Задание по квантовой механике I

Авторы заметок: Хоружий Кирилл
Примак Евгений
Гурьева Соня

От: *14 сентября 2021 г.*

Содержание

1 Задачи **1**
T1 . . . 1
T2 . . . 2
T5 . . . 3
T7 . . . 5
T8 . . . 6
T9 . . . 7

1 Задачи

T1

Собственные функции. Рассмотрим частицу в очень глубокой потенциальной одномерной яме:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \notin [0,a]; \\ 0. & x \in [0,a]; \end{cases} \qquad H(x, -i\hbar\partial_x)\psi(x) = E\psi(x), \qquad \Rightarrow \qquad \psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0.$$

Тогда решение может быть найдено в виде

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \qquad k^2 = \tfrac{2m}{\hbar^2}E,$$

но в силу требования $\psi(x)|_{x\in\{0,a\}} = 0$, сразу получаем $B = 0$, и условие на k:

$$k = k_n = \frac{\pi n}{a}, \qquad \Rightarrow \qquad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\pi^2 n^2,$$

то есть спектр дискретный.

Из нормировки ψ можем найти

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_0^a dx|\psi(x)|^2 = \frac{|A|^2}{2}a = 1, \qquad \Rightarrow \qquad A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Тогда искомая волнавая функция стационарных состояний и соответсвующие уровни энергии

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\tfrac{\pi n}{a}x\right), \qquad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\pi^2 n^2.$$

Средние значения. Найдём среднее значение для координаты

$$\langle x\rangle = \int_0^a x|\psi_n(x)|^2\,dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^(k_n x)\,dx = \frac{2}{a}\left(\frac{a^2}{4} - \frac{1}{4k_n}\frac{1}{2k_n}\cos(2k_n x)\bigg|_0^a\right) = \frac{a}{2}.$$

Аналогично можем найти среднее значение импульса

$$\langle p\rangle = \int_0^a dx\psi^*\hat{p}\psi = -i\hbar k_n\frac{2}{a}\int_0^a \sin(k_n x)\cos(k_n x)\,dx = -\frac{i\hbar k_n}{a}\int_0^a \sin(2k_n x) = 0,$$

в силу интегрирования по периоду.

Теперь можем посчитать дисперсию величин

$$(\Delta x)^2 = \langle\psi|(\hat{x} - \bar{x})^2|\psi\rangle = \langle\psi|x^2|\psi\rangle - \bar{x}^2,$$

и аналогично с $\hat{p}$. Для координаты среднее квадрата

$$\langle x^2\rangle = \frac{2}{a}x^2\sin^2(k_n x)\,dx = \frac{a^2}{3} + \frac{1}{ak_n}\int_0^a \sin(2k_n x)x\,dx = \frac{a^2}{3} - \frac{1}{2ak_n^2}x\cos(2k_n x)\bigg|_0^a = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2},$$

а соответсвующая дисперсия

$$(\delta x)^2 = a^2\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right).$$

Теперь для импульса

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle = \int_0^a dx \psi^* \left(-\hbar^2 \partial_x^2\right) \psi = \frac{2k_n^2 \hbar^2}{2a} \int_0^a dx \left(1 = \cos(2k_n x)\right) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{a^2}.$$

Сравним с классикой. Понятно, что частица равновероятно может находиться в любой части ящика (в классическом случае), тогда

$$\int_0^a P(x)\, dx = 1, \quad \Rightarrow \quad P(x) = \frac{1}{a}, \qquad \Rightarrow \qquad \langle x \rangle^{\text{кл}} = \int_0^a P(x) x\, dx = \frac{a}{2} = \langle x \rangle.$$

Теперь для импульса, $p \in \{-p_0, p_0\}$, где $P(p_0) = P(-p_0) = 1/2$, тогда

$$\langle p \rangle^{\text{кл}} = P(p_0) p_0 + P(-p_0)(-p_0) = 0 = \langle p \rangle.$$

Аналогично с квадратом координаты

$$\langle x^2 \rangle^{\text{кл}} = \int_0^a \frac{1}{a} x^2\, dx = \frac{a^2}{3} = \lim_{n\to\infty} \langle x^2 \rangle,$$

что прекрасно сходится с принципом соответствия.

T2

Посмотрим теперь на движение частицы в неглубокой потенциальной яме

$$U(x) = \left\{-U_0, |x| < a; \quad 0, |x| \geqslant a. \right. \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x).$$

Так как речь идёт про связанные состояния, то будем считать $E < 0$, тогда, для удобства, переобозначим $E \to -E$. Запишем стационарное уравнение Шредингера, сразу раскрывая $U(r)$, выделяем две области:

$$\begin{cases} \psi'' + k^2 \psi = 0, & |x| < a; \\ \psi'' - \varkappa^2 \psi = 0, & |x| > a; \end{cases} \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \qquad \varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E,$$

В силу симметричности потенциала ($[\hat{I}, \hat{H}] = 0$), решения могут быть найдены, как собственные функции оператора инверсии, то есть в виде четных и нечетных функций. Тогда сразу можем выделить два решения:

$$\psi^+(x) = \begin{cases} A\cos(kx), & |x| < a; \\ Be^{-\varkappa|x|}, & |x| > a; \end{cases} \qquad \psi^-(x) = \begin{cases} A\sin(kx), & |x| < a; \\ B\,\mathrm{sign}(x) e^{-\varkappa|x|}, & |x| > a; \end{cases}$$

где сразу воспользовались L_2 интегрируемостью ψ и выбросили решение вида $e^{\varkappa x}$.

Осталось воспользоваться гладкостью $\psi(x)$, удобнее будет проверить непрерывность логарифмической производной

$$(\ln\psi)' = \frac{\psi'}{\psi}, \quad \Rightarrow \quad \frac{\psi'(a-\varepsilon)}{\psi(a-\varepsilon)} = \frac{\psi'(a+\varepsilon)}{\psi(a+\varepsilon)}, \quad \Rightarrow \quad \varkappa = k\tan(ka), \quad \Leftrightarrow \quad |\cos(ka)| = \frac{ka}{k_0 a},$$

где ввели $k_0^2 = \varkappa^2 + k^2$. Получили трансцендентное уравнение на уровни энергии, анализ которого удобнее всего произвести графически (рис. 1). Ясно, что спектр не просто дискретен, но и ограничен. Четное состояние существует при $k_0 a > 0$, N четных существует при $k_0 a \geqslant (N-1)\pi$. Важно, что решения существуют только при $\operatorname{tg} ka > 0$.

Аналогично, через логарифмическую производную нахожим условие на уровни энергии нечетных решений.

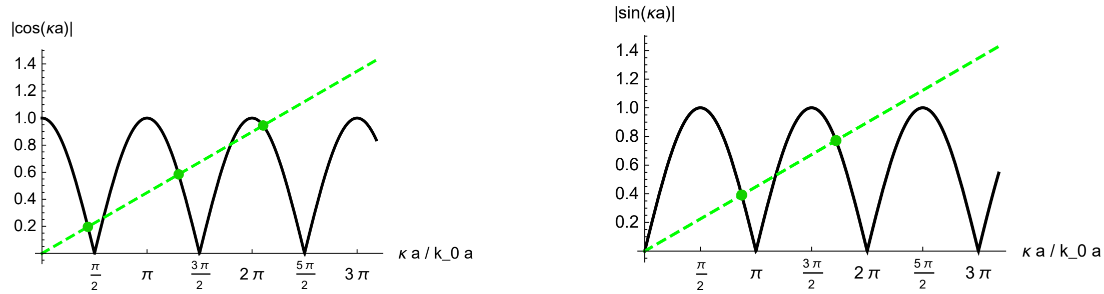

Рис. 1: Трансцендентное уравнение (для четного и нечетного решения) на уровни энергии к задаче T2

T5

I. Найдём уровни энергии и волновые функции связанных состояний ($E < 0$) частицы в поле

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

Гамильтониан системы и стационарное уравнение Шрёдингера:

$$H = -\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} + U(x), \qquad -\frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m}\psi(x) + U(x)\psi(x) = -|E|\psi(x),$$

далее считая $E = -E$, будем решать уравнение

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

В местах, где не происходит скачков производной подходит в качестве решения экспонента, так что будем искать решение в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\varkappa(x+a)}, & x < -a \\ Be^{-\varkappa(x+a)} + Ce^{\varkappa(x-a)}, & |x| < a \\ De^{-\varkappa(x-a)}, & x > a. \end{cases}$$

где введено $\varkappa^2 = 2mE/\hbar^2$.

Можно было бы заметить, что потенциал симметричен, а значит можно искать решение уравнения Шредингера, как собственные функции оператора инверсии: четные и нечетные решения ($A = D$, $B = C$ и $A = -D$, $B = -C$), но мы пойдём другим путём, чтобы посмотреть, как из уравнений вылезет симметрия задачи.

Чтобы найти $\psi(x)$ запишем условия непрерывности и, интегрируя стационарное уравнение Шредингера, уравнение на скачок производной:

$$\left.\begin{aligned} \psi(-a+\varepsilon) &= \psi(-a-\varepsilon), \\ \psi(a+\varepsilon) &= \psi(a-\varepsilon), \\ \psi'(-a+\varepsilon) - \psi'(-a-\varepsilon) &= -2\varkappa_0\psi(-a) \\ \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) &= -2\varkappa_0\psi(a) \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \left.\begin{aligned} A - C - Be^{2a\varkappa} &= 0 \\ B - D + Ce^{2a\varkappa} &= 0 \\ -A + C - Be^{2a\varkappa} + 2A\varkappa_0/\varkappa &= 0 \\ B - D - Ce^{2a\varkappa} + 2d\varkappa_0/\varkappa &= 0 \end{aligned}\right\}$$

Для удобства введем $X = e^{2a\varkappa}$, и выразив из первого уравнения A, из второго B, из третьего C подставим и получим уравнение вида

$$\frac{D\varkappa(\varkappa-\varkappa_0)}{(\varkappa-\varkappa_0)+\varkappa_0 X^{-2}} = d\varkappa_0, \quad \Rightarrow \quad \varkappa^2 - 2\varkappa\varkappa 0 + \varkappa 0^2 - \frac{\varkappa 0^2}{X^2} = 0, \quad \Rightarrow \quad \boxed{\varkappa_\pm = (1 \pm e^{-2A\varkappa})\varkappa_0}, \tag{1}$$

что составляет условие совместности полученной СЛУ,

Забавный факт: составим матричку для СЛУ и найдём определитель

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -X & -1 & 0 \\ 0 & 1 & X & -1 \\ \varkappa - 2\varkappa 0 & \varkappa X & -\varkappa & 0 \\ 0 & \varkappa & -\varkappa X & 2\varkappa 0 - \varkappa \end{pmatrix}, \qquad \det M = 4(X^2(\varkappa-\varkappa_0)^2 - \varkappa_0^2).$$

Решение уравнения $\det M = 0$ относительно $\varkappa$ приводит к тем же корням, что и уравнение (1): $\varkappa = (1 \pm e^{-2A\varkappa})\varkappa_0$, таким образом СЛУ будет совместна, если вырождена.

Стоит заметить, что $\mathrm{rg}\, M(\varkappa_\pm) = 3$, тогда, решая уравнение относительно A, B, C, находим

$$\varkappa_+: \qquad A = D,\ B = C = \frac{A}{1+e^{2a\varkappa}}, \qquad \text{четное решение}$$

$$\varkappa_-: \qquad A = -D,\ B = -C = -\frac{A}{-1+e^{2a\varkappa}}, \qquad \text{нечетное решение}$$

Для наглядности можем их построить[1] . **Нормировка**. Для нахождения волновой функции, найдём коэффициент A из нормируемости на 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_+(x)|^2\, dx = 1, \quad \Rightarrow \quad A_+^2 = \frac{\varkappa}{2}\frac{(1+e^{2a\varkappa})^2}{1+e^{2a\varkappa}+2a\varkappa}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_-(x)|^2\, dx = 1, \quad \Rightarrow \quad A_-^2 = \frac{\varkappa}{2}\frac{(-1+e^{2a\varkappa})^2}{-1+e^{2a\varkappa}-2a\varkappa}$$

[1] Само собой зависимость $\psi(x)$ от x.

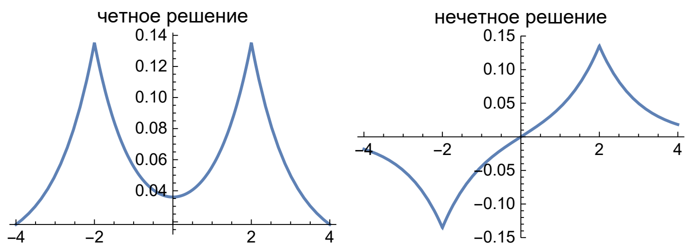

Рис. 2: Четное и нечётное решение к Т5

Таким образом нашли собственные функции к этой задаче.

Стоит вспомнить, что уравнение (1) – трансцендентное уравнение, где $\varkappa = \varkappa(E)$, то есть уравнение на уровни энергии. Как мы показали, $\varkappa_+$ соответствует четному решению и $\varkappa_-$ нечётному, из достаточно убедительного рисунка[2] №3 видно, что $E^+ > E^-$.

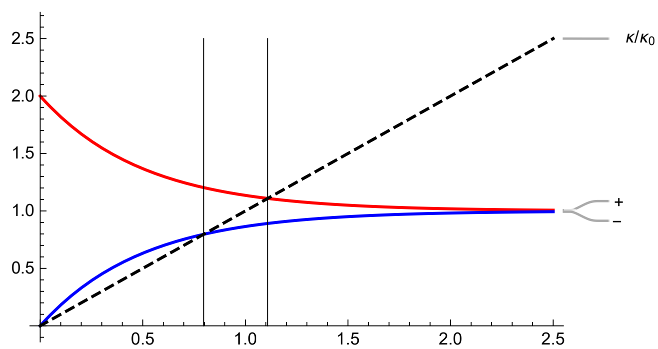

Рис. 3: Решение трансцендентного уравнения к Т5

Далекие ямы. Рассмотрим предельный случай $\varkappa_0 a \gg 1$, соответствующий достаточно далёким ямам, тогда $\varkappa_+ \approx \varkappa_- \approx \varkappa_0$, то есть система вырождается по энергии.

Вероятность перехода. В силу существования чётного и нечётного решения, можем построить состояния, соответствующие нахождению в правой (ψ_a) и левой (ψ_{-a}) ямах:

$$\begin{cases} \psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ + \psi_-); \\ \psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_+ - \psi_-); \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a + \psi_{-a}); \\ \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a - \psi_{-a}). \end{cases}$$

Теперь, из уравнения Шрёдингера, найдём эволюцию во времени для собственных состояний:

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi = -E\psi, \quad \Rightarrow \quad \psi_+(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_+ t}\psi_+(x), \quad \psi_-(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_- t}\psi_-(x).$$

Для состояния ψ_a найдём зависимость от времени в базисе ψ_a, ψ_{-a}:

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

Вероятность перехода можем найти, как

$$P = |\langle\psi_a(x,t)|\psi_{-a}(x)\rangle|^2 = \left|\frac{1}{2}\underbrace{\left(\int |\psi_{-a}|^2\,dx\right)}_{\equiv 1}\left(e^{-iE^+t/\hbar} - e^{-iE^-t/\hbar}\right)\right|^2 = \sin^2\left(\frac{E^+ - E^-}{2\hbar}t\right).$$

Можем чуть более явно найти вероятность, считая $\varkappa_0 a \gg 1$, тогда

$$\varkappa_+^2 \approx \varkappa_0^2 + \frac{2\varkappa_0^2}{e^{2\varkappa_0 a}}, \quad \varkappa_-^2 \approx \varkappa_0^2 - \frac{2\varkappa_0^2}{e^{2\varkappa_0 a}}, \quad \Rightarrow \quad P = \sin^2\left(\frac{\varkappa_0^2\hbar}{m}e^{-2\varkappa_0 a}t\right).$$

[2] Где по Ox отложена $\varkappa \sim \sqrt{E}$, оси действительно полезно подписывать.

T7

Рассмотрим движение в потенциальном поле

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

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H} = -\tfrac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + U(x), \qquad \hat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

Подставляя, находим

$$\psi''(x) - \tfrac{2m}{\hbar^2}\left(U(x) - E\right)\psi(x) = 0, \qquad \Rightarrow \qquad \psi(x) = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikx} + \beta_1 e^{-ikx}, & x \in [0, a]; \\ \alpha_2 e^{ik(x-a)} + \beta_2 e^{-ik(x-a)}, & x \in [a, 2a]; \end{cases}$$

где рассмотрели решение на двух областях: $[0, a]$ и $[a, 2a]$, и ввели $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$.

Запишем условие на непрерывность $\psi(x)$ и скачок первой производной

$$\left.\begin{aligned} \psi(a+\varepsilon) = \psi(a-\varepsilon), \\ \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) = -2\varkappa_0\psi(a), \end{aligned}\right\} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}, \qquad A = \begin{pmatrix} e^{ika}\left(1 - \frac{\varkappa_0}{ik}\right) & -e^{-ika}\frac{\varkappa_0}{ik} \\ e^{ika}\frac{\varkappa_0}{ik} & e^{-ika}\left(1 + \frac{\varkappa_0}{ik}\right) \end{pmatrix}$$

Здесь, для удобства, ввели связь коэффициентов через матрицу A.

В силу периодичности потенциала, $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$, и решение может быть найдено в виде функций Блоха[3]

$$U(x+a) = U(x), \qquad \Rightarrow \qquad \psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x).$$

Тогда, подставляя предполагаемое решение, находим

$$\begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = e^{iKa} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}.$$

Получается, матрица A должна быть скалярна, чего можем добиться дополнительными условиеями на α и β:

$$\lambda^2 - (\operatorname{tr} A)\lambda + \det(A) = 0, \qquad \operatorname{tr} A = e^{ika}\left(1 - \tfrac{\varkappa_0}{ik}\right) + e^{-ika}\left(1 + \tfrac{\varkappa_0}{ik}\right) \overset{\text{def}}{=} 2\rho, \qquad \det A = 1.$$

Подставляя условие из $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$, находим

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

что, вроде, носит гордое имя дисперсионного соотношения. Подставляя[4] ρ находим выражение для K:

$$\cos(Ka) = \cos(ka) - \tfrac{\varkappa_0}{k}\sin(ka).$$

Так как $Ka \in \mathbb{R}$, то дисперсионное соотношение становится условием на допустимые значения энергии и, из уравнения и достаточно убедительного рисунка, можем сделать вывод о разрешенных зонах. Действительно, для того, чтобы зона была разрешенной необходимо, чтобы

$$|\cos(k[E]a) - \tfrac{\varkappa_0}{k[E]}\sin(k[E]a)| < 1, \tag{2}$$

на что чуть подробнее посмотрим в предельных случаях.

Построим $|\cos(k[E]a) - \frac{\varkappa_0}{k[E]}\sin(k[E]a)|$ для $\varkappa_0 a \ll 1$ (слабая связь) и $\varkappa_0 a \gg 1$ (сильная связь). Видно, что слабой связи соответствует почти непрерывный спектр $\cos(Ka) \approx \cos(ka)$ и $K \approx k + \frac{2\pi n}{a}$, а сильная связб приводит к почти дискретному спектру с $ka \approx \pi n$.

По определению, эффективной массой частицы называется

$$m^* \overset{\text{def}}{=} \hbar^2 \left(\frac{d^2E}{dK^2}\right)^{-1},$$

где $\hbar K$ – квазиимпульс.

Считая k малым, находим

$$\frac{1}{6}k^2\left(a^3\varkappa_0 - 3a^2\right) - a\varkappa_0 + 1 = \cos(aK), \qquad \Rightarrow \qquad E(K) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{6}{a^2}\frac{1 - \cos(Ka) - a\varkappa_0}{3 - \varkappa_0 a}.$$

Тогда эффективная масса система равна

$$E''_{KK} = \frac{3\hbar^2\cos(aK)}{m\,(3 - a\varkappa_0)}, \qquad \Rightarrow \qquad m^* = m\frac{1 - a\varkappa_0/3}{\cos(aK)},$$

которое $a\varkappa_0 \ll 1$ и $aK \ll 1$ переходит в классический случай!

[3] Действительно, $\psi(x) = e^{Ka}F(x)$, где $F(x+a) = F(x)$, тогда $\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x)$.

[4] Имеет смысл выразить $\rho = \cos(ak) - \frac{\varkappa_0}{k}\sin(ak)$.

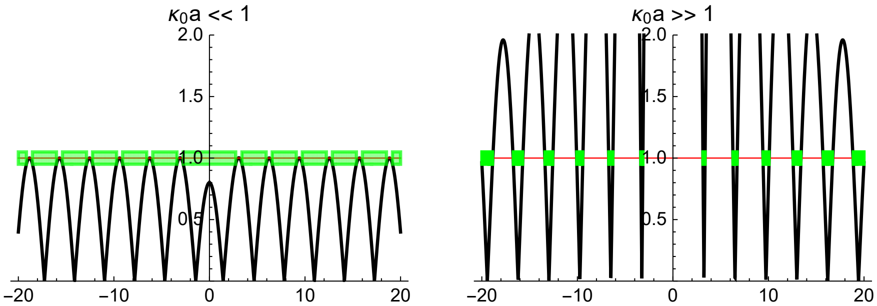

Рис. 4: Слабая и сильная связь в задаче Т7

Т8

Рассмотрим связанное сферически симметричное состояние частицы в сфрически симметричной потенциальной яме, вида

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < r_0, \\ 0, & r \geqslant r_0, \end{cases}$$

в частности случаи $\dim \in \{1, 2, 3\}$.

Как обычно, запищем стационарное уравнение Шрёдингера, в силу связного состояния ($E < 0$)переобозначим $E \to -E$:

$$\hat{H}\psi = \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U\right)\psi = -E\psi, \qquad \Rightarrow \qquad \triangle\psi - \frac{2m}{\hbar^2}(U+E)\psi = 0.$$

Раскрывая $U(r)$, выделяем две области:

$$\begin{cases} \triangle\psi + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \triangle\psi - \varkappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E), \qquad \varkappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E.$$

Осталось раскрыть лапласиан, считая $\psi \equiv \psi(r)$ (сферически симметричное состояние)

$$\triangle|_{\dim=1} = \partial_r^2, \qquad \triangle|_{\dim=2} = \tfrac{1}{r}\partial_r + \partial_r^2, \qquad \triangle|_{\dim=3} = \tfrac{2}{r}\partial_r + \partial_r^2.$$

Одномерный случай. Подробно разобран в Т2, здесь ограничимся только указанием итоговой охапки диффуров и ответа:

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \psi'' - \varkappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad \psi^+(r) = \begin{cases} A\cos(kr), & r < r_0; \\ Be^{-\varkappa r}, & r > r_0; \end{cases} \qquad \psi^-(r) = \begin{cases} A\sin(kr), & r < r_0; \\ Be^{-\varkappa r}, & r > r_0; \end{cases}$$

где ψ^+ и ψ^- – четное и нечетное решение (в силу симметричности потенциала), а A и B известны из условий нормировки, непрерывности и гладкости.

Двухмерный случай. Дифференциальное уравнение на $\psi(r)$ примет вид

$$\begin{cases} \psi'' + \frac{1}{r}\psi' + k^2\psi = 0, \\ \psi'' + \frac{1}{r}\psi' - \varkappa^2\psi = 0. \end{cases}$$

В силу сферической симметрии задачи, решение может быть найден в виде функций Бесселя J_n и Y_n:

$$\psi(r) = \begin{cases} A_1 J_0(kr) + B_1 Y_0(kr), & r < r_0; \\ A_2 J_0(i\varkappa r) + B_2 Y_0(-i\varkappa r), & r > r_0. \end{cases}$$

В силу нормируемости ψ должно выполняться равенство $B_2 = A_2/i$.

Дальше вспоминаем, что $\psi(r \leqslant r_0)|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)|_{r=r_0}$, также $\psi(r \leqslant r_0)'|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)'|_{r=r_0}$, плюс $\int |\psi(r)|^2\, dr = 1$, что даёт нам три уравнения, на три коэффициента. Однако ожидается дискретность спектра, так что необходимо дополнительное условие, чтобы прийти к уравнению на E.

Можно предположить, что волновой функции ненормально уходить в бесконечность (даже оставаясь L_2 интегрируемой), тогда $B_1 = 0$, и мы получаем дискретный спектр.

Трёхмерный случай. Попробуем найти решение в виде $\psi(r) = \mu(r)\nu(r)$, где $\mu(r) = \exp\left(-\int \frac{f(r)}{2}\, dr\right)$, иногда это помогает диффурах вида $F'' + f(r)F' + F = 0$:

$$\begin{cases} \psi'' + \frac{2}{r}\psi' + k^2\psi = 0, & r < r_0; \\ \psi'' + \frac{2}{r}\psi' - \varkappa^2\psi = 0, & r > r_0; \end{cases} \qquad \nu(r) = e^{-\ln r} = \frac{1}{r}, \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \nu'' + k^2\nu = 0, & r < r_0; \\ \nu'' - \varkappa^2\nu = 0, & r > r_0. \end{cases}$$

А такое уравнение на $\nu(r)$ уже решается, итого находим

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{A_1}{r} e^{-ikr} + \frac{B_1}{r} e^{ikr}, & r < r_0; \\ \frac{A_2}{r} e^{-\varkappa r} + \frac{B_2}{r} e^{\varkappa r}, & r > r_0. \end{cases}$$

Осталось наполнить это физическим смыслом: при $r > r_0$ требование нормировки приведет к $B_2 = 0$, при $r < r_0$ для наглядности перепишем в тригонометрических функциях:

$$\psi(r < r_0) = -\frac{iA_1 \sin(kr)}{r} + \frac{A_1 \cos(kr)}{r} + \frac{iB_1 \sin(kr)}{r} + \frac{B_1 \cos(kr)}{r}, \quad \Rightarrow \quad B_1 = -A_1,$$

из того же требования нормируемости функции.

Из непрерывности в $r = r_0$ находим:

$$\psi(r \leqslant r_0)|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)|_{r=r_0}, \quad \Rightarrow \quad A_2 = -2iA_1 e^{r_0\varkappa} \sin(kr_0).$$

Выразив все коэффициенты через A_1, подставим их в условие глакзкости $\psi(r)$:

$$\psi(r \leqslant r_0)'|_{r=r_0} = \psi(r \geqslant r_0)'|_{r=r_0}, \quad \Rightarrow \quad k\cos(kr_0) + \varkappa \sin(kr_0) = 0, \quad \Rightarrow \quad \boxed{k[E] = -\varkappa[E] \cdot \operatorname{tg}\left(k[E] r_0\right)},$$

это трансцендентное уравнение на E имеет решения, соответсвенно выделяет дискретный спектр уровней энергии.

Осталось найти A_1 из условия нормировки, к сожалению через элементарные функции у меня это условие не выражается, возможно выше была вычислительная ошибка, но система ± физична. Для начала посчитаем плотность вероятности

$$|\psi(r < r_0)|^2 = \frac{4A_1^2 \left(k\cos\left(k\left(r - r_0\right)\right) - \varkappa \sin\left(k\left(r - r_0\right)\right)\right)^2}{r^2\left(\varkappa^2 + k^2\right)}, \qquad |\psi(r > r_0)|^2 = \frac{4A_1^2 k^2 e^{2\varkappa(r_0 - r)}}{r^2\left(\varkappa^2 + k^2\right)}.$$

тогда условие нормировки:

$$\int_0^{r_0} |\psi(r < r_0)|^2\, dr + \int_{r_0}^{\infty} |\psi(r > r_0)|^2\, dr = 1, \quad \Rightarrow \quad A_1^{-2} = 8e^{2\varkappa r_0} \operatorname{Ei}\left(-2r_0\varkappa\right) \sin(kr_0)^2 + 4k \operatorname{Si}\left(2kr_0\right),$$

где Si – интегральный синус, Ei – интегральная экспонента, таким образом нашли волновую функцию и уровни энергии:

$$\psi(r) = 2A_1 \begin{cases} \sin(kr)/r, & r < r_0; \\ \sin(kr_0)\, e^{\varkappa(r_0 - r)}/r, & r > r_0. \end{cases}$$

T9

Найдём уровни энергии трёхмерного изотропного гармонического осциллятора в ПДСК. Запишем уравнение Шрёдингера примет вид

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

и перейдём к безразмерным величинам

$$\hat{\boldsymbol{Q}} = \frac{\hat{\boldsymbol{q}}}{q_0}, \quad \hat{\boldsymbol{P}} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p_0} = -i\partial_{\boldsymbol{Q}}, \qquad p_0 = \sqrt{m\omega\hbar}, \quad q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \Rightarrow \quad \hat{H}_Q = \frac{1}{2}\left(Q^2 + \hat{P}^2\right) = \hat{H}/(\hbar\omega).$$

Для благоприятного разделения переменных[5] представим $\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, и $E = E_x + E_y + E_z$:

$$\frac{1}{2}\left(x^2 + y^2 + z^2 - \left(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2\right)\right)\psi_x\psi_y\psi_z = \frac{1}{\hbar\omega}(E_x + E_y + E_z)\psi_x\psi_y\psi_z.$$

Нетрудно получить

$$\left(x^2 - \frac{\psi_x''(x)}{\psi_x(x)} - \frac{2E_x}{\hbar\omega}\right)\psi_x\psi_y\psi_z + \ldots \left(z^2 - \frac{\psi_z''(z)}{\psi_z(z)} - \frac{2E_z}{\hbar\omega}\right)\psi_x\psi_y\psi_z = 0,$$

таким образом переменные разделились и мы получили три независимых уравнения одномерных осцилляторов:

$$\begin{cases} \psi_x''(x) + \left(\frac{2E_x}{\hbar\omega} - x^2\right)\psi_x(x) = 0, \\ \psi_y''(y) + \left(\frac{2E_y}{\hbar\omega} - y^2\right)\psi_y(y) = 0, \\ \psi_z''(z) + \left(\frac{2E_z}{\hbar\omega} - z^2\right)\psi_z(z) = 0. \end{cases} \quad \Rightarrow \quad E_i = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n_i\right).$$

[5] Здесь и далее $\boldsymbol{Q} = (x,\, y,\, z)^{\mathrm{T}}$ – обезразмеренные для удобства перменные.

Так приходим к выражению для энергии изотропного гармонического осциллятора через число квантов по каждой из осей:

$$E = E_x + E_y + E_z = \hbar\omega\left(\frac{3}{2} + n_x + n_y + n_z\right),$$

где явно видно вырождение уровней энергии, при $n_x + n_y + n_z = n$. Нетруно посчитать[6] , что

$$\#(n) = \mathrm{card}\,\{(n_x,\, n_y,\, n_z) \mid n_x + n_y + n_z = n\} = \frac{(n+1)(n+2)}{2},$$

что и является кратностью вырождения.

Заметим, что $\#(0) = 1$, $\#(1) = 3$, $\#(2) = 6$, тогда

$$\begin{aligned} 2 \cdot \big(\#(0)\big) &= 2, \\ 2 \cdot \big(\#(0) + \#(1)\big) &= 8, \\ 2 \cdot \big(\#(0) + \#(1) + \#(2)\big) &= 20, \end{aligned}$$

что намекает на некоторую связь с магическими числами (ЛЛ3, §118: модель оболочек).

[6] $n \geqslant 0$.