модель атома Резерфорда. Теория Бора.

Задача1

Оценить время, за которое электрон, движущийся вокруг протона в атоме водорода по орбите с радиусом $r_0 = 0.53 \cdot 10^{-10}$ *м, упал бы на ядро, если бы он терял энергию на излучение в соответствии с формулой классической электродинамики*

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 c^3}\overline{\left|\dot{\vec{v}}\right|^2},$$ *где* $\dot{\vec{v}}$ *- вектор ускорения электрона.*

А) Обсуждение условия задачи.

В 1911 году после многолетних опытов по рассеянию α -частиц от металлической фольги, в которых были обнаружены частицы, испытывающие рассеяние назад, Э.Резерфорд высказал гипотезу, что вся масса атома сосредоточена в малой области - в ядре, вокруг которого по круговым орбитам движутся электроны. Напоминая по своему внешнему виду солнечную систему, модель получила название “планетарной”. И Резерфорду, и другим физикам было ясно, что модель не может объяснить огромную стабильность атомов, существующих миллиарды лет: электроны в моделе Резерфорда двигались ускоренно (вращательное движение - движение с ускорением), а по законам классической электродинамики всякий ускоренно движущийся заряд должен излучать энергию в виде энергии электромагнитных волн. В данной задаче требуется определить то время, за которое электрон, двигаясь по спирали, “сядет” на ядро.

Б) Запишем условие задачи кратко.

Найти	τ
Дано	$r_0 = 0.53 \cdot 10^{-10}$ м
	$r_1 = 10^{-15}$ м
	$\dfrac{dE}{dt} = -\dfrac{2}{3}\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 c^3}\left|\dot{\vec{v}}\right|^2$

Решение

Как известно, любую физическую задачу (любое физическое явление или процесс) необходимо решать в определенной системе отсчета (СО). Все инерциальные СО равноправны, поэтому выберем СО, связав начало системы координат с телом отсчета - ядром и назовем эту СО символически “Ядро”, указав тем самым, что ядро в этой СО неподвижно, а движется только электрон.

Если предположить, что за каждый оборот излучается малая доля энергии, то орбиту электрона можно принять за окружность и тогда $\dot{\vec{v}}$ есть центростремительное ускорение. Обозначим его через w:

$$w = \frac{v^2}{r}\,. \qquad (1)$$

С другой стороны $\quad w = \dfrac{F}{m}$, $\qquad (2)$

где F - кулоновская сила взаимодействия электрона с ядром (протоном).

$$F = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\,. \qquad (3)$$

Из формул (1), (2) и (3) получаем:

$$w = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2 m}\,. \qquad (4)$$

В исходной формуле E - это полная энергия электрона, которая слагается из его кинетической и потенциальной энергий:

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\,. \qquad (5)$$

Преобразуем равенство (5). Из (1) и (4) (по модулю):

$$\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2 m}\text{ , откуда }\ \frac{mv^2}{2} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r}\,. \qquad (5^*)$$

Тогда формула (5) перепишется так:

$$E = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = \frac{-e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{mv^2}{2}\ . \tag{6}$$

В таком же плане преобразуем исходную формулу, чтобы получить дифференциальное уравнение для E:

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{e^2 w^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3} = \left| w = \frac{v^2}{r} \right| = -\frac{e^2 v^4}{6\pi\varepsilon_0 c^3 r^2} = \left| E^2 = \frac{m^2 v^4}{4} \right| =$$

$$= \left| \times \frac{4m^2}{4m^2} \right| = -\frac{4e^2 E^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3 r^2 m^2} = \left| r = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 E} \right| = -\frac{128\pi\varepsilon_0}{3m^2 e^2 c^3} E^4 \tag{7}$$

Уравнение (7) решаем разделением переменных и интегрированием:

$$\int\limits_{E_0}^{E_1} \frac{dE}{E^4} = \alpha \int\limits_0^{\tau} dt \quad \text{или} \quad -\frac{1}{3E^3}\Bigg|_{E_0}^{E_1} = -\frac{1}{3}\left(\frac{1}{E_1^3} - \frac{1}{E_0^3} \right) = \alpha\tau \text{ , здесь}$$

$$\alpha = -\frac{128\pi\varepsilon_0}{3e^2 c^3 m^2} \quad \text{и} \quad E_0 = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0}, \quad E_1 = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_1}.$$

Итак, $\tau = \dfrac{4\pi\varepsilon_0 c^3 m^2}{e^4}\left(r_0^3 - r_1^3 \right) \approx 1.4 \cdot 10^{-11}$ с.

В) Представляет интерес оценить полученный результат “наглядно”. Для этого сравним полученный результат со временем одного оборота. Воспользуемся формулой (5*):

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0} \Rightarrow v^2 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0 m} \Rightarrow v = \frac{e}{2\sqrt{\pi\varepsilon_0 r_0 m}}\ .$$

Тогда $t_1 = \dfrac{2\pi r_0}{v} = \dfrac{\sqrt{16\pi^2 \varepsilon_0 r_0^3 m}}{e} \approx 10^{-11}$ с.

Таким образом, практически за один оборот электрон излучит свою энергию и “сядет” на ядро.

Пройдет пара лет и датский физик Нильс Бор “спасет” модель атома по Резерфорду, однако, ценой введения новых “безумных” с точки зрения классической физики постулатов

Задача 2

Пользуясь условиями квантования $\oint p_i dq_i = hn_i$*, найти уровни энергии одномерного гармонического осциллятора с частотой* ω.

А) Обсуждение условия задачи.

В 1913 году датский физик Нильс Бор, пытаясь разрешить проблему возникновения оптических спектров, выдвинул два квантовых постулата:

1). В атоме существуют стационарные орбиты у электронов, двигаясь по которым они не излучают энергию.

2). При переходе с одной орбиты на другую электрон излучает или поглощает энергию согласно соотношению $E_m - E_n = h\nu_{mn}$ где индексы характеризуют номера стационарных орбит.

Постулаты Бора не только объяснили возникновение оптических спектров (как излучения, так и поглощения), но и “спасли” модель атома Резерфорда. Следует отметить, что идея квантования излучения (и поглощения) впервые была высказана немецким физиком Максом Планком в 1900 году (конец XIX века !!!) для устранения “ультрафиолетовой катастрофы” в излучении нагретых тел. Данное в условии соотношение $\oint p_i dq_i = hn_i$ по сути дела объединяет оба постулата.

Постулаты Н. Бора были чужды классической физике. Однако, в его теории используются и чисто классические представления: орбита, скорость электрона на орбите и т.д. Физики шутили, что по четным дням недели теория Бора - чисто классическая, по нечетным - квантовая. Только через 12-15 лет квантовая механика дала обоснование постулатам Н. Бора.

Б) Запишем условие задачи кратко.

Найти	E
Дано	ω
	$\oint p_i dq_i = hn_i$

Решение

Выберем систему отсчета “Центр масс осциллятора”.

В задаче речь идет об одномерном гармоническом осцилляторе. Расшифруем эти слова. Одномерный - означает, что положение осциллятора определяется одной координатой и одной соответствующей проекцией импульса.

Гармонический осциллятор - это материальная точка, совершающая колебательные движения под действием гармонической силы. Гармоническая сила - сила, пропорциональная первой степени смещения и направленная противоположно смещению. Как уже отмечалось выше, гипотеза Н, Бора основывалась и на классических представлениях, дополняя (ограничивая) их квантовыми постулатами.

Поэтому будем считать (как в классической физике), что полная энергия осциллятора равна сумме его кинетической и потенциальной энергий: $E = E_k + E_p$, где $E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$. Для расчета потенциальной энергии энергии проведем следующие выкладки:

$$F_{упр} = -kx,\ F = -\frac{dE_p}{dx} \Rightarrow dE_p = -Fdx = kxdx \Rightarrow E_p = \frac{kx^2}{2}.$$

Итак, $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$. (1)

Найдем закон движения. Используя классические представления, составим формулу II закона Ньютона:

где $\omega^2 = \frac{k}{m}$. $m\ddot{x} = F \Rightarrow m\ddot{x} = -kx \Rightarrow m\ddot{x} + kx = 0 \Rightarrow \ddot{x} + \omega^2 x = 0$, (2)

Решением уравнения $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$ является функция $x = A\cos\omega t$, что легко проверить прямой подстановкой.

Составим $\dot{x} = v = -\omega A \sin\omega t \Rightarrow p = mv = -m\omega A\sin\omega t$

Определим полную энергию осциллятора (1):

$$E = \frac{m^2\omega^2A^2\sin^2\omega t}{2m} + \frac{kA^2\cos^2\omega t}{2} = \left|k = m\omega^2\right| =$$

$$= \frac{m\omega^2A^2\sin^2\omega t}{2} + \frac{m\omega^2A^2\cos^2\omega t}{2} = \frac{m\omega^2A^2}{2}.$$

Считая, что m и ω заданы, выразим A через условие задачи. Для этого воспользуемся условием квантования:

$$\oint pdq = \oint pdx = \oint(-m\omega A\sin\omega t)(-A\omega\sin\omega t)dt =$$

$$= mA^2\omega^2\oint\sin^2\omega t dt = mA^2\omega^2\frac{\pi}{\omega} = \pi m\omega A^2 = nh \Rightarrow A^2 = \frac{nh}{\pi m\omega}$$

Итак, $E = \frac{m\omega^2A^2}{2} = \frac{m\omega^2}{2}\frac{nh}{\pi m\omega} = \frac{nh\omega}{2\pi} = n\hbar\omega$, где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ - постоянная Планка, $n = 0, 1, 2, \dots$.

Уровни энергии гармонического осциллятора, подчиняющегося гипотезе Н. Бора, квантуются, причем, они располагаются на равных расстояниях (эквидистантные уровни). В самом нижнем энергетическом состоянии $(n$=0) полная энергия равна нулю - осциллятор неподвижен. Впоследствии в квантовой механике, будет показано, что не существует $E_0 = 0$: при n=0

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Контрольные вопросы.

1. Какие явления свидетельствовали о сложном строении атома?
2. Какую модель строения атома предложил Дж. Томсон, почему?
3. Каковы результаты опытов Резерфорда по рассеянию α -частиц?
4. Какую модель строения атома предложил Резерфорд?
5. Как такая модель объясняет результаты опытов Резерфорда по рассеянию α -частиц?
6. Почему модель атома Резерфорда называлась планетарной?
7. Что общего и в чем различие солнечной системы и модели атома Резерфорда?
8. В чем модель Резерфорда противоречила законам электродинамики?
9. Прочитать постулаты Бора.
10. Что в постулатах Бора соответствовало классическим представлениям, что противоречило им?
11. Как постулаты Бора “спасали” модель атома Резерфорда?
12. Исходя из гипотезы Бора, объяснить происхождение оптических спектров.
13. Какие опыты подтверждают гипотезу Бора?
14. Развитием чьих идей была гипотеза Бора?
15. Каково содержание принципа соответствия, сформулированного Бором?

2. Волновые свойства микрочастиц. Соотношения неопределенностей Гейзенберга.

Задача 3

Электрон находится в оболочке атома. А может ли электрон быть составной частью ядра?

А) Обсуждение условия задачи.

Эта задача является исторической. Дело в том, что к 30-м годам XX века физики знали только два вида взаимодействий: гравитационное и электромагнитное. Расчеты показывали, что гравитационные взаимодействия в 10^{41} раз слабее электромагнитных и поэтому первыми можно пренебречь, решая задачу об устойчивости атома и его ядра. Поскольку заряд ядра численно равен заряду электронной оболочки, то, чтобы объяснить массу ядра, физики предполагали (Тамм , Гейзенберг), что в ядре имеется протонов в два раза больше, чем нужно для нейтральности атома. Но чтобы скомпенсировать лишний заряд протонов, в ядро поместили еще и электроны. Таким образом суммарный заряд ядра по-прежнему численно совпадал с зарядом электронной оболочки. Эти дополнительные электроны ядра вместе с тем осуществляли взаимодействие между протонами, не давая им разлететься в противоположные стороны. Однако, квантовая механика “протестовала” против такой гипотезы (сравните ситуацию с планетарной моделью атома Резерфорда, которая противоречила законам классической электродинамики, одинакова ли она?). Раскрыть этот “протест” и требуется в задаче. Но при этом нужно исходить из фундаментальной идеи квантовой механики о корпускулярно-волновых свойствах электрона. т.е. необходимо воспользоваться соотношением неопределенностей Гейзенберга.

Б) Запишем условие задачи кратко.

Найти	Δp_x
Дано	$\Delta x \Delta p_x = h$

Решение

Свяжем СО с ядром, как единым объектом, имеющим определенные размеры, неопределенность которого обозначим через Δx . Естественно, сам диаметр ядра (будем считать его шаром) не может быть меньше его неопределенности. Для упрощения решения задачи примем, что диаметр ядра равен его неопределенности $d = \Delta x = 10^{-15}$ м. Тогда из соотношения неопределенностей Гейзенберга следует, что

$$\Delta p_x = \frac{h}{\Delta x} = \frac{h}{d}$$

Рассчитаем $\Delta p_x = \frac{h}{d} \cong \frac{6.62 \cdot 10^{-34}\ Дж \cdot c}{10^{-15}\ м} \cong 6.62 \cdot 10^{-19}\ \frac{кг \cdot м}{c}$

Так как $\Delta p_x = m_e \Delta v_x$, то

$$\Delta v_x = \frac{\Delta p_x}{m_e} = \frac{6.62 \cdot 10^{-19}\ кг \cdot м/c}{9.1 \cdot 10^{-31}\ кг} \cong 10^{12}\ м/c$$

Но неопределенность величины не может быть больше самой величины, следовательно скорость электрона в ядре должна быть порядка $10^{12}\ м/c$. Однако в СТО утверждается, что самым быстрым движением материального объекта является скорость света в вакууме, которая равна $c = 3 \cdot 10^8\ м/c$.

Таким образом СТО отвергает существование электронов в ядре, т.к. они нарушали бы положение II постулата СТО.

С другой стороны размеры электронной оболочки $\approx 10^{-10}$ м, что в 10^5 степени раз больше размеров ядра. Следовательно, и скорость электронов в оболочке будет во столько же раз меньше: не $10^{12}\ c/м$, а $10^7\ м/c$, что меньше скорости света. В атомной оболочке электроны могут находиться.

В 1932 году английский физик Чедвик (в лаборатории Резерфорда) открыл новую частицу - нейтрон. И проблема массы и заряда ядра была решена. А одновременно в физику было введено новое взаимодействие между частицами ядра, получившего название сильного взаимодействия, которое оказалось в 137 раз сильнее электромагнитного (взаимодействия между частицами из-за наличия у них электрического заряда).

Контрольные вопросы.

1. Какие явления свидетельствуют о волновых свойствах электромагнитного поля?
2. В каких явлениях проявляются корпускулярные свойства электромагнитного поля?

3. Какие свойства мы называем корпускулярными?
4. Какие свойства мы называем волновыми?
5. Кто и когда высказал гипотезу о квантовых (корпускулярных) свойствах электромагнитного поля?
6. Кто и когда высказал гипотезу о волновых свойствах элементарных частиц? Какие элементарные частицы были известны к этому времени?
7. Уравнения де Бройля (написать и проанализировать)
8. Волновая функция де Бройля. Ее толкование самим де Бройлем и впоследствии Максом Борном.
9. Каково физическое и философское содержание соотношений неопределенностей Гейзенберга?
10. Сформулировать и раскрыть содержание принципа дополнительности Н. Бора.
11. Дать схематическое изложение опытов, подтверждающих соотношения неопределенностей Гейзенберга.

3. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.

Задача № 4.

Определить волновую функцию и энергию стационарных состояний частицы, движущейся в потенциальной яме шириной a *, с бесконечно высокими стенками.*

Решение

Найти	E_n, Ψ_n
Дано	$0 \le x \le a$
	$U_1 = 0$, при $0 \le x \le a$
	$U = \infty$, при $x \langle 0,\ x \rangle a$

Выберем систему отсчета “Потенциальная яма” и сделаем в этой СО чертеж.

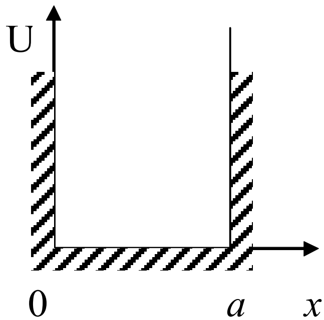

Рис.1.

Внутри потенциальной ямы гамильтониан имеет вид $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2}$, и уравнение Шредингера запишется так $\hat{H}\Psi = E\Psi$, или

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi \ . \qquad (*)$$

Уравнение (*) является дифференциальным уравнением второго порядка с постоянными коэффициентами. Прямой подстановкой можно убедиться, что его решением является функция вида $\Psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$,

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ - волновое число. Для определения постоянных A , B воспользуемся граничными условиями:

1) $\Psi(0) = 0 = A\sin 0 + B\cos 0 = B$, т.е. коэффициент $B = 0$.

2) $\Psi(a) = 0 = A\sin ka$.

Чтобы выполнялось условие (2), необходимо считать, что $\sin ka = 0$. (Коэффициент A не может равняться нулю, т.к. все решение теряет смысл.) Но $\sin ka = 0$, если $ka = n\pi,\ n = 1,2,3,..$ Итак, $k_n = \dfrac{n\pi}{a}$ и тотчас же получается квантование энергии $E_n = \dfrac{k^2\mathbf{h}^2}{2m} = \dfrac{\mathbf{h}^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$.

Мы отбросили $n = 0$, так как в этом случае снова $\Psi(x) = 0$, не имеет смысла также рассматривать $n\langle 0$, так как смысл имеет не сама функция $\Psi_n(x) = -\Psi_{-n}(x)$, а $|\Psi(x)|^2$.

Итак $\Psi_n(x) = A_n \sin\dfrac{n\pi x}{a}$. Константу A_n найдем из условия нормировки: $\int\limits_0^a |\Psi_n(x)|^2 dx = 1$. Интегрирование дает $A_n = \sqrt{2/a}$. Окончательно собственная волновая функция частицы, движущейся в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a, имеет вид $\Psi_n = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin\dfrac{n\pi x}{a}$.

Изобразим графически три функции $\Psi_n(x)$, три функции $|\Psi_n(x)|^2$ и три уровня энергии E_n частицы при n=1,2,3.

Выше отмечалось, что нельзя использовать значение n=0, исходя из того, что при этом $\Psi_0(x) = 0$. Но к этому результату можно подойти, исходя из соотношений неопределенности Гейзенберга: при n=0 и E_0=0, а следо-

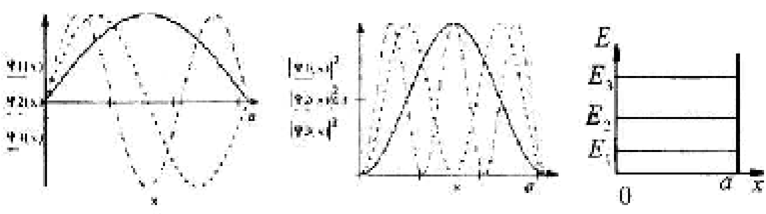

Рис..2.

вательно и импульс $p=0$. ($E=\frac{p^2}{2m}$, внутри ямы частица движется как свободная и обладает лишь кинетической энергией). Это означает, что и $\Delta p=0$. Но тогда, Δx должно равняться бесконечности, что противоречит условию : частица находится в пределах потенциальной ямы $0\le x\le a$. В этой одномерной задаче проявляются все особенности одномерного движения в любом потенциальном поле, лишь бы движение было ограниченным (в данном случае $0\le x\le a$). Например, число узлов, т.е. мест, в которых волновая функция принимает нулевое значение, равно $(n-1)$, где n - номер функции.

Из графика $|\Psi(x)|^2=\varphi(x)$ видно, что для малых n распределение плотности вероятности обнаружения частицы на участке, большем расстояния между соседними узлами, пропорционально длине этого участка, т.е. как если бы данная частица была бы классической. В этом проявляется Боровский принцип соответствия: при больших квантовых числах $n\rangle\rangle 1$ получаются те же результаты, что и при классическом подходе.

Задача № 5.

Частица, находится в бесконечно глубокой потенциальной яме $(0\le x\le a)$, в состоянии $\Psi(x)=A\sin\frac{\pi x}{a}$. Определить нормировочный множитель A, среднюю координату частицы $\overline{x}$, среднюю кинетическую энергию $\overline{T}$.

Найти	$A,\ \overline{x},\ \overline{T}$
Дано	$\Psi(x)=A\sin\frac{\pi x}{a}$ $(0\le x\le a)$

Решение

Эта задача является продолжением задачи №4. Выберем ту же СО “Потенциальная яма”. Очевидно, что и чертеж будет тем же, что и в задаче №4 при $n=1$.

Множитель A определяем из условия нормировки, смысл которого (условия) состоит в том, что имеется полная вероятность (равная единице) обнаружить частицу в интервале $0 \le x \le a$. Итак, $\int\limits_0^a \left|\Psi(x)\right|^2 dx = 1$;

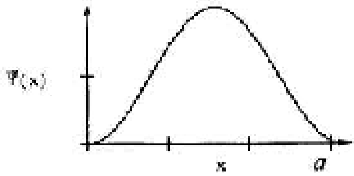

Рис..3.

$$A^2 \int\limits_0^a \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = A^2 \int\limits_0^a \frac{1 - \cos \frac{2\pi x}{a}}{2} dx = \frac{A^2}{2}\left(x - \frac{a}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{a} \right)\Bigg|_0^a =$$

$$= \frac{A^2 a}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}} .$$

Определим среднюю координату частицы $\overline{x}$ по основной формуле нахождения среднего значения любой физической величины

$$\overline{x} = \int\limits_0^a \Psi^*(x)\hat{x}\Psi(x)dx = \int\limits_0^a x\Psi^2(x)dx = \frac{2}{a}\int\limits_0^a x \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx .$$

Проинтегрируем по частям $u = x;\ dv = \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx$

$$\overline{x} = \frac{2}{a}\left\{ x.\frac{1}{2}\left(x - \frac{a}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a} \right)\right\}\Bigg|_0^a - \frac{1}{2}\int\limits_0^a \left(x - \frac{a}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a} \right) dx =$$

$$= \frac{2}{a}\left\{ \frac{a^2}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{2} - \frac{a^2}{4\pi^2}\cos\frac{2\pi x}{a} \right)\right\}\Bigg|_0^a = \frac{2}{a}\cdot\left\{ \frac{a^2}{4} \right\} = \frac{a}{2}$$

Средняя координата находится в середине промежутка *(a,0)*, там вероятнее обнаружить частицу, что можно иллюстрировать графиком $\left|\Psi(x)^2\right|$:

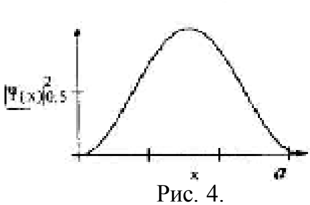

Рис. 4.

Оператор кинетической энергии

$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, т.к. частица движется в одномерной потенциальной яме, то $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$. Снова воспользуемся формулой расчета среднего значения любой физической величины $\overline{T} = \int\limits_0^a \Psi^*(x)\hat{T}\Psi(x)dx$.

Итак, $\overline{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_0^a \Psi^*(x)\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2}{a}\int\limits_0^a \sin\frac{\pi x}{a}\frac{d^2}{dx^2}\sin\frac{\pi x}{a}dx =$

$$\frac{\hbar^2}{ma}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\int\limits_0^a \sin^2\frac{\pi x}{a}dx = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^3}\int\limits_0^a \frac{1-\cos\frac{2\pi x}{a}}{2}dx =$$

$$= \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^3}\frac{1}{2}\left(x - \frac{a}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)\Bigg|_0^a = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^3}\frac{a}{2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}.$$

Так как частица движется как свободная, то $T = p^2/2m$. Чем больше T , тем больше и импульс частицы. Обратим внимание на то, что среднее значение кинетической энергии, а значит, и импульса возрастают при уменьшении размеров потенциальной ямы. И при $a \to 0$, $\overline{T}$ и $\overline{p} \to \infty$. По этому же закону изменяются и неопределенность энергии (импульса). Мы получили иллюстрацию для соотношения неопределенностей Гейзенберга $\Delta x \cdot \Delta p_x = h$. При уменьшении ширины ямы уменьшается неопределенность координаты (уменьшается неопределенность локализации частицы), но при этом увеличивается неопределенность проекции импульса: при

$a \to 0$ $(\Delta x \to 0)$, $\Delta p_x \to \infty$.

Задача № 6

В одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками $(0 \le x \le a)$ *находится частица в состоянии* $\Psi(x) = Ax(a-x)$. *Найти волновую функцию в энергетическом представлении и вычислить среднюю энергию частицы.*

Запишем условие задачи кратко.

Найти	$\varphi(E)$, $\overline{E}$
Дано	$0 \le x \le a$ $\Psi(x) = Ax(a-x)$ $U = 0 \quad 0 \le x \le a$ $U = \infty \quad x\langle 0, \ \ x\rangle a$

Решение

Совместим начало координат СО “Потенциальная яма” с левым углом ямы. Сделаем чертеж.

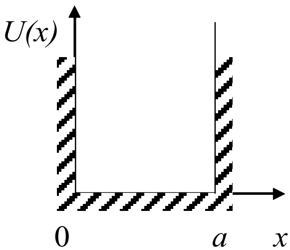

Рис.5.

Обсудим условие задачи. С таким видом потенциальной ямы мы уже встречались в предыдущих задачах. Поэтому обратим внимание на принципиально новые особенности задачи. Во-первых, требуется найти волновую функцию в энергетическом представлении. Чтобы понять, о чем идет речь, вспомним третий постулат квантовой механики. Он утверждает: задана функция состояния системы (частицы) $\Psi(x)$ и некоторый эрмитовый оператор, соответствующий физической величине, характеризующий данную систему (частицу). Этот оператор обладает полным набором собственных функций $\Psi_n(x)$. Утверждается, что функцию состояния системы $\Psi(x)$ можно разложить в ряд по собственным функциям $\psi_n(x)$ упомянутого оператора:

$$\Psi(x) = \sum \varphi_n \psi_n \,, \qquad (*)$$

где коэффициенты разложения φ_n определяются следующим образом: умножаем (*) на $\Psi^*{}_n(x)$ и проинтегрируем по всей области задания переменной, учитывая ортонормированность собственных функций $\Psi_n(x)$ оператора, получаем

$$\varphi_n = \int_0^a \Psi_n^*(x)\Psi(x)dx \qquad (**)$$

Применим этот постулат к нашей задаче. В условии упоминается оператор энергии $\hat{H}$, его волновые функции были найдены (для свободной частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме) в задаче №4. Поэтому нахождение функций φ_n, которые в данной задаче названы волновыми функциями в энергетическом представлении (т.к. упоминаемый в постулате оператор взят оператором энергии) могут быть определены по формуле (**):

$$\varphi_n(E) = \int_0^a \Psi_n^*(x)\Psi(x)dx \ .$$

Но предварительно определим коэффициент A в волновой функции $\Psi(x)$, используя условие нормировки, которое утверждает, что имеется полная вероятность обнаружить частицу в указанном объеме (в интервале $0 \le x \le a$).

$$\int_0^a \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1 \ ,$$

$$\int_0^a Ax(a-x)Ax(a-x)dx = A^2\int_0^a x^2\left(a^2 - 2ax + x^2\right)dx =$$

$$= A^2\int_0^a \left(x^2a^2 - 2ax^3 + x^4\right)dx = A^2\left[\frac{a^2x^3}{3} - \frac{2ax^4}{4} + \frac{x^5}{5}\right]_0^a =$$

$$= A^2\left(\frac{a^5}{3} - \frac{a^5}{2} + \frac{a^5}{5}\right) = A^2\frac{10a^5 - 15a^5 + 6a^5}{30} = A^2\frac{a^5}{30} = 1 \ .$$

Итак, $A^2 = \dfrac{30}{a^5}$.

В задаче №4 были определены волновые функции частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1,2,3\ldots \ .$$

Следует напомнить, что появление индекса n связано с существованием внутри атома дискретных энергетических состояний. Причем, значение n не может равняться нулю, т.к. тогда была бы известна точно энергия $E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}$ (и импульс), что противоречит соотношению неопределенностей Гейзенберга, из которого следует полная неопределенность ($x = \infty$) нахождения частицы, в то время как по условию задачи частица обязательно должна находиться в пределах ямы.

Воспользуемся условием (**) и определим волновую функцию в энергетическом представлении

$$\varphi_n(E) = \int_0^a \Psi_n^*(x)\Psi(x)dx = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x)dx =$$

$$= \frac{4\sqrt{15}\left[1-(-1)^n\right]}{(\pi n)^3}.$$

В процессе интегрирования использовались табличные интегралы

$$\int x\sin\alpha x\,dx = \frac{\sin\alpha x}{\alpha^2} - \frac{x\cos\alpha x}{\alpha};$$

$$\int x^2\sin\alpha x\,dx = \frac{2x}{\alpha^2}\sin\alpha x - \left(\frac{x^2}{\alpha} - \frac{2}{\alpha^3}\right)\cos\alpha x.$$

Согласно третьему постулату, квадрат модуля коэффициентов разложения, то есть функций $\varphi_n(E)$, определяет вероятность того, что частица обладает энергией E_n:

$$W(E_n) = |\varphi(E_n)|^2 = \frac{240}{(\pi n)^6}\left[1-(-1)^n\right]^2.$$

Очевидно, что только для нечетных n=1, 3, 5, ... вероятность $W(E_n)$ отличается от нуля. Естественно, что и волновая функция $\varphi_n(E)$ отлична от нуля только при этих значениях числа n. Теперь нетрудно определить среднюю энергию частицы по формуле:

$$\overline{E} = \sum_{n=1,2,3,..} \left|\varphi(E_n)\right|^2 E_n = \sum_{n=1,2,3,..} \frac{240}{(\pi n)^6}\left[1-(-1)^n\right]^2 \frac{\pi^2\mathbf{h}^2 n^2}{2ma^2} =$$

$$= \frac{240\cdot 2^2\pi^2\mathbf{h}^2}{\pi^6 2ma^2} \sum_{n=1,3,5,...} \frac{1}{n^4} = \frac{5\mathbf{h}^2}{ma^2} .$$

Здесь учтено, что $\sum\limits_{n=1,3,5,//} \frac{1}{n^4} = 1+\frac{1}{3^4}+\frac{1}{5^4}+\cdots = \frac{\pi^4}{96}$.

Построим графики $\Psi(x)$ и $E(n)$

$x = 0 \qquad \Psi(0) = 0$

$x = a \qquad \Psi(a) = 0$

$x = \frac{a}{2} \qquad \Psi\left(\frac{a}{2}\right) = \frac{a}{2}\left(a-\frac{a}{2}\right) = \frac{a^2}{4}$

$x = \frac{a}{4} \qquad \Psi\left(\frac{a}{4}\right) = \frac{a}{4}\left(a-\frac{a}{4}\right) = \frac{3a^2}{16}$

$x = \frac{3a}{4} \qquad \Psi\left(\frac{3a}{4}\right) = \frac{3a}{4}\left(a-\frac{3}{4}a\right) = \frac{3a^2}{16}$

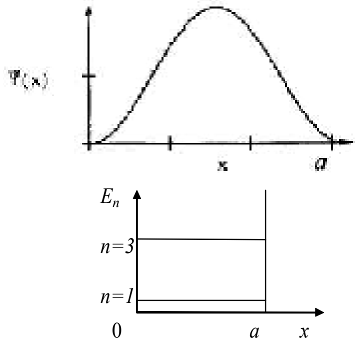

Рис. 6.

$\Psi(x) = x(a-x), \quad \frac{d\Psi(x)}{dx} = a - x + x(-1) = 0, \; x_{\max} = \frac{a}{2}$ /

Снова убеждаемся, что n=0 невозможно (см. Задачу №5).

Контрольные вопросы.

1.Какое уравнение и почему называется стационарным уравнением Шредингера?

2.Как движется частица в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками?

3.Как читаются постулаты квантовой механики?

4.Какие операторы используются в квантовой механике?

5.Что утверждает соотношение неопределенностей Гейзенберга $\Delta x \cdot \Delta p_x = h$?

6.Каков смысл условия нормировки?

7.Что является узлом волновой функции; смысл узла, если он располагается на стенках ямы или внутри ее?

8.Построить графики $\Psi_n(x)$, $\left|\Psi_n(x)\right|^2$ и E_n для свободной частицы в потенциальной яме.

9.Каким условиям должны удовлетворять решения уравнения Шредингера?

4. Уравнение Шредингера при конечной глубине потенциальной ямы.

Задача №7

Частица с массой m *находится в потенциальной яме*

$$U(x)=\begin{cases}\infty, & x\langle 0\\ 0, & 0\langle x\langle a\\ U_0, & x\rangle a\end{cases}$$

Получить уравнение, определяющее спектр собственных значений энергии частицы в области $E\langle U_0$*, и привести его к виду*

$\sin ka=\pm\dfrac{\mathbf{h}}{a}\sqrt{\dfrac{1}{2mU_0}}ka$, *где* $k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\mathbf{h}}$. *Обосновать дискретность энергетического спектра для* $E\geq\dfrac{\pi^2\mathbf{h}^2}{8ma^2}$.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	$\Psi(x)$, E
Дано	m
	$U(x)=\begin{cases}\infty, & x\langle 0\\ 0, & 0\langle x\langle a\\ U_0, & x\rangle a\end{cases}$

Решение

Свяжем СО с “Потенциальной ямой”, т.е. с той областью пространства, которое ограничено стенками ямы и в пределах которого может перемещаться частица. Данная задача существенно отличается от задач §3, в которых рассматривалось движение частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме. Уже то, что мы рассматриваем одномер-

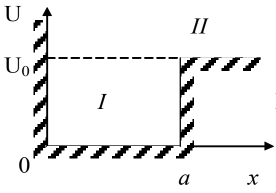

Рис. 7.

ное движение, является идеализацией, тем более , если яма бесконечно глубокая. Ближе к реальности условие данной задачи, в которой рассматривается яма, одна из стенок которой имеет конечную высоту. Сделаем чертеж.

Стационарное уравнение Шредингера в данной задаче должно быть записано для двух областей (I) и (II), т.к. в области (I) $0\langle x\langle a$ потенциальная энергия равна нулю, в области (II) потенциальная энергия равна U_0 при $x\rangle a$.

Итак, в области (I) $\dfrac{d^2\Psi_I}{dx^2}+\dfrac{2mE}{\hbar^2}\Psi_I=0$, его решением является функция $\Psi_I=A_I\sin k_I x+B_I\cos k_I x$, где $k_I^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$. При $x\le 0$ $\Psi_I=0$, следовательно $B_I=0$ и решение упрощается $\Psi_I=A_I\sin k_I x$. В области (II) уравнение Шредингера запишется так:

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U_0\right)\Psi_{II}=0 .$$

Введем обозначение

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U_0\right)=+\frac{2m}{\hbar^2}\left(U_0-E\right)=\chi^2 .$$

Уравнение Шредингера для области (II) примет вид

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2}-\chi^2\Psi_{II}=0 .$$

Решением такого уравнения является функция

$$\Psi_{II}=B_{II}e^{-\chi x}+B_I'e^{\chi x} .$$

Второе слагаемое описывает процесс, распространяющийся к началу координат. Но в области $0\langle x\langle a$ справедливо решение $\Psi_I\left(x\right)$. Поэтому, учитывая условие задачи, положим $B_I'=0$ и решение примет вид $\Psi_{II}=B_{II}e^{-\chi x}$.

На границе потенциальной ямы при $x=a$ должны выполняться два условия:

1) непрерывность самой волновой функции, что требуется из смысла $|\Psi|^2$ - плотность вероятности должна быть одна и та же в точке $x = a$ при подходе к ней с обеих сторон;

2) непрерывность первой производной волновой функции при $x = a$. .

Объясним второе условие. Из уравнения Шредингера $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\mathbf{h}^2}\left(E - U_0\right)\Psi = 0$ следует, что

$$\int_{x-\alpha}^{x+\alpha} \frac{d^2\Psi}{dx^2} dx = \frac{2m}{\mathbf{h}^2} \int_{x-\alpha}^{x+\alpha} \left(U_0 - E\right) dx .$$

Интеграл слева равен $\frac{d\Psi(x+\alpha)}{dx} - \frac{d\Psi(x-\alpha)}{dx}$. В пределе при $a \to 0$ получаем $\frac{d\Psi(x+\alpha)}{dx_{\alpha\to 0}} - \frac{d\Psi(x-\alpha)}{dx_{\alpha\to 0}} = 0$, что и показывает, что первая производная непрерывна при подходе к точке x с обеих сторон (в нашей задаче $x = a$).

Удовлетворяя этим требованиям к волновой функции, определим постоянные интегрирования A_I и B_{II}:

$$A_I \sin k_I a = B_{II} e^{-\chi a}$$

$$A_I k_I \cos k_I a = -B_{II} \chi e^{-\chi a}$$

Поделив второе равенство на первое, получаем $ctg k_I a = -\frac{\chi}{k_I}$.

Проведем элементарные тригонометрические преобразования.

$$ctg k_I a = \frac{\cos k_I a}{\sin k_I a} = \frac{\sqrt{1 - \sin^2 k_I a}}{\sin k_I a} = -\frac{\chi}{k_I} .$$

$Ctg k_I a \langle 0$, если значения $k_I a$ лежат в четных квадрантах. Возведем в квадрат:

$$\frac{1 - \sin^2 k_I a}{\sin^2 k_I a} = \frac{\chi^2}{k_I^2} \text{, откуда } \left(1 + \frac{\chi^2}{k_I^2}\right)\sin^2 k_I a = 1 ,$$

или $\quad \sin k_I a = \dfrac{1}{\sqrt{1+\dfrac{\chi^2}{k_I^2}}} = \sqrt{\dfrac{k_I^2}{k_I^2+\chi^2}} = \dfrac{k_I}{\sqrt{k_I^2+\chi^2}} =$

$$= \frac{\sqrt{\dfrac{2mE}{\mathbf{h}^2}}}{\sqrt{\dfrac{2mE}{\mathbf{h}^2}+\dfrac{2mU_0}{\mathbf{h}^2}-\dfrac{2mE}{\mathbf{h}^2}}} = \sqrt{\frac{E}{U_0}}$$

. Т.к. $k_I^2 = \dfrac{2mE}{\mathbf{h}^2}$, то $E = \dfrac{k_I^2\mathbf{h}^2}{2m}$.

Помножим на a^2/a^2 : $\quad E = \dfrac{k_I^2 a^2 \mathbf{h}^2}{2ma^2}$.

Тогда $\sin k_I a = \sqrt{\dfrac{E}{U_0}} = \sqrt{\dfrac{\mathbf{h}^2 k_I^2 a^2}{2ma^2 U_0}} = \sqrt{\dfrac{\mathbf{h}^2}{2ma^2 U_0}}k_I a = \dfrac{\mathbf{h}}{a}\sqrt{\dfrac{1}{2mU_0}}k_I a$

Рассмотрим возможные значения $k_I a$ для энергии $E \geq \dfrac{\pi^2\mathbf{h}^2}{8ma^2}$.

Придадим этому выражению более знакомый вид, рассматривая наименьшее значение указанной энергии, т.е. рассмотрим равенство $E = \dfrac{\pi^2\mathbf{h}^2}{8ma^2} = \dfrac{\mathbf{h}^2 k^2}{2m}$, где через k обозначена величина $k = \dfrac{\pi}{2a}$, или $ka = \dfrac{\pi}{2}$. Это наименьшее значение величины ka, соответствующее меньшей энергии. Следовательно, прямая $y = \pm\dfrac{\mathbf{h}}{a}\sqrt{\dfrac{1}{2mU_0}}ka$ не может располагаться под большим углом, чем прямая OA. Представим уравнение $y = \sin ka$ графически.

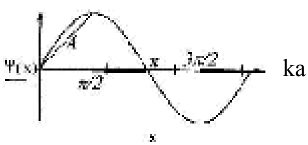

Рис. 8.

Возможны только те решения, которые располагаются в четных четвертях значений ka. Поясним это утверждение. Мы установили, что минимальное значение $ka = \frac{\pi}{2}$. При этом $\sin\frac{\pi}{2}$

принимает максимальное значение равное единице. В интервале $\left[\frac{\pi}{2}, \pi\right]$ величина ka отлична от нуля, причем значение энергии изменяется в пределах от

$$E_1 = \left.\frac{\mathbf{h}^2 k^2}{2m}\right|_{k=\frac{\pi}{2a}} = \frac{\mathbf{h}^2 \pi^2}{8ma^2} \text{ до значения } E_2 = \left.\frac{\mathbf{h}^2 k^2}{2m}\right|_{k=\frac{\pi}{a}} = \frac{\mathbf{h}^2 \pi^2}{2ma^2} \rangle E_1 .$$

Мы получили важный результат: энергия может принимать определенные значения в интервале $\left[\frac{\pi}{2}, \pi\right]$. При меньших $\frac{\pi}{2}$ и больших π углах допустимых значений энергии нет, т.е. энергия изменяется дискретно. Однако, учитывая периодичность функции $\sin\left(\varphi + 180^0\right)$, получаем, что в интервале $\left[\frac{3\pi}{2}, 2\pi\right]$ снова появляются разрешенные значения энергии. Из графика следует, что разрешается энергия, для которой величина ka лежит в четных интервалах изменения угла, разбитого по четвертям $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$, $\left[\frac{\pi}{2}, \pi\right]$, $\left[\pi, \frac{3\pi}{2}\right]$, $\left[\frac{3\pi}{2}, 2\pi\right]$....

Задача №8

Определить собственные функции и собственные значения оператора энергии квантового гармонического осциллятора.

В задаче №2 в полуклассической модели атома Н. Бора была решена проблема возникновения линейчатых спектров атома. Однако там же отмечалось, что теория Н. Бора дает неверные значения наинизшего энергетического состояния квантового гармонического осциллятора: вместо состояния $E_0 = 0$ эксперимент дает $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ - это так называемая нулевая энергия, появление которой находится в соответствии с положениями квантовой механики, в том числе в соответствии с соотношением неопределенностей Гейзенберга (см. Задачу №4).

Задача о квантовом гармоническом осцилляторе (КГО) является следующей по сложности после задачи о движении частицы в потенциальной яме прямоугольной формы: в задаче №2 была найдена потенциальная энергия гармонического осциллятора $U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$; следуя общему правилу построения эрмитовых операторов, сопоставим этой функции оператор потенциальной энергии $\hat{U} = \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$. В координатном представлении оператор $\hat{x}$ совпадает с самой координатой. Итак, потенциальная яма КГО изобразится в координатах $U(x)$ в виде параболы.

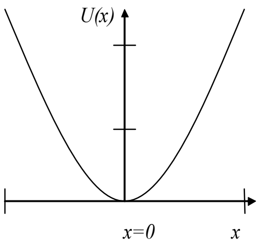

Рис. 9.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	$\Psi(x)$, E_n
Дано	$U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

Решение

Выберем СО “Потенциальная яма” и воспользуемся сделанным выше чертежом. Уравнение Шредингера для одномерного КГО запишется так

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{kx^2}{2}\Psi(x) = E\Psi(x) ,$$

где $k = m\omega^2$

Решение этого уравнения должно удовлетворять граничным условиям $\lim\limits_{x \to \pm\infty} \Psi(x) = 0$. Введем новую переменную, что позволит нам освободится от констант $\hbar,\ m,\ \omega$. Примем за условную единицу энергии величину $\dfrac{\hbar\omega}{2}$ (множитель 1/2 вводится для удобства, что проявится позже). Поэтому возможные значения энергии по-видимому (пока мы предполагаем) будут кратные этой величине, т.е. $E = \dfrac{\hbar\omega}{2}\lambda$, где λ - безразмерный параметр. В качестве единицы длины примем амплитуду в классической теории при энергии, равной $\dfrac{\hbar\omega}{2}$. В классической теории энергия и амплитуда связаны соотношением $\dfrac{m\omega^2 x^2}{2}$, приравняем эту величину упомянутой энергии $\dfrac{\hbar\omega}{2}$, получаем условную единицу длины $\dfrac{m\omega^2 x_0^{\,2}}{2} = \dfrac{\hbar\omega}{2}$, откуда $x_0 = \sqrt{\dfrac{\hbar\omega}{m\omega^2}} = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$. Тогда произвольная координата x так запишется через x_0: $x = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}\xi$, где ξ - новый безразмерный параметр. Перейдем в уравнении Шредингера к новым переменным

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}\Psi\right) = \frac{d}{d\xi}\left(\frac{d}{dx}\Psi\right)\cdot\frac{d\xi}{dx} =$$

$$= \frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi}\left(\frac{d}{d\xi}\Psi\right)\cdot\frac{d\xi}{dx} = \left(\frac{d\xi}{dx}\right)^2\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} = \frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}$$

Составим уравнение Шредингера для КГО в новых переменных. Производя сокращения и перенося все члены в левую сторону равенства, получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \frac{m\omega^2}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\xi^2\Psi = E\Psi = \frac{\hbar\omega}{2}\lambda\Psi,$$, или

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2}+\left(\lambda-\xi^2\right)\Psi=0 \text{ при } \Psi\left(\xi\right)\underset{\xi\to\pm\infty}{=}0$$

Из теории дифференциальных уравнений известно, что решением такого уравнения при заданном граничном условии является функция вида $\Psi\left(\xi\right)=U\left(\xi\right)V\left(\xi\right)$, где $U\left(\xi\right)$ - быстро убывающий множитель, $V\left(\xi\right)$ - медленно изменяющийся множитель при больших значениях $\xi \rangle\rangle 1$.

Составим $\Psi''\left(\xi\right)=U''\left(\xi\right)V\left(\xi\right)+2U'\left(\xi\right)V'\left(\xi\right)+U\left(\xi\right)V''\left(\xi\right)$
тогда уравнение Шредингера примет вид:

$$U''V+2U'V'+UV''+\left(\lambda-\xi^2\right)UV=0$$

Уравнение можно упростить, если задать функцию $U\left(\xi\right)$ в следующем виде, что удовлетворяет требованиям, предъявляемым к ней - быстрое убывание при $\xi \rangle\rangle 1$.

Пусть $U\left(\xi\right)=e^{-\frac{\xi^2}{2}}$, тогда $U'=-\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ и $U''=\xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}}-e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Подставим в предыдущее уравнение и, сокращая на экспоненту, получаем

$$V''-2\xi V'+\left(\lambda-1\right)V=0$$

Мы получили дифференциальное уравнение для медленно убывающей функции V. Будем искать решение в виде степенного ряда

$$V\left(\xi\right)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k\xi^k$$

Составим члены предыдущего уравнения

$$V'\left(\xi\right)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k k\xi^{k-1},\ V''\left(\xi\right)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k k(k-1)\xi^{k-2};$$

$$\xi V'\left(\xi\right)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k k\xi^k$$ (степень совпала с суммарным знаком).

Чтобы подобное сделать и для $V''\left(\xi\right)$, положим $k=k_1+2$:

$$V''(\xi) = \sum_{k_1=-2}^{\infty} a_{k_1+2}(k_1+2)(k_1+1)\xi^{k_1}$$

Т.к. в этом ряду члены с $k_1 = -2$, $k_1 = -1$ обращаются в нуль, то суммирование можно начать с $k_1 = 0$. А теперь снова заменим k_1 на k, так как значение суммы не зависит от написания значка суммирования

$$V''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2}(k+2)(k+1)\xi^{k}$$

Итак, уравнение для функции V примет вид:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ a_{k+2}(k+2)(k+1) - 2a_k k + (\lambda - 1)a_k \right\}\xi^k = 0$$

Это равенство должно выполняться при всех значениях ξ. Но из математического анализа известно, что ряд тождественно равен нулю, если только все его коэффициенты равны нулю. Приравнивая к нулю выражение в фигурных скобках, получаем рекуррентную формулу для коэффициентов ряда:

$$a_{k+2} = \frac{2k - (\lambda - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k$$

Все четные коэффициенты выражаются через a_0, нечетные - через a_1. Эти же коэффициенты a_0 и a_1 остаются произвольными, как и должно быть, так как исходное уравнение - дифференциальное уравнение второго порядка.

Однако у нас еще есть граничное условие $\underset{\xi \to \pm\infty}{\Psi(\xi) = 0}$, которое накладывает на эти константы и параметр λ дополнительные ограничения.

Рассмотрим рекуррентное соотношение при $k \rangle\rangle 1$ и $k \rangle\rangle \lambda$. Тогда, пренебрегая в числителе $(\lambda - 1)$, а в знаменателе добавками к k, получим

$$a_{k+2} \cong \frac{2k}{k^2} a_k = \frac{2}{k} a_k$$

Таким образом, ряд разложения оказывается неограниченным (и можно показать, что из-за этого расходится). Поэтому нужно подобрать (в силу произвольности значений этих постоянных) коэффициенты a_0 , a_1 , λ такими, чтобы ряд разложения обрывался и превращался в полином.

При этом может быть, что функция $\Psi(\xi) = \sum\limits_{k=0} a_k \xi^k$ будет либо четной, либо нечетной функцией от ξ . Это следует из физических соображений. Из-за своего вида потенциальная функция $U(x)$ является четной функцией от x (а следовательно, и от ξ), плотность вероятности обнаружения частицы $|\Psi(\xi)|^2$ должна быть четной функцией ξ . Для этого $V(\xi)$ должна быть либо четной, либо нечетной функцией.

Предположим, что $V(\xi)$ - четная функция. Для этого положим a_1 =0. Тогда из рекуррентной формулы $a_{k+2} = \dfrac{2k-(\lambda-1)}{(k+2)(k+1)} a_k$

все коэффициенты при нечетных степенях обратятся в нуль и ряд $V(\xi) = \sum\limits_{k=0} a_k \xi^k$ будет содержать только члены с четными степенями ξ . Далее выберем λ так, чтобы коэффициент a_{n+2} обратился в нуль. Тогда и все последующие коэффициенты a_{n+4}, a_{n+6}... согласно рекуррентному соотношению обратятся в нуль, т.е. ряд для $V(\xi)$ превратится в полином степени *n*. Приравнивая нулю рекуррентную формулу при $k = n$, получаем $2n-(\lambda-1)=0$, или $\lambda = 2n+1$, т.е. коэффициент λ принимает целые, положительные, нечетные значения.

Аналогично рассуждаем при оставлении в полиноме $V(\xi)$ нечетных степеней, но в этом случае нужно положить $a_0 = 0$. Полиномы $V(\xi)$ были исследованы Чебышевым и Эрмитом и носят их имя, обозначаясь $H_n(\xi)$. Общий вид этих полиномов таков:

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)$$

Постоянный множитель выбирается так, чтобы выполнялось условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi_n(\xi)\right|^2 d\xi = 1$$

Общий вид полинома Чебышева-Эрмита запишется так:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n - (2\xi)^{n-2}\frac{n(n-1)}{1!} + (2\xi)^{n-4}\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}..$$

Частные значения:

$H_0 = 1$, $H_1 = 2\xi$, $H_2 = 4\xi^2 - 2$, $H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$,

$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$,

$H_{2n}(0) = (-1)^n 2^n (2n-1)!$, $H_{2n+1}(0) = 0$

Соответственно выпишем ряд волновых функций осциллятора (перейдя к переменной x):

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \quad \Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}\frac{2x}{x_0}\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right),$$

$$\Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2^2 \cdot 2x_0\sqrt{\pi}}}\left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right).$$

Квадрат волновой функции нулевого состояния

$$\left|\Psi_0(x)\right|^2 = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}}\exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right)$$

представляется гауссовой кривой. В этом случае наибольшая плотность вероятности соответствует положению равновесия $x = 0$. При больших n график $\left|\Psi_n\right|^2$ представляет собой быстро осциллирующую функцию с n нулями и $n+1$ максимумами. Если усреднить функцию в промежутке между двумя нулями, то усредненное значение почти сов-

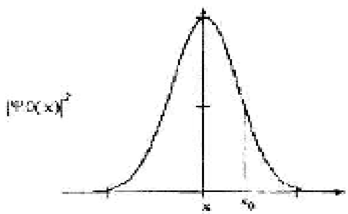

Рис. 10

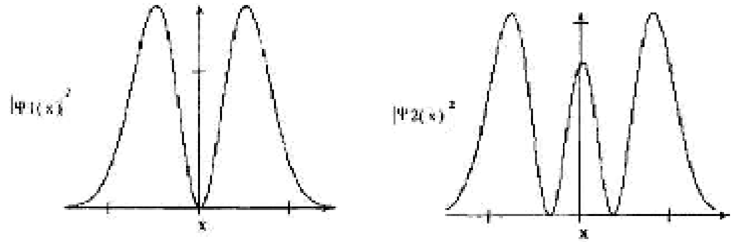

Рис. 11.

падает с классической плотностью вероятности. При $x \to \pm a$ $\left|\Psi_n(x)\right|^2$ не стремится к бесконечности, а достигая наибольшего максимума, быстро стремится к нулю при $|x|\rangle a$. Надо отметить, что сама волновая функция отлична от нуля при $|x|\rangle a$, т.е. в области, где потенциальная энергия по классической теории больше полной, а значит $E_{кин}$ отрицательна. Это можно объяснить тем, что в стационарных состояниях только полная энергия имеет определенное значение, а кинетическая и потенциальная энергии порознь не имеют определенных значений, что соответствует соотношению неопределенностей Гейзенберга $\Delta x \Delta p_x = h$. Поэтому отличие от нуля вероятности обнаружения частицы в классически запрещенной области в квантовой механике не противоречит здравому смыслу. Мы вспомним об этом, рассматривая явление “туннельный эффект”.

Теперь рассмотрим вопрос об энергетических состояниях КГО. Выше мы получили следующее выражение для энергии $E = \dfrac{\hbar\omega}{2}\lambda$, где λ был введен как безразмерный множитель. При нахождении волновой функции для λ было получено $\lambda_n = 2n + 1$.

Таким образом $E_n = \dfrac{\hbar\omega}{2}(2n+1) = \hbar\omega\left(n + \dfrac{1}{2}\right)$, $n = 0,1,2,\ldots$.

Во-первых, мы получили квантование энергии, что естественно соответствует основным положениям квантовой механики, однако, в отличие от теории Н.Бора, не является постулатом.

Во-вторых, при $n = 0$ $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, т.е. имеется наинизшее энергетическое состояние с отличной от нуля энергией. Этот результат находится в соответствии с соотношением неопределенностей Гейзенберга: $\Delta E = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2}$ может равняться нулю, и, следовательно, полная энергия E также может равняться нулю, если оба положительных слагаемых равны нулю. Отсюда $\Delta p_x = 0$ и $\Delta x = 0$, что противоречит соотношению неопределенностей Гейзенберга $\Delta x \Delta p_x = h$. Расстояние между энергетическими состояниями постоянно и равно $\hbar\omega$.

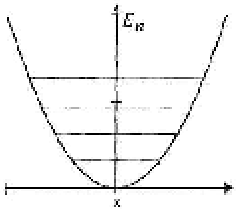

Рис.12.

Наличие нулевой энергии $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ обнаруживается экспериментально по изучению рассеяния света прозрачными средами при понижении температуры. По классическим представлениям колебания атомов при понижении температуры должны уменьшаться и рассеяние должно исчезать. Но эксперимент показывает, что рассеяние не исчезает и стремится к некоторому пределу, обусловленному нулевыми колебаниями.

При детальном рассмотрении квантовых переходов, для чего необходимо составить матричный элемент перехода $X_{nn'} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n'}^* X \Psi_n dx$, получается, что переходы в КГО возможны только между ближайшими соседними состояниями $n' = n \pm 1 \Rightarrow \Delta n = \pm 1$

Задача №9

Частица с массой m и энергией E пролетает над прямоугольной потенциальной ямой. Найти: а) коэффициент прозрачности D и коэффициент отражения R; б) значения E, при которых частица будет беспрепятственно проходить через данную яму. Убедиться в том, что это будет происходить при условии $a = \dfrac{n\lambda}{2}$, где λ - длина волны частицы внутри ямы, $n = 1,2,\ldots$ (к задаче прилагается рисунок потенциальной ямы).

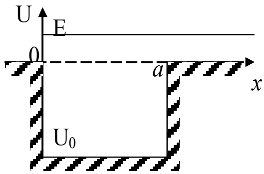

Рис. 13.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	D, R, E
Дано	$E>0$ $U_0<0$ a

Решение

Данный в задаче рисунок предполагает СО "Потенциальная яма". С точки зрения классической физики задача не имеет смысла, т.к. энергия частицы $E>0$ и она движется над ямой, которая не может оказывать влияния на частицу.

Иначе обстоит дело в квантовой механике. Основным положением квантовой механики является корпускулярно-волновой дуализм элементарных частиц. Это приводит к тому, что "Потенциальная яма" оказывает влияние на движение частицы, несмотря на то, что она находится вне "Потенциальной ямы". Именно поэтому имеет смысл расчет и коэффициента прозрачности D, и коэффициента отражения R.

Для решения задачи составим уравнение Шредингера для трех областей.

$x<0$

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k^2\Psi_1 = 0\text{, где } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ и } \Psi_1 = a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx}$$

$0<x<a$

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + k_0^2\Psi_2 = 0\text{, где } k_0 = \frac{\sqrt{2m\left(E+U_0\right)}}{\hbar} \text{ и } \Psi_2 = a_2 e^{ik_0x} + b_2 e^{-ik_0x}$$

$x>a$

$$\frac{d^2\Psi_3}{dx^2}+k^2\Psi_3=0\text{, где } k=\frac{\sqrt{2mE}}{\mathbf{h}} \text{ и } \Psi_3=a_3e^{ikx},$$

т.к. $b_3=0$ нет отражения.

На границах ямы функции и их первые производные должны быть непрерывными.

$$\Psi_1\Big|_{x=0}=\Psi_2\Big|_{x=0},\quad \frac{d\Psi_1}{dx}\Big|_{x=0}=\frac{d\Psi_2}{dx}\Big|_{x=0}$$

$$a_1+b_1=a_2+b_2,\quad a_1ik-b_1ik=a_2ik_0-b_2ik_0$$

$$\Psi_2\Big|_{x=a}=\Psi_3\Big|_{x=a},\quad \frac{d\Psi_2}{dx}\Big|_{x=a}=\frac{d\Psi_3}{dx}\Big|_{x=a}$$

$$a_2e^{ik_0a}+b_2e^{-ik_0a}=a_3e^{ika},\quad ik_0a_2e^{ik_0a}-ik_0b_2e^{-ik_0a}=ika_3e^{ika}$$

Интенсивность “падающего” потока пропорциональна квадрату модуля коэффициента a_1, плотность частиц, прошедших яму - $|a_3|^2$. По определению, коэффициент прозрачности

$$D=\frac{|a_3|^2}{|a_1|^2} \text{ и коэффициент отражения } R=\frac{|b_1|^2}{|a_1|^2}=1-D\text{, т.к. } R+D=1$$

в силу неуничтожимости частиц.

Решая совместно четыре уравнения для коэффициентов, найдем:

$$\frac{a_3}{a_1}=\frac{4kk_0e^{-ika}}{(k+k_0)^2e^{-ik_0a}-(k-k_0)^2e^{ik_0a}}.$$

Тогда

$$D=\left|\frac{a_3}{a_1}\right|^2=\left[1+\frac{\left(k_0^2-k^2\right)^2}{4k^2k_0^2}\sin^2 k_0a\right]^{-1}=\left[1+\frac{U_0^2\sin^2 k_0a}{4E(E+U_0)}\right]^{-1};$$

Соответственно,

$$R = 1 - D = \left[1 + \frac{4k^2 k_0^2}{\left(k_0^2 - k^2\right)^2 \sin^2 k_0 a}\right]^{-1} = \left[1 + \frac{4E\left(E + U_0\right)}{U_0^2 \sin^2 k_0 a}\right]^{-1}$$

Чтобы частица беспрепятственно прошла над потенциальной ямой, необходимо чтобы $D = 1$:

$$1 = \frac{1}{1 + \dfrac{U_0^2 \sin^2 k_0 a}{4E\left(E + U_0\right)}} = \frac{4E\left(E + U_0\right)}{4E\left(E + U_0\right) + U_0^2 \sin^2 k_0 a}.$$

Чтобы правая сторона равнялась единице, необходимо: $U_0^2 \sin^2 k_0 a = 0$ или $\sin^2 k_0 a = 0$, т.к. $U_0 \neq 0$. Отсюда $k_0 a = n\pi$, или $U_0 + E = \dfrac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = \dfrac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$, тогда $E_n = \dfrac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} - U_0$, n - целые числа, при которых $E \rangle 0$. Убедимся, что при этом должно выполнятся соотношение $a = n\dfrac{\lambda}{2}$, где λ - длина волны частицы внутри ямы, $n = 1,2,\ldots$. Действительно: т.к. $k_0 a = n\pi$, то $k_0 = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ и $\dfrac{2\pi}{\lambda} a = n\pi$, откуда $a = n\dfrac{\lambda}{2}$.

Мы получили ожидаемый результат: в пределах ямы укладывается целое число полуволн, т.к. в этом случае на стенках ямы образуются узлы, а в яме - стоячие волны.

Задача № 10

Рассмотрим задачу из "жизни". Поток электронов падает на барьер, форма которого показана на рисунке. Оценить коэффициент прозрачности, если $U_0 = 3$ эВ, $E_1 = 1$ эВ, $d = 10^{-7}$ см. Как изменится коэффициент прозрачности, если энергия электронов увеличится до $E_2 = 2$ эВ?

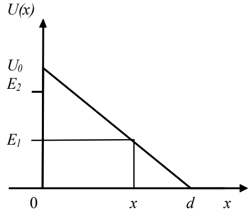

Рис. 14.

Запишем задачу кратко.

Найти	D_1, D_2
Дано	$U_0 = 3$ эВ
	$E_1 = 1$ эВ
	$d = 10^{-7}$ см
	$E_2 = 2$ эв

Решение

Свяжем СО с потенциальной ямой, данной в условии задачи, которая является углубленной моделью явления холодной электронной эмиссии. Проведем более подробное обсуждение физического содержания рассматриваемого процесса - туннелирования электронов через потенциальный барьер.

Как известно туннельный эффект, являясь чисто квантовым эффектом (это хорошо видно из решения задачи №9, когда частица пролетает над "потенциальной ямой" и все же испытывает отражение) и позволяет понять многие физические процессы. Например, 1) благодаря "ТЭ" возможно прохождение тока через места механической скрутки (без пайки) металлических проводников, покрытых окислами и загрязненными; 2) благодаря "ТЭ" осуществляется холодная эмиссия (это явление лежит в основе рассматриваемой задачи), термо- и фотоэмиссия; 3) туннельным эффектом обосновывается радиоактивный распад; 4) благодаря "ТЭ" могут наступить термоядерные реакции при температурах, при которых энергии теплового движения недостаточно для преодоления кулоновского барьера; 5) "ТЭ" "работает" в полупроводниковых приборах, в так называемых "туннельных диодах"; 6) на "ТЭ" работает туннельный микроскоп; 7) на "ТЭ" основаны химические процессы.

А теперь приступим к решению задачи. Примем формулу для коэффициента просачивания.

$$D = C\exp\left(-\frac{2}{\mathbf{h}}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left[U(x)-E\right]}dx\right)$$

Из рисунка видно, что

$$U(x) = \begin{cases} 0 \text{ при } x < 0 \\ U_0\left(1-\dfrac{x}{d}\right) \text{ при } 0 \le x \le \alpha \\ 0 \text{ при } \alpha \le x \le \infty \end{cases}$$

Таким образом, $x_1 = 0$, а x_2 определяется из очевидного равенства

$$U_0\left(1-\frac{x_2}{d}\right) = E \ ,$$

откуда $x_2 = d\left(1-\dfrac{E}{U_0}\right)$.

Итак,

$$J = \int_0^{x_2}\sqrt{2m\left[U(x)-E\right]}dx = \sqrt{2m}\int_0^{x_2}\sqrt{U_0\left(1-\frac{x}{d}\right)-E}\,dx$$

Рассмотрим интеграл

$$\int\left[U_0\left(1-\frac{x}{d}\right)-E\right]^{\frac{1}{2}} dx = \begin{vmatrix} a = U_0 - E \\ b = U_0/d \end{vmatrix} = \int\left(a-bx\right)^{1/2} dx =$$

$$= \begin{vmatrix} a - bx = y^2 \\ -b\,dx = 2y\,dy \\ dx = -2y/b\,dy \end{vmatrix} = -\int y\frac{2y}{b}dy = -\frac{2}{b}\int y^2 dy = -\frac{2}{b}\frac{y^3}{3} =$$

$$= -\frac{2}{3U_0/d}\left(\sqrt{U_0\left(1-\frac{x}{d}\right)-E}\right)^3$$

$$J=\sqrt{2m}\left[-\frac{2}{3}\frac{d}{U_0}\left(\sqrt{U_0\left(1-\frac{x}{d}\right)-E}\right)^3\right]\Bigg|_{x_1=0}^{x_2=d\left(1-\frac{E}{U_0}\right)}=$$

$$=\frac{2}{3}\sqrt{2m}\,\frac{d}{U_0}\left(\sqrt{U_0-E}\right)^3=\frac{2}{3}\sqrt{2m}\,\frac{\left(U_0-E\right)\sqrt{U_0-E}}{U_0}d\,.$$

Следовательно, коэффициент просачивания

$$D=\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\frac{2\sqrt{2m}}{3}\frac{\left(U_0-E\right)\sqrt{U_0-E}}{U_0}d\right\}.$$

Коэффициент $C\approx 1$.

Подставим числовые данные (с наименованиями, проверим, что показатель экспоненты - безразмерное число).

$$D_{E_1=1\text{эВ}}\;=\;1{,}52\cdot 10^{-4},\qquad D_{E_2=2\text{эВ}}\;=\;8{,}9\cdot 10^{-3}\,.$$

Таким образом, увеличение энергии электронов в два раза (и уменьшение ширины барьера тоже в два раза - см. Рис. 14) приводит к увеличению коэффициента прозрачности почти в 60 раз (58,5 раза).

Контрольные вопросы.

1. Что такое “потенциальная яма”?
2. Что такое “потенциальный барьер”?
3. Что такое “гармонический осцилятор”?
4. Чем отличается решение задачи квантового гармонического осцилятора от решения для классического осцилятора?
5. Записать оператор Гамильтона для КвГО.
6. Дать анализ выражения для энергии КвГО.
7. Дать объяснение существования энергии нулевых колебаний, не обращаясь к уравнению Шредингера.
8. Сопоставить (используя графики) движение частицы при наличии потенциального барьера (потенциальной ямы) по классическим и квантовым законам.
9. Дать анализ формулы для коэффициента просачивания через потенциальный барьер.
10. Дать объяснение явлениям, в которых проявляется эффект туннелирования.

5. Движение в поле центральной симметрии.

Задача №11

Определить волновые функции и уровни энергии частицы массой m *и нулевым орбитальным моментом, находящейся в сферически симметричной потенциальной яме радиуса* r_0 *с непроницаемыми стенками.*

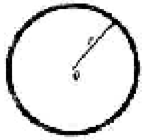

Рис. 15.

Запишем задачу кратко.

Найти	φ, E
Дано	$U(r)\big\|_{0<r\le r_0} = 0$
	$U(r)\big\|_{r=r_0} = \infty$

Решение

Свяжем СО с материальным объектом, являющимся источником потенциального поля. Назовем эту СО “Потенциальная яма”. Согласно условию задачи орбитальное квантовое число $l = 0$. Это означает, что волновая функция также будет обладать сферической симметрией. Как известно, в квантовой механике нет такого понятия “траектория”. Зная волновую функцию, можно определить вероятность нахождения частицы на том или ином расстоянии от центра поля.

Радиальное уравнение при $l = 0$ принимает вид:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2mE}{\hbar^2}R = 0,$$

так как внутри ямы потенциальная функция $U(r)$ равна нулю.

Сделаем подстановку $R(r) = \dfrac{\chi(r)}{r}$, это позволит существенно упростить дифференциальное уравнение для функции $\chi(r)$:

$$\frac{dR}{dr} = \frac{d}{dr}\left(\frac{\chi}{r}\right) = \frac{\chi' r - \chi}{r^2};$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left(\frac{dR}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\frac{\chi' r - \chi}{r^2} = \frac{(\chi'' r + \chi' - \chi')r^2 - (\chi' r - \chi)2r}{r^4} =$$

$$= \frac{\chi'' r^3 - 2\chi' r^2 + 2\chi r}{r^4} = \frac{\chi'' r^2 - 2\chi' r + 2\chi}{r^3}$$

Составим радиальное уравнение

$$\frac{\chi'' r^2 - 2\chi' r + 2\chi}{r^3} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\chi' r - \chi}{r^2} + \frac{2mE}{\mathbf{h}^2} \cdot \frac{\chi}{r} = 0,$$

$\chi'' + \dfrac{2mE}{\mathbf{h}^2}\chi = 0$, или $\chi'' + k^2\chi = 0$, где $k^2 = \dfrac{2mE}{\mathbf{h}^2}$.

С таким уравнением мы уже встречались ранее. Можно убедиться прямой подстановкой, что решением этого уравнения будет функция вида $\chi(r) = A\sin(kr + \alpha)$, A, α - постоянные интегрирования.

Так как при $r \to 0$ функция $R(r)$ должна быть конечной, то $\alpha \equiv 0$. На границе потенциальной ямы при $r = r_0$ функция должна равняться нулю

$$R(r_0) = \frac{A\sin(kr_0)}{r_0} = 0.$$

Это возможно ($A \neq 0$) только, если $\sin(kr_0) = 0$, откуда $kr_0 = n\pi$, n=1, 2, 3... . Так как $k^2 = \dfrac{2mE}{\mathbf{h}^2}$, то

$$E = \frac{k^2\mathbf{h}^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\mathbf{h}^2}{2mr_0^2}.$$

Воспользуемся таблицей волновых функций.

$$\Psi_{n,0,0} = R(r)Y_{00}(\theta,\varphi) = R(r)\cdot 1 = \frac{A}{r}\sin\left(\frac{n\pi}{r_0}r\right)\frac{1}{\sqrt{4\pi}}. .$$

Из условие нормировки $\int\limits_0^{r_0} \left|\Psi_{n,00}\right|^2 4\pi r^2 dr = 1$ определяем константу A:

$$A^2 4\pi \int\limits_0^{r_0} r^2 \frac{1}{r^2}\sin^2\left(\frac{n\pi r}{r_0}\right)dr = A^2 4\pi \int\limits_0^{r_0} \sin^2\left(\frac{n\pi r}{r_0}\right)dr = 1$$

$$A^2 4\pi \int_0^{r_0} r^2 \frac{1}{r^2} \sin^2\left(\frac{n\pi r}{r_0}\right) dr = A^2 4\pi \int_0^{r_0} \sin^2\left(\frac{n\pi r}{r_0}\right) dr = 1$$

Так как $\int_0^{r_0} \sin^2\left(\frac{n\pi r}{r_0}\right) dr = \frac{r_0}{2}$, то $A = \sqrt{\frac{2}{r_0}}$;

Итак, $\Psi_{n,00} = \sqrt{\frac{2}{r_0}} \frac{1}{r} \sin\left(\frac{n\pi r}{r_0}\right)$.

Задача № 12

Частица массой m находится в сферически симметричном потенциальном поле

$$U(r) = \begin{cases} 0 & r < r_0; \\ U_0 & r > r_0. \end{cases}$$

Показать с помощью подстановки $R(r) = \frac{1}{r}\chi(r)$, что уравнение определяющее собственные значения энергии частицы в s - состоянии ($l=0$) при $E < U_0$, имеет вид

$$\sin kr_0 = \pm\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mr_0^2 U_0}} kr_0, \text{ где } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}.$$

Каков энергетический спектр частицы в этом случае?

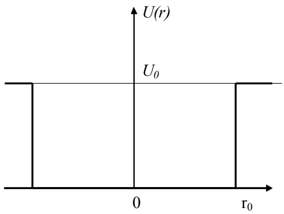

Рис. 16.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	E
Дано	$U(r) = \begin{cases} 0 & r < r_0; \\ U_0 & r > r_0. \end{cases}$ $l = 0$

Решение

Систему отсчета свяжем с потенциальной ямой. В отличие от предыдущей задачи, за пределами ямы потенциальная функция конечна (см. рис.). Воспользуемся рекомендацией условия задачи и перейдем к переменной χ. Необходимо составить члены радиального уравнения

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR)+\frac{2m}{\mathbf{h}^2}\left[E-U(r)-\frac{\mathbf{h}^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R(r)=0$$

подстановкой $R(r)=\frac{1}{r}\chi(r)$. Все это подробно было сделано в задаче №11. Учтем также условие $l=0$. Таким образом, для двух областей $(0,\ r_0)$ и $(r_0,\ \infty)$ мы получаем два дифференциальных уравнения

$\chi_1''+k^2\chi_1=0$ при $r<r_0$, где $k^2=\dfrac{2mE}{\mathbf{h}^2}$ и

$\chi_2''-\beta^2\chi_2=0$ при $r>r_0$, где $\beta^2=\dfrac{2m}{\mathbf{h}^2}(U_0-E)$.

С подобными уравнениями мы встречались ранее как в курсе "квантовой механики", так и в курсе "электродинамики".

Их стандартные решения имеют вид (справедливость утверждения можно проверить прямой подстановкой)

$\chi_1=A\sin kr+B\cos kr$ при $r<r_0$

$\chi_2=C_1e^{-\beta r}+C_2e^{\beta r}$ при $r>r_0$.

Сравнивая производимые действия с решением задачи №7, обнаруживаем их одинаковость. Читателю следует продумать причину этого совпадения. Далее поступаем аналогично решению задачи №7. Определим постоянные интегрирования, исходя из требования конечности функции $R(r)$. Чтобы в точке $r=0$ функция χ_1 была конечной, необходимо положить $B=0$. Конечность χ_2 на бесконечности приводит к условию $C_2=0$. Итак, решение задачи имеет вид

$$R_1=A\frac{\sin kr}{r},;\quad R_2=C_1\frac{e^{-\beta r}}{r}.$$

Для нахождения коэффициентов A и C, воспользуемся непрерывностью функции χ при $r=r_0$ и ее первой производной (см. доказательство непрерывности первой производной при $r=r_0$ в решении задачи №7).

$$A\frac{\sin kr_0}{r_0} = C\frac{e^{-\beta r_0}}{r_0},$$

$$Ak\frac{\cos kr_0}{r_0} = -C\beta\frac{e^{-\beta r_0}}{r_0}.$$

Делим эти равенства друг на друга, получаем $tgkr_0 = -\frac{k}{\beta}$.

Так как $tg\alpha = \frac{\sin\alpha}{\cos\alpha} = \frac{\sin\alpha}{\sqrt{1-\sin^2\alpha}}$, то предыдущее равенство можно записать так $\sin kr_0 = \pm\sqrt{\frac{\mathbf{h}^2}{2mr_0^2U_0}}kr_0$, где использованы значения k и β.

Далее для выяснения характера энергетического спектра снова проводим графическое решение задачи (см. задачу №7). Устанавливаем дискретность энергетических состояний частицы в сферически-симметричной яме конечной глубины. Минимальное значение энергии равно $E_{\min} = \frac{\pi^2\mathbf{h}^2}{8ma^2}$.

Контрольные вопросы.

1. Определение центрально-симметричного поля.
2. Особенности решения уравнения Шредингера для центрально-симметричного поля.
3. Законы сохранения в поле центральной симметрии.

6. Приближенные методы квантовой механики.

Задача №13

На частицу массой m*, находящуюся в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной* a*, наложено малое возмущение* $\hat{V}(x) = V_0 \cos\dfrac{2\pi}{a}x$*, где* a *и* V_0 *- постоянные. Определить поправки к энергии стационарных состояний с точностью до второго порядка включительно.*

Запишем условие задачи кратко.

Найти	$E_n^{(1)},\ E_n^{(2)}$
Дано	$\hat{V}(x) = V_0 \cos\dfrac{2\pi}{a}x$ $0 \le x \le a$ $U_{\substack{x<0\\x>a}} = \infty$.

Решение

Мы уже неоднократно рассматривали частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме, в качестве СО бралась “Потенциальная яма”.

Решение задачи для свободной частицы (невозмущенная задача), находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме, было дано в задаче №4.

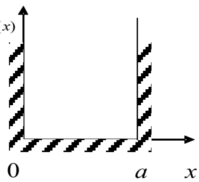

Рис. 17.

Там мы получили следующие собственные функции и собственные значения невозмущенного гамильтониана

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x\ ,\quad E_n^0 = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}\ .$$

Для вычисления поправок к энергии за счет стационарного возмущения найдем матричные элементы оператора $\hat{V}$.

$$V_{mn} = \int_0^a \psi_m^*(x)\hat{V}\psi_n(x)dx = \frac{2}{a_0}V_0\int_0^a \sin\frac{m\pi}{a}x\cos\frac{2\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{a}x\,dx\ .$$

Для взятия такого интеграла нужно последовательно использовать тригонометрические тождества

$$\sin\alpha\sin\beta = \frac{1}{2}\left[\sin(\alpha-\beta)\right] - \cos(\alpha+\beta)\ ,\ \text{где}\ \ \alpha = \frac{m\pi}{a}x\ ;\ \beta = \frac{n\pi}{a}x\ .$$

$\cos\alpha'\cos\beta' = \frac{1}{2}\left[\cos(\alpha'-\beta')\right] + \cos(\alpha'+\beta')$, где $\alpha' = \alpha - \beta$ или $\alpha + \beta$, $\beta' = \frac{2\pi}{a}x$.

Затем необходимо воспользоваться значением интеграла

$$\int_0^a \cos\gamma x dx = \frac{1}{\gamma}\sin\gamma x\Big|_0^a,$$ где $\gamma = \alpha' - \beta'$ или $\alpha' + \beta'$.

В итоге матричный элемент $V_{mn} = \frac{V_0}{2}\left[\delta_{m,n+2} + \delta_{m,n-2}\right]$.

Следовательно, поправка к энергии перового порядка равна

$$E_n^{(1)} = V_n^{(1)} = V_{nn} = \frac{V_0}{2}\left[\delta_{n,n+2} + \delta_{n,n-2}\right] = 0,$$ если $m \neq n+2$ и $m \neq n-2$.

Если же $m = n+2$ или $m = n-2$, то $E_n^{(1)} = \frac{V_0}{2}$

Поправка второго порядка $E_n^{(2)} = \sum\limits_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}$.

Задача №14

Невозмущенная система имеет два близких уровня энергии, расстояние между которыми сравнимо с матричными элементами возмущающей энергии между этими состояниями. Найти поправку к энергии в первом приближении.

Запишем условие задачи кратко.

Решение

Найти	$E^{(1)}$
Дано	$E_{20} - E_{10} \cong V_{12}$.

СО "Квантовая система". Ищем волновую функцию системы в следующем виде $\psi = c_1\psi_{01} + c_2\psi_{02}$, где ψ_{01} и ψ_{02} - волновые функции обеих состояний без возмущения. Эта волновая функция будет описывать некоторые новые два состояния, в которые исходные состояния перейдут под влиянием возмущения. Подставим эту функцию в уравнение для отыскания собственных значений $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$.

$$\hat{H}\psi = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\left(c_1\psi_{01} + c_2\psi_{02}\right) = E\psi = \left(c_1\psi_{01} + c_2\psi_{02}\right)E .$$

Умножим это уравнение один раз на ψ_{01}^*, другой раз на ψ_{02}^* и проинтегрируем по всему объему. При это воспользуемся уравнениями для невозмущенных состояний: $\hat{H}_0\psi_{0i} = E_{i0}\psi_{0i}$, а также ортонормированностью невозмущенных функций $\int \psi_{01}^*\psi_{02}d\tau = 0$,

$$\int \psi_{0i}^*\psi_{oi}d\tau = 1 .$$

$$\int \psi_{01}^*\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\left(c_1\psi_{01} + c_2\psi_{02}\right)d\tau = \int \psi_{01}^*E\left(c_1\psi_{01} + c_2\psi_{02}\right)d\tau$$

$$\int \psi_{01}^*\hat{H}_0c_1\psi_{01}d\tau + \int \psi_{01}^*\hat{H}_0c_2\psi_{02}d\tau +$$

$$+ \int \psi_{01}^*\hat{V}c_1\psi_{01}d\tau + \int \psi_{01}^*\hat{V}c_2\psi_{02}d\tau =$$

$$= \int \psi_{01}^*Ec_1\psi_{01}d\tau + \int \psi_{01}^*Ec_2\psi_{02}d\tau .$$

Аналогично и для ψ_{02}^*.

$c_1E_{10} + c_1V_{11} + c_2V_{12} = Ec_1$ или $(E_{10} + V_{11} - E)c_1 + V_{12}c_2 = 0$, соответственно $V_{21}c_1 + \left(E_{20} + V_{22} - E\right)c_2 = 0$.

Эта система алгебраических уравнений имеет решение, если определитель, построенный из коэффициентов, равен нулю.

$$\begin{vmatrix} E_{10} + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & E_{20} + V_{22} - E \end{vmatrix} = 0 ,$$

или $\left(E_{10} + V_{11} - E\right)\left(E_{20} + V_{22} - E\right) - V_{12}V_{21} = 0$.

Раскрывая скобки, располагая члены по убывающей степени E и учитывая симметрию состояний 1 и 2 (т.е. $V_{12} = V_{21}$), получаем:

$$E^2 - \left(E_{10} + E_{20} + V_{11} + V_{22}\right)E +$$

$$+ \left(E_{10} + V_{11}\right)\left(E_{20} + V_{22}\right) - \left|V_{12}\right|^2 = 0 .$$

Решение этого квадратного уравнения дает два значения “возмущающей” энергии:

$$E_{1,2}=\frac{1}{2}\left(E_{10}+E_{20}+V_{11}+V_{22}\right)\pm$$

$$\pm\sqrt{\frac{\left(E_{10}-E_{20}+V_{11}-V_{22}\right)^2}{4}+\left|V_{12}\right|^2} \qquad (*)$$

Если $V_{12}=0$, то получаем формулу для поправок к энергии в первом приближении без квантового перехода между состояниями

$$E_1=\frac{1}{2}\left(E_{10}+E_{20}+V_{11}+V_{22}\right)+\frac{1}{2}\left(E_{10}-E_{20}+V_{11}-V_{22}\right)=E_{10}+V_{11}+E_{20}+V_{22},$$

$$E_2=\frac{1}{2}\left(E_{10}+E_{20}+V_{11}+V_{22}\right)-\frac{1}{2}\left(E_{10}-E_{20}+V_{11}-V_{22}\right)=0.$$

По условию же задачи матричный элемент V_{12} того же порядка, что и $\left(E_{10}-E_{20}\right)$, так что уровни энергии существенно перестраиваются по сравнению к исходному расположению согласно (*).

Рассмотрим задачу на использование вариационного метода.

Задача №15

Определить приближенно с помощью вариационного метода энергию основного состояния частицы в потенциальном поле $U(x)=U_0x^4$ (где $U_0=const$). В качестве допустимых функций использовать функции в виде $\psi=Ae^{-x^2/2\beta^2}$.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	E_0
Дано	$U(x)=U_0x^4$ $U_0=const$ $\psi=Ae^{-x^2/2\beta^2}$

Решение

Задача носит чисто вычислительный характер: нахождение минимума некоторого функционала. Поэтому не будем выбирать СО.

Нам необходимо найти минимум функционала вида

$$\overline{E} = \Im(\psi) = \int \psi^*(x)\hat{H}\psi(x)dx\,,$$

который по общей теории квантовой механики определяет среднее значение энергии системы, соответствующей гамильтониану

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U_0x^4$$

при заданном виде волновой функции $\psi(x) = A\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)$.

Чтобы продолжить математические действия, необходимо определить постоянную A, используя условие нормировки

$\int|\psi|^2 dx = 1$, или $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} A^2\exp\left(-\frac{x^2}{\beta^2}\right)dx = 1$, откуда

$$A^2 = \frac{1}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{\beta^2}\right)dx} = \frac{1}{\sqrt{\pi}\beta} \quad \text{и} \quad A = \left(\sqrt{\pi}\beta\right)^{-1/2}.$$

Здесь мы воспользовались значением определенного интеграла $\int\limits_0^{\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}/2$; $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}dx = 2\int\limits_0^{\infty} e^{-x^2}dx$.

Итак,

$$\overline{E} = \Im(\psi) =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left(\sqrt{\pi}\,\beta\right)^{-1/2}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U_0x^4\right\}\left(\sqrt{\pi}\,\beta\right)^{-1/2}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)dx =$$

$$= \left(\sqrt{\pi}\beta\right)^{-1}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right) + U_0x^4\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\right\}dx\,.$$

Учитывая, что

$$\frac{d}{dx}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right) = \exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\left(-\frac{2x}{2\beta^2}\right);$$

$$\frac{d}{dx}\left\{\frac{d}{dx}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\right\}=\frac{d}{dx}\left\{\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\left(-\frac{x}{\beta^2}\right)\right\}=$$

$$=\left(-\frac{x}{\beta^2}\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\left(-\frac{x}{\beta^2}\right)+\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\left(-\frac{1}{\beta^2}\right)=$$

$$=\frac{x^2}{\beta^4}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)-\frac{1}{\beta^2}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right).$$

Еще раз составим

$$\overline{E}=\left(\sqrt{\pi}\beta\right)^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\left\{-\frac{\mathbf{h}^2}{2m}\frac{x^2}{\beta^4}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)-\frac{\mathbf{h}^2}{2m\beta^2}\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)+\right.$$

$$\left.+U_0x^4\exp\left(-\frac{x^2}{2\beta^2}\right)\right\}dx=\left(\sqrt{\pi}\,\beta\right)^{-1}\left\{-\frac{\mathbf{h}^2}{2m\beta^4}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\exp\left(-\frac{x^2}{\beta^2}\right)dx-\right.$$

$$\left.-\frac{\mathbf{h}^2}{2m\beta^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{\beta^2}\right)dx+U_0\int_{-\infty}^{+\infty}x^4\exp\left(-\frac{x^2}{\beta^2}\right)dx=\right.$$

$$=\left(\sqrt{\pi}\,\beta\right)^{-1}\left\{-\frac{\mathbf{h}^2}{2m\beta^4}\cdot 2\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{2^2\left(\frac{1}{\beta^2}\right)^{\frac{3}{2}}}-\frac{\mathbf{h}^2}{2m\beta^2}\cdot 2\frac{\sqrt{\pi}\,\beta}{2}+U_0^2\,\frac{6\sqrt{\pi}}{2^3\left(\frac{1}{\beta^2}\right)^{\frac{5}{2}}}\right\}=$$

$$=\frac{\mathbf{h}^2}{4m\beta^2}+\frac{3}{4}U_0\beta^4.$$

Здесь использовано значение определенных интегралов

$$\int_0^{\infty}x^n e^{-ax^2}dx=\frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{2a^{\frac{n+1}{2}}},\ a>0\ \ n>-1;$$

при целом четном $n = 2k$ $\int\limits_0^\infty x^n e^{-ax^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdots (2k-1)\sqrt{\pi}}{2^{k+1} a^{k+1/2}}$.

Определим значение параметра β , при котором энергия примет минимальное значение. Составим условие экстремума

$\frac{d}{d\beta}\overline{E} = 0$, или $\frac{\hbar^2}{4m}\left(-2\beta^{-3}\right) + \frac{3}{4}U_0 \cdot 4\beta^3 = 0$. Откуда $\beta^2 = \left(\frac{\hbar^2}{6mU_0}\right)^{\frac{1}{3}}$.

Таким образом, $E_0 = \overline{E}_{\min} = \frac{\hbar^2}{4m\left(\frac{\hbar^2}{6mU_0}\right)^{\frac{1}{3}}} + \frac{3}{4}U_0\left(\frac{\hbar^2}{6mU_0}\right)^{\frac{2}{3}}$.

Квазиклассическое приближение.

Задача №16

Выше на примерах мы рассмотрели применение двух приближенных методов квантовой механики: метод теории возмущений и вариационный метод. Довольно часто используется и третий метод приближенных решений квантово-механических задач - квазиклассический метод. Ниже мы объясним происхождение названия метода и критерий его применимости.

В лекционном курсе рассматривается вопрос о выполнимости в квантовой механике принципа соответствия: квантовая механика содержит в себе как частный случай классическую механику. Условием перехода является малость постоянной Планка в условиях данной задачи, т.е. переход к классической механике происходит при пренебрежении в квантово-механических формулах и уравнениях членов, содержащих $\hbar$. Однако, если подобную операцию сделать с уравнением Шредингера $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi$,то получается явный абсурд. Поэтому в этом и других случаях следует применять разложение волновой функции Ψ в ряд по степеням малой величины $\hbar$. В частности выражение $\Psi = ae^{\frac{i}{\hbar}S}$ (a и S не зависят от $\hbar$) можно рассматривать как начало такого разложения.

Действительно $\Psi = ae^{\frac{i}{\hbar}S} = \exp\left(\dfrac{iS + \hbar \ln a}{\hbar}\right)$ состоит из первых двух членов разложения экспоненты. Подставим функцию $\Psi = ae^{\frac{i}{\hbar}S}$ в уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi .$$

Получим

$$a\frac{\partial S}{\partial t} - i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}\left(\nabla S\right)^2 - \frac{i\hbar}{2m}a\Delta S - \frac{i\hbar}{m}\nabla S\nabla a + +Ua = 0 .$$

Члены нулевой и первой степени по $\hbar$ должны обращаться в нуль по отдельности. Отсюда находим два уравнения

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\nabla S\right)^2 + U = 0$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}\Delta S + \frac{1}{m}\nabla S\nabla a = 0 .$$

Первое уравнение есть не что иное, как классическое уравнение Гамильтона-Якоби для действия частицы *S*.

Второе уравнение (после умножения на *2a*) принимает вид

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + div\left(a^2\frac{\nabla S}{m}\right) = 0$$

Так как $a^2 = \left|\Psi\right|^2$ есть плотность вероятности нахождения частицы, а $\dfrac{\nabla S}{m} = \dfrac{\vec{p}}{m}$ есть классическая скорость частицы $\vec{v}$, то последнее уравнение есть не что иное, как уравнение непрерывности, показывающее, что плотность вероятности перемещается по законам классической механики с классической скоростью $\vec{v}$.

Для стационарных состояний, т.е. при заданной энергии *E*, действие $S = -Et + S_0\left(x,y,z\right)$, где функция S_0 удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{2m}\left(\nabla S_0\right)^2 + U = E .$$

Амплитуда же волновой функции *a* стационарных состояний не зависит от времени и удовлетворяет уравнению

$$div\left(a^2\nabla S\right)=0 \qquad (*)$$

Если задача одномерная, т.е. $\left(\nabla S\right)^2=\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2$, тогда уравнение

$\frac{1}{2m}\left(\nabla S_0\right)^2+U=E$ имеет следующее решение

$$\left(\nabla S_0\right)^2=2m\left(E-U\right);\quad \nabla S_0=\sqrt{2m\left(E=U\right)}=\frac{\partial S_0}{\partial x},$$

откуда $S_0=\int\sqrt{2m\left(E-U\right)}dx=\int pdx$, где $p=\sqrt{2m\left(E-U\right)}$ есть классический импульс.

Из уравнения (*) $div\left(a^2p\right)=\frac{d}{dx}\left(a^2p\right)=0$ следует, $a^2p=const$, откуда

$$a=\frac{const}{\sqrt{p}}.$$

Итак, общее решение уравнения Шредингера запишется так

$$\Psi=\frac{c_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int pdx\right)+\frac{c_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int pdx\right).$$

Как и следовало ожидать, вероятность нахождения частицы $\left|\Psi\right|^2$ в точке с координатами между x и $x+dx$ обратно пропорциональна импульсу частицы p, т.к. для квазиклассической частицы время, проведенное частицей на участке dx, обратно пропорциональна скорости (импульсу) частицы.

В классически недоступных участках пространства, где $E<U\left(x\right)$, функция $p\left(x\right)=\sqrt{2m\left(E-U\right)}$ - чисто мнимая величина, так что показатели степени в выражении для Ψ - вещественны и по квантово - механическим представлениям (в силу корпускулярно - волнового дуализма) частица по закону экспоненты может проникнуть в запретную зону.

Уточним условие применимости полученных результатов. В уравнении $a\frac{\partial S}{\partial t}-i\hbar\frac{\partial a}{\partial t}+\frac{a}{2m}\left(\nabla S\right)^2-\frac{i\hbar}{2m}a\Delta S-\frac{i\hbar}{m}\nabla S\nabla a+Ua=0$ члены, содержащие $\hbar$ должны быть малы по сравнению с членами без $\hbar$. Сравним, например, члены

$$\frac{a}{2m}(\nabla S)^2 = \frac{a}{2m}\left(\frac{dS}{dx}\right)^2 = \frac{a}{2m}p^2,$$

$$\frac{i\mathbf{h}a}{2m}\Delta S = \frac{i\mathbf{h}a}{2m}\frac{d^2S}{dx^2} = \frac{i\mathbf{h}a}{2m}\frac{dp}{dx}.$$

Составив отношение второго равенства к первому, получим величину $\frac{\mathbf{h}\,{}^{dp}\!/_{dx}}{p^2}$, которая должна быть много меньше единицы.

Если ввести $\mathbf{D} = \frac{\lambda}{2\pi}$, где $\lambda = \frac{2\pi\mathbf{h}}{p}$ - длина волны де Бройля, полученную выше величину можно привести к виду $\frac{d\mathbf{D}}{dx} << 1$.

Итак, длина волны де Бройля частицы должна мало меняться на протяжении расстояний порядка ее самой.

Квазиклассическое приближение заведомо неприменимо вблизи точек поворота, т.е. вблизи тех точек, в которых частица согласно классической механике, остановилась бы, после чего начала бы движение в обратном направлении.

В этих точках $p(x) = 0$, следовательно и $\lambda = \infty$, что явно не малая величина.

Применим полученные знания для вывода правила квантования Бора - Зоммерфельда в теории Бора.

Задача №17

Показать, что условие квантования Бора - Зоммерфельда $\oint p dx = nh$ *содержится в квазиклассическом приближении квантовой механики.*

Запишем условие задачи кратко.

Найти	[redacted]
Дано	[redacted]
	[redacted]

Решение

Задача имеет вычислительный характер, поэтому СО выбирать не нужно. Выберем ход функции $U(x)$ так, как это показано на рисунке. В интервале $a \le x \le b$ частица совершает одномерное финитное (ограниченное) движение с т.з. классической механики. В точках a и b частица должна останавливаться, т.е. $p=0$. Поэтому мы не можем воспользоваться в точках a и b условиями непрерывности самой волновой функции и ее первой производной. По квантово - механическим же представлениям частица может проникать за пределы $x>b$ и $x<a$. Исходя из классических представлений о движении частицы, будем считать, что функция Ψ обращается в нуль в точках $x=a$ и $x=b$. Учитывая эти условия, запишем полученные выше функции так:

для $\Psi_{x=a} = 0$

$$\Psi = \frac{c}{\sqrt{p}} \sin \frac{1}{\mathbf{h}} \int_a^x p dx ,$$

для $\Psi_{x=b} = 0$

$$\Psi = \frac{c'}{\sqrt{p}} \sin \frac{1}{\mathbf{h}} \int_x^b p dx .$$

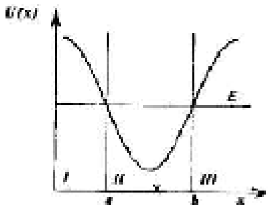

Рис. 18.

Чтобы эти два выражения совпадали во всей области $a \le x \le b$, необходимо, чтобы сумма фаз была равна целому кратному от π :

$$\frac{1}{\mathbf{h}} \int_a^b p dx = n\pi$$, (причем $c = (-1)^n c'$).

Или $\oint p dx = 2\pi \mathbf{h} n$, где интеграл учитывает прямое и обратное движение частицы в пределах ямы (обратим внимание на множитель 2).

Мы получили условие, определяющее стационарные состояния в квазиклассическом приближении, что совпадает с правилом квантования Бора - Зоммерфельда в старой квантовой теории.

Получим дополнительные сведения, учтя условие применимости квазиклассического приближения.

Так как в квазиклассическом приближении постоянная Планка считается малой величиной, то $\oint p dx$ будет большой величиной, если n - большое число. Мы автоматически получили условие, при котором выполняется принцип соответствия.

Фаза волновой функции меняется от нуля в точке $x=a$ до $n\pi$ в точке $x=b$, так что внутри этого интервала функция обращается в нуль $n-1 \approx n$ раз. Таким образом, целое число n определяет число нулей волновой функции. Этот вывод соответствует полученному выше условию, что длина волны де Бройля мала по сравнению с областью движения частицы. Очевидно, что расстояние между двумя соседними узлами соответствует по порядку величины длине волны де Бройля. При больших n это расстояние $\frac{b-a}{n}$ мало, что требуется по условию применимости квазиклассического метода.

Воспользуемся условием квантования $\oint pdx = nh$ и выясним общий характер энергетического спектра.

Пусть ΔE - расстояние между соседними уровнями, пусть n - большое число, тогда $\Delta E << E$ и условие квантования можно записать так $\Delta E \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = 2\pi\hbar$, при больших n. Но $\frac{\partial E}{\partial p} = v$, так что $\oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \oint \frac{dx}{v} = T$ и $\Delta E = \frac{2\pi\hbar}{T} = \hbar\omega$.

При больших n можно считать, что для соседних уровней $\Delta E \approx \hbar\omega$, т.е. $\omega = const$ и уровни расположены эквидистантно, что очевидно, так как мы перешли в квазиклассическую область.

Условие квантования можно истолковать и так: $\oint pdq$ определяет площадь фазового пространства, занимаемого частицей. Отношение $\frac{\oint pdq}{h} = n$ определяет число состояний в плоском фазовом пространстве, которые могут быть заняты частицей.

Контрольные вопросы.

1. Какие задачи в квантовой механике имеют точное решение?
2. Почему другие задачи не имеют точного решения?
3. Перечислите известные приближенные методы решения квантово - механических задач.
4. При каком условии применим метод теории возмущений?
5. Какова идея вариационного метода решения квантово - механических задач?
6. Какова идея квазиклассического метода решения квантово - механических задач? Условия его применимости.

7. Спин

Задача №18.

Найти собственные функции и собственные значения операторов, определяемых матрицами Паули.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	χ_i, σ_i
Дано	$\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$

Решение

Задача является аналитической, поэтому нет необходимости выбирать СО.

Для нахождения искомых величин составим операторные уравнения для операторов $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$, данных в $\hat{\sigma}_z$ представлении: $\hat{\sigma}_x\chi^{(1)} = \sigma_x\chi^{(1)}$; $\hat{\sigma}_y\chi^{(2)} = \sigma_y\chi^{(2)}$; $\hat{\sigma}_z\chi^{(3)} = \sigma_z\chi^{(3)}$, где $\chi^{(i)}$ и σ_i - соответственно собственные функции и собственные значения операторов $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$.

Волновые функции $\chi^{(i)}$ будут зависеть не от пространственных координат, а от особой переменной, описывающей спиновую степень свободы. Но так как матрицы Паули, отвечающие моменту $\frac{1}{2}\hbar$, имеют только два столбца и две строки, то соответствующая волновая функция (вектор состояния) имеет лишь две компоненты. Назовем их a и b. Для удобства запишем волновую функцию χ в виде матрицы: $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$.

Составим уравнение $\hat{\sigma}_x\chi^{(1)} = \sigma_x\chi^{(1)}$:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \sigma_x\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

Перемножая матрицы, получаем: $\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \sigma_x\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, откуда $b = \sigma_x a$ и $a = \sigma_x b$. Решая совместно, имеем $b = \sigma_x a = \sigma_x\sigma_x b = \sigma_x^2 b$. Следовательно,

$\sigma_x^2 = 1$, $\sigma_x = \pm 1$.

Если $\sigma_x = 1$, то $\chi_{+1}^{(1)} = a\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$, если $\sigma_x = -1$, то $\chi_{-1}^{(1)} = a\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$.

Из условия нормировки

$\chi_1^{(1)*}\chi_1^{(1)} = |a|^2\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = 2|a|^2 = 1$ следует, что $a = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$.

Поэтому $\chi_{+1}^{(1)} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$ и $\chi_{-1}^{(1)} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$.

Аналогично из второго и третьего уравнений находим

для $\sigma_y = \pm 1$: $\chi_{+1}^{(2)} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$, $\chi_{-1}^{(2)} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}$;

для $\sigma_z = \pm 1$: $\chi_{+1}^{(3)} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\chi_{-1}^{(3)} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.

Функции $\chi_{+1}^{(3)}$ и $\chi_{-1}^{(3)}$ соответствуют случаям, когда спин направлен по оси z и против оси z соответственно.

Можно показать, что операторы $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ эрмитовские, а волновые функции, отвечающие разным собственным значениям оператора $\hat{\sigma}_z$, ортогональны.

Задача №19

Показать, что матрицы Паули можно рассматривать как компоненты векторного оператора $\hat{\vec{\sigma}}$, *для которого справедливы соотношения* $\left[\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}\right] = 2i\hat{\vec{\sigma}}$; $\left(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}\right) = 3\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	$\left[\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}\right], \left(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}\right)$
Дано	$\hat{\vec{\sigma}}$

Решение

Задача алгебраическая, СО не требуется.

Чтобы показать, что матрицы Паули можно рассматривать как компоненты векторного оператора $\hat{\vec{\sigma}}$, нужно убедиться, что при поворотах координатной системы эти операторы преобразуются как составляющие вектора, т.е., что преобразованные операторы обладают теми же свойствами как и исходные.

Введем обозначения: косинус угла между старой осью α и новой осью α' обозначим $(\alpha'\alpha)$. Тогда компоненты преобразованного вектора выражаются через компоненты вектора относительно старых осей следующим образом: $\hat{\sigma}'_{\alpha'} = (\alpha'\alpha)\hat{\sigma}_{\alpha}$, $\hat{\sigma}'_{\beta'} = (\beta'\beta)\hat{\sigma}_{\beta}$.

Убедимся, что произведения компонент антикоммутируют, как и у компонент первоначальных матриц Паули.

Перемножая $\hat{\sigma}'_{\alpha'}$ и $\hat{\sigma}'_{\beta'}$, получим

$$\hat{\sigma}'_{\alpha'}\hat{\sigma}'_{\beta'} = (\alpha'\alpha)(\beta'\beta)\hat{\sigma}_{\alpha}\hat{\sigma}_{\beta} = (\alpha'\alpha)(\beta'\beta)\left(\delta_{\alpha\beta} + i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{\sigma}_{\gamma}\right) =$$

$$= \delta_{\alpha'\beta'} + i(\alpha'\alpha)(\beta'\beta)\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{\sigma}_{\gamma},$$

где использованы соотношения для исходных компонент

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\Psi = \hat{\sigma}_x\begin{pmatrix} -i\Psi_2 \\ i\Psi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\Psi_1 \\ -i\Psi_2 \end{pmatrix} = i\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ -\Psi_2 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_z\Psi = -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\Psi \;;$$

$$\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x\Psi = \hat{\sigma}_z\begin{pmatrix} \Psi_2 \\ \Psi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_2 \\ -\Psi_1 \end{pmatrix} = i\begin{pmatrix} -i\Psi_2 \\ i\Psi_1 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_y\Psi = -\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z\Psi \;;$$

$$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\Psi = \hat{\sigma}_y\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ -\Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\Psi_2 \\ i\Psi_1 \end{pmatrix} = i\begin{pmatrix} \Psi_2 \\ -\Psi_1 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_x\Psi = -\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y\Psi \;,$$

которые можно записать в общем виде

$$\hat{\sigma}_l\hat{\sigma}_m = \delta_{lm} + \varepsilon_{lmn}i\hat{\sigma}_n \,. \qquad (*)$$

Но $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ - инвариантный тензор, он одинаков в любой системе координат. То же самое можно сказать, если один из значков тензора (γ) свернут (просуммирован) со значком какого - либо вектора, например $\hat{\sigma}_{\gamma}$. Это следует из свойств коэффициентов преобразования $(\alpha'\alpha)...(\gamma'\gamma)$.

Поэтому $(\alpha'\alpha)(\beta'\beta)\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{\sigma}_{\gamma} = \varepsilon_{\alpha'\beta'\gamma'}\hat{\sigma}_{\gamma'}$.

Таким образом, $\hat{\sigma}'_{\alpha'}\hat{\sigma}'_{\beta'} = \delta_{\alpha'\beta'} + i\varepsilon_{\alpha'\beta'\gamma'}\hat{\sigma}_{\gamma'}$, как и для старых компонент $\hat{\sigma}_\alpha$ и $\hat{\sigma}_\beta$.

Получив доказательство, что компоненты $\hat{\sigma}_\alpha$ являются компонентами векторного оператора $\hat{\vec{\sigma}}$, можно составить

$$\left[\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}\right] = \hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta - \hat{\sigma}_\beta\hat{\sigma}_\alpha = i\hat{\sigma}_\gamma - \left(-i\hat{\sigma}_\gamma\right) = 2i\hat{\sigma}_\gamma .$$

Соответственно

$$\left(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}\right) = \hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\alpha + \hat{\sigma}_\beta\hat{\sigma}_\beta + \hat{\sigma}_\gamma\hat{\sigma}_\gamma = \hat{\sigma}_\alpha^2 + \hat{\sigma}_\beta^2 + \hat{\sigma}_\gamma^2 = 3\hat{\sigma}_x^2 = 3\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},$$

т.к. $\hat{\sigma}_\alpha^2 = \hat{\sigma}_\beta^2 = \hat{\sigma}_\gamma^2 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$.

Чтобы составить $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z$, нужно снова воспользоваться соотношениями (*). Так как $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z$, то

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_z^2 = i\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.$$

Задача №20

Вычислить квадрат проекции спина электрона на произвольное направление.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	$s^2_{\vec{a}}$
Дано	$\vec{a}$
	$\hat{\vec{s}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$

Решение

Задача расчетная, выбора СО делать не надо.

Искомую величину можно представить так $\left(\hat{\vec{s}}\frac{\vec{a}}{a}\right)^2$,

где $\frac{\vec{a}}{a}$ - единичный орт направления вектора $\vec{a}$.

Перейдем к матрицам Паули

$$\left(\hat{\vec{s}}\frac{\vec{a}}{a}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4a^2}\left(\hat{\vec{\sigma}}\vec{a}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4a^2}\left(\hat{\sigma}_x a_x + \hat{\sigma}_y a_y + \hat{\sigma}_z a_z\right)\left(\hat{\sigma}_x a_x + \hat{\sigma}_y a_y + \hat{\sigma}_z a_z\right) =$$

$$= \frac{\hbar^2}{4a^2}\left\{\hat{\sigma}_x^2 a_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 a_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 a_z^2 + \left(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\right)a_x a_y + \left(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y\right)a_y a_z +\right.$$

$$\left. + \left(\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z\right)a_z a_x\right\} = \frac{\hbar^2}{4a^2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}a^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}\right)_{\vec{a}}^2 = \frac{\hbar^2}{4}.\,.$$

Здесь учитывались перестановочные соотношения для компонент $\hat{\vec{\sigma}}$ (см. формулы (*) в предыдущей задаче)

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\ a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = a^2 .$$

Таким образом, учитывая, что $\hat{\vec{s}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$, получаем $\left(\hat{s}_{\vec{a}}\right)^2 = \frac{1}{4}\hbar^2$.

Задача №21

Найти скалярное произведение спинов двух частиц в триплетном и синглетном состояниях. Спин частицы равен $\hbar/2$.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	$\left(\hat{\vec{s}}_1\hat{\vec{s}}_2\right)$
Дано	$s = \hbar/2$
	$l = 1$
	$l = 0$

Решение

Задача аналитическая. СО не выбираем.

Составим $\hat{\vec{s}} = \hat{\vec{s}}_1 + \hat{\vec{s}}_2$. Возведем в квадрат, чтобы получить $\left(\hat{\vec{s}}_1\hat{\vec{s}}_2\right)$.

$$s^2 = s_1^2 + s_2^2 + 2\left(\vec{s}_1\vec{s}_2\right).$$

Откуда $\left(\hat{\vec{s}}_1\hat{\vec{s}}_2\right) = \dfrac{s^2 - s_1^2 - s_2^2}{2}$.

Общее значение квадрата спина $s^2 = \hbar^2 s(s+1)$.

В триплетном состоянии $l = 1,\ s = 1$; в синглетном $s = 0$, а $s_1^2 = s_2^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$.

Следовательно, $\left(\vec{s}_1\vec{s}_2\right) = \dfrac{s^2 - \left(s_1^2 + s_2^2\right)}{2} = \dfrac{\mathbf{h}^2}{4}\left[2s(s+1) - 3\right]$.

В триплетном состоянии $\left(\vec{s}_1\vec{s}_2\right) = \dfrac{\mathbf{h}^2}{4}$; в синглетном - $\left(\vec{s}_1\vec{s}_2\right) = -\dfrac{3\mathbf{h}^2}{4}$.

Контрольные вопросы к 7.

1. Для объяснения каких свойств и явлений вводится представление о спине элементарной частицы?
2. На какие две группы частиц делятся элементарные частицы в отношении значении их спина?
3. Какие частицы подчиняются принципу Паули?
4. Какими свойствами обладают волновые функции фермионов?
5. Почему спину нельзя сопоставить наглядную модель?
6. Сопоставить формулы спинового и орбитального механического момента.
7. Что такое гиромагнитное число?

8. Квантовые переходы. Основы теории излучения.

Задача №22

Применим общие соображения к решению задачи о поглощении и испускании света.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	$C_m(t)$
Дано	$\lambda > a_0 = 10^{-8}\,см$
	$E = E^0 \cos\omega t$

Решение

Будем решать задачу в СО “Лаборатории”. Пусть длина волны λ превышает размеры атома a_0, что соответствует видимой части спектра. В этом случае можно считать, что фаза волны одна и та же в пределах атома. Тогда $F = eE_\omega^0 \cos\omega t$, откуда $U(x,t) = -eE_\omega^0 x \cos\omega t$, которое можно рассматривать как возмущение.

Подставим $\Psi = \sum C_k(t)\Psi_k$, где $\Psi_k = \Psi_k^0 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_k t\right)$ в уравнение Шредингера (*);

$$\sum C_k \hat{H}^0 \Psi_k + \sum C_k \hat{V} \Psi_k = i\hbar \sum C_k \frac{d\Psi_k}{dt} + i\hbar \sum \Psi_k \frac{dC_k}{dt}.$$

Так как функции Ψ_k удовлетворяют невозмущенному уравнению Шредингера, то первый член слева подобен первому члену справа и как равные величины они сокращаются. Уравнение принимает вид:

$$\sum C_k \hat{V} \Psi_k = i\hbar \sum \Psi_k \frac{dC_k}{dt}.$$

Умножим обе стороны этого равенства на Ψ_m^* и проинтегрируем по всему пространству изменения координат.

$$\sum C_k \int \Psi_m^* \hat{V} \Psi_k d\tau = i\hbar \sum \frac{dC_k}{dt} \int \Psi_m^* \Psi_k d\tau .$$

Воспользуемся условием ортонормированности волновых функций невозмущенной задачи $\int \Psi_m^* \Psi_k d\tau = \delta_{mk}$. Правая сторона равенства существенно упрощается, так как от суммы остается один член с $m = k$.

Итак,

$$\frac{dC_m}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum C_k \int \Psi_m^* \hat{V} \Psi_k d\tau , \quad k = 1,\ 2,\ 3\ldots \qquad (1)$$

Подставляя в это равенство последовательно Ψ_1, Ψ_2, ..., мы получим систему уравнений для нахождения коэффициентов C_m.

Упростим задачу, воспользуемся тем, что коэффициенты C_m медленно изменяются со временем, т.е. в момент $t = 0$ лишь один из коэффициентов, пусть с индексом n, $C_n \neq 0$. И более того, этот коэффициент $C_n = 1$, так как система в момент времени $t = 0$ находится лишь в одном из возможных состояний. Обозначим это условие так: $C_k = \delta_{kn}$.

Это условие сохраняется и при достаточно малом промежутке времени после включения возмущения.

Поэтому в формуле (1) только один член в сумме отличен от нуля, когда $k = n$:

$$\frac{dC_m}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\int \Psi_m^* \hat{U} \Psi_n d\tau \ . \tag{2}$$

Полагая $m = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$ получаем все коэффициенты в первом приближении. Подставляя эти коэффициенты в равенство (1), находим второе приближение и т.д.

Учитывая, что $\Psi_m^* = \Psi_m^{0*} \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_m t\right)$ и $\Psi_n = \Psi_n^0 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$, можем формулу (2) записать так:

$$\frac{dC_m}{dt} = -\frac{i}{\hbar} e^{i\omega_{mn}t} U_{mn}\ , \tag{3}$$

где $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{dt}$ и $U_{mn} = \int \Psi_m^{0*} \hat{U} \Psi_n^0 d\tau$.

Возмущающее действие создается световой волной. Выше мы получили, что

$$U(x,t) = -exE_\omega^0 \cos\omega t\ ,\ U_{mn} = -eE_\omega^0 \cos\omega t \int \Psi_m^{0*} x \Psi_n^0 d\tau = -E_\omega \cos\omega t \cdot ex_{mn}\ ,$$

где ex_{mn} - средний дипольный момент перехода.

Продолжим преобразование формулы (3).

$$\frac{dC_m}{dt} = \frac{i}{\hbar} E_\omega^0 ex_{mn} e^{i\omega_{mn}t} \cos\omega t = \frac{i}{2\hbar} E_\omega^0 ex_{mn} e^{i\omega_{mn}t}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right).$$

Проинтегрируем в интервале времени $(0,t)$, получаем

$$C_m = \frac{1}{2\hbar} E_\omega^0 ex_{mn}\left[\frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} + 1}{\omega_{mn} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1}{\omega_{mn} - \omega}\right]. \tag{4}$$

Здесь следует сделать примечание относительно величины ex_{mn}, которую мы назвали средним электрическим моментом. Дело в том, что обычно средним электрическим моментом мы называем величину

$e\overline{x} = \int \Psi_m^{0*} ex \Psi_m^0 d\tau$, но нам удобно и величину ex_{mn} называть средним дипольным моментом перехода из состояния n в состояние m.

В зависимости от того, что больше E_m или E_n, может происходить либо поглощение энергии волны, либо вынужденное испускание энергии частоты $\omega_{mn} = \dfrac{E_m - E_n}{\hbar}$.

В каждом их указанных случаев одним членом в формуле (4) можно пренебречь. Например, при поглощении величина $\omega_{mn} + \omega$ больше, чем $\omega_{mn} - \omega$. Поэтому первым членом в квадратных скобках можно пренебречь. Тогда получаем:

$$C_m = -\frac{1}{2\hbar} E_0 e x_{mn} \frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1}{\omega_{mn} - \omega}.$$

Составим

$$\left|C_m\right|^2 = \frac{E_0^2}{4\hbar^2}\left(e x_{mn}\right)^2 \frac{2\left[1 - \cos\left(\omega_{mn} - \omega\right)t\right]}{\left(\omega_{mn} - \omega\right)^2},$$

где учтено, что

$$\left[e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1\right]^2 = \left(e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1\right)\left(e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1\right) = 2 - 2\cos\left(\omega_{mn} - \omega\right)t =$$

$$= 2\left[1 - \cos\left(\omega_{mn} - \omega\right)t\right].$$

Воспользуемся формулой тригонометрии:

$$1 - \cos\left(\omega_{mn} - \omega\right)t = 2\sin^2\frac{\left(\omega_{mn} - \omega\right)t}{2}.$$

Тогда $\left|C_m\right|^2 = \dfrac{E_0^2}{\hbar^2}\left(e x_{mn}\right)^2 \dfrac{\sin^2 \dfrac{\omega_{mn} - \omega}{2} t}{\left(\omega_{mn} - \omega\right)^2}$.

Из этого выражения следует, что вероятность перехода пропорциональна квадрату амплитуды волны E_0^2, т.е. интенсивности волны, пропорциональна квадрату дипольного момента перехода $\left(e x_{mn}\right)^2$. Зависимость от частоты ω носит резонансный характер, т.е. наиболее вероятен переход под действием волны, когда ее частота ω и частота $\omega_{mn} = \dfrac{E_m - E_n}{\hbar}$ совпадают или близки. Это и есть условие частот Бора.

Так как чисто монохроматической волны практически не существует (исключая лазерное излучение), то полная вероятность определяется интегрированием по всем частотам. В силу острого максимума подынтегральной функции пределы интегрирования можно задать от $-\infty$ до $+\infty$. Интегрирование дает (см. Шпольский "Атомная физика". Т.II. стр.251):

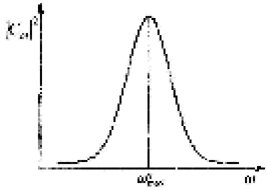

Рис. 19.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|C_m\right|^2 d\omega = \frac{E_0^2 \left(ex_{mn}\right)^2}{2\hbar^2} t ,$$

а в единицу времени вероятность перехода от времени не зависит.

Заметим, что в рамках квантовой механики спонтанное излучение атома не должно происходить, так как в отсутствии внешнего воздействия согласно квантовой механики атом может сколь угодно долго находиться в стационарном состоянии, в состоянии с определенной энергией, когда энергия состояния - интеграл состояния.

Однако опыт говорит о другом. Дело в том, что мы существенно упростили задачу о движении электрона в поле ядра и не учитываем электромагнитное поле, создаваемое движущимся электроном и действующим на него самого. Объяснение спонтанного излучения дается в квантовой электродинамике, мы сможем рассчитать и вероятность спонтанного излучения.

Рассмотрим правила отбора при дипольном излучении.

а). Случай гармонического осцилятора.

Квантовые уровни осцилятора определяются по формуле

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right), \ n=0, 1, 2, \ldots$$

Элементы матрицы электрического момента

$$d_{mn} = ex_{mn}e^{i\omega_{mn}t} = ex_{mn}e^{i\omega_0(m-n)t}, \text{ где } x_{mn} = \int \Psi_m^* x \Psi_n dx .$$

Расчеты матрицы координаты показывают, что они отличны от нуля лишь при $m = n \pm 1$, а соответствующие частоты равны $\omega_{mn} = \omega_0(m-n) = \pm\omega_0$, т.е. осцилятор может поглощать и излучать только электромагнитные волны с собственной частотой ω_0.

б). Оптический электрон атома.

Рассмотрим матрицу электрического момента d_{mn} для электрона, движущегося в поле центральной силы. Волновые функции стационарных состояний имеют вид

$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r) P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}$.

Расчеты дают, что магнитное квантовое число m изменяется по правилу $m' - m = \pm 1$ или 0.

Орбитальное число $l' = l \pm 1$, т.е. между соседними по M^2 состояниями. Квантовое число n изменяется на любое целое число.

Задача №23

Рассмотрим вынужденный переход, когда время перехода Δt *(время изменения поля) мало по сравнению с величиной* $\frac{1}{\omega_{nk}} = \frac{\hbar}{E_n - E_k}$ *, которое следует из соотношения неопределенностей Гейзенберга* $\Delta E \Delta t = \hbar$ *. Данное условие осуществляется при переходе атома трития* H^3 *в основные и возбужденные состояния иона* He^{3+} *при* β *- распаде ядра.*

Запишем условие задачи кратко.

Найти	$a_{1_s 1_s}$
Дано	$H_1^3 \to He_2^3 + \beta^{-1}$

Решение

Выберем СО "Ядро He^3". Время изменения потенциала ядра по порядку величины равно времени пролета β - электрона через атом:

$$\Delta t \cong \frac{a_0}{v} \cong a_0 \sqrt{\frac{2m}{E_\beta}}$$, где a_0 - боровский радиус.

Это время мало по сравнению с характерным - атомным временем $T_a = \frac{\hbar^3}{m^{+1} e^4}$.

Вероятность перехода в 1_s состояние определяется по формуле

$$a_{1_s 1_s} = \int 2\left(\frac{Z_1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Z_1 r}{a_0}\right) \cdot 2\left(\frac{Z_2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Z_2 r}{a_0}\right) \cdot r^2 dr .$$

Тогда $w_{11} = |a_{11}|^2 = \left(\frac{8}{9}\right)^2 \approx 0{,}7$, где Z_1 и Z_2 - начальный и конечный заряды ядра.

Аналогично $w_{1_s 2_s} = 0{,}25$.

Таким образом, при β - распаде ядра атома трития образующийся ион He^{3+} будет с подавляющей вероятностью находиться в основном или в первом возбужденном состояниях.

Задача №24

В начальный момент времени t=0 *система находится в состоянии* $\Psi_1^{(0)}$ *относящемуся к двух кратно выраженному уровню. Найти вероятность перехода системы в другие состояния* $\Psi_2^{(0)}$ *с той же энергией под действием включенного в начальный момент времени постоянного возмущения.*

Прежде чем приступить к решению задачи, рассмотрим некоторые теоретические положения.

Если состояние вырождено, то одному невозмущенному оператору $\hat{H}_0$ соответствует несколько собственных функций $\Psi_n^{(0)}$, соответствующие одному собственному значению. Из функций $\Psi_n^{(0)}$ можно составить линейную комбинацию $C_n^{(0)}\Psi_n^{(0)} + \ldots$, коэффициенты $C_n^{(0)}$ можно определить следующим образом.

Имеем уравнение с точным решением $\hat{H}_0\Psi^{(0)} = E^{(0)}\Psi^{(0)}$. Возмущенное уравнение $\hat{H}\Psi = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\Psi = E\Psi$. Представляя $\Psi = \sum C_m \Psi_m^{(0)}$, получим из предыдущих двух уравнений равенство

$$\sum C_m\left(E_m^{(0)} + \hat{V}\right)\Psi_m^{(0)} = \sum C_m E \Psi_m^{(0)} .$$

Умножая обе стороны равенства на $\Psi_k^{(0)}$ и интегрируя, получим

$$\left(E - E_k^{(0)}\right)C_k = \sum V_{km}C_m .$$

В первом приближении $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$, причем для коэффициентов C_k возьмем нулевое значение $C_n = C_n^{(0)}$ $C_{n'} = C_{n'}^{(0)}$ … $C_m = 0$ при $m \neq n,\ n'$.

Тогда получим $E^{(1)}C_n^{(0)} = \sum V_{nn'}C_{n'}^{(0)}$ или $\sum\limits_{n'}\left(V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}\right)C_{n'}^{(0)} = 0$, где $n,\ n',\ \ldots$ пробегает все значения, нумерующие состояния, относящиеся к данному невозмущенному собственному значению $E_n^{(0)}$. Эта система однородных линейных уравнений для величины $C_n^{(0)}$ имеет отличные от нуля решения при условии обращения в нуль определителя, составленного из коэффициентов при неизвестных.

Таким образом, получаем уравнение

$$\left|V_{nn'} - E^{(1)}\delta_{nn'}\right| = 0 \tag{*}$$

Определим поправки первого приближения к собственному значению и правильные функции нулевого приближения для двукратно вырожденного уровня. Уравнение (*) запишется так

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{**}$$

(индексы 1 и 2 соответствуют двум произвольно выбранным невозмущенным собственным функциям $\Psi_1^{(0)}$ и $\Psi_2^{(0)}$ данного двукратно вырожденного уровня). Решая уравнение (**), находим

$$E^{(1)} = \frac{1}{2}\left[V_{11} + V_{22} \pm \hbar\omega^{(1)}\right], \text{ где } \hbar\omega^{(1)} = \sqrt{\left(V_{11} - V_{22}\right)^2 + 4\left|V_{12}\right|^2}$$

и введено обозначение $\hbar\omega^{(1)}$ для разности двух значений поправок $E^{(1)}$.

Подставляя это значение $E^{(1)}$ в уравнение (*), получим для коэффициентов в нормированных правильных функциях нулевого приближения

$$\Psi^{(0)} = C_1^{(0)}\Psi_1^{(0)} + C_2^{(0)}\Psi_2^{(0)}$$

значения

$$C_1^{(0)} = \left\{ \frac{V_{12}}{2|V_{12}|} \left[1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}} \right] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad C_2^{(0)} = \pm \left\{ \frac{V_{21}}{2|V_{21}|} \left[1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar\omega^{(1)}} \right] \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

Теперь вернемся к исходной задаче.

Запишем условие задачи кратко.

Решение

Найти	w_{12}
Дано	$C_1^{(0)}$
	$C_2^{(0)}$

В силу неопределенности характера системы как физического объекта, выбирать СО не будем.

Составим волновые функции нулевого приближения

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 \text{ и } \Psi' = C_1'\Psi_1 + C_2'\Psi_2,$$

где коэффициенты C_1, C_2, C_1', C_2' (индекс (0) опущен) определяются по найденным выше функциям.

Отсюда $\Psi_1 = \dfrac{C_2'\Psi - C_2\Psi'}{C_1C_2' - C_1'C_2}$.

Функции Ψ и Ψ' относятся к состояниям с возмущенными энергиями $E + E^{(1)}$ и $E + E^{(1)'}$, где $E^{(1)}$ и $E^{(1)'}$ - два значения энергии, найденные выше.

Вводя временные множители, получим

$$\Psi_1 = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}{C_1C_2' - C_1'C_2}\left[C_2'\psi e^{-\frac{i}{\hbar}E^{(1)}t} - C_2\psi' e^{-\frac{i}{\hbar}E^{(1)'}t} \right].$$

В начальный момент времени (t=0)

$$\Psi_1 = \psi_1 = \frac{C_2'\psi - C_2\psi'}{C_1C_2' - C_1'C_2}.$$

Выражая снова Ψ и Ψ' через ψ_1, ψ_2, получим Ψ_1 в виде линейной комбинации от ψ_1, ψ_2 с коэффициентами, зависящими от времени.

$$\Psi_1 = a_1(t)\psi_1 + a_2(t)\psi_2,$$

где $a_2(t) = \dfrac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}{C_1C_2' - C_1'C_2}\left(C_2'C_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1^{(1)}t} - C_2'C_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2^{(1)}t} \right)$.

Подставляя сюда значения коэффициентов и вычисляя $\left|a_2(t)\right|^2$, получим для вероятности перехода выражение

$$w_{12} = 2\frac{\left|V_{12}\right|^2}{\left(\hbar\omega^{(1)}\right)^2}\left[1 - \cos\omega^{(1)}t\right], \text{ где } \omega^{(1)} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\left(V_{11} - V_{22}\right)^2 + 4\left|V_{12}\right|^2}$$

отсюда видно, что вероятность w_{12} периодически меняется со временем с частотой $\omega^{(1)}$.

Задача №25

На заряженный линейный гармонический осцилятор, находящийся в основном состоянии, внезапно накладывается однородное электрическое поле. Определить вероятность перехода осцилятора в возбужденные состояния под влиянием этого возмущения.

Запишем условие задачи кратко.

Найти	ω_{ok}
Дано	$\vec{E}$ $U_0(x) = \dfrac{m\omega^2 x^2}{2}$

Решение

Не уменьшая общности решения, но устраняя поступательное движение выберем СО “Осцилятор”. Потенциальная энергия осцилятора в однородном электрическом поле $\vec{E}$ равна

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} - eEx = \frac{m\omega^2}{2}\left(x - x_0\right)^2 + const \quad ,$$

где $x_0 = \dfrac{eE}{m\omega^2}$.

Поэтому волновая функция возмущенного осцилятора имеет вид

$$\psi_k = \frac{(-1)^k}{\sqrt{2^k k!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \mathbf{h}}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{(\xi-\xi_0)^2}{2}} \frac{d^k}{d\xi^k}\left[e^{-(\xi-\xi_0)^2}\right],$$

где $\xi = x\left(\frac{m\omega}{\mathbf{h}}\right)^{\frac{1}{2}}$, $\xi_0 = \frac{eE}{\left(m\mathbf{h}\omega^3\right)^{\frac{1}{2}}}$.

Вероятность перехода определяется коэффициентами разложения a_k возмущенной функции $\psi_0(x-x_0)$ в ряд по невозмущенным функциям $\psi_k(x)$:

$$a_k = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi_k(x)\psi_0(x-x_0)dx = \frac{(-1)^k}{\sqrt{2^k \pi k!}} = e^{-\frac{\xi_0^2}{2}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{\xi\xi_0} \frac{d^k}{d\xi^k} e^{-\xi^2} d\xi.$$

Входящий в эту формулу интеграл приводится путем k-кратного интегрирования по частям к интегралу Пуассона:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{\xi\xi_0} \frac{d^k}{d\xi^k} e^{-\xi^2} d\xi = (-1)^k \xi_0^k \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{\xi\xi_0} e^{-\xi^2} d\xi = \left(-\xi_0\right)^k \sqrt{\pi} e^{\frac{\xi_0^2}{4}}.$$

Поэтому $a_k = \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} \xi_0^k e^{-\frac{\xi_0^2}{4}}$.

Для вероятности перехода $0 \to k$ получим

$$w_{ok} = |a_k|^2 = \frac{\xi_0^{2k} e^{-\frac{\xi_0^2}{2}}}{2^k k!} \qquad (*)$$

Формула (*) есть не что иное, как распределение Пуассона со средним значением k, равным

$$\bar{k} = \frac{\xi_0^2}{2} = \frac{e^2 E^2}{2m\mathbf{h}\omega^3}.$$

Задача №26.

*Вычислить время жизни τ и ширину энергетического уровня 2*р *атома водорода относительно спонтанного перехода.*

Запишем условие задачи кратко.

Решение

Найти	τ , ΔE
Дано	H $2p$

Выберем СО "Атом", совместив начало координат с ядром атома.

Согласно определению, время жизни атома τ в возбужденном состоянии равно обратной величине вероятности перехода W за единицу времени.

Итак, $\dfrac{1}{\tau} = \dfrac{4\omega^3 e^2}{3\mathbf{h}c^3}\sum_{l=1}^{3}\left(x_l\right)^2_{2p,1s}$, (см. Д.Блохинцев Осн.кв.мех. с.376)

где суммирование ведется по числу l, $\left(x_l\right)^2_{2p,1s}$ - матричные элементы координат $l = 1 \to x$, $l = 2 \to y$, $l = 3 \to z$.

Так как $E_n = -\dfrac{m\ e^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\mathbf{h}^2 n^2}$, то

$$\mathbf{h}\omega = E_{2p} - E_{1s} = \frac{3me^4}{8\mathbf{h}^2\left(4\pi\varepsilon_0\right)^2},\ x_1 = x,\ x_2 = y,\ x_3 = z.$$

Учитывая равновероятность спонтанных переходов из состояний, отличающихся только магнитным квантовым числом m, можно ограничиться вычислением матричных элементов для перехода с $\Delta m = 0$, для которого отличен от нуля только матричный элемент координаты z:

$$\left(z\right)_{2p1s} = \int \psi^*_{210} r\cos\theta\psi_{100}\, r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi\ .$$

Подставляя сюда волновые функции ψ_{210} и ψ_{100}

$$\psi_{210} = \left(32\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta,\quad a_0 = \frac{(4\pi)^2\varepsilon_0\mathbf{h}^2}{me^2}.$$

$$\psi_{100} = \left(\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}},$$

получим:

$$(z)_{2p1s} = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi a_0^4} \int_0^{\infty} e^{-\frac{3r}{2a_0}} r^4 dr \int_0^{\pi} \cos^2\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{2^8 a_0}{3^5\sqrt{2}}.$$

Таким образом, для времени жизни атома в состоянии $2p$ имеем:

$$\tau = \frac{3^{11}}{2^{17}} \frac{4\pi\varepsilon_0 \mathbf{h} c^3}{e^2 a_0^2 \omega^3} = \left(\frac{3}{2}\right)^8 \frac{\mathbf{h}}{mc^2} \left(\frac{c\mathbf{h}}{4\pi\varepsilon_0 e^2}\right)^5 = 1{,}6 \cdot 10^{-9}\, c.$$

Воспользовавшись соотношением неопределенностей Гейзенберга $\Delta E\tau = \mathbf{h}$, определим ширину уровня $2p$:

$$\Delta E = \frac{\mathbf{h}}{\tau} = 0{,}656 \cdot 10^{18}\, \text{эр}г = 0{,}41 \cdot 10^{-6}\, эB.$$