

Простейшие задачи квантовой механики

В данной главе рассматриваются простейшие стационарные задачи квантовой механики, допускающие точное аналитическое решение.

2.1. Одномерное движение

Стационарное уравнение Шредингера для одномерного движения частицы с массой m в поле $V(x)$ выглядит следующим образом:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_E(x) + V(x)\Psi_E(x) = E\Psi_E(x).} \quad (2.1)$$

Граничные условия к нему определяются характером движения, постановкой задачи и стандартными условиями.

В случае *инфинитного* движения энергетический спектр непрерывен, так что граничные условия, т. е. $\Psi_E(\pm\infty)$, выбираются конечными, однозначными, непрерывными и учитывающими постановку задачи (например, о прохождении микрочастиц через потенциальный барьер).

В случае *финитного* движения граничные условия берутся нулевыми

$$\boxed{\Psi_E(\pm\infty) = 0,} \quad (2.2)$$

чтобы обеспечить конечное значение нормировочного интеграла. В данном разделе мы будем рассматривать только финитное движение.

Сформулируем общие свойства одномерного финитного движения.

1. *Энергетические уровни не вырождены.* Для доказательства предположим противное, и пусть Ψ_1 и Ψ_2 — две различные (*линейно независимые*) собственные функции, соответствующие одному и тому же значению энергии. Поскольку обе они удовлетворяют одному и тому же уравнению (2.1), то имеем:

$$\frac{\Psi_1''}{\Psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] = \frac{\Psi_2''}{\Psi_2},$$

или $\Psi_1''\Psi_2 - \Psi_1\Psi_2'' = 0$ (штрих означает дифференцирование по x). Интегрируя это соотношение, находим:

$$\Psi_1'\Psi_2 - \Psi_1\Psi_2' = \text{const.} \quad (2.3)$$

Поскольку в соответствии с (2.2) $\Psi_1(\pm\infty) = \Psi_2(\pm\infty) = 0$, то константа в (2.3) должна тоже быть равной нулю, так что $\Psi'_1/\Psi_1 = \Psi'_2/\Psi_2$. Интегрируя еще раз, получим $\Psi_1 = \text{const} \cdot \Psi_2$, т. е. *линейную зависимость* функций Ψ_1 и Ψ_2 . А это противоречит исходному предположению, т. е. Ψ_1 и Ψ_2 задают *одно и то же* состояние.

2. *Волновые функции стационарных состояний вещественны.* Для координатных частей волновых функций всегда можно выбрать постоянный фазовый множитель так, чтобы их мнимые части обратились в нуль. Доказательство данного утверждения также проводится от противного. Предположим, что функция $\Psi_E(x)$ остается комплексной при любом выборе нормировочной константы. Тогда, вследствие вещественности $V(x)$ и E , ее вещественная и мнимая части тоже будут *линейно независимыми* собственными функциями, соответствующими *одному и тому же* значению энергии E . Но это означает *вырождение* энергетического уровня E , что *противоречит* ранее доказанному утверждению. На основании (1.93) можно заключить, что *при одномерном движении в связанных стационарных состояниях токи отсутствуют*.

3. *Выполняется осцилляционная теорема.* Если основное состояние нумеровать нулем, первое возбужденное — единицей и т.д., то внутри области движения частицы (за исключением границ) ее координатная волновая функция, соответствующая n -му возбужденному состоянию, обратится в нуль ровно n раз. Данное нетривиальное свойство доказывается в курсе функционального анализа.

4. *При симметричной (относительно $x = 0$) потенциальной энергии, $V(x) = V(-x)$, все волновые функции стационарных состояний являются либо четными ($\Psi_E(-x) = \Psi_E(x)$), либо нечетными ($\Psi_E(-x) = -\Psi_E(x)$).* Действительно, в силу симметрии гамильтониана, если $\Psi_E(x)$ есть решение, то таковым является и $\Psi_E(-x)$, а вследствие невырожденности спектра они могут отличаться лишь на численный фактор: $\Psi_E(-x) = c\Psi_E(x)$. Меняя в этом соотношении еще раз знак x у $\Psi_E(x)$ ($\Psi_E(x) = c\Psi_E(-x)$), получаем $c^2 = 1$, откуда $c = \pm 1$, что и доказывает сделанное утверждение.

К таким же *одномерным* уравнениям (2.1) приводится, очевидно, задача о *трехмерном* движении в поле с потенциальной энергией $V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$, разбивающейся на сумму функций, каждая из которых зависит только от одной из координат.

Задачи о частице в прямоугольной потенциальной яме (пример *финитного* движения) и о прохождении частиц через потенциальный барьер (пример *инфинитного* движения), имеющие точное аналитическое решение, разобраны в практическом курсе [3], ч. 2.