Первое задание по квантовой механике

Драчов Ярослав
Факультет общей и прикладной физики МФТИ

24 декабря 2020 г.

Задача 1. Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний частицы в потенциальном ящике

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

Вычислить средние и дисперсии координаты и импульса: $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $(\Delta x)^2$ и $(\Delta p)^2$ для n-того стационарного состояния. В пределе $n \to \infty$ провести сравнение с классическими значениями этих величин. Найти фазовый объём на одно квантовое состояние.

Решение. В данной потенциальной яме возможен только невырожденный спектр энергии частицы. Волновая функция частицы удовлетворяет уравнению

$$\psi^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi(x) = 0,$$

должна быть непрерывна в точках 0 и a и нормирована на единицу.

При $x \leqslant 0$ и $x \geqslant a$ должно выполняться $\psi(x) = 0$, а при $0 < x < a$ справедливо уравнение

$$\psi'' + k^2\psi(x) = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},,$$

т. е.

$$\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}.$$

Из условий непрерывности $\psi(x)$ получаем $\psi(0) = c_1 + c_2 = 0$, т. е. $\psi(x) = c \sin kx$, а также $\psi(a) = c \sin kx = 0$, поэтому

$$ka = n\pi, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2,$$

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x, & 0 < x < a, \\ 0, & x \leqslant 0, x \geqslant a, \end{cases}$$

где $n = 1, 2, 3 \ldots$. Таким образом, состояние определяется одним квантовым числом.

Дальнейший расчёт удобно вести в естественной (для данной задачи) системе единиц: $\hbar = 1$, $m = 1$, $a = 1$, тогда

$$E_n = \frac{\pi^2 n^2}{2}, \quad \psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{2} \sin \pi n x, & 0 < x < a, \\ 0, & x \leqslant 0, x \geqslant a. \end{cases}$$

Таким образом,

$$\langle n|\,\widehat{\mathrm{x}}\,|n\rangle = \int\limits_0^1 x\psi_n^2(x)\,dx = \frac{1}{2} - \frac{\partial}{\partial\alpha}\int\limits_0^1 \sin\alpha x\,dx\Bigg|_{\alpha=2\pi n} = \frac{1}{2},$$

т. е. в обычных единицах $\langle n|\,\widehat{\mathrm{x}}\,|n\rangle = (1/2)a$, а также

$$\langle n|\,(\Delta\widehat{\mathrm{x}})^2\,|n\rangle = \langle n|\,\widehat{\mathrm{x}}^2\,|n\rangle - \langle n|\,\widehat{\mathrm{x}}\,|n\rangle^2 = \int\limits_0^1 x^2\psi_n(x)\,dx - \frac{1}{4} =$$

$$= \frac{1}{3} + \frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\int\limits_0^1 \cos\alpha x\,dx\Bigg|_{\alpha=2\pi n} - \frac{1}{4} = \frac{1}{12} - \frac{1}{2(\pi n)^2},$$

и в обычных единицах $\langle n|\,(\Delta\widehat{\mathrm{x}})^2\,|n\rangle = \left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2(\pi n)^2}\right]a^2$.

Классическая плотность вероятности найти частицу в интервале $(x, x + dx)$ есть $\rho(x) = 1/a$ (скорость частицы в ящике постоянна). То есть в классическом пределе

$$\overline{x} = \int\limits_0^a x\rho(x) = \frac{a}{2}, \quad \overline{(\Delta\widehat{\mathrm{x}})^2} = \frac{a^2}{12},$$

что совпадает с квантовым результатом при $n \gg 1$.

Волновая функция частицы в импульсном представлении:

$$\psi_n(p) \equiv \langle p|n\rangle = \int\limits_0^1 \langle p|x\rangle\,\langle x|n\rangle\,dx = \int\limits_0^1 \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ipx}\sqrt{2}\sin n\pi x\,dx =$$

$$= -2i\sqrt{\pi}e^{-i\frac{p-n\pi}{2}}\frac{n\sin\left(\frac{p-n\pi}{2}\right)}{p^2-(n\pi)^2}.$$

В квазиклассическом приближении ($n \gg 1$) распределение по импульсам вблизи $p = \pm n\pi$ имеет вид

$$|\psi_n(p)|^2 \simeq \frac{\sin^2(\varepsilon/2)}{\pi\varepsilon^2}, \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\varepsilon/2)}{\pi\varepsilon^2}\,d\varepsilon = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^x}{x^2}\,dx = \frac{1}{2},$$

где $\varepsilon = p \pm n\pi$, что соответствует классической плотности вероятности распределения по импульсам

$$\rho(p) = \frac{1}{2}\delta(p-p_n) + \frac{1}{2}\delta(p+p_n), \quad p_n = \sqrt{2E_n} = \pi n.$$

Фазовая плоскость, как и траектория частицы на ней, — понятие классическое, поэтому рассмотрим эту часть задачи в квазиклассическом приближении: $\hbar \to 0$, $n \to \infty$ при конечном $\hbar n$. Фазовые объёмы для состояний с энергией $E \leqslant E_n$ и $E \leqslant E_{n+1}$ имеют вид

$$\Gamma_n = 2p_n a = 2\pi\hbar n \quad \left(p_n = \sqrt{2mE_n} = \frac{\pi\hbar}{a}n\right),$$

$$\Gamma_{n+1} = 2p_{n+1}a = 2\pi\hbar(n+1).$$

Следовательно, объём, приходящийся на одно квантовое состояние,

$$\Delta\Gamma_n = \Gamma_{n+1} - \Gamma_n = 2\pi\hbar.$$

Задача 2. Найти уровни энергии и волновые функции стационарных состояний в потенциальной яме

a) $U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a, U_0 > 0, \\ 0, & |x| > a, \end{cases}$

b) $U(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0, \\ -U_0, & 0 < x < a, U_0 > 0, \\ 0, & x > a. \end{cases}$

Решение. а) Используем оператор инверсии $\hat{\mathrm{I}}$. Поскольку в координатном представлении

$$\widehat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x), \quad \text{а также} \quad U(x) = U(-x),$$

получаем $[\hat{\mathrm{I}}, \widehat{\mathrm{H}}] = 0$.

Таким образом, волновые функции невырожденного дискретного спектра данной задачи ($E < 0$) обладают определённой чётностью

$$\begin{cases} \widehat{\mathrm{H}}\psi_E(x) = E\psi_E(x), \\ \hat{\mathrm{I}}\psi_E(x) = \pm\psi_E(x), \end{cases}$$

и данная система уравнений будет заведомо совместна.Обозначая

$$\varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E|, \quad k^2 = k_0^2 - \varkappa^2, \quad k_0^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2},$$

получим уравнения для определения $\psi_E(x)$ при $|x| < a$

$$\psi_E''(x) + k^2\psi_E(x) = 0$$

и при $|x| > a$

$$\psi_E''(x) - \varkappa^2\psi(x) = 0.$$

Таким образом, для чётных состояний получаем $\psi_E^{(+)} = A\cos kx$ при $|x| < a$ и $\psi^{(+)}(x)$ при $|x| > a$. Вследствие явного учёта чётности функции граничное условие достаточно поставить в одной из точек $x = \pm a$. Из условия непрерывности логарифмической производной для функции $\psi_E(x)$ при $x = a$ получим

$$\frac{\psi_E'(a+0)}{\psi_E(a+0)} = \frac{\psi_E'(a-0)}{\psi_E(a-0)},$$

т. е.

$$k\operatorname{tg} ka = \varkappa, \quad k^2 = k_0^2 - \varkappa^2, \quad \text{или} \quad \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 = 1 + \operatorname{tg}^2 ka. \tag{1}$$

На основании этого имеем

$$|\cos ka| = \frac{ka}{k_0 a}$$

При обязательном дополнительном условии $\operatorname{tg} ka > 0$, которое следует из (1). Уровни энергии определяются формулой $E_n = -\hbar^2 \varkappa_n^2/(2m)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$ (рис. 1)

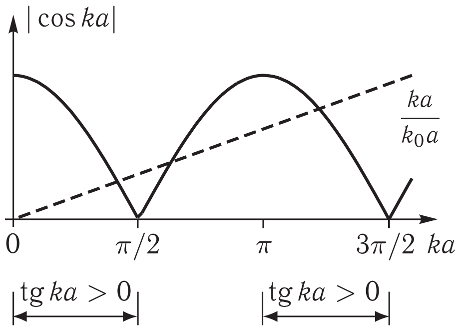

Рис. 1: Определение уровней энергии для чётных состояний

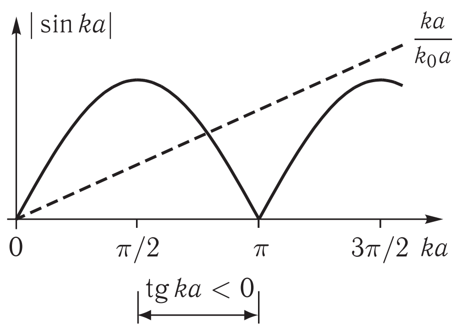

Рис. 2: Определение уровней энергии для нечётных состояний

Чётное состояние существует при малой глубине U_0 ямы ($k_0 a > 0$). N чётных состояний существует при $k_0 a \geqslant (N-1)\pi$. Из условия непрерывности функции

$$\psi(a-0) = \psi(a+0)$$

получаем

$$B = Ae^{\varkappa a} \cos ka.$$

Условие нормировки даёт

$$1 = 2|A|^2 \left(\int\limits_0^a \cos^2 kx \, dx + \int\limits_a^\infty \cos^2 ka e^{-2\varkappa(x-a)} \, dx \right),$$

откуда в результате несложных вычислений имеем

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\sin 2ka}{2ka} + \frac{\cos^2 ka}{\varkappa a} \right)^{-1/2}, \quad B = Ae^{\varkappa a} \cos ka.$$

Для нечётных состояний волновая функция должна иметь вид

$$\psi_E^{(-)}(x) = \begin{cases} A \sin kx, & |x| < a, \\ B \operatorname{sign}(x) e^{-\varkappa |x|}, & |x| > a, \end{cases}$$

где

$$\operatorname{sign}(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ -1, & x < 0. \end{cases}$$

Уровни энергии для нечётных состояний определяются из уравнения

$$k \operatorname{ctg} ka = -\varkappa, \quad k^2 = k_0^2 - \varkappa^2, \quad \text{т. е.} \quad \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 = 1 + \operatorname{ctg}^2 ka$$

или

$$|\sin ka| = \frac{ka}{k_0 a} \quad \text{при} \quad \operatorname{tg} ka < 0.$$

Как видно из рис. 2, нечётные дискретные состояния существуют при условии $k_0 a \geqslant \pi/2$, $(ka/(k_0 a) = 1$, когда $k_0 a = \pi/2)$, т. е.

$$U_0 \geqslant \frac{\pi^2}{8} \frac{\hbar^2}{ma^2}.$$

Это и есть условие существования хотя бы одного нечётного состояния в такой яме. N нечётных состояний существует при $k_0 a \geqslant \pi N/2$.

Из непрерывности функции $\psi(a+0) = \psi(a-0)$ следует

$$B = A e^{\varkappa a} \sin ka.$$

Учитываем условие нормировки нашей функции

$$1 = 2|A|^2 \left(\int_0^a \sin^2 kx \, dx + \sin^2 ka \int_a^\infty e^{-2\varkappa(x-a)} \, dx \right)$$

и получаем итоговый результат

$$A = \frac{1}{\sqrt{a}} \left(1 - \frac{\sin 2ka}{2ka} + \frac{\sin^2 ka}{\varkappa a}\right)^{-1/2}, \quad B = A e^{\varkappa a} \sin ka.$$

b) Получим решение задачи о состояниях дискретного спектра в данной потенциальной яме на основании анализа нечётных решений $\psi_E^{(-)}(x)$ пункта a данной задачи.

Граничные условия, накладываемые на волновую функцию в точке $x = 0$ и на ψ и ψ' в точке $x = a$. Совпадают с соответствующими граничными условиями для $\psi_E^{(-)}(x)$. Однако область, где волновая функция отлична от нуля уменьшается вдвое. Поэтому $\psi_E^{(-)}(x)$ нужно умножить на $\sqrt{2}$. В итоге получим волновые функции в виде

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \sqrt{2}\psi_E^{(-)}(x), & x > 0, \\ 0, & x \leqslant 0. \end{cases}$$

Задача 3. а) Найти энергию и волновую функцию связанного состояния частицы в поле

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \varkappa_0}{m}\delta(x).$$

Вычислить средние и дисперсии координаты и импульса в связанном состоянии.

б) Найти коэффициенты прохождения и отражения.

в) Вычислить вероятность «ионизации» связанного состояния при мгновенном изменения параметра глубины ямы с $\varkappa_0$ до $\varkappa_1$.

Решение. а) Полагая $E < 0$ и вводя обозначение

$$\varkappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2},$$

получаем уравнение, которому удовлетворяет волновая функция дискретного невырожденного спектра частицы в виде

$$\psi''(x) - \left(\varkappa^2 - 2\varkappa_0\delta(x)\right)\psi(x) = 0. \tag{1}$$

В точке разрыва потенциала $x = 0$ потребуем непрерывности $\psi(x)$:

$$\psi(+0) = \psi(-0).$$

При этом производная $\psi'(x)$ терпит разрыв, величину которого находим из уравнения (1), интегрируя его в пределах от $-\varepsilon$ до ε при $\varepsilon \to 0$:

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\varkappa_0\psi(0). \tag{2}$$

При этом, как и должно быть, выполняется условие непрерывности плотности потока вероятности: $j(+0) = j(-0)$, где

$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi(x)\psi'(x)^* - \psi^*(x)\psi'(x)\right).$$

Нормированное решение ищем в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 e^{-\varkappa x}, & x > 0, \\ C_2 e^{\varkappa x}, & x < 0. \end{cases}$$

Из непрерывности ψ при $x = 0$, получаем $C_1 = C_2 = C$. Тогда условие (2) даёт $\varkappa = \varkappa_0$, т. е. при $E < 0$ имеем всего один дискретный уровень с энергией

$$E_0 = -\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m}$$

и волновой функцией

$$\psi_0(x) = \sqrt{\varkappa_0}e^{-\varkappa_0|x|} \equiv \langle x|0\rangle,$$

нормированной на единицу.

В импульсном представлении волновая функция найденного дискретного уровня будет иметь вид

$$\psi_0(p) \equiv \langle p|0\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \, \langle p|x\rangle \, \langle x|0\rangle =$$

$$= \frac{\sqrt{\varkappa_0}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\varkappa_0|x| - \frac{ipx}{\hbar}} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(x_0\hbar)^3/2}{(\varkappa_0\hbar)^2 + p^2}.$$

Легко найти $\langle 0| \widehat{\mathrm{x}} |0\rangle = 0$, $\langle 0| \widehat{\mathrm{p}} |0\rangle = 0$, а также

$$\langle 0| \widehat{\mathrm{x}}^2 |0\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \varkappa e^{-2\varkappa_0|x|} \widehat{\mathrm{x}}^2 dx = \alpha \int\limits_{0}^{\infty} e^{-\alpha x} x^2 dx =$$

$$= \alpha \frac{d^2}{d\alpha^2} \int\limits_{0}^{\infty} e^{-\alpha x} dx = \left.\frac{2}{\alpha^2}\right|_{\alpha = 2\varkappa_0} = \frac{1}{\varkappa_0^2},$$

и, кроме того,

$$\langle 0| \widehat{\mathrm{p}}^2 |0\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dp \, p^2 \frac{2}{\pi} \frac{(\varkappa_0\hbar)^3}{\left((\hbar\varkappa_0)^2 + p^2\right)^2} = \frac{2}{\pi} (\varkappa_0\hbar)^3 \left(-\frac{d}{d\alpha^2}\right) \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2 dp}{\alpha^2 + p^2} =$$

$$= \frac{2}{\pi} (\varkappa_0\hbar)^3 \left(-\frac{d}{d\alpha^2}\right) \left.\frac{2\pi i (i\alpha)^2}{2i\alpha}\right|_{\alpha = \varkappa\hbar} = (\varkappa_0\hbar)^2.$$

Откуда находим дисперсии

$$(\Delta\widehat{\mathrm{x}})^2 = \langle 0| \widehat{\mathrm{x}}^2 |0\rangle - \langle 0| \widehat{\mathrm{x}} |0\rangle^2 = \frac{1}{\varkappa_0^2},$$

$$(\Delta\widehat{\mathrm{p}})^2 = \langle 0| \widehat{\mathrm{p}}^2 |0\rangle - \langle 0| \widehat{\mathrm{p}} |0\rangle^2 = (\varkappa_0\hbar)^2.$$

б) Волновая функция частицы массы m, свободно двигавшейся вдоль оси x с энергией $E > 0$ и попавшей в область действия δ-потенциала будет иметь вид

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{i\varkappa x} + Ae^{-i\varkappa x}, & x < 0, \\ Be^{i\varkappa x}, & x > 0 \end{cases},$$

где, как и ранее,

$$\varkappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Запишем уравнение Шрёдингера

$$\psi''(x) + \left(\varkappa^2 + 2\varkappa_0\delta(x)\right)\psi(x) = 0. \tag{3}$$

Как и в предыдущем пункте в точке разрыва потенциала $x = 0$ потребуем непрерывности $\psi(x)$:

$$\psi(+0) = \psi(-0).$$

При этом производная $\psi'(x)$ терпит разрыв, величину которого находим из уравнения (3), интегрируя его в пределах от $-\varepsilon$ до ε при $\varepsilon \to 0$:

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\varkappa_0 \psi(0). \tag{4}$$

При этом, как и ранее, выполняется условие непрерывности плотности потока вероятности $j(+0) = j(-0)$, где

$$j(x) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi(x)\psi'(x)^* - \psi^*(x)\psi'(x) \right).$$

Из непрерывности при $x = 0$ получаем $1 + A = B$. Тогда условие (4) даёт

$$A = \frac{-\varkappa_0}{i\varkappa + \varkappa_0}.$$

Откуда

$$R = \frac{|j_{\text{отр}}|}{|j_{\text{пад}}|} = |A|^2 = \frac{\varkappa_0^2}{\varkappa^2 + \varkappa_0^2}, \quad D = \frac{|j_{\text{прош}}|}{|j_{\text{пад}}|} = |B|^2 = \frac{\varkappa^2}{\varkappa^2 + \varkappa_0^2}.$$

Очевидно, что выполняется равенство $D + R = 1$.

в) Изначально

$$\psi(x) = \sqrt{\varkappa_0} e^{-\varkappa_0 |x|},$$

после резкого изменения параметра $\varkappa$ связанное состояние частицы описывается функцией

$$\varphi(x) = \sqrt{\varkappa_1} e^{-\varkappa_1 |x|}.$$

Вероятность оказаться в состоянии φ

$$W_{\text{ост}} = |\langle \varphi | \psi \rangle|^2 = \left(\sqrt{\varkappa_0 \varkappa_1} \cdot 2 \int\limits_0^\infty e^{-(\varkappa_0 + \varkappa_1)x} dx \right)^2 = \frac{4\varkappa_0^2 \varkappa_1^2}{(\varkappa_0 + \varkappa_1)^2}.$$

Вероятность вылететь из ямы («ионизации»):

$$W_i = 1 - \frac{4\varkappa_0^2 \varkappa_1^2}{(\varkappa_0 + \varkappa_1)^2} = \frac{(\varkappa_0 - \varkappa_1)^2}{(\varkappa_0 + \varkappa_1)^2}.$$

Задача 4. Найти коэффициенты прохождения и отражения частицы

а) на прямоугольном потенциальном барьере,

б) на прямоугольной потенциальной яме.

Решение. При рассмотрении задачи о нахождении коэффициентов отражения и прохождения мы будем исходить из потенциала

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a/2, \\ 0, & |x| > a/2. \end{cases}$$

Волновая функция частицы будет иметь вид

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ikx}, & x < a/2, \\ Ce^{ik_1 x} + De^{-ik_1 x}, & |x| < a/2, \\ Be^{ikx}, & x > a/2, \end{cases}$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0, \quad k_1^2 = \frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}.$$

Учёт условий непрерывности волновой функции ψ и её производной ψ' в точках $x = \pm a/2$ даёт систему из четырёх уравнений. В результате решения этой системы имеем

$$A = \frac{ie^{-ika}\left(k_1^2 - k^2\right)\sin k_1 a}{2kk_1 \cos k_1 a - i\left(k_1^2 + k^2\right)\sin k_1 a},$$

$$B = \frac{2kk_1 e^{-ik_1 a}}{2kk_1 \cos k_1 a - i\left(k_1^2 + k^2\right)\sin k_1 a}.$$

Таким образом, для коэффициента отражения получаем

$$R = \frac{|j_x^{\text{отр}}|}{|j_x^{\text{пад}}|} = |A|^2 = \frac{\left(k_1^2 - k^2\right)\sin^2 k_1 a}{4k_1^2 k^2 \cos^2 k_1 a + \left(k_1^2 + k^2\right)^2 \sin^2 k_1 a} = \\ = \frac{\left(k_1^2 - k^2\right)\sin^2 k_1 a}{4k_1^2 k^2 + \left(k_1^2 - k^2\right)^2 \sin^2 k_1 a}.$$

Величина R обращается в ноль при $k_1 a = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(E+U_0)} = n\pi$, $n = 1, 2, \ldots$, а также, естественно, при $k = k_1$, $(U_0 = 0)$.

Коэффициент прохождения имеет вид

$$D = \frac{|j_x^{\text{прош}}|}{|j_x^{\text{пад}}|} = |B|^2 = \frac{4k_1^2 k^2}{4k_1^2 k^2 \cos^2 k_1 a + \left(k_1^2 + k^2\right)^2 \sin^2 k_1 a} = \\ = \frac{4k_1^2 k^2}{4k_1^2 k^2 + \left(k_1^2 - k^2\right)^2 \sin^2 k_1 a}.$$

Очевидно, что выполняется равенство $D + R = 1$.

Полученные результаты для коэффициентов прохождения и отражения будут справедливы и в случае потенциального барьера (рис. 3) если в фор-

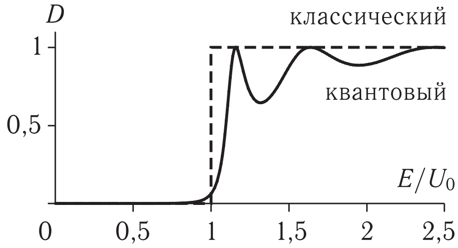

Рис. 3: Коэффициент прохождения для потенциального барьера

муле $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E+U_0)$ осуществить замену $U_0 \to -U_0$.

При $0 < E < U_0$ нужно дополнительно положить $k_1 = i\varkappa$, где $\varkappa_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$. В результате получаем

$$R = \frac{(\varkappa^2 + k^2)\,\mathrm{sh}^2\,\varkappa_1 a}{4\varkappa_1^2 k^2 + (\varkappa_1^2 + k^2)^2\,\mathrm{sh}^2\,\varkappa_1 a},$$

$$D = \frac{4\varkappa_1^2 k^2}{4\varkappa_1^2 k^2 + (\varkappa_1^2 + k^2)^2\,\mathrm{sh}^2\,\varkappa_1 a}.$$

Из рис. 3 видно, что коэффициент прохождения D в квантовом случае достигает максимального значения $D = 1$ (классический предел) лишь при $k_1 a = \pi n$, $n = 1, 2, \ldots$. Между этими максимумами находятся минимумы, причём значение D в этих точках растёт с ростом величины E/U_0. Данные отличия в поведении квантового коэффициента прохождения от классического связаны с проявлением волновых свойств частиц.

Задача 5. Найти уровни энергии и волновые функции связанных состояний частицы в поле

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \varkappa_0}{m}\left\{\delta(x+a) + \delta(x-a)\right\}.$$

Рассмотреть предел $\varkappa_0 a \gg 1$ и эволюцию начального состояния, отвечающего волновой функции частицы, связанной в одной яме при $x = -a$, определить вероятность обнаружить частицу в той же яме в момент времени t и частоту осцилляций.

Решение. Очевидно, что данный потенциал представляет собой чётную функцию $U(-x) = U(x)$, поэтому гамильтониан коммутирует с оператором инверсии

$$[\widehat{\mathrm{H}}, \hat{\mathrm{I}}] = 0,$$

и можно искать решение уравнения Шрёдингера, как общие собственные функции операторов $\widehat{\mathrm{H}}$ и $\hat{\mathrm{I}}$, т. е. в виде чётных и нечётных функций. Запишем общий вид чётного и нечётного решения на всей числовой прямой, исключая сами δ-функции ($E < 0$, $\varkappa^2 = 2m|E|/\hbar^2$)

$$\psi^{(+)}(x) = \begin{cases} Be^{\varkappa x}, & x < -a, \\ A\,\mathrm{ch}\,\varkappa x, & -a < x < a, \\ Be^{-\varkappa x}, & x > a, \end{cases}$$

$$\psi^{(-)}(x) = \begin{cases} Be^{\varkappa x}, & x < -a \\ A\,\mathrm{sh}\,\varkappa x, & -a < x < a, \\ -Be^{-\varkappa x}, & x > a. \end{cases}$$

Учитываем условия «сшивания» решений: непрерывность функции при $x = a$

$$\psi(a+0) = \psi(a-0) \qquad (1)$$

и конечный разрыв производной (как и в задаче 3)

$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = -2\varkappa_0 \psi(a). \qquad (2)$$

Условие совместности уравнений (1) и (2) с учётом явного вида $\psi^{(+)}(x)$ и $\psi^{(-)}(x)$ даёт трансцендентное уравнение для нахождения уровней энергии

$$\frac{\varkappa a}{\varkappa_0 a} = 1 \pm e^{-2\varkappa a}, \tag{3}$$

где верхний знак отвечает чётному, а нижний — нечётному уровню энергии.

Анализ уравнения (3) показывает (рис. 4), что в данном потенциале

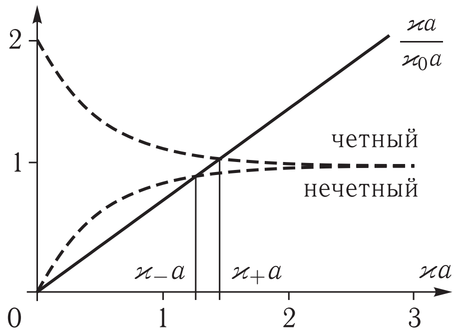

Рис. 4: Графический анализ уравнения (3)

в общем случае существуют два дискретных уровня энергии — чётный и нечётный. Чётный уровень лежит ниже и присутствует всегда, нечётный лежит выше и существует только при $\varkappa_0 a \geqslant 1/2$. Таким образом, при малых расстояниях между ямами остаётся только чётный уровень.

Если $\varkappa a \ll 1$, то $\varkappa \simeq 2\varkappa_0$ и энергия чётного состояния

$$E^{(+)} = -4\frac{\hbar^2\varkappa_0^2}{2m},$$

т. е. при малом расстоянии две δ-ямы действуют, как одна, но с удвоенным значением $\varkappa_0$. Если же ямы далеки друг от друга (при $\varkappa_0 a \gg 1$), то уровни энергии экспоненциально мало отличаются друг от друга и в конце концов сливаются. В результате мы получаем задачу о двух δ-ямах, независимых друг от друга.

Находим нормировочные коэффициенты для чётной и нечётной волновых функций

$$A^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{a}}\left(1 + \frac{\operatorname{sh} 2\varkappa a}{2\varkappa a} + \frac{\operatorname{ch}^2 \varkappa a}{\varkappa a}\right)^{-1/2}, \quad B^{(+)} = A^{(+)} e^{\varkappa a} \operatorname{ch} \varkappa a,$$

$$A^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{a}}\left(-1 + \frac{\operatorname{sh} 2\varkappa a}{2\varkappa a} + \frac{\operatorname{sh}^2 \varkappa a}{\varkappa a}\right)^{-1/2}, \quad B^{(-)} = A^{(-)} e^{\varkappa a} \operatorname{sh} \varkappa a.$$

При исследовании задачи эволюции начального состояния, отвечающего волновой функции частицы, связанной в одной яме при $x = -a$, используем следующие предположения

а) δ-ямы находятся достаточно далеко друг от друга, т. е. в системе ям имеется два дискретных уровня энергии, отвечающих связанным состояниям. Однако ямы не бесконечно далеки, следовательно, $E^{(+)} \neq E^{(-)}$.

б) Система, рассматриваемая нами, — приближенно двухуровневая, т. е. отброшен весь непрерывный спектр — считается, что частица не выходит из ям.

Как это следует из рис. 5, в любом из *стационарных* состояний $\psi^{(+)}(x)$ или

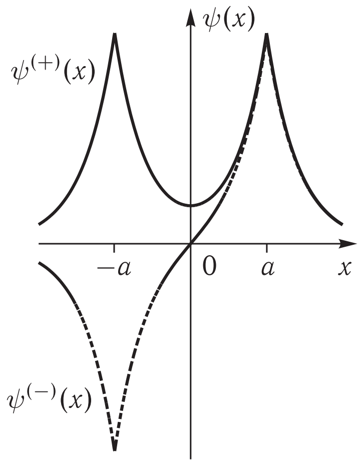

Рис. 5: Стационарные состояния для системы двух δ-ям

$\psi^{(-)}(x)$ выполняется

$$\left|\psi^{(\pm)}(-x)\right|^2 = \left|\psi^{(\pm)}(x)\right|^2,$$

поэтому вероятность обнаружения частицы вблизи левой и правой ямы одинакова — частица не локализована вблизи ни одной из ям.

С целью построить состояние, в котором частица (хотя бы в начальный момент времени) была бы локализована в окрестности одной из ям, воспользуемся линейной комбинацией функций

$$\Psi(x,t) = C_1 e^{-\frac{iE^{(+)}t}{\hbar}}\psi^{(+)}(x) + C_2 e^{-\frac{iE^{(-)}t}{\hbar}}\psi^{(-)}(x). \tag{4}$$

Очевидно, что в начальный момент времени

$$\Psi(x,0) = C_1\psi^{(+)}(x) + C_2\psi^{(-)}(x).$$

Если положить $C_1 = C_2$, то мы получим состояние (рис. 5), в котором частица локализована вблизи правой δ-ямы. Обозначим это состояние $\Psi(x,0) = \psi_a(x)$. По аналогии можно построить состояние $\psi_{-a}(x)$ с локализацией частицы вблизи левой δ-ямы. Окончательно

$$\begin{cases} \psi_a(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi^{(+)}(x) + \psi^{(-)}(x)\right), \\ \psi_{-a}(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi^{(+)}(x) - \psi^{(-)}(x)\right), \end{cases}$$

и обратно

$$\begin{cases} \psi^{(+)}(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(x) + \psi_{-a}(x)\right), \\ \psi^{(-)}(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_a(x) - \psi_{-a}(x)\right) \end{cases}.$$

Итак, волновая функция (4), в котором частица в начальный момент времени локализована вблизи правой δ-ямы, имеет вид

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{ e^{-\frac{iE^{(+)}t}{\hbar}}\psi^{(+)}(x) + e^{-\frac{iE^{(-)}t}{\hbar}}\psi^{(-)}(x) \right\} =$$

$$= \frac{1}{2}\left\{ \psi_a(x)\left[e^{-\frac{iE^{(+)}t}{\hbar}} + e^{-\frac{iE^{(-)}t}{\hbar}} \right] + \psi_{-a}(x)\left[e^{-\frac{iE^{(+)}t}{\hbar}} - e^{-\frac{ie^{(-)}t}{\hbar}} \right] \right\}.$$

В соответствии со статистической интерпретацией, вероятность обнаружить частицу локализованной вблизи левой ямы, если в начальный момент она была локализована в правой, равна

$$W_{-a} = \frac{1}{4}\left| e^{-\frac{iE^{(+)}t}{\hbar}} - e^{-\frac{iE^{(-)}t}{\hbar}} \right|^2 = \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{E^{(+)} - E^{(-)}}{\hbar} t \right) \right] =$$

$$= \sin^2\left[\frac{E^{(+)} - E^{(-)}}{2\hbar} t \right].$$

Задача 6. Найти волновую функцию, минимизирующую соотношение неопределённостей для координаты и импульса:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}.$$

Решение. Как известно, коммутатор $[\widehat{\mathrm{p}}, \widehat{\mathrm{x}}] = i\hbar\widehat{\mathbb{1}}$ Пусть

$$\begin{cases} \langle \widehat{\mathrm{p}} \rangle = \langle \psi | \, \widehat{\mathrm{p}} \, | \psi \rangle \,, \\ \langle \widehat{\mathrm{x}} \rangle = \langle \psi | \, \widehat{\mathrm{x}} \, | \psi \rangle \,, \end{cases} \quad \text{и тогда} \quad \begin{cases} \Delta\widehat{\mathrm{p}} = \widehat{\mathrm{p}} - \langle \widehat{\mathrm{p}} \rangle \widehat{\mathbb{1}}, \\ \Delta\widehat{\mathrm{x}} = \widehat{\mathrm{x}} - \langle \widehat{\mathrm{x}} \rangle \widehat{\mathbb{1}}, \end{cases}$$

при этом, очевидно $[\Delta\widehat{\mathrm{p}}, \Delta\widehat{\mathrm{x}}] = i\hbar\widehat{\mathbb{1}}$. Введём в рассмотрение вектор $|\varphi\rangle$ такой, что

$$|\varphi\rangle = (\Delta\widehat{\mathrm{p}} - i\gamma\Delta\widehat{\mathrm{x}})\,|\psi\rangle\,, \quad \text{тогда} \quad \langle\varphi| = \langle\psi|\,(\Delta\widehat{\mathrm{p}} + i\gamma\Delta\widehat{\mathrm{x}}).$$

Здесь мы учли эрмитовость операторов, действительность средних значений, а также $\gamma^* = \gamma$ по определению. Построим следующую конструкцию:

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \|\,|\varphi\rangle\,\|^2 = \langle\psi|\,(\Delta\widehat{\mathrm{p}} + i\gamma\Delta\widehat{\mathrm{x}})(\Delta\widehat{\mathrm{p}} - i\gamma\Delta\widehat{\mathrm{x}})\,|\psi\rangle =$$

$$= \left\langle (\Delta\widehat{\mathrm{p}})^2 \right\rangle + \gamma^2 \left\langle (\Delta\widehat{\mathrm{x}})^2 \right\rangle + \gamma\hbar \geqslant 0,$$

ибо квадрат нормы вектора положительно определён. По определению дисперсии

$$(\Delta p)^2 = \left\langle (\Delta\widehat{\mathrm{p}})^2 \right\rangle,$$

$$(\Delta x)^2 = \left\langle (\Delta\widehat{\mathrm{x}})^2 \right\rangle,$$

Мы получили квадратный трёхчлен относительно γ. Для того, чтобы это выражение было положительным, нужно, чтобы его дискриминант $D \leqslant 0$, т. е.

$$\hbar^2 - 4(\Delta p)^2(\Delta x)^2 \leqslant 0.$$

Мы получили соотношение неопределённостей

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2}.$$

Очевидно, что оно минимизируется если детерминант равен нулю и существует единственный вещественный корень для параметра $\gamma = \zeta \in \mathbb{R}$. При этом значении параметра составленный нами вектор состояния $|\varphi\rangle$ имеет нулевую норму, а значит, и сам он равен нулю, $|\varphi\rangle = 0$, т. е.

$$(\Delta\widehat{\mathrm{p}} - i\zeta\Delta\widehat{\mathrm{x}})\,|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow (\widehat{\mathrm{p}} - \langle\widehat{\mathrm{p}}\rangle)\,|\psi\rangle = i\zeta(\widehat{\mathrm{x}} - \langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle)\,|\psi\rangle\,, \quad \zeta \in \mathbb{R}.$$

Равенство нулю детерминанта определяет значение ζ, так как уравнение принимает вид

$$\hbar^2\gamma^2 + 4(\Delta p)^2\gamma\hbar + 4(\Delta p)^4 = 0$$

с единственным корнем

$$\zeta = -2\frac{(\Delta p)^2}{\hbar} \implies |\zeta| = \frac{\Delta p}{\Delta x}.$$

В координатном представлении получаем

$$(x - \langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle)\,\psi(x) = i\zeta\left(-i\hbar\frac{d}{dx} - \langle\widehat{\mathrm{p}}\rangle\right)\psi(x).$$

Мы можем переписать это как

$$\zeta\frac{d}{dx}\psi(x) - x\psi(x) + (\langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle - i\zeta\,\langle\widehat{\mathrm{p}}\rangle)\,\psi(x).$$

Далее упростим:

$$\zeta\hbar\frac{d}{dx}\psi = \psi\,(x - \langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle + i\zeta\,\langle\widehat{\mathrm{p}}\rangle)\,,$$

проинтегрируем

$$\int\frac{d\psi}{\psi} = \int\frac{x + i\zeta\,\langle\widehat{\mathrm{p}}\rangle - \langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle}{\zeta\hbar}dx,$$

получим

$$\ln\psi = \frac{x^2}{2\zeta\hbar} + \frac{i\,\langle\widehat{\mathrm{p}}\rangle\,x}{\hbar} - \frac{\langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle\,x}{\zeta\hbar} + C = \frac{x^2 - 2\,\langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle\,x + \langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle^2 - \langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle^2}{2\zeta\hbar} + i\frac{\langle\widehat{\mathrm{p}}\rangle\,x}{\hbar} + C,$$

откуда

$$\psi(x) = A\exp\left[\frac{(x - \langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle)^2}{2\zeta\hbar} + \frac{i\,\langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle\,x}{\hbar} - \frac{\langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle^2}{2\zeta\hbar}\right].$$

Нормализуем полученную волновую функцию

$$|A|^2\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{\left(\frac{(x-\langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle)^2}{\zeta\hbar} - \frac{\langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle^2}{\zeta\hbar}\right)}dx = 1,$$

$$A = e^{\frac{\langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle^2}{2\zeta\hbar}}\frac{1}{\sqrt[4]{\pi|\zeta|\hbar}}.$$

Откуда

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi|\zeta|\hbar}}e^{-\frac{(x-\langle\widehat{\mathrm{x}}\rangle)^2}{2|\zeta|\hbar} + \frac{i\langle\widehat{\mathrm{p}}\rangle x}{\hbar}}.$$

Задача 7. Найти разрешённые зоны энергии частицы, движущейся в потенциальном поле
$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \varkappa_0}{m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na).$$
Рассмотреть предельные случаи:

а) $\varkappa_0 a \gg 1$ (сильная связь),

б) $\varkappa_0 a \ll 1$ (слабая связь),

и закон дисперсии для первой зоны: вычислить эффективную массу частицы при малых значениях квазиимпульса.

Решение. Прежде всего необходимо заметить, что вследствие инвариантности потенциала относительно трансляций на величину a (период одномерной кристаллической решётки), т. е. $U(x+a) = U(x)$, гамильтониан нашей задачи будет коммутировать с оператором трансляции $\widehat{\mathrm{T}}_a$
$$[\widehat{\mathrm{H}}, \widehat{\mathrm{T}}_a] = 0.$$
Поэтому мы можем искать решение в виде общих собственных функций операторов $\widehat{\mathrm{H}}$ и $\widehat{\mathrm{T}}_a$
$$\begin{cases} \widehat{\mathrm{H}}\psi(x) = E\psi(x), \\ \widehat{\mathrm{T}}_a\psi(x) = \lambda(a)\psi(x), \end{cases} \tag{1}$$
где $\lambda(a)$ (собственное значение оператора трансляции) имеет вид $\lambda(a) = e^{\pm iKa}$, а $\operatorname{Im} K = 0$ (квазиимпульс). Собственные функции оператора трансляции согласно теореме Блоха должны удовлетворять условию, которое следует из (1)
$$\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x). \tag{2}$$

Запишем общий вид решения уравнения Шрёдингера (1) в двух смежных областях
$$\begin{array}{lll} 0 < x < a & \text{(область 1):} & \psi(x) = c_1 e^{ikx} + d_1 e^{-ikx}, \\ a < x < 2a & \text{(область 2):} & \psi(x) = c_2 e^{ik(x-a)} + d_2 e^{-ik(x-a)}, \end{array}$$
причём $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$. Условия сшивания в точке $x = a$
$$\psi(a+0) = \psi(a-0),$$
$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = -2\varkappa_0\psi(0)$$
после элементарных вычислений дают связь между коэффициентами c_1, d_1, c_2, d_2, которую можно записать в матричном виде:
$$\begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}, \tag{3}$$
где матрица A имеет вид
$$A = \begin{pmatrix} e^{ika}\left(1 - \frac{\varkappa_0}{ik}\right) & -e^{-ika}\frac{\varkappa_0}{ik} \\ e^{ika}\frac{\varkappa_0}{ik} & e^{-ika}\left(1 + \frac{\varkappa_0}{ik}\right) \end{pmatrix}.$$

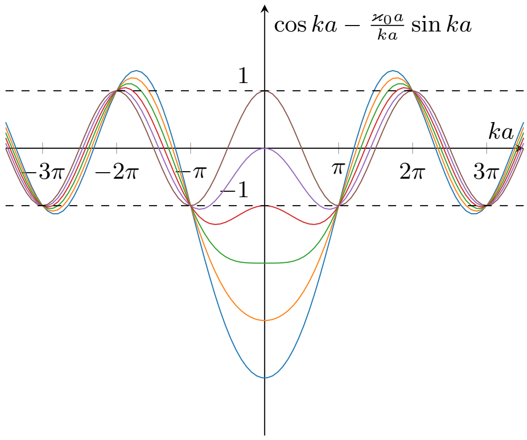

Рис. 6: Разрешённые зоны энергии (между штриховыми линиями) для различных $\varkappa_0$

Нетрудно заметить, что $\det A = 1$.

Далее мы применим формулу (2) и получим

$$\psi(x+a) = c_2 e^{ik(x+a-a)} + d_2 e^{-ik(x+a-a)} = c_2 e^{ikx} + d_2 e^{-ikx} = e^{iKa}\psi(x).$$

Таким образом, имеем

$$\begin{pmatrix} c_2 \\ d_2 \end{pmatrix} = e^{iKa} \begin{pmatrix} c_1 \\ d_1 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

и, сравнивая (2) и (3), видим, что задача свелась к проблеме диагонализации матрицы A (матрица сдвига), а $e^{iKa} = \lambda(a)$ — играет роль собственного значения этой матрицы. В результате получаем уравнение на собственные значения

$$\lambda^2(a) - 2\rho\lambda(a) + 1 = 0,$$

где $2\rho = \operatorname{tr} A$ — след матрицы A. Решение уравнения даёт

$$\lambda_{1,\,2}(a) = e^{\pm iKa} = \rho \pm i\sqrt{1-\rho^2},$$

откуда следует, что $\cos Ka = \rho$ или, конкретнее:

$$\cos Ka = \cos ka - \frac{\varkappa_0}{k} \sin ka. \tag{5}$$

Это и есть так называемое *дисперсионное соотношение.*

Анализ соотношения (5) показывает, что энергетический спектр в таком поле имеет *зонную структуру*. В самом деле, задавшись некоторым значением энергии E, мы находим $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ и затем из уравнения (5) можем найти значение Ka(рис. 6).

- *Случай 1.* Энергия E такова, что $|\rho| = |\cos Ka| \leqslant 1$. При этом K является вещественным числом, что и требуется для функции Блоха, а сама функция — распространяющаяся модулированная волна. Эти области значений E называются *разрешёнными зонами* энергии.

- *Случай 2.* Энергия E такова, что $|\rho| = |\cos Ka| > 1$. При этом величина K — комплексная, и частицы с такими K не могут распространяться внутри большого кристалла. Эти области значений энергии — *запрещённые зоны.*

Разрешённые зоны чередуются с запрещёнными, не перекрываясь между собой. Ширина разрешённых зон увеличивается с ростом $|ka|$. Условие $\varkappa_0 a \ll 1$ (слабая связь) описывает случай, близкий к свободному. Это значит, что $K \simeq k + 2\pi n/a$, и поэтому зависимость $E(K)$ параболическая. В противоположном предельном случае $\varkappa_0 a \gg 1$ (сильная связь) интервалы разрешённых значений энергии фактически превращаются в отдельные дискретные уровни $ka \approx \pi n$.

Далее рассмотрим случай $E < 0$. Для этого сделаем замену $k \mapsto i\varkappa$ ($k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $E < 0$). Получим дисперсионное соотношение:

$$\cos Ka = \operatorname{ch} \varkappa a - \frac{\varkappa_0}{\varkappa} \sin \varkappa a.$$

Графически правая часть данного уравнения изображена на рис. 7. В дан-

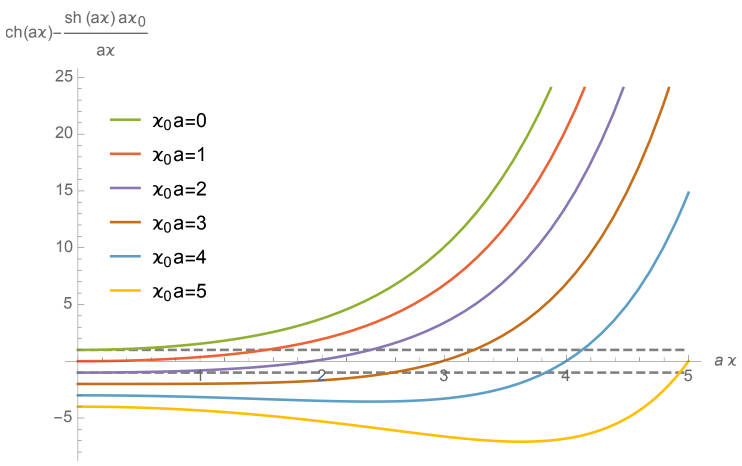

Рис. 7: Разрешённые зоны энергии (между штриховыми линиями) для различных $\varkappa_0$

ном случае имеем лишь одну разрешённую зону для любых $\varkappa_0$. При $\varkappa_0 a \ll 1$ это будет зона $\varkappa a \approx 0$, а при $\varkappa_0 a \gg 1$ получаем зону $\varkappa_0 \approx \varkappa$.

Задача 8. Рассмотреть вопрос о существовании связанного сферически симметричного состояния частицы в сферически симметричной потенциальной яме в пространстве одного, двух (качественно в импульсном представлении для мелкой ямы) и трёх измерений.

Решение. Рассмотрим сферически-симметричный локализованный потенциал $U(x)$ — мелкую яму, которая может быть охарактеризована двумя масштабами: глубиной U_0 и шириной a, удовлетворяющие соотношению $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$. Далее будем обсуждать сразу случай произвольной пространственной размерности $d = 1, 2, 3$. Также положим $\hbar = 1$.

Чтобы записать уравнение Шрёдингера в импульсном представлении, необходимо его спроецировать на бра-вектор $\langle \mathbf{p}|$, то есть рассмотреть $\langle \mathbf{p}| \widehat{\mathrm{H}} |\psi\rangle = E \langle \mathbf{p}|\psi\rangle$. Кинетическая энергия в таком случае запишется тривиально — этот оператор диагонален в импульсном представлении:

$$\langle \mathbf{p}| \frac{\widehat{\mathrm{p}}^2}{2m} |\psi\rangle = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi(\mathbf{p}).$$

Потенциальная энергия не является диагональным оператором; поэтому нам пригодятся её матричные элементы в этом базисе.

$$\langle \mathbf{p}| U(\widehat{\mathrm{x}}) |\mathbf{p}'\rangle = \langle \mathbf{p}| U(\widehat{\mathbf{x}}) \underbrace{\int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|}_{\hat{\mathbb{I}}} |\mathbf{p}'\rangle = \int d\mathbf{x} U(\mathbf{x}) \langle \mathbf{p}|\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\mathbf{p}'\rangle =$$

$$= \int d\mathbf{x} U(\mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')x} = U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'},$$

из чего мы заключаем, что эти матричные элементы тождественно совпадают с преобразованием Фурье от потенциала. В таком случае, потенциальная энергия записывается в импульсном представлении в следующем виде:

$$\langle \mathbf{p}| U(\widehat{\mathbf{x}}) |\psi\rangle = \langle \mathbf{p}| U(\widehat{\mathbf{x}}) \underbrace{\int (d\mathbf{p}') |\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'|}_{\hat{\mathbb{I}}} |\psi\rangle = \int (d\mathbf{p}') U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \psi(\mathbf{p}'),$$

где введено удобное обозначение $(d\mathbf{p}) \equiv d^d\mathbf{p}/(2\pi)^d$. Таким образом, уравнение Шрёдингера в импульсном представлении записывается в следующем виде:

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi(\mathbf{p}) + \int (d\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}') U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} = E\psi(\mathbf{p}).$$

Обсудим сперва некоторые общие свойства связанных состояний в яме (предполагая, что они имеются). Для конкретности можно говорить об основном состоянии.

Первое, что приходит в голову — это то, что частица, находясь в связанном состоянии, находится большей частью в яме и масштаб пространственного изменения её волновой функции равен её ширине a. В этом случае из соотношения неопределённостей следует, что типичное значение её импульса — это $p \sim \hbar/a$, и типичное значение кинетической энергии, связанной просто с пространственной локализацией частицы в яме, равно $\left\langle \widehat{\mathrm{T}} \right\rangle \sim \hbar^2/ma^2$.

В случае мелкой ямы $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$. Откуда полная энергия частицы $E = \left\langle \widehat{\mathrm{U}} \right\rangle + \left\langle \widehat{\mathrm{T}} \right\rangle \sim -U_0 + \hbar^2/ma^2 > 0$ и частица просто «вылетит» из ямы в состоянии непрерывного спектра. Единственное разрешение полученного парадокса — это предположить, что типичный масштаб волновой функции связанного состояния в мелкой яме $l \gg a$ (так, чтобы выполнялось во всяком случае нестрогое неравенство $U_0 \geqslant \hbar^2/ml^2$). Но это означает, что большая часть волновой функции частицы располагается вне ямы. В таком случае, масштаб l волновой функции определяется уравнением Шрёдингера вне ямы, где волновая функция экспоненциально затухает $\psi(x) \simeq e^{-\varkappa|x|}$, и $\varkappa = l^{-1}$ непосредственно связан с энергией связанного состояния $|E| = \hbar^2\varkappa^2/2m$. Полученное соотношение масштабов волновой функции и ямы в действительности означает, что внутри ямы волновая функция практически не меняется — а значит, связанное состояние (если оно имеется) нечувствительно к деталям потенциала.

Итак, масштаб волновой функции в координатно представлении — большой масштаб $\varkappa^{-1} \gg a$ — что из соотношения неопределённостей означает, что в импульсном представлении, напротив, волновая функция $\psi(p)$ является локализованной вблизи нуля на малом масштабе $\sim \varkappa$. С другой стороны, масштаб $U(\mathbf{x})$ — это $a \ll \varkappa^{-1}$; в свою очередь, масштаб $U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ — это большой масштаб a^{-1}. Благодаря большой разнице в масштабах, в свёртке $\int (d\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}')U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ основной вклад в интеграл приходит с $|\mathbf{p}'| \leqslant \varkappa$, на котором функция $U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ меняется слабо — поэтому её можно вынести за интеграл как «медленную огибающую», положив в ней $\mathbf{p}'$ нулём. Это приводит нас к следующему приближённому уравнению:

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\mathbf{p}) + U_p \int (d\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}') = E\psi(\mathbf{p}) \implies \psi(\mathbf{p}) = -\frac{U_{\mathbf{p}}}{-E + \frac{p^2}{2m}} \int (d\mathbf{p}')\psi(\mathbf{p}')$$

(отметим, что поскольку мы имеем дело с ямой, то потенциал $U(x) < 0$; и поскольку мы имеем дело со связанным состоянием, то $E = -|E| < 0$). Данное уравнение — алгебраическое, ведь в правой части стоит интеграл от волновой функции, который является константой. Последнее упрощение можно сделать, заметив, что в произведении перед интегралом, опять-таки, $U_{\mathbf{p}}$ является медленной огибающей, а $(|E|+p^2/2m)^{-1}$ — относительно быстрозатухающей функцией, посему можно вообще положить $p = 0$. Наконец, проинтегрировав получившееся уравнение по $(d\mathbf{p})$ и сократив на интеграл от волновой функции, мы получаем следующее уравнение самосогласования — которое является уравнением на допустимые уровни энергии:

$$|U_{\mathbf{p}=0}| \int \frac{(d\mathbf{p})}{|E| + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} = 1.$$

1. *Случай одномерной ямы.*

   При буквально нулевой энергии, этот интеграл расходится степенным образом на малых импульсах, и сходится на больших — поэтому ожидается степенная зависимость от энергии. Подбирая достаточно маленькую энергию, можно прийти к тому, что знак равенства будет иметь место. В действительности же, этот интеграл, разумеется, считается точно:

   $$|U_{\mathbf{p}=0}|\sqrt{\frac{m}{2|E|}} = 1 \implies |E| = \frac{m}{2\hbar^2}\left|\int\limits_{-\infty}^{\infty} U(x)dx\right|^2.$$

2. *Случай двумерной ямы.*

   Интеграл расходится логарифмически на малых и на больших импульсах. На больших импульсах очевидным образом интеграл нужно обрезать на масштабах $1/a$, поскольку это уравнение было выведено именно в таком предположении (это позволило нам заменить $U_{\mathbf{p}}$ на $U_{\mathbf{p}=0}$; и поскольку интеграл логарифмический, то он нечувствителен к этой обрезке — она меняет лишь константу под логарифмом), а на маленьких — масштабом $\sqrt{2mE}$; сингулярность на малых энергиях оказывается слабой, логарифмической. Поэтому чтобы сделать левую часть порядка единицы, уровень энергии требуется сделать ну очень маленьким. Приступим теперь к непосредственному вычислению:

$$\int \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2}\frac{1}{|E|+\frac{p^2}{2m}} = \int \frac{2\pi p\,dp}{4\pi^2}\frac{1}{|E|+\frac{p^2}{2m}} \approx \frac{m}{\pi}\int\limits_{\sim\sqrt{mE}}^{1/a}\frac{dp}{p} = \frac{m}{2\pi}\ln\frac{\#}{ma^2|E|}.$$

Точность этого выражения следующая: число перд логарифмом определено точно, а в силу неточности при обрезании, число под логарифмом (#) неизвестно. Для его нахождения нужно решать уравнение Шрёдингера точно; это число уже определяется явным видом потенциала. Тем самым, решая уравнение самосогласования, мы получаем (восстанавливая опять $\hbar$ по размерности):

$$|E| = \#\frac{\hbar^2}{ma^2}\exp\left(-\frac{2\pi\hbar^2}{m}\left|\int U(\mathbf{r})d^2\mathbf{r}\right|^{-1}\right).$$

Таким образом, мы определили уровень энергии в мелкой двумерной яме с экспоненциальной точностью; и этот уровень оказывается действительно экспоненциально мелким. Ведущая асимптотика даётся этой самой экспонентой, которая может быть оценена как $\exp\left(-\frac{\hbar^2/ma^2}{U_0}\right) \lll 1$. Число же в предэкспоненте таким способом определить нельзя.

3. *Случай трёхмерной ямы.*

   Исследуемый интеграл вообще не расходится на малых импульсах, поэтому он практически не зависит от энергии. На больших импульсах он может быть обрезан на масштабе $\sim 1/a$; тем самым, весь интеграл оценивается как

   $$\int \frac{(d\mathbf{p})}{|E|+\frac{p^2}{2m}} \sim ma^{-1}.$$

   С другой стороны, $U_{p=0} \sim U_0 a^3$; тем самым вся комбинация имеет порядок $\frac{U_0}{\hbar^2/ma^2} \ll 1$. Из-за слабой чувствительности интеграла к изменению энергии, сделать это выражение порядка единицы изменяя энергию, невозможно и уравнение самосогласования не имеет решений. Из чего мы заключаем, что в трёхмерии в мелкой яме нет связанных состояний.

Задача 9. Найти уровни энергии трёхмерного изотропного гармонического осциллятора и кратности их вырождения, разделяя переменные в декартовых координатах. Обсудить связь задачи с моделью ядерных оболочек и получить значения магических чисел 2, 8, 20.

Решение. Потенциальная энергия трёхмерного изотропного гармонического осциллятора даётся формулой

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2,$$

где ω — это угловая частота, равная $\sqrt{k/m}$. Т. к. пространство состояний такой частицы — это тензорное произведение пространств состояний, связанных с отдельными одномерными волновыми функциями, то стационарное уравнение Шрёдингера для такой системы будет задаваться как

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)\psi=E\psi.$$

Разделяя переменные, получаем

$$E_{n_x,\,n_y,\,n_z}=(n_x+n_y+n_z+3/2)\hbar\omega,$$

или $E_n=(n+3/2)\hbar\omega$, где n — неотрицательное целое число. Итак, энергетические уровни вырождены и кратность вырождения равна числу различных наборов n_x, n_y, n_z, удовлетворяющих условию

$$n_x+n_y+n_z=n,$$

а именно

$$\sum_{n_x=0}^{n}(n-n_x+1)=\frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

Аналогично электронам, протоны внешней оболочки будут относительно слабо притягиваться к ядру, если на данной оболочке будет мало протонов, т. к. они находятся дальше всех от ядра. Поэтому, ядра с полностью заполненной внешней оболочкой будут иметь самую сильную энергию связи в сравнении с другими ядрами с таким же полным числом протонов. Все утверждения, сформулированные выше, также справедливы и для нейтронов.

Это означает, что магические числа (по определению — числа нуклонов, характеризующие наиболее устойчивые ядра) следует ожидать в атомах с полностью заполненной внешней оболочкой.

Из-за спина, кратность вырождения уровней энергии трёхмерного гармонического осциллятора удваивается, после чего становится равной $(n+1)(n+2)$. Откуда получаем выражение для нахождения магических чисел

$$\sum_{n=0}^{k}(n+1)(n+2)=\frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{3}.$$

Для $k=1$ получаем магическое число 2, для 2 — 8, для 3 — 20.

Задача 10. Рассмотреть когерентные состояния одномерного гармонического осциллятора. Вычислить распределение по числу квантов в когерентном состоянии.

Решение. Собственные векторы оператора уничтожения $\widehat{\mathrm{a}}\,|z\rangle=z\,|z\rangle$ образуют систему так называемых когерентных состояний гармонического осциллятора, причём z — любое комплексное число. Вектор $|z\rangle$ можно представить в виде разложения по системе собственных векторов гамильтониана

$$\widehat{\mathrm{H}}=\frac{\widehat{\mathrm{p}}^2}{2m}+\frac{m\omega^2\widehat{\mathrm{x}}^2}{2}=\hbar\omega\left(\widehat{\mathrm{a}}^{+}\widehat{\mathrm{a}}+\frac{1}{2}\right),$$

где
$$\widehat{\mathrm{a}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\widehat{\mathrm{Q}} + i\widehat{\mathrm{P}}\right), \quad \widehat{\mathrm{a}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\widehat{\mathrm{Q}} - i\widehat{\mathrm{P}}\right),$$
и $\widehat{\mathrm{Q}} = \widehat{\mathrm{x}}/x_0$, $\widehat{\mathrm{P}} = \widehat{\mathrm{p}}/p_0$, т. е.
$$|z\rangle = \sum_n C_n(z)\,|n\rangle\,.$$
И с учётом уравнения на собственные значения
$$C_n(z) = \langle n|z\rangle = \frac{1}{z}\,\langle n|\widehat{\mathrm{a}}z\rangle = \frac{1}{z}\,\langle \widehat{\mathrm{a}}^+ n|z\rangle\,,$$
где мы воспользовались также определением эрмитово сопряжённого оператора. По построению
$$\widehat{\mathrm{a}}^+\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,,$$
так что получаем рекуррентное соотношение
$$zC_n(z) = \sqrt{n+1}C_{n+1}(z),$$
которое можно разрешить в явном виде
$$C_n(z) = \frac{z^n}{\sqrt{n!}}C_0(z).$$
Разложение принимает вид
$$|z\rangle = C_0(z)\sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle = C_0(z)\sum_n \frac{(z\widehat{\mathrm{a}}^+)^n}{n!}\,|0\rangle = C_0(z)e^{z\widehat{\mathrm{a}}^+}\,|0\rangle\,,$$
где мы использовали соотношение
$$|n\rangle = \frac{(\widehat{\mathrm{a}}^+)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle\,.$$
Коэффициент $C_0(z)$ можно определить из условия единичной нормировки состояния
$$\langle z|z\rangle = |C_0(z)|^2\,\langle 0|\,e^{z^*\widehat{\mathrm{a}}}e^{z\widehat{\mathrm{a}}^+}\,|0\rangle = |C_0(z)|^2\sum_n \frac{(z^*z)^n}{n!} = 1,$$
где мы учли ортогональность стационарных состояний. Отсюда
$$|C_0(z)|^2 e^{|z|^2} = 1 \implies C_0(z) = e^{-\frac{|z|^2}{2}}.$$
Окончательно
$$|z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}}e^{z\widehat{\mathrm{a}}^+}\,|0\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}}\sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,.$$
Очевидно, что в данном состоянии нет определённого значения энергии. Вероятность обнаружить значении энергии E_n
$$w_n = |\,\langle n|z\rangle\,|^2 = e^{-|z|^2}\frac{|z|^n}{n!}$$
определяется распределением Пуассона.