

Одномерные задачи

1.1. Общие принципы решения одномерных задач

Энергии стационарных состояний частицы массы m , совершающей одномерное движение в поле $V(x)$, и соответствующие им волновые функции находятся из решения одномерного стационарного уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (1.1)$$

Граничные условия к нему вытекают из стандартных условий [требование конечности, однозначности и непрерывности волновой функции $\Psi(x)$], а также определяются характером движения. В частности, в случае финитного движения граничные условия необходимо выбирать нулевыми. Напомним, что в стационарных состояниях зависимость волновых функций от времени дается множителем $\exp[-iEt/\hbar]$. В настоящем пособии будут исследоваться основные аспекты аналитического решения уравнения (1.1).

Вначале рассмотрим движение в кусочно-непрерывном потенциале (рис. 1.1) и исследуем поведение волновой функции в точках его разрыва.

Пример 1.1. Потенциальная энергия имеет конечный разрыв в точке $x = a$ (рис. 1.1а). Исследовать волновую функцию в этой точке.

Решение. Непрерывность волновой функции в точке $x = a$ будет обеспечена в силу фундаментальности стандартных условий.

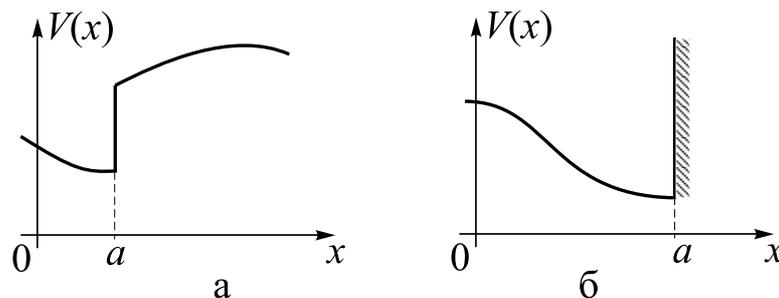


Рис. 1.1.

Для исследования производной проинтегрируем уравнение Шредингера (1.1) в пределах от $a - 0$ до $a + 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi'(a + 0) - \Psi'(a - 0)] = 0.$$

Таким образом, при наличии конечного разрыва потенциальной энергии волновая функция в точке разрыва будет оставаться непрерывной вместе со своей первой производной:

$$\boxed{\Psi(a - 0) = \Psi(a + 0); \quad \Psi'(a - 0) = \Psi'(a + 0).} \quad (1.2)$$

Под $\Psi(a \pm 0)$ здесь следует понимать значение функции справа (слева) от точки $x = a$ в непосредственной близости от нее. Соотношения (1.2) называются также правилом «сшивания» волновой функции в точке разрыва потенциала.

Соотношения (1.2) можно сформулировать иначе:

$$\boxed{\left. \frac{\Psi'(x)}{\Psi(x)} \right|_{a-0} = \left. \frac{\Psi'(x)}{\Psi(x)} \right|_{a+0}, \quad \text{или} \quad \left. \frac{d}{dx} \ln \Psi(x) \right|_{a-0} = \left. \frac{d}{dx} \ln \Psi(x) \right|_{a+0},} \quad (1.3)$$

т. е. в точке конечного разрыва потенциала логарифмическая производная волновой функции будет непрерывна. Условия (1.2) и (1.3) эквивалентны. \square

Если в точке $x = a$ имеется бесконечно высокая потенциальная стенка (рис. 1.1б), то в соответствии с уравнением Шредингера (1.1) справа от стенки волновая функция тождественно обращается в нуль, т.е. в эту область частица не проникает. В соответствии с условием непрерывности при $x = a$ волновая функция должна обратиться в нуль:

$$\boxed{\Psi(a - 0) = \Psi(a) = 0; \quad \Psi(x > a) \equiv 0.} \quad (1.4)$$

В этом случае на производную функции в точке $x = a$ каких-либо ограничений не накладывается.

В заключение перечислим без доказательства специфические свойства одномерного финитного движения, которые устанавливаются в теории функционального анализа:

- 1) все энергетические уровни будут невырожденными;
- 2) волновые функции стационарных состояний можно выбрать вещественными ¹;

¹ Другими словами, их фазы не зависят от координат.

3) если основное состояние нумеровать индексом «0», первое возбужденное — «1» и т.д., то в области локализации частицы, исключая ее границы, волновая функция n -го возбужденного состояния ровно n раз обращается в нуль, причем все нули будут невырожденными².

1.2. Прямоугольная потенциальная яма

Прямоугольная потенциальная яма является частным случаем рассмотренной выше кусочно-непрерывной потенциальной энергии. Поэтому при решении задач мы будем пользоваться результатами предыдущего пункта.

Пример 1.2. Частица массы m находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме ширины a (рис. 1.2). Найти энергии стационарных состояний частицы и соответствующие им волновые функции.

Решение. Примем дно ямы за нулевой уровень отсчета энергии, а левый угол — за начало координат.

Допустимые энергии будут неотрицательными, а движение — всегда финитным. Поэтому необходимо решить уравнение Шредингера (1.1) с потенциалом

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a; \\ +\infty, & x \leq 0, x \geq a \end{cases} \quad (1.6)$$

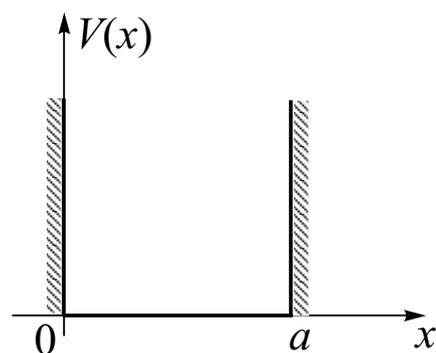


Рис. 1.2.

² Данное свойство называется *осцилляционной теоремой*.

и нулевыми граничными условиями *на бесконечности*. Потенциал (1.6) является кусочно-непрерывным с бесконечно высокими стенками. Поэтому в соответствии с (1.4) вне ямы волновая функция обратится в тождественный нуль и примет нулевые значения на границах ямы, что полностью согласуется с граничными условиями. Теперь уравнение (1.6) упрощается и записывается на промежутке от 0 до a в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) = E\Psi(x) \quad (1.7)$$

и нулевыми условиями *на границах промежутка*:

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0. \quad (1.8)$$

В соответствии со свойствами одномерного финитного движения общее решение линейного однородного дифференциального уравнения удобно представить в вещественной форме:

$$\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad (1.9)$$

где

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad (1.10)$$

A и B — подлежащие определению константы. Постоянная k также подлежит определению, поскольку выражается через неизвестные значения энергии. Число неизвестных на единицу превышает число граничных условий (1.8). В этом нет никакого противоречия, поскольку решение уравнения (1.7) определяется с точностью до *ненулевого постоянного множителя* (нормировочной константы).

Для выполнения первого граничного условия (1.8) в точке $x = 0$ необходимо положить $B = 0$, и тогда A следует считать нормировочной константой. Значения k , а следовательно, и энергии E , определяются вторым граничным условием (1.8) в точке $x = a$, т.е. из уравнения

$$\sin ka = 0.$$

Данное уравнение удовлетворяется при следующих *дискретных* значениях k :

$$k_n = \pi n/a, \quad n = 0, \pm 1, \dots \quad (1.11)$$

Таким образом, в соответствии с (1.9)–(1.11) мы получаем следующие выражения для энергий и волновых функций:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 0, \pm 1, \dots; \quad (1.12)$$

$$\Psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}. \quad (1.13)$$

Вид функции (1.13) подтверждает правильность выбора решения в *вещественной* форме (1.9).

Устраним теперь «посторонние» значения n . Прежде всего заметим, что при $n = 0$ функция (1.13) обращается в тождественный нуль, т.е. получено не представляющее физического интереса тривиальное решение уравнения Шредингера. Поэтому *значение $n = 0$ необходимо исключить из рассмотрения.*

Далее, при замене ненулевого $n \rightarrow -n$ значения энергии (1.12) остаются прежними, а волновые функции (1.13) вследствие нечетности синуса меняют знак, т.е. умножаются на константу -1 . Это означает физическую эквивалентность $\Psi_n(x)$ и $\Psi_{-n}(x)$. Поэтому *отрицательные значения n также необходимо исключить из рассмотрения,* так что кажущееся вырождение энергетических уровней по знаку n на самом деле отсутствует.

Нормировочная константа A для частного случая $n = 1$ вычислена в примере 1.1 части 1. Предлагаем самостоятельно обобщить результат на случай $n > 1$. Приведем окончательный ответ:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots; \quad (1.14)$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi nx}{a}. \quad (1.15)$$

Кратко проанализируем решение.

Одномерная бесконечно глубокая потенциальная яма содержит бесконечное число уровней энергии. Энергии стационарных состояний сверху не ограничены и однозначно определяются квантовым числом n . Расстояние между соседними уровнями линейно возрастает с увеличением квантового числа.

Основному состоянию соответствует $n = 1$. Оно имеет *ненулевую энергию* $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$, т.е. лежит выше «дна» потенциальной ямы. Данный факт согласуется с принципом неопределенности: разброс значений координаты ограничен конечными размерами ямы, так что импульс просто *обязан* иметь ненулевой разброс значений вследствие конечности правой части неравенства

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (1.16)$$

(см. также следующий пример).

Для проверки осцилляционной теоремы решения (1.14), (1.15) необходимо перенумеровать так, чтобы основному состоянию соответствовало $n = 0$. Для этого сделаем замену $n \rightarrow n + 1$:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n + 1)^2, \quad n = 0, 1, \dots; \quad (1.17)$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} (n + 1).$$

Предлагаем теперь самостоятельно проверить осцилляционную теорему, а также свойства ортогональности и полноты функций (1.15). \square

Пример 1.3. *В условиях предыдущей задачи в стационарных состояниях найти средние значения координаты и импульса и их среднеквадратичные отклонения. Проверить соотношение неопределенностей для координаты и импульса в стационарных состояниях.*

Решение. Задачу решаем по аналогии с примером 3.3 Части 1, только в качестве волновых функций используем (1.15), а интегрирование проводим на промежутке от 0 до a . Интегрировать здесь удобно по безразмерной переменной $\xi = x/a$. Все выкладки рекомендуем сделать самостоятельно, а здесь приведем лишь конечный результат:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{a}{2}; & \langle (\Delta x)^2 \rangle &= \frac{a^2}{2} \left[\frac{1}{6} - \frac{1}{\pi^2 n^2} \right]; \\ \langle p \rangle &= 0; & \langle (\Delta p)^2 \rangle &= \left(\frac{\pi \hbar n}{a} \right)^2, \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

На основании полученных результатов проверим соотношение неопределенностей (1.16) в стационарных состояниях (1.15):

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2 \right).$$

Легко видеть, что множитель в скобках в правой части будет больше единицы при всех допустимых значениях n . \square

Пример 1.4. *Частица массы m находится в прямоугольной потенциальной яме, которая ограничена слева бесконечно высокой потенциальной стенкой, а справа — ступенькой конечной высоты V_0 (рис. 1.3а). Найти энергии связанных стационарных состояний частицы.*

Решение. В точке $x = a$ потенциальная энергия претерпевает конечный разрыв, поэтому уравнение Шредингера (1.1) нужно решать в двух соседних областях: I ($0 \leq x \leq a$) и II ($x > a$).

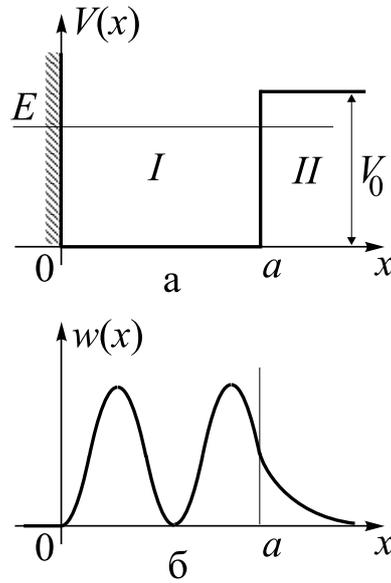


Рис. 1.3.

В области I задача полностью эквивалентна той, что разобрана в примере 1.2, поэтому можно сразу выписать ее решение с требуемым условием в нуле:

$$\Psi_I(x) = A \sin kx, \quad (1.18)$$

где A — произвольная ненулевая константа, а волновое число k связано с энергией соотношением (1.10).

Финитное движение возможно только при условии

$$E < V_0, \quad (1.19)$$

что необходимо учитывать при решении уравнения Шредингера в области II :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_{II}''(x) + V_0 \Psi_{II}(x) = E \Psi_{II}(x). \quad (1.20)$$

Нетрудно убедиться, что уравнению (1.20) удовлетворяет следующая функция, обращающаяся в нуль при $x \rightarrow +\infty$:

$$\Psi_{II}(x) = B e^{-\varkappa x}, \quad (1.21)$$

где

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \stackrel{(1.10)}{=} \sqrt{K_0^2 - k^2}, \quad (1.22)$$

$$K_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar, \quad (1.23)$$

B — произвольная ненулевая константа.

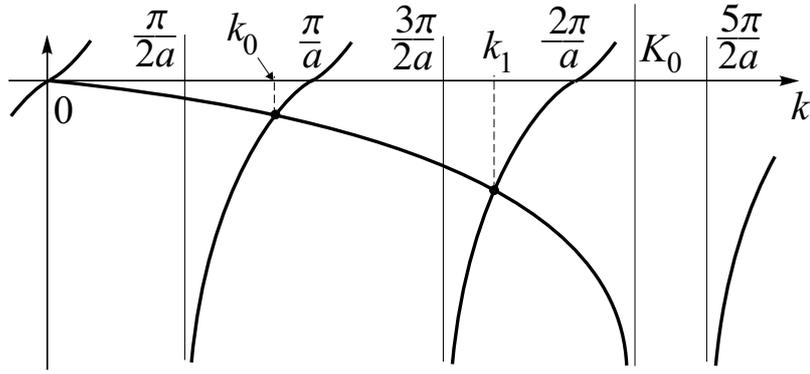


Рис. 1.4.

Решения (1.18) и (1.21) необходимо «сшить» в точке конечного разрыва потенциала $x = a$ в соответствии с (1.3), полагая $\Psi(a-0) = \Psi_I(a)$, $\Psi(a+0) = \Psi_{II}(a)$ и т.д. В итоге получаем следующее трансцендентное уравнение для k , а значит, и для E :

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\sqrt{K_0^2 - k^2}}. \quad (1.24)$$

При произвольном значении параметра K_0 оно не имеет ненулевого аналитического решения. Для энергетического спектра теперь имеем формулу:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (1.25)$$

где k_n — положительные (почему?) корни уравнения (1.24). Энергетические уровни нумеруются здесь в соответствии с осцилляционной теоремой.

Для анализа результата воспользуемся графическим методом решения уравнения (1.24) (см. рис. 1.4). График его левой части является тангенсоидой. Абсциссы точек ее пересечения с графиком правой части являются корнями (1.24). График правой части имеет вертикальную асимптоту при $k = K_0$, поэтому *число связанных состояний в яме конечной глубины ограничено*. На рис. 1.4 представлен случай с двумя связанными состояниями — основным и первым возбужденным. Можно показать, что для появления в яме последовательности уровней E_0, \dots, E_n параметр K_0 должен удовлетворять условию

$$K_0 > (2n + 1) \frac{\pi}{2a}. \quad (1.26)$$

При $2K_0a < \pi$ *связанные состояния частицы в яме вообще отсутствуют*. При условии же $K_0a \gg 1$ (т.е. при $V_0 \rightarrow \infty$) правая часть

уравнения (1.24) стремится к нулю, а энергетический спектр становится таким же, как и в случае бесконечно глубокой потенциальной ямы, т.е. переходит в (1.17). Таким образом, в соответствии с (1.23), (1.25) энергетический спектр частицы полностью определяется ее массой, а также произведением параметров $a^2 m V_0$.

Уравнение (1.24), возможно, не слишком удобно для численного решения, так как требует поиска нескольких его корней. Его, однако, методами элементарной тригонометрии можно преобразовать к эквивалентному более удобному виду, учитывающему многозначность обратных тригонометрических функций:

$$ka = \pi(n + 1) - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}. \quad (1.27)$$

Зависящее от параметра $n = 0, 1, \dots$ уравнение (1.27) имеет *не более одного положительного корня для каждого n* и легко решается численно.

Обратим внимание читателя на еще одну особенность движения в микромире. В данной задаче область $x > a$ является *классически недоступной*, так как в ней $E < V(x)$. Тем не менее в соответствии с (1.21) в этой области *волновая функция не обращается в нуль тождественно!* Это означает *проникновение частицы в классически недоступную область*. График распределения частицы в случае первого возбужденного состояния дается на рис. 1.3б. Плотность вероятности обнаружения частицы экспоненциально затухает при углублении в классически недоступную область ($\sim e^{-2\kappa x}$). Эффективная глубина ее проникновения $d \sim (2\kappa)^{-1}$ определяется высотой «ступеньки» V_0 и энергией частицы E . Прямое экспериментальное подтверждение данного факта невозможно по причине макроскопичности измерительных приборов. *Наличие* частицы можно зафиксировать, приведя ее в состояние с определенным импульсом. Функция (1.21) не соответствует такому состоянию. Косвенным же подтверждением проникновения микрочастицы в классически недоступную область является туннельный эффект (см. ниже). В случае бесконечно высокой «ступеньки» ($V_0 \rightarrow \infty$) частица «выталкивается» из классически недоступной области ($D \rightarrow 0$) и мы приходим к задаче примера 1.2. \square

1.3. Прохождение через потенциальный барьер

В данном разделе мы исследуем некоторые аспекты *инфинитного движения*, а именно преодоление частицей потенциального барьера.

Пусть поле $V(x)$ таково, что потенциальная кривая, изображенная на рис. 1.5, имеет в ограниченной области «горб», а в асимптотике ($x \rightarrow \pm\infty$) выходит на плато, т.е. движение частиц становится свободным. Такой «горб» принято называть *потенциальным барьером*.

Поставим задачу исследования процесса преодоления барьера частицей массой m , движущейся с полной энергией E . Последовательное рассмотрение требует моделирования частицы волновым пакетом и решения соответствующей нестационарной задачи (см. пример 4.8 части 1).

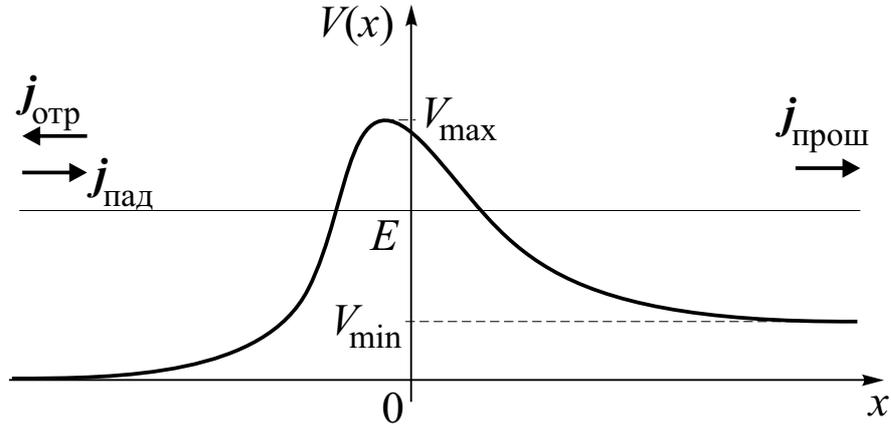


Рис. 1.5.

Более простой, однако, представляется *стационарная* задача о рассеянии барьером *установившегося* потока частиц. После преодоления барьера поток разбивается на прошедший и отраженный. Данный процесс удобно характеризовать следующими наблюдаемыми величинами: *коэффициентом отражения*, представляющего собой отношение плотности потока отраженных частиц к плотности потока падающих частиц

$$R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}}\Big|_{x \rightarrow -\infty}, \quad \text{где } j_{\text{отр}} = |j_{\text{отр}}|; \quad j_{\text{пад}} = |j_{\text{пад}}| \quad (1.28)$$

и *коэффициентом прохождения*, представляющего собой отношение плотности потока прошедших частиц к плотности потока падающих частиц

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}}\Big|_{x \rightarrow -\infty}, \quad \text{где } j_{\text{прош}} = |j_{\text{прош}}|. \quad (1.29)$$

Плотности потока предполагаются взятыми на асимптотически удаленных расстояниях в области выхода потенциалов на плато.

Для вычисления плотностей потока необходимо знать волновую функцию рассеиваемой на барьере частицы. Согласно условию задачи, в области $x \rightarrow +\infty$ имеются *только прошедшие* через барьер частицы (с положительным импульсом). Поэтому асимптотический вид волновой функции при $x \rightarrow +\infty$ представляет собой плоскую волну:

$$\Psi(x)|_{x \rightarrow +\infty} = e^{ik'x}, \quad (1.30)$$

где

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_{\text{min}})}}{\hbar}. \quad (1.31)$$

Функция (1.31) нормирована на совпадение плотности потока прошедших частиц с классической скоростью (см. пример 4.3 части 1):

$$j_{\text{прош}}|_{x \rightarrow +\infty} = \frac{\hbar k'}{m}. \quad (1.32)$$

В задаче о рассеянии частиц на потенциальном барьере в качестве граничного условия к уравнению Шредингера (1.1) необходимо использовать асимптотический вид³ волновой функции (1.30).

В области $x \rightarrow -\infty$ имеются как падающие, так и отраженные частицы. Согласно примеру 4.4 части 1, одномерное свободное движение будет двукратно вырождено по знаку проекции импульса. Поэтому асимптотический вид решения уравнения Шредингера в этой области представляется следующим образом:

$$\Psi(x)|_{x \rightarrow -\infty} = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (1.33)$$

где волновое число k определено в (1.10). Первое слагаемое в (1.33) соответствует потоку падающих частиц, второе — потоку отраженных частиц. Плотности потоков вычисляются опять же в соответствии с формулой примера 4.8 части 1:

$$j_{\text{пад}}|_{x \rightarrow -\infty} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2; \quad j_{\text{отр}}|_{x \rightarrow -\infty} = \frac{\hbar k}{m} |B|^2. \quad (1.34)$$

Зная константы A и B , легко вычислить коэффициенты отражения и прохождения по формулам (1.28), (1.29), (1.32) и (1.34):

$$\boxed{R = \frac{|B|^2}{|A|^2}; \quad D = \frac{k'}{k} |A|^{-2}.} \quad (1.35)$$

Пример 1.5. Доказать, что в ситуации с установившимся потоком

$$\boxed{R + D = 1.} \quad (1.36)$$

Решение. В стационарных состояниях плотность вероятности не зависит от времени. Поэтому, в соответствии с уравнением непрерывности, плотность потока вероятности не меняется на всем протяжении оси Ox :

$$j_x(x, t) = j = \text{const}. \quad (1.37)$$

³ Строго говоря, в (1.30) должен стоять произвольный постоянный множитель, который сократится при вычислении R и D по формулам (1.28) и (1.29) в силу линейности и однородности уравнения Шредингера.

Предлагаем на основании (1.33) самостоятельно убедиться в том, что в области $x \rightarrow -\infty$ падающий и отраженный потоки *не интерферируют*, т.е.

$$j_x|_{x \rightarrow -\infty} = (j_{\text{пад},x} + j_{\text{отр},x})|_{x \rightarrow -\infty} = (j_{\text{пад}} - j_{\text{отр}})|_{x \rightarrow -\infty}. \quad (1.38)$$

В области $x \rightarrow +\infty$ поток является целиком прошедшим:

$$j_x|_{x \rightarrow +\infty} = j_{\text{прош}}|_{x \rightarrow +\infty} \quad (1.39)$$

Из общих формул (1.28), (1.29) на основании (1.37)–(1.39) получаем фундаментальное соотношение (1.36), выражающее закон сохранения вещества при рассеянии частиц на барьере. \square

Рассеяние микрочастиц на потенциальном барьере существенно отличается от аналогичного макроскопического процесса.

Рассмотрим, во-первых, случай $V_{\min} < E < V_{\max}$. В макромире *все без исключения* частицы упруго отражались бы от барьера, т.е. $R = 1$. В микромире частицы могут с ненулевой вероятностью проникать в классически недоступную подбарьерную область (см. замечание в конце предыдущего пункта). Если барьер не слишком широк (порядка де-Бройлевской длины), то частицы будут обнаруживаться с ненулевой вероятностью и на противоположной стороне барьера, т.е. $D \neq 0$. Частицы как бы «просачиваются» сквозь барьер, или туннелируют. Такое прохождение частиц сквозь потенциальный барьер, запрещенное классической механикой, называется *туннельным эффектом*. Данный эффект имеет чисто квантовую природу. Сам *процесс* прохождения сквозь барьер принципиально не может быть изучен экспериментально, т.к. в области барьера импульс не имеет определенного значения и не измеряется классическими приборами. Экспериментально фиксируется лишь сам *факт* прохождения электрона сквозь барьер. Туннельный эффект используется в электронике (туннельные диоды), при вырывании электронов с поверхности проводника внешним электрически полем (холодная эмиссия); в теории Гамова вероятность α -распада вычисляется в предположении о туннельном механизме выхода α -частицы из ядра; сильное постоянное или низкочастотное электрическое поле приводит к *туннельной ионизации* атомов.

Рассмотрим теперь случай $E > V_{\max}$. В макромире *все без исключения* частицы продолжили бы свое движение в положительном направлении оси Ox , изменив разве что свой импульс, т.е. $D = 1$. В микромире несохранение импульса во внешнем силовом поле приводит к тому, что в области барьера появляются состояния со всевозможными значениями импульса, в том числе и с *другим его знаком*. Потоки с одинаковыми сонаправленными импульсами интерферируют друг с

другом, что в конечном итоге приводит к появлению наблюдаемых отраженных частиц, т.е. $R > 0$. Такой классически запрещенный эффект называется *надбарьерным отражением*. Для появления надбарьерного эффекта существенен не столько барьер, сколько наличие силового поля в ограниченной области пространства. Поэтому *отражать может не только барьер, но и яма*.

Таким образом, рассеяние микрочастиц на потенциальном барьере имеет скорее оптическую аналогию, чем классическую механическую. Потенциальный барьер можно уподобить среде с переменным показателем преломления.

Пример 1.6. *Показать, что если частицы налетают на барьер (рис. 1.5) из области $x \rightarrow +\infty$, то при неизменных остальных условиях коэффициенты отражения и прохождения остаются прежними.*

Решение. В общем случае произвольного стационарного состояния асимптотический вид волновой функции представляет собой суперпозицию двух плоских волн, распространяющихся в обе стороны оси Ox :

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= A_- e^{ikx} + B_- e^{-ikx} \quad \text{при } x \rightarrow -\infty; \\ \Psi(x) &= A_+ e^{ik'x} + B_+ e^{-ik'x} \quad \text{при } x \rightarrow +\infty.\end{aligned}\tag{1.40}$$

Поскольку эти выражения представляют собой асимптотические формы одного и того же решения линейного дифференциального уравнения, между коэффициентами A_- , B_- и A_+ , B_+ существует линейная связь. Пусть $A_+ = \alpha A_- + \beta B_-$, где α , β — постоянные (вообще говоря, комплексные), зависящие от конкретного поля $V(x)$. Аналогичное соотношение для B_+ можно тогда написать на основании соображений, связанных с вещественностью стационарного уравнения Шредингера (1.1): если $\Psi(x)$ есть решение данного уравнения Шредингера, то и $\Psi^*(x)$ есть решение того же уравнения. Асимптотические виды

$$\begin{aligned}\Psi^*(x) &= A_-^* e^{-ikx} + B_-^* e^{ikx} \quad \text{при } x \rightarrow -\infty; \\ \Psi^*(x) &= A_+^* e^{-ik'x} + B_+^* e^{ik'x} \quad \text{при } x \rightarrow +\infty\end{aligned}$$

отличаются от (1.40) лишь обозначением постоянных коэффициентов; поэтому имеем $B_+^* = \alpha B_-^* + \beta A_-^*$, или $B_+ = \alpha^* B_- + \beta^* A_-$. Таким образом, коэффициенты в (1.40) связаны друг с другом соотношениями вида

$$A_+ = \alpha A_- + \beta B_-; \quad B_+ = \beta^* A_- + \alpha^* B_-.\tag{1.41}$$

Для частиц, налетающих на барьер в положительном направлении (рис. 1.5), в функциях (1.40) следует положить $B_+ = 0$; при этом

$B_-/A_- = -\beta^*/\alpha^*$. Во противоположном случае полагаем $A_- = 0$, тогда $A_+/B_+ = \beta/\alpha^*$. Для коэффициентов отражения в соответствии с (1.35) имеем:

$$R_1 = \left| \frac{B_-}{A_-} \right|^2 = \left| \frac{\beta^*}{\alpha^*} \right|^2, \quad R_2 = \left| \frac{A_+}{B_+} \right|^2 = \left| \frac{\beta}{\alpha^*} \right|^2,$$

откуда ясно, что

$$\boxed{R_1 = R_2.} \quad (1.42)$$

Для коэффициентов прохождения в силу (1.36) получаем аналогичное соотношение. \square

Соотношения (1.36), (1.42) выражают модельно-независимые свойства рассеяния на потенциальном барьере.

Рассмотрим теперь отражение на потенциальном барьере заданной формы $V(x)$ и вычислим коэффициенты отражения и прохождения как функции энергии частицы, имеющей массу m .

Пример 1.7. *Определить коэффициент отражения частицы от прямоугольной потенциальной ступеньки высоты V_0 (рис. 1.6) в зависимости от энергии частицы E (частицы движутся слева направо).*

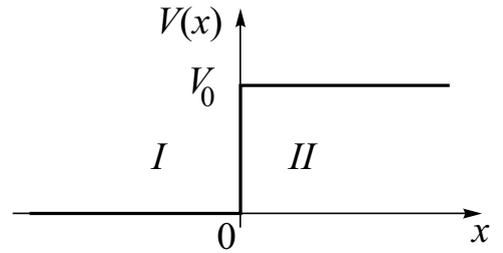


Рис. 1.6.

Решение. Введем систему координат в соответствии с рис. 1.6. Потенциальная кривая является кусочно-непрерывной с конечным разрывом в нуле. Поэтому уравнение Шредингера необходимо решить отдельно для каждой из областей I и II , а затем сшить эти решения в точке разрыва $x = 0$ в соответствии с (1.2).

В области I присутствуют как падающая, так и отраженная волны. Поэтому решение $\Psi_I(x)$ выбираем в виде (1.33).

Решение в области II существенно зависит от знака $E - V_0$ (заметим, что в отличие от общего случая в данной задаче $V_{\max} = V_{\min} = V_0$).

При $E < V_0$ область II является классически недоступной, поэтому удовлетворяющее стандартным условиям решение с точностью до постоянного множителя выбираем в виде

$$\Psi_{II}(x) = e^{-\kappa x}, \quad (1.43)$$

где κ определяется соотношением (1.22). Легко проверить, что в состоянии (1.43) плотность потока равна нулю. Поэтому коэффициент

прохождения $D = 0$. Рекомендуем самостоятельно получить выражения для A и B и на основании (1.35) независимо от (1.36) показать, что $R = 1$.

Таким образом, если область II недоступна в классическом смысле, то частицы полностью отражаются от ступеньки. Вместе с тем, вблизи ее края остается ненулевая вероятность обнаружения частиц (см. пример 1.4). Здесь можно провести аналогию с полным внутренним отражением в оптике.

При $E > V_0$ область II является классически доступной, поэтому решение $\Psi_{II}(x)$ выбираем в виде (1.30) и сшиваем с $\Psi_I(x)$. Рекомендуем также самостоятельно получить

$$A = \frac{k + k'}{2k}, \quad B = \frac{k - k'}{2k}.$$

Коэффициенты отражения и прохождения вычисляем по формулам (1.35):

$$R(E) = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 = \left(\frac{\sqrt{\xi} - \sqrt{\xi - 1}}{\sqrt{\xi} + \sqrt{\xi - 1}} \right)^2;$$

$$D(E) = \frac{4kk'}{(k + k')^2} = \frac{4\sqrt{\xi(\xi - 1)}}{(\sqrt{\xi} + \sqrt{\xi - 1})^2}, \quad \text{где } \xi = \frac{E}{V_0}.$$

Очевидно, что $R \neq 0$, т.е. имеет место надбарьерное отражение. В данной ситуации оно будет аналогично частичному отражению световой волны при ее нормальном падении на границу раздела сред с различными показателями преломления. Предлагаем самостоятельно убедиться в справедливости (1.36) и построить графики зависимостей $R(E)$ и $D(E)$.

В предельном случае классической механики ($\hbar \rightarrow 0$) коэффициент отражения должен обратиться в нуль. Между тем полученное выражение для $R(E)$ вовсе не содержит постоянной Планка! Классическому пределу соответствует случай, когда дебройлевская длина волны частицы $\lambda = 2\pi\hbar/p$ мала по сравнению с характеристическими размерами рассеивающих неоднородностей потенциала, т.е. по сравнению с расстояниями, на которых заметно меняется поле $V(x)$. В рассматриваемом же схематическом примере это расстояние равно нулю (в точке разрыва), так что предельный переход не может быть произведен. \square

Пример 1.8. Частицы массой m каждая рассеиваются на прямоугольном симметричном потенциальном барьере ширины a и высоты V_0 (рис. 1.7). Определить коэффициенты отражения и преломления как функции энергии E .

Решение. Введем систему координат в соответствие с рис. 1.7. Стационарное уравнение Шредингера необходимо отдельно решать в каждой из трех областей: *I*, *II*, *III*. В области *I* общий вид решения дается выражением (1.33). Для области *III* решение удобно представить в виде

$$\Psi_{III}(x) = e^{ik(x-a)},$$

которое отличается от (1.30) постоянным множителем e^{-ika} , а $k' = k = \sqrt{2mE}/\hbar$ вследствие симметрии барьера. Решение в области *II* существенно зависит от знака $E - V_0$.

При $E < V_0$ подбарьерная область является классически недоступной. Поэтому решение уравнения Шредингера выбирается в виде

$$\Psi_{II}(x) = F e^{\varkappa x} + G e^{-\varkappa x}, \quad (1.44)$$

где \varkappa определяется соотношением (1.22). В отличие от предыдущего примера, здесь мы обязаны сохранить и растущее решение вследствие *конечности ширины барьера*.

После сшивания решений в точках $x = 0$ и $x = a$ в соответствии с (1.2) получаем следующую систему уравнений для коэффициентов A , B , F и G :

$$\begin{cases} \left[\begin{array}{l} A + B = F + G; \\ A - B = \frac{i\varkappa}{k} (G - F); \end{array} \right. & (1.45) \\ \left[\begin{array}{l} F e^{\varkappa a} + G e^{-\varkappa a} = 1; \\ F e^{\varkappa a} - G e^{-\varkappa a} = \frac{ik}{\varkappa}. \end{array} \right. \end{cases}$$

Легко заметить, что систему (1.45) можно разбить на две удобные для решения подсистемы. После необходимых вычислений (проделать самостоятельно!) имеем:

$$A = \operatorname{ch} \varkappa a + \frac{i}{2} \left[\frac{\varkappa}{k} - \frac{k}{\varkappa} \right] \operatorname{sh} \varkappa a; \quad B = -\frac{i}{2} \left[\frac{\varkappa}{k} + \frac{k}{\varkappa} \right] \operatorname{sh} \varkappa a.$$

В соответствии с (1.35),

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{(k^2 + \varkappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \varkappa a}{4k^2 \varkappa^2 + (k^2 + \varkappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \varkappa a}; \quad (1.46)$$

$$D = |A|^{-2} = \frac{4k^2 \varkappa^2}{4k^2 \varkappa^2 + (k^2 + \varkappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \varkappa a}. \quad (1.47)$$

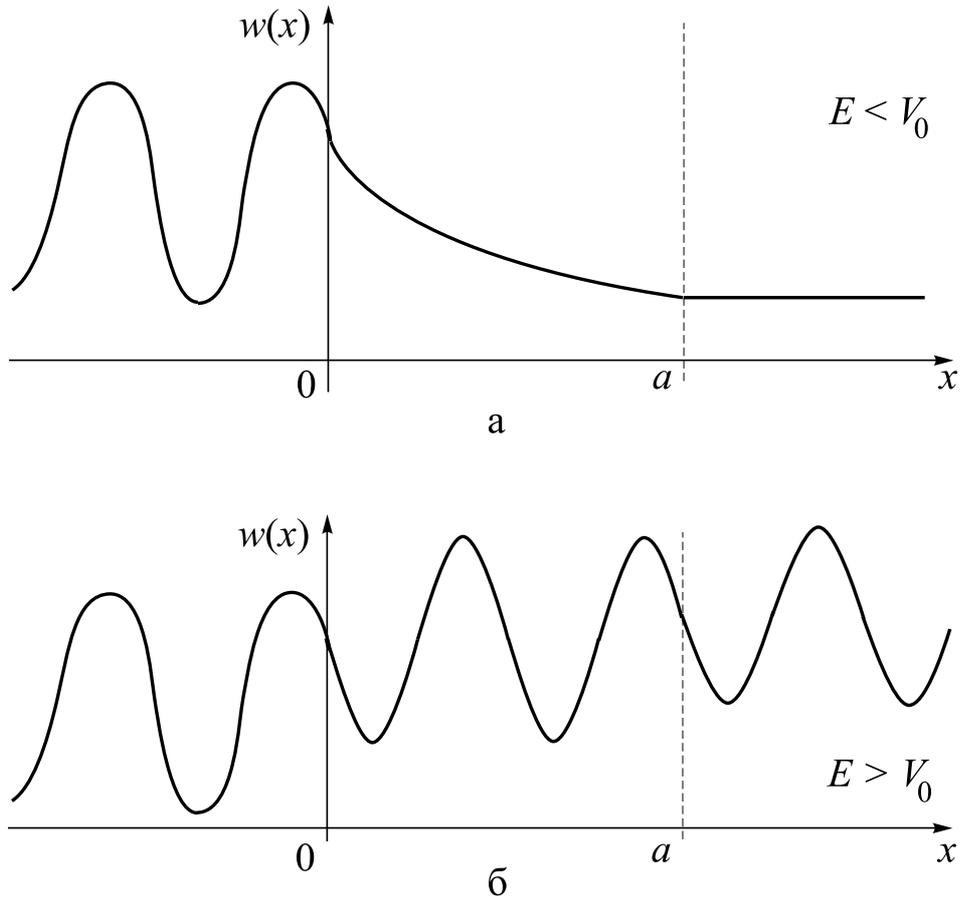


Рис. 1.8.

Видно, что $D \neq 0$, т.е. будет иметь место *туннельный эффект*. Его можно объяснить тем, что глубина проникновения частицы под барьер сравнима с шириной барьера (см. график плотности вероятности на рис. 1.8а).

При $E > V_0$ область II также является классически доступной, поэтому решение уравнения Шредингера необходимо выбрать в виде

$$\Psi_{II}(x) = F e^{ik''x} + G e^{-ik''x}, \quad (1.48)$$

где

$$k'' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar}}.$$

Решение (1.44) отличается от (1.48) заменой

$$\kappa \rightarrow ik''.$$

Такую же замену нужно сделать и в (1.46), (1.47): □

$$R = \frac{(k^2 + k''^2)^2 \sin^2 k''a}{4k^2k''^2 + (k^2 + k''^2)^2 \sin^2 k''a}; \quad (1.49)$$

$$D = \frac{4k^2 k''^2}{4k^2 k''^2 + (k^2 + k''^2)^2 \sin^2 k'' a}. \quad (1.50)$$

В общем случае $R \neq 0$, т.е. имеет место надбарьерное отражение. Однако при некоторых значениях энергии барьер становится абсолютно прозрачным: $R = 0$. Опять же прослеживается оптическая аналогия с прохождением световой волны сквозь слой вещества с иным показателем преломления: при специально подобранной толщине слоя наблюдается «просветление». Предлагаем самостоятельно найти эти значения, а также исследовать следующие частные предельные случаи:

- 1) $E \rightarrow \infty$ (фактически $E \gg V_0$);
- 2) случай барьера малой прозрачности $(V_0 - E)ma^2/\hbar^2 \gg 1$;
- 3) $E \rightarrow 0$ (фактически $E \ll ma^2V_0^2/\hbar^2$, $E \ll V_0$);
- 4) $ma^2V_0/\hbar^2 \ll 1$ и $ma^2E/\hbar^2 \ll 1$;
- 5) $E \approx V_0$.

Проверьте непосредственно, что $R + D = 1$.

1.4. Линейный гармонический осциллятор

Линейным гармоническим осциллятором называется частица, совершающая движение в потенциальной яме $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ (рис. 1.9а),

где m — масса частицы, ω — частота осциллятора. В *классическом* случае частица совершала бы движение по закону $x(t) = x_0 \cos(\omega t + \varphi_0)$. Амплитуда x_0 однозначно определяется энергией осциллятора, которая в свою очередь может принимать *непрерывный* ряд значений на интервале от 0 до ∞ .

В микромире стационарная постановка задачи требует решения уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_E(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi_E(x) = E \Psi_E(x) \quad (1.51)$$

с граничными условиями $\Psi_E(\pm\infty) = 0$ вследствие финитного движения.

В соответствии с общей теорией энергетический спектр осциллятора будет *дискретным*:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.52)$$

Уровни расположены эквидистантно на расстоянии $\hbar\omega$ друг от друга. В соответствии с общим свойством одномерного финитного движения они *не вырождены*, т.е. каждому соответствует только одно состояние:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \Psi_n^{(\text{osc})} \left(\frac{x}{x_0} \right), \quad (1.53)$$

где

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (1.54)$$

— «естественная» единица длины для осциллятора, позволяющая существенно упростить все математические выкладки переходом к безразмерным величинам;

$$\Psi_n^{(\text{osc})}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}; \quad (1.55)$$

$H_n(\xi)$ — полином Чебышева — Эрмита (см. приложение Б). Функции (1.53) нормированы на единицу и ортогональны на всей вещественной оси:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n'}(x) \Psi_n(x) dx = \delta_{n'n}. \quad (1.56)$$

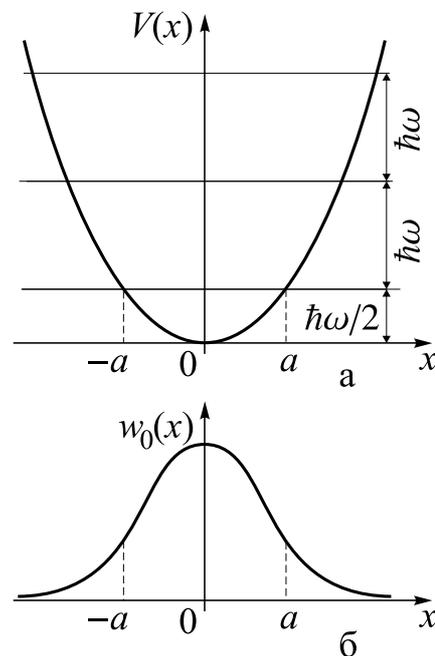


Рис. 1.9.

Основное состояние осциллятора имеет ненулевую энергию $E_0 = \hbar\omega/2$ (отсчитывается от «дна» потенциальной ямы). Это так называемая энергия нулевых колебаний. Наличие нулевых колебаний не противоречит принципу неопределенностей, не позволяющему частице опуститься на «дно». Основному состоянию соответствует волновая функция

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right). \quad (1.57)$$

Поскольку при удалении от положения равновесия потенциальная энергия монотонно возрастает непрерывным образом, волновые функции будут ненулевыми и в классически недоступной области. График плотности вероятности в основном состоянии дается в качестве примера на рис. 1.9б. Он представляет собой гауссову кривую.

Пример 1.9. *Линейный одномерный гармонический осциллятор приведен в основное состояние. Найти вероятность его обнаружения в классически доступной области.*

Решение. Будем предполагать массу осциллятора m и частоту ω известными. Найдем границы классически доступной области $\pm a$ (см. рис. 1.9) из условия

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m\omega^2 a^2 &= E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}; \\ a &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \stackrel{(1.54)}{=} x_0. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Таким образом, можно сказать, что единицей длины для осциллятора служит размер классически доступной области в основном состоянии.

Для величины вероятности получаем:

$$\begin{aligned} P &= \int_{-a}^{+a} w_0(x) dx = \int_{-a}^{+a} \Psi_0^2(x) dx \stackrel{(1.57)}{=} \\ &= \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \int_{-a}^{+a} \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right) dx = \\ &= \left(\frac{x}{x_0} = t\right) \stackrel{(1.58)}{=} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-t^2} dt = \operatorname{erf}(1) \approx 0,8427. \end{aligned}$$

При вычислении интеграла использовано свойство четности подынтегральной функции. Ответ выражается через табулированную функцию ошибок (см. формулу (А.6) части 1). Легко заметить, что результат не зависит ни от массы осциллятора, ни от его частоты.

Пример 1.10. Проверить соотношение неопределенностей для координаты и импульса в случае с одномерным линейным гармоническим осциллятором.

Решение. Полиномы Чебышева – Эрмита имеют четность $(-1)^n$, поэтому в соответствии с (1.55) $\langle x \rangle = 0$. В связанных стационарных состояниях любой системы $\langle p \rangle = 0$ (см. задачу 42 части 1). Поэтому

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle; \quad \langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle$$

Вид осцилляторного потенциала позволяет кардинально упростить вычисление этих средних величин с использованием теоремы о вириале (пример 5.2 части 1). Для осциллятора она дает

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{m} = m\omega^2 \langle x^2 \rangle. \quad (1.59)$$

С другой стороны, по определению стационарных состояний

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.60)$$

После совместного решения (1.59) и (1.60) получаем:

$$\langle x^2 \rangle = x_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{x_0^2} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots,$$

где x_0 определено в (1.54). Заметим, что специфический вид потенциальной энергии позволил получить эти результаты без использования трудоемкого интегрирования.

Выполнение соотношения неопределенностей здесь очевидно. Более того, в основном состоянии ($n = 0$) это соотношение превращается в *строгое равенство*. Состояния, минимизирующие соотношение неопределенностей, называются *когерентными*. Примером служит основное состояние осциллятора. \square

Эффектами Штарка называются изменения, происходящие со связанной заряженной системой под воздействием внешнего электрического поля. Ниже мы рассмотрим эффект Штарка для заряженного осциллятора в постоянном электрическом поле.

Пример 1.11. Масса осциллятора m , частота ω , заряд e . На осциллятор действует постоянное однородное электрическое поле напряженности \mathcal{E} , направленное вдоль оси Ox . Найти энергии стационарных состояний и соответствующие им волновые функции.

Решение. Уравнение Шредингера для осциллятора в электрическом поле

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_E(x)}{dx^2} + \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - e\mathcal{E}x \right) \Psi_E(x) = E \Psi_E(x) \quad (1.61)$$

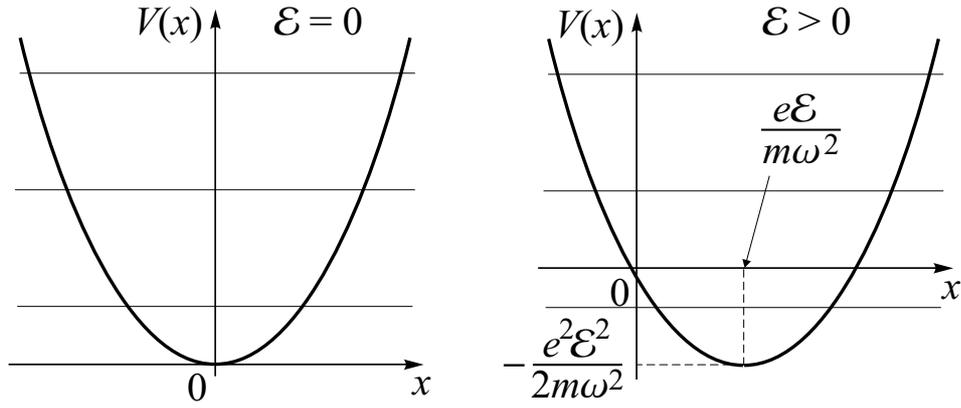


Рис. 1.10.

можно упростить, если в потенциальной энергии выделить полный квадрат:

$$\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - e\mathcal{E}x = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}. \quad (1.62)$$

После замен

$$x \rightarrow X = x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}; \quad E \rightarrow E' = E + \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}; \quad \Psi_E(x) \rightarrow \Phi_{E'}(X) \quad (1.63)$$

мы приходим к уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi_{E'}(X)}{dX^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \Phi_{E'}(X) = E' \Phi_{E'}(X), \quad (1.64)$$

по своей структуре *полностью совпадающему с уравнением Шредингера* (1.51) *для такого же осциллятора без поля*. Причину данного феномена легко понять, проанализировав (1.62): потенциальная кривая осциллятора под действием внешнего электрического поля претерпевает лишь *параллельный перенос* (рис. 1.10); форма кривой, определяющая частоту, остается *неизменной*. Таким образом, у осциллятора смещается положение равновесия и начало отсчета энергии. Это целиком отражается в заменах (1.63), но не в конечном уравнении (1.64) и граничных условиях к нему (вспомните их).

Решение (1.64) легко строится на основании (1.52), (1.53) и (1.63):

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}; \quad (1.65)$$

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \Psi_n^{(\text{osc})} \left(\frac{x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}}{x_0} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.66)$$

Эффект Штарка для осциллятора в постоянном поле заключается в смещении всех энергетических уровней вниз на одинаковую величину, не исчезающую в классическом пределе. \square

Ниже рассматривается случай двумерного осциллятора, имеющего в главных осях потенциальную энергию

$$V(x, y) = \frac{1}{2} m(\omega_X^2 x^2 + \omega_Y^2 y^2). \quad (1.67)$$

Пример 1.12. *Масса двумерного осциллятора m , частоты в главных осях ω_X, ω_Y (см. (1.67)). Найти энергии стационарных состояний и соответствующие им волновые функции. Рассмотреть отдельно случай кругового осциллятора: $\omega_X = \omega_Y = \omega$.*

Решение. Уравнение Шредингера с потенциалом (1.67)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi_E(x, y) + \frac{1}{2} m(\omega_X^2 x^2 + \omega_Y^2 y^2) \Psi_E(x, y) = E \Psi_E(x, y) \quad (1.68)$$

допускает разделение переменных в декартовых координатах:

$$\begin{aligned} \Psi_E(x, y) &= \Psi_X(x) \Psi_Y(y); \\ E &= E_X + E_Y; \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_X(x) + \frac{1}{2} m\omega_X^2 x^2 \Psi_X(x) &= E_X \Psi_X(x); \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \Psi_Y(y) + \frac{1}{2} m\omega_Y^2 y^2 \Psi_Y(y) &= E_Y \Psi_Y(y). \end{aligned}$$

Очевидно, что задача двумерного осциллятора сводится теперь к задаче двух *независимых* одномерных осцилляторов. Поэтому сразу можно записать ее решение:

$$E_{n_X n_Y} = \hbar\omega_X \left(n_X + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_Y \left(n_Y + \frac{1}{2} \right), \quad n_X, n_Y = 0, 1, \dots; \quad (1.69)$$

$$\Psi_{n_X n_Y}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{x_0 y_0}} \Psi_{n_X}^{(\text{osc})} \left(\frac{x}{x_0} \right) \Psi_{n_Y}^{(\text{osc})} \left(\frac{y}{y_0} \right), \quad (1.70)$$

где

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_X}}; \quad y_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_Y}}.$$

Рассмотрим два случая.

Таблица 1.1

n	0	1	2	...
$n_X; n_Y$	0; 0	0; 1	0; 2	...
		1; 0	1; 1	...
			2; 0	...

1. $\omega_X \neq \omega_Y$. Каждому значению энергии соответствует единственное состояние, т.е. энергетический спектр будет *невыврожденным*.

2. $\omega_X = \omega_Y = \omega$. В случае кругового осциллятора $x_0 = y_0$, а соотношения (1.69), (1.70) преобразуются:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1), \quad n = n_X + n_Y, \quad n_X, n_Y = 0, 1, \dots; \quad (1.71)$$

$$\Psi_{n_X n_Y}(x, y) = \frac{1}{x_0} \Psi_{n_X}^{(\text{osc})}\left(\frac{x}{x_0}\right) \Psi_{n_Y}^{(\text{osc})}\left(\frac{y}{x_0}\right), \quad (1.72)$$

Теперь энергия определяется не каждым из квантовых чисел n_X, n_Y по отдельности, а *только их суммой* $n = n_X + n_Y$. Вместе с тем, состояния, соответствующие одному и тому же значению n , будут *различаться* значениями n_X и n_Y (таблица 1.1). Таким образом, в круговом осцилляторе энергетические уровни *вырождаются* с кратностью $n + 1$. \square