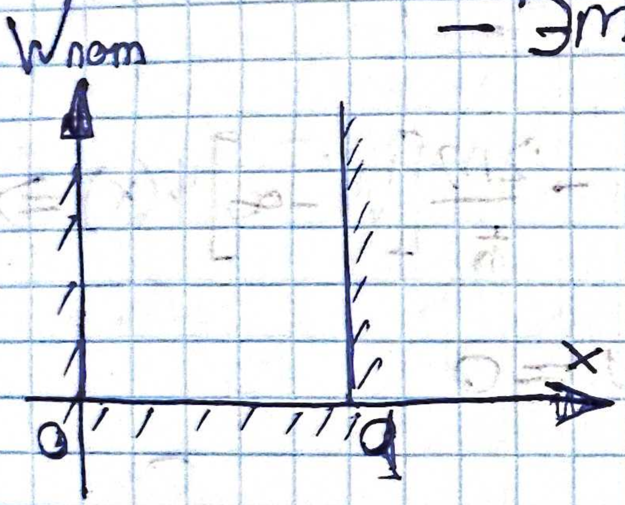
Лекция 7–8

Важнейшая модельная задача кв. механики — это „потенциальная яма"



$$W_{пот}(x) = \begin{cases} +\infty, & x \le 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ +\infty, & x \ge a \end{cases}$$

Запишем ЗСЭ: $\hat{W}\psi = W\psi$

С одной стороны: $\hat{W} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\bar{r}, t) = W\psi(\bar{r}, t)$

с другой: $\hat{W} (\equiv \hat{H}) = \hat{W}_{кин} + \hat{W}_{пот} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + W_{пот}(\vec{r}) =$

$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + W_{пот}(r) \Rightarrow$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)+W_{пот}(\vec{r})\psi(\vec{r},t)=W\psi(\vec{r},t) \quad и$$

Следовательно

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=-\dfrac{i}{\hbar}W\psi(\vec{r},t) \\ \Delta\psi(\vec{r},t)=-\dfrac{2m}{\hbar^2}\left[W-W_{пот}(\vec{r})\right]\psi(\vec{r},t) \end{cases}$$

Можно ожидать, что $\psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})\varphi(t)$ – метод разделения переменных

В этом случае $\begin{cases} \cancel{\psi(\vec{r})}\dot{\varphi}(t)=-\dfrac{i}{\hbar}W\cancel{\psi(\vec{r})}\varphi(t) \\ \Delta\psi(r)\cancel{\varphi(t)}=-\dfrac{2m}{\hbar^2}\left[W-W_{пот}(\vec{r})\right]\psi(r)\cancel{\varphi(t)} \end{cases} \Rightarrow$

$$\Rightarrow \begin{cases} \varphi(t)\sim e^{-i\frac{W}{\hbar}\cdot\cancel{t}\,x} \\ \Delta\psi(t)=-\dfrac{2m}{\hbar^2}\left[W-W_{пот}(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) \end{cases}$$

В нашем случае удобно разбить область решения на 3 части:

1) $x\leq 0: W_{пот}=\infty \Rightarrow \psi''(x)=-\dfrac{2m}{\hbar}\left[W-\infty\right]\psi(x)\Rightarrow$

$$\Rightarrow \psi''=\infty\psi \Rightarrow \psi=0$$

3) $x\geq a: W_{пот}=\infty \Rightarrow \psi=0$ аналогич. образом

2) $0<x<a: W_{пот}=0 \Rightarrow \psi''(x)=-\dfrac{2m}{\hbar^2}W\psi(x)$

Обозначаем $\dfrac{2mW}{\hbar^2}=k^2$, получим $\psi''=(\pm ik)^2\psi \Rightarrow \psi(x)\sim e^{\pm ikx}$

$$\Rightarrow \psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

Итак, $\psi(\vec{r},t)=\psi(x)\varphi(t)=\begin{cases}0, & x<0\\ (Ae^{ikx}+Be^{-ikx})e^{-i\omega t}, & 0<x\leq a, \ \omega=\frac{W}{\hbar}\\ 0, & x>a\end{cases}$

Определим A и B из условия непрерывности $\psi(\vec{r},t)$:

$$\psi(0,t)=0=(Ae^{0}+Be^{0})\cancel{e^{-i\omega t}} \Rightarrow A+B=0 \Rightarrow B=-A$$

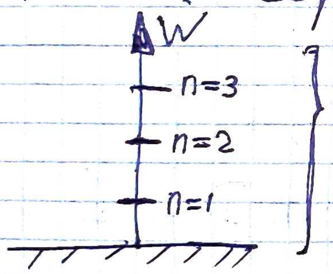
$$\psi(a,t)=0=(Ae^{ika}-Ae^{-ika})\cancel{e^{-i\omega t}} \Rightarrow e^{ika}-e^{-ika}=0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{e^{ika}-e^{-ika}}{2}=0 \Rightarrow 2i\sin ka=0 \Rightarrow \sin ka=0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow ka=\pi n, \ n\in Z \Rightarrow k=\frac{\pi n}{a} \Rightarrow \sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}=\frac{\pi n}{a} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow W=\frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}, \text{ где } n=0,1,2\ldots$$

Таким образом:



локализация частицы в ПЯ приводит к самопроизвольному (естественному) возникн. энерг. ур.

$$\omega=\frac{W}{\hbar}=\frac{\pi^2\hbar n^2}{2ma^2}=\omega(n)$$ — дискретность спектра

Найти волновое число: $k=\frac{p}{\hbar}=\sqrt{\frac{2mW}{\hbar}}=\sqrt{\frac{2m\left(\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2}\right)}{\hbar^2}}=\frac{\pi n}{a}$

— тот же самый, что и в наших обозначениях $\left(k^2=\frac{2mW}{\hbar^2}\right) \Rightarrow k=k(n)$.

При этом длина волны де Бройля $\lambda=\frac{2\pi}{k}=\frac{2\pi a}{\pi n} \Rightarrow$

$$\Rightarrow a=n\frac{\lambda}{2} \Rightarrow$$

$\Rightarrow$ В ПЯ формируется стоячие волны де Бройля

$\Rightarrow$ каждый энергетич. уровень (опр. числом, n) соотв. стоячей волне де Бройля — это и есть боровские орбиты. Поскольку на разных орбитах энергия микрочастицы различается ($W = W(n)$), переходы с одной орбиты на другую сопровождаются испусканием (или поглощением) энергии.

Обратим внимание на ЗСИ:

$$\hat{p}\psi - \bar{p}\psi \Rightarrow -i\hbar\nabla\left[Ae^{i(kx-\omega t)} - Ae^{-i(kx+\omega t)}\right] =$$

$$= p_x\left[Ae^{i(kx-\omega t)} - Ae^{-i(kx+\omega t)}\right]$$

$$-i\hbar(ik)Ae^{i(kx-\omega t)} + (i\hbar)(-ik)Ae^{-i(kx+\omega t)} =$$

$$= p_x\left[Ae^{i(kx-\omega t)} \overset{-}{\cancel{+}} Ae^{-i(kx+\omega t)}\right]$$

$$\hbar k\left(e^{ikx} + e^{-ik}\right) = p_x\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right)$$ — тождества нет!

$\Downarrow$

импульс вдоль OX не сохраняется?

Это произошло потому что $\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ $- Ae^{-i(kx+\omega t)} = \psi_1(x,t) + \psi_2(x,t)$

Поскольку волновая фун. $\psi(x,t)$ явл суперпозицией других, более базисных, фун. ($\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$), то каждый раз при измерении импульса прибор покажет p_1 или p_2, но не какие-то фикс. зн. В этом случае имеет смысл ~~повторить~~ говорить лишь о среднем значении. Для этого поступаєм так:

$$\hat{F}\psi - \tilde{F}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = \tilde{F}(C_1\psi_1) + \tilde{F}(C_2\psi_2) =$$

$$= C_1\tilde{F}\psi_1 + C_2\tilde{F}\psi_2 = C_1 f_1 \psi_1 + C_2 f_2 \psi_2 \neq f(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \langle\psi|\hat{F}\psi\rangle = |C_1 f_1 \psi_1 + C_2 f_2 \psi_2\rangle = \langle\psi|\hat{F}\psi\rangle = \langle C_1\psi_1 + C_2\psi_2 | C_1 f_1 \psi_1 +$$

$$+ C_2 f_2 \psi_2\rangle = \langle C_1\psi_1 | C_1 f_1 \psi_1\rangle + \langle C_1\psi_1 | C_2 f_2 \psi_2\rangle + \langle C_2\psi_2 | C_1 f_1 \psi_1\rangle +$$

$$+ \langle C_2\psi_2 | C_2 f_2 \psi_2\rangle = C_1^* \langle \psi_1 | (C_1\psi_1) | \psi_1\rangle + C_1^* C_2 f \cancel{\langle\psi_1|\psi_2\rangle}^{0} +$$

$$C_2^* C_1 f_1 \cancel{\langle\psi_2|\psi_1\rangle}^{0} + C_2^* f_2 C_2 \cancel{\langle\psi_2|\psi_2\rangle}^{0} =$$

$$= |C_1|^2 f_1 + |C_2|^2 f_2 = p_1 \cdot f_1 + p_2 f_2 = \langle f\rangle \Rightarrow \langle f\rangle = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle$$

Тогда $\langle p_x\rangle = \langle\psi|\hat{p}_x|\psi\rangle = \int \psi^* \hat{p} \cdot \psi \, dV = \int_0^a [A[e^{i(kx-\omega t)} - e^{-i(kx+\omega t)}]]^* \cdot (-ik) \cdot$

$$\frac{\partial}{\partial x}(A[e^{i(kx-\omega t)} - e^{-i(kx+\omega t)}] dx = \ldots = 0$$