

4. Простейшие случаи движения микроаггисты

Свободное движение аггисты

Гамильтониан содержит только оператор кинетической энергии

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (\text{одномерный случай}), \quad \text{причём } \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0.$$

Разделение переменных: $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot f(t)$

Уравнение Шрёдингера распадается на два уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t) \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = E \varphi(x) & (1) \\ i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E f(t) & (2) \end{cases}$$

Уравнение (1) запишем в виде:

$$\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + k^2 \varphi(x) = 0, \quad \text{где } k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E = \frac{p^2}{\hbar^2}$$

Его решение $\varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

Уравнение (2) имеет решение: $f(t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t} = e^{-i\omega t}$

Решение уравнения Шрёдингера имеет вид:

$$\psi(x, t) = A \underbrace{e^{i(kx - \omega t)}}_{\rightarrow} + B \underbrace{e^{-i(kx + \omega t)}}_{\leftarrow}$$

Это две плоские волны с импульсом $p_x = \hbar k$, движущиеся вдоль оси x в положительном и отрицательном направлениях.

Первая волна: условие постоянства фазы $kx - \omega t = \text{const}$;

$$\frac{\partial}{\partial t}(kx - \omega t) = 0; \quad k \frac{\partial x}{\partial t} = \omega; \quad \text{фазовая скорость } \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\omega}{k} > 0.$$

Вторая волна: $kx + \omega t = \text{const}$; фазовая скорость $\frac{\partial x}{\partial t} = -\frac{\omega}{k} < 0$.

Уравнение (1) имеет решение при любом значении E , т.е. энергия имеет непрерывный спектр значений. Поскольку $[\hat{p}_x, \hat{H}] = 0$, p_x — интеграл движения.

Энергия и импульс имеют общую систему волновых функций и могут одновременно иметь определённые значения, причём $E = \frac{p_x^2}{2\mu}$.

Частица в прямоугольной потенциальной яме (одномерной)

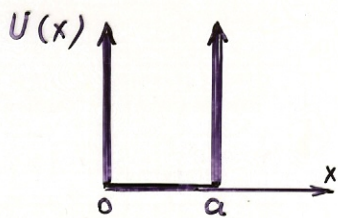
Стационарные состояния частицы, движущейся в потенциальном поле $U(\vec{r})$, находятся в результате решения уравнения Шрёдингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \text{ или } \left\{ \nabla^2 + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\vec{r})] \right\} \psi(\vec{r}) = 0,$$

где E — полная энергия частицы.

Точное аналитическое решение этого уравнения может быть получено только для некоторых видов $U(\vec{r})$, являющихся упрощёнными моделями, но позволяющими понять основные свойства квантовых систем.

Рассмотрим бесконечно глубокую потенциальную яму (или яму с бесконечно высокими стенками):



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

Вероятность нахождения частицы вне интервала $(0, a)$

равна нулю, так что там $\psi(x) = 0$.

В силу непрерывности волновой функции $\psi(0) = \psi(a) = 0$.

Уравнение Шрёдингера внутри ямы, где $U(x) = 0$:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \kappa^2 \psi = 0, \text{ где } \kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Общее решение имеет вид: $\psi(x) = A \sin \kappa x + B \cos \kappa x$

Из граничного условия $\psi(0) = 0$ следует $B = 0$, так что

$$\psi(x) = A \sin \kappa x$$

Из граничного условия $\psi(a) = 0$ следует $\kappa a = n\pi$, где $n = 1, 2, 3, \dots$

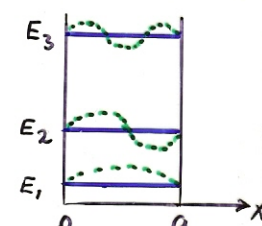
Отсюда $\kappa_n = n \frac{\pi}{a}$, или

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \cdot n^2$$

Заметим, что при $n = 0$ было бы $\psi(x) \equiv 0$.

- Выводы
1. Частица в яме имеет дискретные значения полной энергии, т.е. энергия квантуется
 2. Минимальное значение энергии частицы в яме (основное энергетическое состояние) отлично от нуля: $E_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m a^2}$.
С уменьшением ширины ямы a значение $E_{\min}$ возрастает.
Это проявление принципа неопределённости:
 $\Delta x \sim a$, $\Delta p \sim \frac{\hbar}{a}$, $E_{\min} \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2m a^2}$
 3. Существует бесконечное число стационарных состояний с определёнными значениями энергии (энергетических уровней).

Волновые функции стационарных состояний $\psi(x) = A \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$, так что:



$\psi_3 = A \sin\left(\frac{3\pi}{a} x\right)$
 $\psi_2 = A \sin\left(\frac{2\pi}{a} x\right)$
 $\psi_1 = A \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right)$

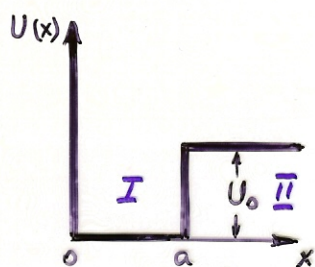
Волновая функция $\psi_n(x)$ имеет $(n-1)$ узлов внутри ямы, не считая границ. В узлах вероятность нахождения частицы равна нулю. Это специфика квантового движения.

Вероятность нахождения частицы в любой точке внутри ямы равна единице.

Отсюда условие нормировки: $1 = \int_0^a \psi^* \psi dx = A^2 \int_0^a \sin^2\left(n \frac{\pi}{a} x\right) dx = A^2 \cdot \frac{a}{2}$,

Итак, $\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)}$ т.е. $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

Рассмотрим потенциальную яму конечной глубины :



$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < x < a \\ \infty & \text{при } x = 0 \\ U_0 & \text{при } a < x < \infty \end{cases}$$

При $x < 0$, $\psi(x) = 0$, поскольку левая стенка бесконечно высокая.

$\psi(0) = 0$ в силу непрерывности волновой функции.

В области I (внутри ямы) уравнение Шредингера :

$$\frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + \kappa_1^2 \psi_1 = 0, \quad \text{где } \kappa_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

В области II (вне ямы) уравнение Шредингера :

$$\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi_2 = 0$$

Рассмотрим случай, когда $E > U_0$: $\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + \kappa_2^2 \psi_2 = 0$, где $\kappa_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)$.

Решение в области I : $\psi_1(x) = A_1 \sin(\kappa_1 x) + B_1 \cos(\kappa_1 x)$

Решение в области II : $\psi_2(x) = A_2 \sin[\kappa_2(x-a)] + B_2 \cos[\kappa_2(x-a)]$

Из граничного условия $\psi_1(0) = 0$ следует $B_1 = 0$.

На границе ямы $x = a$ потребуем непрерывность волновых функций и их первых производных (это обеспечивает существование вторых производных в уравнении Шредингера):

$$\psi_1(a) = \psi_2(a)$$

$$A_1 \sin(\kappa_1 a) = B_2$$

$$\psi_1'(a) = \psi_2'(a), \quad \text{или}$$

$$A_1 \kappa_1 \cos(\kappa_1 a) = A_2 \kappa_2$$

Для нахождения трёх коэффициентов A_1 ; A_2 ; B_2 имеем два уравнения, т.е. один из коэффициентов может быть произвольным.

На величину κ_1 и $E = \frac{\hbar^2}{2m} \kappa_1^2$ никаких условий не накладывается, поэтому частица имеет непрерывный энергетический спектр.

Рассмотрим случай, когда $E < U_0$: $\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} - \nu^2 \psi_2 = 0$, где $\nu^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)$.

Решение в области I: $\psi_1(x) = A_1 \sin(\alpha, x)$

Решение в области II: $\psi_2(x) = C_2 e^{-\nu x} + \cancel{D_2} e^{\nu x}$

Из требования конечности $\psi_2(x)$ при $x \rightarrow \infty$ следует $D_2 = 0$

На границе ямы $x=a$ требуем непрерывность волновых функций и первых производных:

$$A_1 \sin \alpha, a = C_2 e^{-\nu a}$$

$$A_1 \alpha \cos \alpha, a = -C_2 \nu e^{-\nu a}$$

Имеем систему однородных уравнений для нахождения коэффициентов A_1 и C_2 , которая имеет ненулевые решения при равенстве нулю определителя, т.е. при

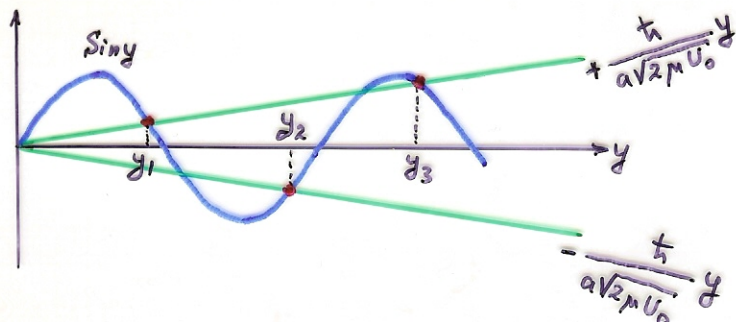
$$\alpha, \operatorname{ctg} \alpha, a = -\nu, \text{ или } \sqrt{2mE} \operatorname{ctg} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = -\sqrt{2m(U_0 - E)}$$

Это условие квантования энергии частицы в потенциальной яме.

Значения энергии стационарных состояний находят в результате решения этого трансцендентного уравнения.

Используем тождество $\sin^2 \alpha \equiv \frac{1}{1 + \operatorname{ctg}^2 \alpha}$. В данном случае $\operatorname{ctg} \alpha, a = -\frac{\nu}{\alpha}$.

Тогда имеем: $\sin \alpha, a = \pm \frac{\hbar}{a\sqrt{2mU_0}} \alpha, a$, или $\sin y = \pm \frac{\hbar}{a\sqrt{2mU_0}} y$,



$$\text{где } y \equiv \alpha, a = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot a$$

Решения уравнения — точки пересечения синусоиды и прямых при условии $\operatorname{ctg} y < 0$: y_1, y_2, y_3 .

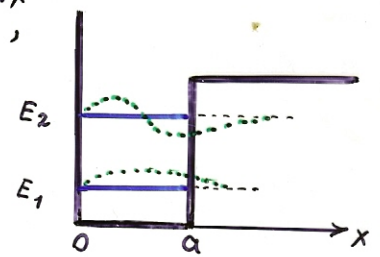
Соответствующие дискретные значения энергии частицы

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot y_n^2$$

- Выводы:
1. В яме конечной глубины, как и в бесконечно глубокой яме, $E_{\min} \neq 0$ (решение $y_0 = 0$ ведёт к $\psi_1(x) \equiv 0$).
 2. Зависимость $E_{\min}$ от ширины ямы в обоих случаях одинаковая: $E_{\min} \sim \frac{1}{a^2}$.
 3. В яме конечной глубины число энергетических уровней конечное; оно зависит от глубины ямы U_0 , уменьшаясь с уменьшением U_0 .
- При достаточно малых U_0 может быть только один уровень с $E_{\min}$ — такая ситуация в ядре тяжёлого водорода (дейтроне), или же вообще отсутствуют уровни энергии.

Волновая функция частицы в потенциальной яме конечной глубины отлична от нуля и в области вне ямы: $\psi_2(x) = C_2 e^{-\gamma x}$, хотя и быстро убывает при $x > a$.

При этом чем выше энергия частицы E_n , тем дальше распространяется волновая функция в область $x > a$.



Это означает, что локализация частицы в яме конечной глубины не является абсолютной даже в случае $E < U_0$. Это сугубо квантовое свойство частицы.

Замечание. В случае $E < U_0$ полная энергия меньше потенциальной, но это не означает, что частица обладает отрицательной кинетической энергией. В квантовой физике полная энергия не является суммой потенциальной и кинетической энергий: их операторы не коммутируют и они не могут одновременно иметь определённые значения.

Другое дело, оператор полной энергии — гамильтониан есть сумма операторов кинетической и потенциальной энергий.

Квантование энергии частицы в потенциальной яме присуще только микрообъектам. Покажем это на примере ямы бесконечной глубины.

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} \cdot n^2; \quad \Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} (2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mu a^2} \cdot n;$$

$$\Delta E_n \sim \frac{1}{n}; \quad \Delta E_n \sim \frac{1}{a^2};$$

Применим это к электрону в атоме: $\mu \sim 10^{-27} \text{ г}$, $a \sim 10^{-8} \text{ см}$

$$\Delta E_n \approx 60 \cdot n \text{ эВ}$$

Применим это к макроскопической частице: $\mu \sim 1 \text{ г}$, $a \sim 1 \text{ см}$

$$\Delta E_n \sim 6 \cdot 10^{-42} \cdot n \text{ эВ}.$$

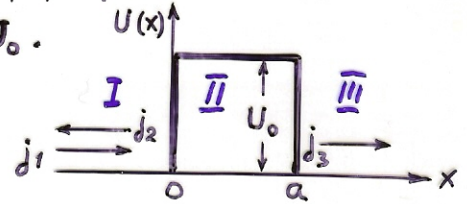
Видно, что в случае макроскопической частицы расхождение между соседними уровнями настолько мало, что спектр энергий фактически непрерывный.

Наконец, отметим, что физической причиной квантования энергии частицы в потенциальной яме служат граничные условия, налагаемые на волновую функцию частицы.

Прохождение микроастиц сквозь потенциальный барьер

Потенциальным барьером называется область пространства, где потенциальная энергия больше, чем в окружающем пространстве.

Рассмотрим одномерный потенциальный барьер прямоугольной формы. К барьеру движется частица с полной энергией $E < U_0$.



Запишем стационарное уравнение Шрёдингера

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \right\} \psi(x) = 0$$

применив к трём областям I, II, III:

область I: $\frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + \kappa^2 \psi_1 = 0$, где $\kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

область II: $\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} - \chi^2 \psi_2 = 0$, где $\chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)$

область III: $\frac{d^2 \psi_3}{dx^2} + \kappa^2 \psi_3 = 0$, где $\kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Решения этих уравнений имеют вид:

$\psi_1(x) = A_1 e^{i\kappa x} + B_1 e^{-i\kappa x}$ — падающая и отражённая волны

$\psi_2(x) = A_2 e^{-\chi x} + B_2 e^{\chi x}$

$\psi_3(x) = A_3 e^{i\kappa(x-a)}$ — прошедшая волна

Определим следующим образом коэффициенты прохождения D и отражения R:

$$D = \frac{|j_3|}{|j_1|}; \quad R = \frac{|j_2|}{|j_1|},$$

где j — плотность тока вероятности, квантовомеханическое выражение для которой нужно получить.

В классической физике уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0 \quad , \text{ где } \rho - \text{плотность объектов внутри замкнутой области,}$$

$$\vec{j} - \text{плотность тока объектов,}$$

$$\operatorname{div} \vec{j} - \text{скалярный поток через замкнутую поверхность.}$$

Уравнение выражает условие сохранения числа объектов, создающих ток.

$$\therefore \text{ Векторный оператор } \vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$$

Дивергенция векторного поля $\vec{A}$:

$$\operatorname{div} \vec{A} = (\vec{\nabla} \vec{A}) = \frac{\partial}{\partial x} A_x + \frac{\partial}{\partial y} A_y + \frac{\partial}{\partial z} A_z$$

Градиент скалярного поля φ :

$$\operatorname{grad} \varphi = \vec{\nabla} \varphi = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} \varphi + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} \varphi + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \varphi \quad \therefore$$

Получим квантовый аналог уравнения непрерывности.

$$\begin{array}{l} \psi^* \left| i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \right. \\ \psi \left| -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H}^* \psi^* \right. \end{array}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r})$$

$$\downarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^* \rightarrow$$

$$\text{Используем тождество: } \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* = \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

$$\text{Тогда } \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \frac{\hbar}{2im} \operatorname{div} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = 0 - \text{квантовое уравнение непрерывности.}$$

$$\text{Здесь } \rho = \psi^* \psi = |\psi|^2 - \text{плотность вероятности}$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) - \text{плотность тока вероятности.}$$

Получим выражения для токов вероятности падающих частиц j_1 , отражённых от потенциального барьера j_2 и прошедших сквозь барьер j_3 .
Падающие частицы: $\psi_1(x) = A_1 e^{ikx}$; $\psi_1^*(x) = A_1^* e^{-ikx}$.

$$j_1 = \frac{\hbar}{2im} (A_1^* e^{-ikx} \cdot A_1 i k e^{ikx} - A_1 e^{ikx} \cdot A_1^* (-ik) e^{-ikx}) = \frac{\hbar}{2im} 2ik |A_1|^2 = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2.$$

Отражённые частицы: $\psi_2(x) = B_1 e^{-ikx}$; $\psi_2^*(x) = B_1^* e^{ikx}$.

$$j_2 = -\frac{\hbar k}{m} |B_1|^2, \text{ где минус соответствует току против оси } x.$$

Прошедшие частицы: $\psi_3(x) = A_3 e^{ik(x-a)}$; $\psi_3^*(x) = A_3^* e^{-ik(x-a)}$.

$$j_3 = \frac{\hbar k}{m} |A_3|^2.$$

Коэффициенты прохождения сквозь барьер и отражения от барьера:

$$D = \frac{|j_3|}{|j_1|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}; \quad R = \frac{|j_2|}{|j_1|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2};$$

Для нахождения коэффициентов A_1 , B_1 , A_3 используем условия непрерывности волновых функций и их производных на границах барьера при $x=0$ и $x=a$:

$$(1) \quad A_1 + B_1 = A_2 + B_2; \quad ik(A_1 - B_1) = \alpha(B_2 - A_2) \quad (3)$$

$$(2) \quad A_2 e^{-\alpha a} + B_2 e^{\alpha a} = A_3; \quad \alpha(B_2 e^{\alpha a} - A_2 e^{-\alpha a}) = ik A_3 \quad (4)$$

Из уравнений (2) и (4) имеем: $A_2 = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k}{\alpha}\right) e^{\alpha a} A_3$

$$B_2 = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k}{\alpha}\right) e^{-\alpha a} A_3$$

$|A_2| \gg |B_2|$, поскольку $|1 - i \frac{k}{\alpha}| = |1 + i \frac{k}{\alpha}|$, так что $B_2 \approx 0$.

Из уравнений (1) и (3) имеем: $A_1 = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{k} \left(\frac{k}{\alpha} + i\right) A_2$

$$B_1 = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{k} \left(\frac{k}{\alpha} - i\right) A_2$$

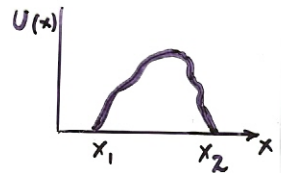
Отсюда $A_1 = \frac{1}{4} \frac{\alpha}{k} \left(\frac{k}{\alpha} + i\right) \left(1 - i \frac{k}{\alpha}\right) e^{\alpha a} A_3$;

Коэффициент прохождения частицы сквозь барьер:

$$D = \frac{16 \left(\frac{\kappa}{\alpha}\right)^2}{\left[1 + \left(\frac{\kappa}{\alpha}\right)^2\right]^2} e^{-2\alpha a} = 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2\mu(U_0 - E)} \cdot a}$$

Для потенциального барьера произвольной формы $U(x)$:

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu(U(x) - E)} dx}, \text{ где } E < U(x)$$



Вероятность проникновения барьера экспоненциально зависит от массы частицы и от ширины барьера.

Вероятность имеет заметную величину при условии

$$\frac{2}{\hbar} \sqrt{2\mu(U_0 - E)} \cdot a \lesssim 1$$

Используем это условие для оценки допустимой ширины барьера a применительно к электрону: $\mu \sim 10^{-27}$, $U_0 - E \sim 1 \text{ эВ} \rightarrow a \lesssim 10^{-8} \text{ см}$, т.е. атомные размеры

В случае макрочастицы с $\mu \sim 1$, $a \sim 1 \text{ см}$ будет $D \approx 0$.

Выводы: 1. Микрочастица имеет конечную вероятность проникновения сквозь потенциальный барьер. Это явление называется туннельным эффектом.

2. Туннельный эффект — строго квантовое явление. Сквозь барьер туннелирует ψ -поле, вероятность нахождения частицы за барьером $|\psi|^2$.

3. В подбарьерной области принципа неопределённости не позволяет описывать движение частицы во времени.

Частица в потенциале линейного (одномерного) гармонического осциллятора

Потенциальная энергия многих физических систем имеет минимум в некоторой точке пространства.

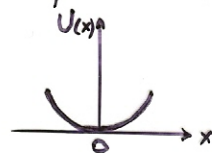
Разложим её в ряд по степеням отклонения от этой точки:

$$U(x) = U(0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)_0 x^2 + \dots$$

Если отсчитывать энергию от значения $U(0)$, то $U(0) = 0$.

Для малых отклонений от положения равновесия можно ограничиться квадратным членом в разложении:

$$U(x) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)_0 x^2 = \frac{1}{2} k x^2, \text{ где } k = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)_0.$$



Это потенциал линейного гармонического осциллятора.

Энергии стационарных состояний частицы в этом потенциале находят в результате решения уравнения Шредингера:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{1}{2} k x^2 \right] \psi = 0, \text{ или } \left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0,$$

$$\text{где обозначено } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Перейдём к безразмерным переменным $\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$; $\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$;

Уравнение будет иметь вид:

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + \epsilon \right] \psi(\xi) = 0$$

Решение ищем в виде:

$$\psi(\xi) = v(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

Для функции $v(\xi)$ имеем уравнение:

$$\frac{d^2 v}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dv}{d\xi} + (\epsilon - 1)v = 0$$

Решение этого уравнения ищем в виде степенного полинома:

$$v(\xi) = \sum_{\beta=0}^{\infty} a_{\beta} \xi^{\beta}$$

При подстановке этого выражения для $v(\xi)$ в уравнение его левая часть будет представлять собой полином вида:

$$(\dots)\xi^0 + (\dots)\xi^1 + (\dots)\xi^2 + (\dots)\xi^3 + \dots = 0$$

Равенство нулю левой части возможно при условии равенства нулю коэффициентов при одинаковых степенях ξ . Отсюда следует рекуррентное соотношение:

$$a_{\beta+2} = \frac{2\beta+1-\epsilon}{(\beta+1)(\beta+2)} a_{\beta},$$

причём a_0 и a_1 играют роль постоянных интегрирования уравнения

В рассматриваемой модельной задаче считаем выражение $U(x) = \frac{1}{2}x^2$ справедливым и для больших значений x . Тогда условие нормировки волновой функции: $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$.

Для существования интеграла, т.е. квадратичной интегрируемости функции $\psi(x)$, функция $v(\xi)$ при $\xi \rightarrow \infty$ должна возрастать не быстрее, чем $e^{\xi^2/2}$: $v(\xi \rightarrow \infty) \leq e^{\xi^2/2}$.

Это возможно лишь при конечном числе слагаемых степенного ряда, т.е. $a_n \neq 0$, но $a_{n+2} = 0$: $a_{n+2} = \frac{2n+1-\epsilon}{(n+1)(n+2)} a_n = 0$

Это условие выполняется при $2n+1-\epsilon=0$, или $\epsilon=2n+1$.

Отсюда следует квантование энергии частицы в потенциале гармонического осциллятора: $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, $n=0; 1; 2; 3; \dots$

Квантование энергии обусловлено требованием квадратичной интегрируемости волновой функции.

Решением уравнения для функции $\psi_n(\xi)$ при $E = 2n + 1$ являются полиномы Эрмита:

$$\psi_n(\xi) = H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}),$$

представляющие собой степенные полиномы:

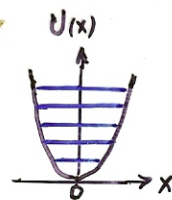
$$H_0(\xi) = 1; H_1(\xi) = 2\xi; H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2; H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \text{ и т. д.}$$

Нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в потенциале гармонического осциллятора имеют вид:

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad n = 0; 1; 2; 3; \dots$$

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Выводы: 1. Энергия частицы имеет дискретные значения, при этом уровни энергии E_n расположены эквидистантно. Квант колебания является величиной $\hbar\omega$. В состоянии ψ_n энергия содержит n квантов.



2. Минимальная энергия частицы – квантового осциллятора $E_{\min} = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ отлична от нуля, т.е. выше минимума $U(0) = 0$. Это является проявлением принципа неопределённости.

„Нулевые колебания“ с энергией $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ испытывают атомы кристаллической решётки при температуре $T = 0 \text{ K}$.

3. Каждому значению энергии частицы E_n соответствует одно состояние $\psi_n(x)$, т.е. собственные состояния частицы в потенциале линейного (одномерного) гармонического осциллятора невырожденные.

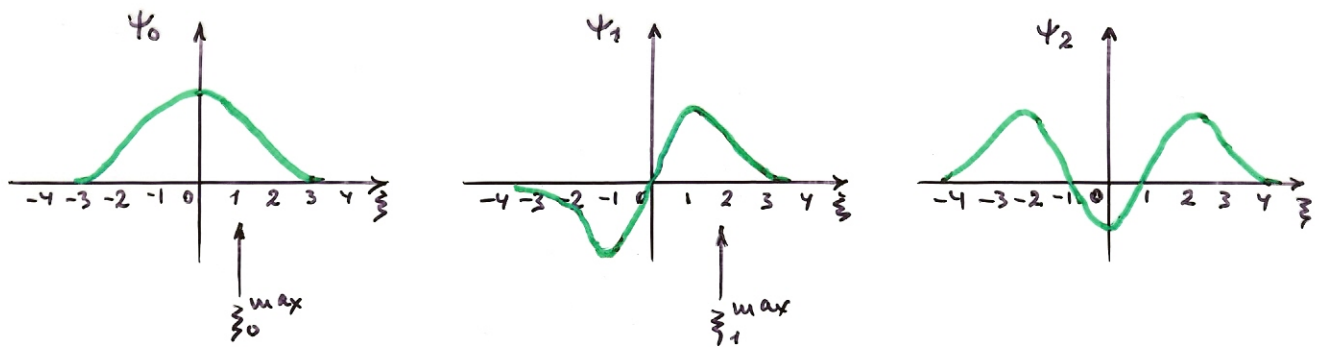
4. Квантовая частица может заходить за „точки поворота“, определяемые условием $U(x_n^{\max}) = E_n$, где движение классической частицы запрещено. Действительно, из условия $\frac{1}{2}k(x_n^{\max})^2 = E_n$ находим $x_n^{\max} = \sqrt{\frac{2E_n}{\mu\omega^2}}$ и $\xi_n^{\max} = x_n^{\max} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \sqrt{2n+1}$.

$$n=0 : \xi_0^{\max}=1; \psi_0(\xi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\xi^2/2}; \psi_0(\xi_0^{\max})=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-1/2}; \psi(2\xi_0^{\max})=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-2}.$$

$$n=1 : \xi_1^{\max}=\sqrt{3}; \psi_1(\xi)=\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}\xi e^{-\xi^2/2}; \psi_1(\xi_1^{\max})=\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{\pi}}e^{-3/2}; \psi(2\xi_1^{\max})=\frac{2\sqrt{6}}{\sqrt{\pi}}e^{-6}.$$

Таким образом, $\psi(\xi > \xi^{\max}) \neq 0$, хотя и быстро убывает при $\xi > \xi^{\max}$.

Волновые функции низших состояний гашеицы в потенунале гармонического осциллятора имеют вид :



Волновая функция $\psi_n(\xi)$ имеет n узлов, т.е. тем выше энергия состояния, тем сильнее осциллирует волновая функция.

В точках, соответствующих узлам волновой функции, вероятность нахождения гашеицы равна нулю.

Движение частицы в поле центральных сил

Стационарные состояние частицы, движущейся в сферически симметричном потенциале $U(\vec{r}) = U(|\vec{r}|) = U(r)$, находятся в результате решения уравнения Шрёдингера:

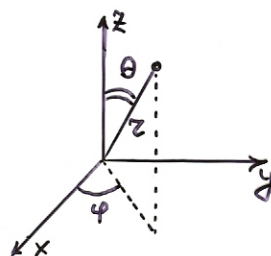
$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi(\vec{r}) = 0$$

Переходим к сферической системе координат:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi ; \quad 0 \leq r < \infty$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi ; \quad 0 \leq \theta \leq \pi$$

$$z = r \cos \theta ; \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$



$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \equiv$$

$$\equiv \frac{1}{r^2} \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta, \varphi}^2 ;$$

Решение ищем в виде произведения радиальной и угловой функций:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$$

После подстановки в уравнение Шрёдингера и последующего деления на $R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$ получаем:

$$\frac{\nabla_r^2 R(r)}{R(r)} + \frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 (E - U(r)) = - \frac{\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y(\theta, \varphi)}{Y(\theta, \varphi)} = \lambda = \text{const.}$$

Тогда имеем $\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0$, или

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \lambda \right] Y(\theta, \varphi) = 0.$$

Сравним это уравнение с уравнением для собственных функций оператора квадрата углового момента L^2 :

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{L^2}{\hbar^2} \right] Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0 ,$$

где $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ - сферические функции, $\ell = 0; 1; 2; 3; \dots$ $m = 0; \pm 1; \pm 2; \dots \pm \ell$

Эти уравнения совпадают при условии $\lambda = \frac{L^2}{\hbar^2}$.

Оператор $\hat{L}^2$ имеет собственные значения $L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)$.

Таким образом, при $\lambda = \ell(\ell+1)$ собственными функциями гамильтониана $\hat{H}$ являются сферические функции $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$.

Выводы: 1. Операторы $\hat{H}$ и $\hat{L}^2$, а также $\hat{L}_z$ имеют общую систему собственных функций, а именно $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$.

2. Отсюда следует, что операторы $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ коммутируют с гамильтонианом $\hat{H}$: $[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0$; $[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$.

3. Это означает, что квадрат углового момента L^2 и проекция углового момента L_z являются интегралами движения.

Заметим, что сохранение проекции момента на любое направление в пространстве естественно вытекает из того, что центральное силовое поле не нарушает изотропию пространства. Поскольку $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$, то L^2 также интеграл движения.

Рассмотрим уравнение для радиальной части волновой функции $R(r)$:

$$\nabla_r^2 R(r) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} r^2 (E - U(r)) - \ell(\ell+1) \right] R(r) = 0, \text{ или}$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) = 0.$$

Введем новую функцию $u(r) = r \cdot R(r)$.

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u(r) = 0.$$

Обозначим $V_\ell(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ - некоторая эффективная потенциальная энергия.

Тогда уравнение принимает вид:

$$\frac{d^2 u(z)}{dz^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V_p(z)] u(z) = 0.$$

Это уравнение по форме совпадает с уравнением Шрёдингера для одномерного движения частицы в потенциале $V_p(z)$ и является уравнением для собственных функций и собственных значений гамильтониана, а E — энергия стационарных состояний.

Физический смысл члена $\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{z^2} = \frac{L^2}{2\mu z^2}$ в выражении для $V_p(z)$ — центробежная потенциальная энергия.

Покажем это на основе принципа соответствия.

В классической механике при $\vec{v} \perp \vec{z}$ угловой момент $L = \mu v z$.

Во вращающейся системе координат центробежная сила $F_z = \frac{\mu v^2}{z} = \frac{L^2}{\mu z^3}$ связана с силовым полем $U_z(z)$ соотношением $F_z = -\frac{\partial U_z(z)}{\partial z}$.

Отсюда центробежная потенциальная энергия $U_z(z) = \frac{L^2}{2\mu z^2}$.

Дискретные значения энергии E и вид функций $u_{El}(z)$ при $l = \text{const}$ зависят от вида потенциальной энергии $U(z)$.

Решение исходного уравнения Шрёдингера:

$$\psi_{Elm}(\vec{r}) = R_{El}(z) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \text{где } R_{El}(z) = \frac{u_{El}(z)}{z}$$

Каждому значению E при $l = \text{const}$ соответствуют $(2l+1)$ собственных функций $\psi_{Elm}(\vec{r})$ с различными значениями квантового числа m .

Это вырождение по проекции углового момента — следствие центральной симметрии силового поля $U(z)$.

Замечание. Векое вырождение квантовой системы связано с какой-либо симметрией этой системы.

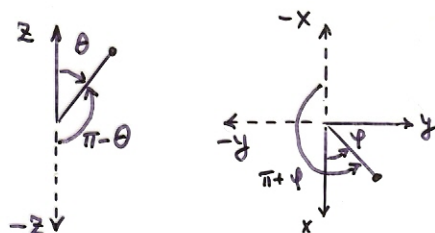
Если поле центральных сил образовано электромагнитным или сильным взаимодействием, гамильтониан системы инвариантен относительно преобразования инверсии $\vec{z} \rightarrow -\vec{z}$.

В сферических координатах:

$$z \rightarrow z$$

$$\theta \rightarrow \pi - \theta$$

$$\varphi \rightarrow \varphi + \pi$$



Для чётных волновых функций $\psi_{\text{ем}}(z, \pi - \theta, \varphi + \pi) = + \psi_{\text{ем}}(z, \theta, \varphi)$

Для нечётных волновых функций $\psi_{\text{ем}}(z, \pi - \theta, \varphi + \pi) = - \psi_{\text{ем}}(z, \theta, \varphi)$

Радиальная часть волновой функции $R(z)$ не меняется при преобразовании инверсии.

Угловая часть — сферические функции меняется следующим образом:

$$Y_{\text{ем}}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{\text{ем}}(\theta, \varphi)$$

Вывод: Волновые функции $\psi_{\text{ем}}(z, \theta, \varphi)$ с чётными значениями квантового числа l описывают чётные состояния, а с нечётными значениями l — нечётные состояния.

Состояниями частицы в центрально симметричном поле соответствуют буквенные обозначения:

$l = 0$	1	2	3	4	5	6
s	p	d	f	g	h	i

Каждое состояние с данным $l = \text{const}$ является совокупностью состояний с различными $m = 0; \pm 1; \pm 2; \pm 3; \dots \pm l$.

— " —
Простейший вид движения частицы в поле центральных сил — движение при $z = a = \text{const}$. Эта система — ротатор.

Уравнение для $u(z)$:
$$\frac{d^2 u(z)}{dz^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - U(z) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{z^2} \right] u(z) = 0$$

существенно упрощается: $u(z=a) = \text{const}; \quad \frac{d^2 u}{dz^2} = 0;$

Положим $U(z=a) = 0$, хотя при этом $\frac{dU}{dz}|_{z=a} \neq 0$, т.е. $F_{\text{ц.с.}} \neq 0$

Отсюда собственные значения энергии ротатора

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \cdot \ell(\ell+1) \quad \ell=0; 1; 2; \dots$$

Собственными функциями ротатора являются сферические функции:

$$\psi(\vec{r}) = Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad \ell=0; 1; 2; \dots$$

$$m=0; \pm 1; \pm 2; \dots \pm \ell.$$

В более общем случае на неизменнои расстоянии от центра движется несколько частиц. Для двух частиц с массами μ_1 и μ_2 имеем:

$$\mu = \frac{\mu_1 \mu_2}{\mu_1 + \mu_2} \text{ - приведённая масса. Энергия ротатора:}$$

$$\mu a^2 = I \text{ - момент инерции.}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2I} \ell(\ell+1)$$

Состояния ротатора $(2\ell+1)$ -кратно вырождены.