Задача № 5.122.

В момент $t = 0$ волновая функция некоторой частицы имеет вид $\psi(x) = A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2} + ikx\right)$. Изобразить примерный вид зависимостей:

а) действительной части ψ от x;

б) $|\psi|^2$ от x.

Решение:

Найдём действительную часть волновой функции:

$$\psi(x) = A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2} + ikx\right) = A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right)\exp(ikx) = A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right)(\cos kx + i\sin kx) =$$
$$= \left[A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right)\cos kx\right] + i\left[A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right)\sin kx\right] \quad (1)$$

Отсюда следует, что действительная часть волновой функции равняется:

$$\mathrm{Re}\{\psi(x)\} = A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right)\cos kx \quad (2)$$

Графически примерный вид зависимости (2) приведен на рисунке 1:

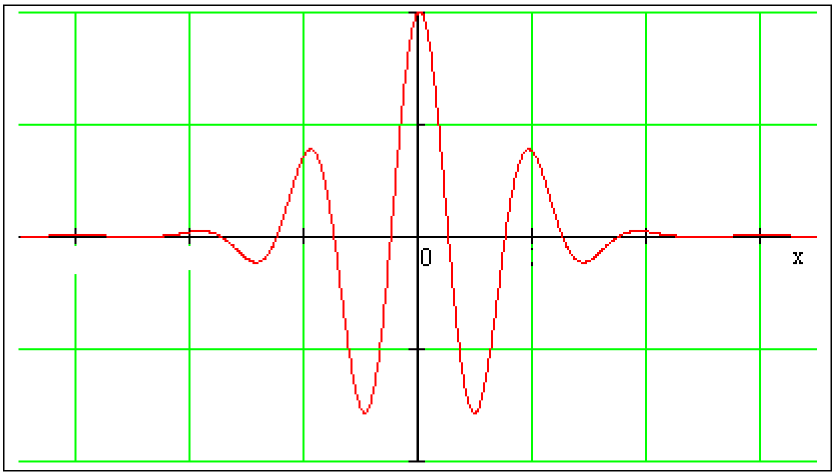

Рисунок 1

Найдём квадрат модуля волновой функции:

$$|\psi|^2 = \psi\psi^* = A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2} + ikx\right)A\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2} - ikx\right) = A^2\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3)$$

Графически примерный вид зависимости (3) приведен на рисунке 2:

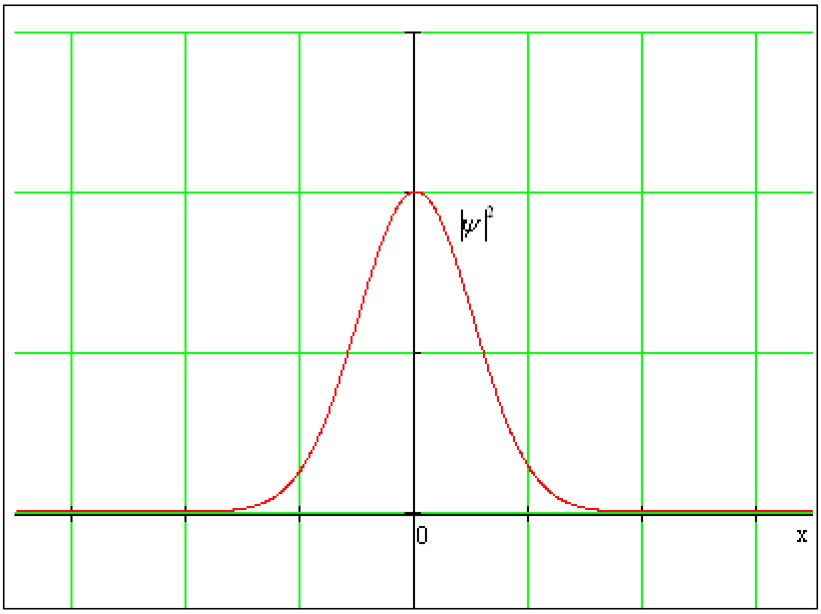

Рисунок 2

Ответ: а) $\mathrm{Re}\{\psi(x)\} = A\exp\left(-\dfrac{x^2}{4\sigma^2}\right)\cos kx$,

б) $|\psi|^2 = A^2\exp\left(-\dfrac{x^2}{2\sigma^2}\right)$.

Задача № 5.123.

Найти частное решение временного уравнения Шредингера для свободно движущейся частицы массы m.

Решение:

Временное уравнение Шредингера имеет вид:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U(x,y,z,t)\Psi \tag{1}$$

Для свободно движущейся частицы $U(x,y,z,t)=0$, поэтому приходим к дифференциальному уравнению:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi \tag{2}$$

Рассмотрим одномерный случай:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \tag{3}$$

Пси-функция $\Psi(x,t)=\psi(x)f(t)$. Подставим в дифференциальное уравнение (3):

$$i\hbar\psi\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}f\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{4}$$

Обозначим $i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\frac{1}{f}=E$, тогда дифференциальное уравнение (4) примет вид:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0 \tag{5}$$

Пусть $\frac{2m}{\hbar^2}E=k^2$, тогда:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\psi=0 \tag{6}$$

Корни характеристического уравнения для дифференциального уравнения (6) равняются ik и $-ik$. Тогда решение дифференциального уравнения (6) имеет вид:

$$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \tag{7}$$

где A B $k=\frac{p}{\hbar}$ - модуль волнового вектора. Учитывая, что $\frac{2m}{\hbar^2}E=k^2$, получим, что импульс микрочастицы равняется $p=\sqrt{2mE}$. Отсюда следует, что E -

энергия частицы. Учитывая, что $i\hbar \frac{\partial f}{\partial t}\frac{1}{f} = E$, где E - энергия частицы, получим дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + i\frac{E}{\hbar} f = 0 \qquad (8)$$

Корень характеристического уравнения (8) равняется $-i\omega$, где $\omega = \frac{E}{\hbar}$. Тогда решение дифференциального уравнения имеет вид:

$$f(t) = Ce^{-i\omega t} \qquad (9)$$

Так как пси-функция свободной частицы равняется $\Psi(x,t) = \psi(x)f(t)$, то решение дифференциального уравнения (3) равняется произведению функций (7) и (9):

$$\Psi(x,t) = \psi(x)f(t) = A_1 e^{i(kx-\omega t)} + A_2 e^{-i(kx-\omega t)} \qquad (10)$$

где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\omega = \frac{E}{\hbar}$, A_1 и A_2 - некоторые постоянные.

В выражение (10) первое слагаемое соответствует дебройлевской волне, распространяющейся в положительном направлении оси x, второе слагаемое соответствует дебройлевской волне, распространяющейся в противоположном направлении.

Ответ: $\Psi(x,t) = A_1 e^{i(kx-\omega t)} + A_2 e^{-i(kx-\omega t)}$, где $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\omega = \frac{E}{\hbar}$.

Задача № 5.124.

Электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Найти ширину ямы, если разность энергии между уровнями с $n_1 = 2$ и $n_2 = 3$ составляет $\Delta E = 0.30\,эВ$.

Решение:

Потенциальная яма имеет вид, представленный на рисунке 1:

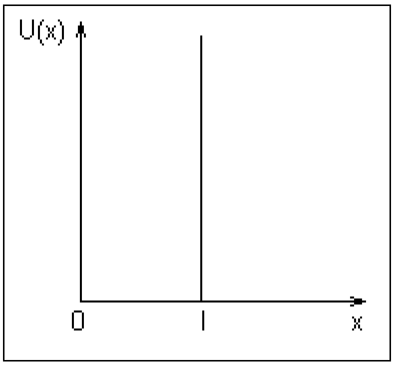

Рисунок 1

Потенциальная энергия:

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

Составим уравнение Шредингера для области $0 < x < l$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2} E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) \qquad (3)$$

Из условия непрерывности пси-функции, имеем:

$$\begin{aligned} &\psi(0) = 0 \Rightarrow \sin\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0 \\ &\psi(l) = 0 \Rightarrow \sin kl = 0 \Rightarrow kl = \pm\pi n, n = 1,2,3,... \end{aligned} \qquad (4)$$

$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right) \tag{5}$$

Учитывая, что $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, получим:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{\pi^2}{l^2}n^2 \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 \tag{6}$$

Разность энергий 3-го и 2-го энергетического уровня равняется:

$$\Delta E = 9\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} - 4\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} = 5\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \tag{7}$$

Отсюда следует, что ширина потенциальной ямы:

$$l = \pi\hbar\sqrt{\frac{5}{2m\Delta E}} \tag{8}$$

Подставляя числовые значения, получим:

$$l = 2.5\cdot 10^{-9}\ \text{м} = 2.5\ \text{нм} \tag{10}$$

Ответ: ширина потенциальной ямы равняется $l = 2.5\ \text{нм}$.

Задача № 5.125.

Частица находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме ширины l с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 < x < l$). Найти вероятность пребывания частицы в области $\frac{l}{3} < x < \frac{2l}{3}$.

Решение:

Потенциальная яма, в которой находится частица, имеет вид (рисунок 1):

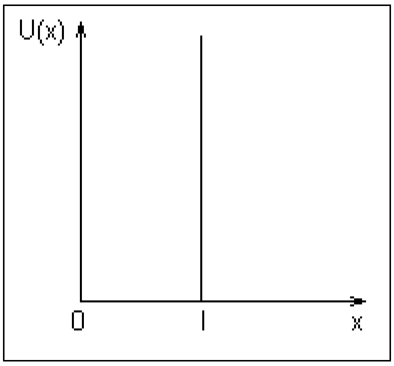

Рисунок 1

Потенциальная энергия частицы:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, x < 0 \\ 0, 0 < x < l \\ \infty, x > l \end{cases}$$

Составим уравнение Шредингера для области $0 < x < l$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x) = A \sin(kx + \alpha) \qquad (3)$$

На пси-функцию, которая является решением Шредингера, накладываются следующие стандартные условия: непрерывность, гладкость, конечность и однозначность. Из условия непрерывности следует:

$$\begin{aligned} &\psi(0) = 0 \Rightarrow \sin\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0 \\ &\psi(l) = 0 \Rightarrow \sin kl = 0 \Rightarrow kl = \pm\pi n, n = 1, 2, 3, ... \end{aligned} \qquad (4)$$

Таким образом, пси-функция (3) примет вид:

$$\psi(x) = A\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right) \tag{5}$$

Учитывая, что $k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}E$, получим:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{\pi^2}{l^2}n^2 \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 \tag{6}$$

Мы получили энергетический спектр частицы. Определим постоянную A в выражении для пси-функции (4), используя условие нормировки:

$$\int_0^l |\psi|^2\,dx = 1 \Rightarrow A^2\int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi}{l}nx\right)dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}} \tag{7}$$

Таким образом, пси-функции стационарных состояний частицы в прямоугольной одномерной яме с абсолютно непроницаемыми стенками, имеют вид:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right) \tag{8}$$

Пси-функция основного состояния ψ_1 равняется:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi}{l}x\right) \tag{9}$$

Графически зависимость $\psi_1(x)$ представлена на рисунке 2:

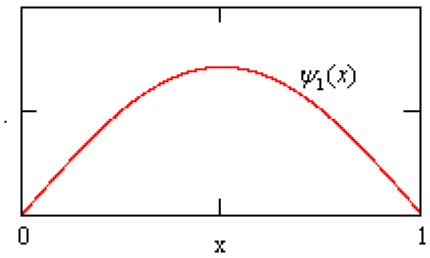

Рисунок 2

Физический смысл пси-функции заключается в том, что квадрат модуля пси-функции определяет плотность вероятности местонахождения частицы:

$$\rho_1(x) = |\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{l}\sin^2\left(\frac{\pi}{l}x\right) \tag{10}$$

Определим вероятность нахождения частицы в области $\frac{l}{3} < x < \frac{2l}{3}$:

$$P = \frac{2}{l}\int_{\frac{l}{3}}^{\frac{2l}{3}} \sin^2\left(\frac{\pi}{l}x\right)dx \approx 0.609 = 60.9\%$$

Ответ: Вероятность нахождения частицы в области $\frac{l}{3} < x < \frac{2l}{3}$ в основном состоянии равняется $P = 60.9\%$.

Задача № 5.126.

Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Плотность вероятности местонахождения частицы $P \sim (1-\cos\alpha x)$, где α - заданная постоянная, x - расстояние от одного края ямы. Найти энергию частицы в этом стационарном состоянии.

Решение:

Потенциальная яма, в которой находится частица, имеет вид (рисунок 1):

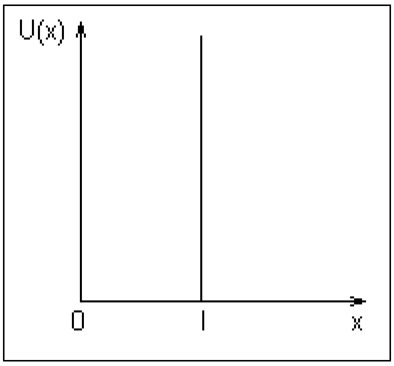

Рисунок 1

Потенциальная энергия:

$$U(x)=\begin{cases}\infty, x<0\\ 0, 0<x<l\\ \infty, x>l\end{cases}$$

По условию задачи плотность вероятности местонахождения частицы $P \sim (1-\cos\alpha x)$.

Используем тригонометрическое соотношение $1-\cos\alpha x = 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}x\right)$. Таким образом:

$$P \sim (1-\cos\alpha x) \sim 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}x\right) \qquad (1)$$

Составим для области $0<x<l$ (рисунок 1) уравнение Шредингера:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0 \qquad (2)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\psi=0 \qquad (3)$$

где $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x)=A\sin\left(kx+\varphi\right) \qquad (4)$$

Учитывая, что $\psi(0)=0$, получим: $\sin\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = 0$. Таким образом, волновая функция стационарного состояния частицы, имеет вид:

$$\psi(x) = A\sin kx \tag{5}$$

Физический смысл пси-функции состоит в том, что квадрат модуля пси-функции является плотностью вероятности местонахождения частицы. Таким образом, плотность вероятности нахождения частицы равняется:

$$P(x) = |\psi|^2 = A^2\sin^2 kx \sim \sin^2 kx \tag{6}$$

Согласно выражению (1) плотность вероятности местонахождения частицы в нашем случае $P \sim \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}x\right)$. На основании (6) и (1) приходим к следующему соотношению:

$$k = \frac{\alpha}{2} \tag{7}$$

Учитывая, что $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, определим энергию частицы:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{\alpha^2}{4} \Rightarrow E = \frac{\alpha^2\hbar^2}{8m} \tag{8}$$

Ответ: Энергия частицы равняется $E = \frac{\alpha^2\hbar^2}{8m}$.

Задача № 5.127.

Частица массы m находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. При этом максимальное значение плотности вероятности местонахождения частицы в яме равно P_m. Найти ширину l ямы и энергию E частицы в данном состоянии.

Решение:

Пусть одномерная потенциальная яма имеет линейные размеры l, тогда она имеет вид:

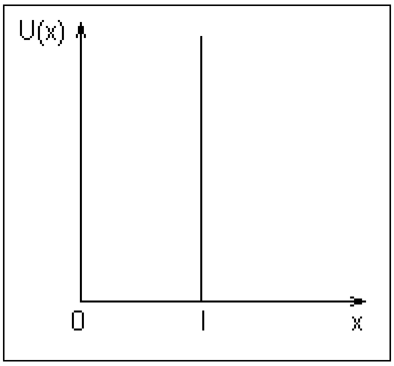

Рисунок 1

Потенциальная энергия в этом случае имеет вид:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, x < 0 \\ 0, 0 < x < l \\ \infty, x > l \end{cases}$$

Составим уравнение Шредингера для области $0 < x < l$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2} E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) \qquad (3)$$

На пси-функцию накладываются следующие стандартные условия: непрерывность, гладкость, однозначность и конечность. Используя условие непрерывности, получим:

$$\begin{aligned} &\psi(0) = 0 \Rightarrow \sin\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0 \\ &\psi(l) = 0 \Rightarrow \sin kl = 0 \Rightarrow kl = \pm\pi n, n = 1, 2, 3, ... \end{aligned} \qquad (4)$$

Таким образом, пси-функции стационарных состояний имеют вид:

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right) \tag{5}$$

Учитывая, что $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, определим энергетический спектр частицы:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{\pi^2}{l^2}n^2 \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 \tag{6}$$

Определим постоянную A в выражении для пси-функции (5), используя условие нормировки:

$$\int_0^l |\psi|^2\,dx = 1 \Rightarrow A^2\int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi}{l}nx\right)dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}} \tag{7}$$

Пси-функции стационарных состояний частицы в потенциальной яме:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right) \tag{8}$$

Пси-функция основного состояния ($n = 1$):

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi}{l}x\right) \tag{9}$$

Физический смысл пси-функции заключается в том, что квадрат модуля пси-функции является плотностью вероятности местонахождения частицы:

$$P(x) = \frac{2}{l}\sin^2\left(\frac{\pi}{l}x\right) \tag{10}$$

Плотность вероятности принимает максимальное значение, если $\sin^2\left(\frac{\pi}{l}x\right) = 1$. Таким образом, максимальная плотность вероятности равняется:

$$P_m = \frac{2}{l} \tag{11}$$

Отсюда линейные размеры потенциальной ямы:

$$l = \frac{2}{P_m} \tag{12}$$

Энергия основного состояния (при $n = 1$):

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} P_m^2 \tag{13}$$

Ответ: линейные размеры ямы $l = \frac{2}{P_m}$, энергия основного состояния $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} P_m^2$.

Задача №5.128.

Частица массы m находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. При этом пространственная производная волновой функции у края ямы $\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right| = a$. Найти энергию E частицы в данном состоянии.

Решение:

Потенциальная яма имеет вид (рисунок 1):

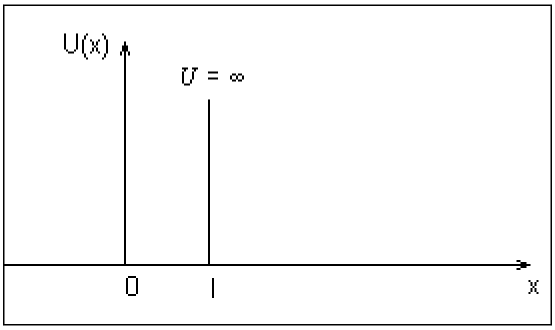

Рисунок 1

Для области $0 < x < l$ составим уравнение Шредингера:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) \qquad (3)$$

Используя условие непрерывности пси-функций, получим:

$$\begin{aligned} &\psi(0) = 0 \Rightarrow \sin\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0 \\ &\psi(l) = 0 \Rightarrow \sin kl = 0 \Rightarrow kl = \pm\pi n, n = 1,2,3,... \end{aligned} \qquad (4)$$

Таким образом, пси-функции стационарных состояний имеют вид:

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right) \qquad (5)$$

Учитывая, что $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, найдём энергетический спектр частицы:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{\pi^2}{l^2}n^2 \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 \qquad (6)$$

Используя условие нормировки пси-функций, определим постоянную A в выражении (5):

$$\int_0^l |\psi|^2\, dx = 1 \Rightarrow A^2\int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi}{l}nx\right)dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}} \qquad (7)$$

Волновые функции стационарных состояний частицы:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right) \qquad (8)$$

Пси-функция основного состояния (при $n=1$) равняется:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi}{l}x\right) \qquad (9)$$

Производная волновой функции основного состояния частицы:

$$\frac{\partial\psi_1}{\partial x} = \frac{\pi}{l}\sqrt{\frac{2}{l}}\cos\left(\frac{\pi}{l}x\right) \qquad (10)$$

На краях ямы $x=0, x=l$ модуль производной пси-функции равняется:

$$\left|\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right| = \frac{\pi}{l}\sqrt{\frac{2}{l}} = \frac{\pi\sqrt{2}}{l^{\frac{3}{2}}} \qquad (11)$$

По условию $\left|\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right| = a$, таким образом, получим:

$$\frac{\pi\sqrt{2}}{l^{\frac{3}{2}}} = a \Rightarrow l = \left(\frac{\pi\sqrt{2}}{a}\right)^{\frac{2}{3}} \qquad (12)$$

Энергия частицы в основном стационарном состоянии (при $n=1$) равняется:

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi\sqrt{2}}{a}\right)^{-\frac{4}{3}} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^{\frac{2}{3}}a^{\frac{4}{3}}}{2^{\frac{2}{3}}} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi a^2}{2}\right)^{\frac{2}{3}} \qquad (13)$$

Ответ: $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi a^2}{2}\right)^{\frac{2}{3}}$.

Задача № 5.129.

Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы l. Найти нормированные волновые функции стационарных состояний частицы, взяв начало отсчёта координаты x в середине ямы.

Решение:

Потенциальная яма имеет вид (рисунок 1):

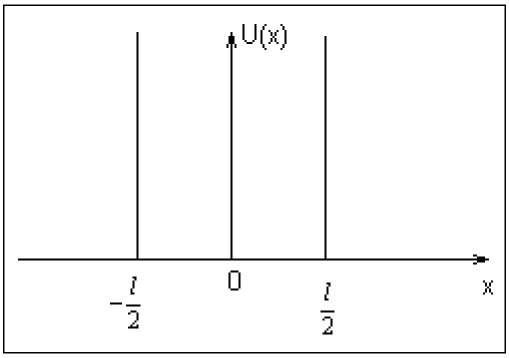

Рисунок 1

Потенциальная энергия частицы имеет вид:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, x < -\dfrac{l}{2} \\ 0, -\dfrac{l}{2} < x < \dfrac{l}{2} \\ \infty, x < \dfrac{l}{2} \end{cases}$$

Составим уравнение Шредингера для области $-\frac{l}{2} < x < \frac{l}{2}$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) \qquad (3)$$

Пси-функция, которая является решением уравнения Шредингера (2) должна удовлетворять стандартным условиям, накладываемым на волновые функции:

$x=-\frac{l}{2}$ и $x=\frac{l}{2}$, получим:

$$\begin{aligned}
&\psi\left(-\frac{l}{2}\right)=A\sin\left(-\frac{kl}{2}+\alpha\right)=0\\
&\psi\left(\frac{l}{2}\right)=A\sin\left(\frac{kl}{2}+\alpha\right)=0
\end{aligned}\tag{4}$$

Учитывая, что:

$$\sin\left(-\frac{kl}{2}+\alpha\right)=-\sin\left(\frac{kl}{2}\right)\cos\alpha+\cos\left(\frac{kl}{2}\right)\sin\alpha$$
$$\sin\left(\frac{kl}{2}+\alpha\right)=\sin\left(\frac{kl}{2}\right)\cos\alpha+\cos\left(\frac{kl}{2}\right)\sin\alpha$$

Таким образом, получим систему уравнений:

$$\begin{cases}-\sin\left(\frac{kl}{2}\right)\cos\alpha+\cos\left(\frac{kl}{2}\right)\sin\alpha=0\\ \sin\left(\frac{kl}{2}\right)\cos\alpha+\cos\left(\frac{kl}{2}\right)\sin\alpha=0\end{cases}\tag{5}$$

Сложив первое и второе уравнение системы (5) и разделив обе части на 2, мы получим уравнение:

$$\cos\left(\frac{kl}{2}\right)\sin\alpha=0\tag{6}$$

Вычтя из второго первое уравнение и разделив обе части на 2, получим уравнение:

$$\sin\left(\frac{kl}{2}\right)\cos\alpha=0\tag{7}$$

Таким образом, мы пришли к системе двух тригонометрических уравнений:

$$\begin{cases}\cos\left(\frac{kl}{2}\right)\sin\alpha=0\\ \sin\left(\frac{kl}{2}\right)\cos\alpha=0\end{cases}\tag{8}$$

Если $\cos\left(\frac{kl}{2}\right)=0$

$\frac{kl}{2}=\frac{\pi}{2}\pm\pi n_1,\ n_1=0,1,2,\ldots$. Но при этих значениях $\frac{kl}{2}$ во втором уравнение $\sin\left(\frac{kl}{2}\right)\neq 0$

$\cos\alpha = 0$. Это выполняется при $\alpha = \frac{\pi}{2} \pm \pi n_2, n_2 = 0,1,2,\ldots$. Другое решение получим из предположения, что $\sin\left(\frac{kl}{2}\right) = 0$ и $\sin\alpha = 0$. Оно имеет вид:

$$\left[\begin{array}{l} \frac{kl}{2} = \pm\pi n_1, n_1 = 0,1,2,\ldots \\ \alpha = \pm\pi n_2, n_2 = 0,1,2,\ldots \end{array}\right.$$

Объединив пары значений $\frac{kl}{2}$ и α, которые являются решениями системы (8), получим:

$\frac{kl}{2} = \pm\frac{\pi}{2}n, \alpha = \pm\frac{\pi}{2}n, n = 1,2,3,\ldots$. Решение при $n = 0$ отброшено всвязи с тем, что в этом случае $k = 0, \psi(x) = 0$, что соответствует случаю, когда частицы нет. Таким образом, получим, что пси-функции собственных состояний частицы в потенциальной яме заданного вида, имеют вид:

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{\pi}{l}nx + \frac{\pi}{2}n\right), n = 1,2,3,\ldots \qquad (9)$$

Или мы можем записать в другом виде:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A\cos\left(\frac{\pi}{l}nx\right), n = 1,3,5,\ldots \\ A\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right), n = 2,4,6,\ldots \end{cases} \qquad (10)$$

Определим постоянную A в выражении для пси-функций стационарных состояний, используя условие нормировки:

$$\int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} |\psi|^2 dx = 1 \Rightarrow A^2 \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \sin^2\left(\frac{\pi}{l}nx + \frac{\pi}{2}n\right)dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}} \qquad (11)$$

Таким образом, получим:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l}}\cos\left(\frac{\pi}{l}nx\right), n = 1,3,5,\ldots \\ \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right), n = 2,4,6,\ldots \end{cases} \qquad (12)$$

Графически пси-функции собственных состояний $\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x)$ представлены на рисунке 2:

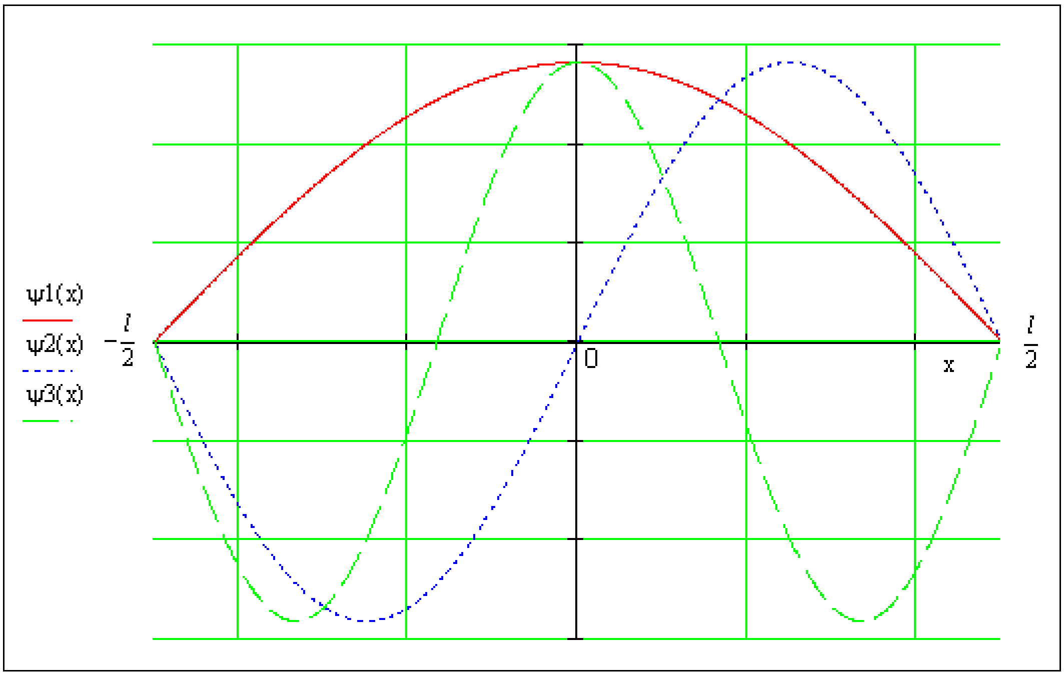

Рисунок 2

Из рисунка видно, что пси-функций собственных состояний частицы на краях потенциальной ямы не отвечают требованию гладкости. Это связано с тем, что мы решали задачу в предположении, что стенки потенциальной ямы бесконечно высокие, что является идеализацией.

Ответ: Пси-функции собственных состояний частицы в потенциальной яме заданного вида, равняются:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l}}\cos\left(\frac{\pi}{l}nx\right), n = 1,3,5,... \\ \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right), n = 2,4,6,... \end{cases}$$

Задача № 5.130.

Электрон находится в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы такова, что энергетические уровни расположены весьма плотно. Найти плотность уровней $\frac{dN}{dE}$, то есть их число на единичный интервал энергии, в зависимости от E. Вычислить $\frac{dN}{dE}$ для $E = 1.0\,эВ$, если $l = 1.0\,см$.

Решение:

Потенциальная яма, в которой находится частица, имеет вид, представленный на рисунке 1:

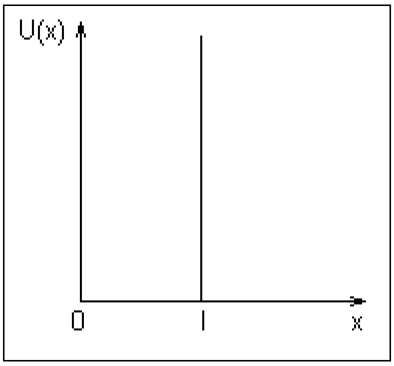

Рисунок 1

Потенциальная энергия:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, x < 0 \\ 0, 0 < x < l \\ \infty, x > l \end{cases}$$

Составим уравнение Шредингера для области $0 < x < l$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) \qquad (3)$$

Используя условие непрерывности, накладываемое на пси-функцию, получим:

$$\begin{aligned}&\psi(0)=0\Rightarrow \sin\alpha=0\Rightarrow \alpha=0\\&\psi(l)=0\Rightarrow \sin kl=0\Rightarrow kl=\pm\pi n, n=1,2,3,...\end{aligned}\qquad(4)$$

Таким образом, пси-функции собственных состояний имеют вид:

$$\psi_n(x)=A\sin\left(\frac{\pi}{l}nx\right)\qquad(5)$$

Учитывая, что $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$, найдём энергетический спектр частицы:

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E=\frac{\pi^2}{l^2}n^2\Rightarrow E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2\qquad(6)$$

Из выражения (6) следует:

$$n=\frac{l}{\pi\hbar}\sqrt{2mE}\qquad(7)$$

Продифференцируем обе части уравнения (7):

$$dn=\frac{l}{\pi\hbar}\sqrt{2m}\frac{dE}{2\sqrt{E}}=\frac{l}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}dE\qquad(8)$$

Таким образом, число энергетических уровней на единичный интервал энергии равняется:

$$\frac{dn}{dE}=\frac{l}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}\qquad(9)$$

Для энергии $E=1.0\,эВ$ и ширины потенциальной ямы $l=1.0\,см$ плотность энергетических уровней равняется:

$$\frac{dn}{dE}=\frac{10^{-2}}{3.14\cdot1.054\cdot10^{-34}}\sqrt{\frac{9.1\cdot10^{-31}}{2\cdot1.6\cdot10^{-19}}}\approx 5\cdot10^{25}\ Дж^{-1}\approx 8\cdot10^{6}\ эВ^{-1}\qquad(10)$$

Ответ: плотность энергетических уровней: $\frac{dn}{dE}=\frac{l}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}$, плотность энергетических уровней для $E=1.0\,эВ$ и $l=1.0\,см$ равняется $\frac{dn}{dE}=8\cdot10^{6}\ эВ^{-1}$.

Задача № 5.131.

Частица массы m находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Найти:

а) возможные значения энергии частицы, если стороны ямы равны l_1 и l_2;

б) значения энергии частицы на первых четырёх уровнях, если яма квадратная со стороной l.

Решение:

Потенциальная яма имеет вид (рисунок 1):

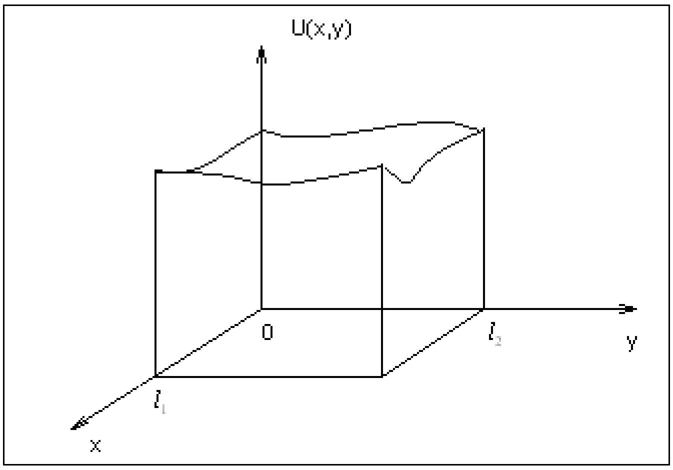

Рисунок 1

Потенциальная энергия:

$$U(x) = \begin{cases} 0, M \in \Omega \\ \infty, M \notin \Omega \end{cases} \qquad \Omega = \begin{cases} 0 < x < l_1 \\ 0 < y < l_2 \end{cases} \qquad M(x, y)$$

Составим уравнение Шредингера для области Ω:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + k^2 \psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x) = A \sin(k_1 x + \alpha_1) \sin(k_2 y + \alpha_2) \qquad (3)$$

Воспользуемся условием непрерывности пси-функции:

$$
\begin{aligned}
&\psi(0,y)=0 \Rightarrow \sin\alpha_1=0 \Rightarrow \alpha_1=0\\
&\psi(x,0)=0 \Rightarrow \sin\alpha_2=0 \Rightarrow \alpha_2=0\\
&\psi(l_1,y)=0 \Rightarrow \sin k_1 l_1=0 \Rightarrow k_1 l_1=\pm\pi n_1,\, n_1=1,2,3,...\\
&\psi(x,l_2)=0 \Rightarrow \sin k_2 l_2=0 \Rightarrow k_2 l_2=\pm\pi n_2,\, n_2=1,2,3,...
\end{aligned} \tag{4}
$$

Поэтому пси-функции собственных состояний имеют вид:

$$
\psi_n(x,y)=A\sin\left(\frac{\pi}{l_1}n_1 x\right)\sin\left(\frac{\pi}{l_2}n_2 y\right) \tag{5}
$$

Продифференцируем дважды выражение (5) по x и по y и получим:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-k_1^2 A\sin k_1 x\sin k_2 y=-k_1^2\psi\\
&\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-k_2^2 A\sin k_1 x\sin k_2 y=-k_2^2\psi
\end{aligned} \tag{6}
$$

Подставим выражения (6) в уравнение Шредингера (2):

$$
-k_1^2\psi-k_2^2\psi+k^2\psi=0 \tag{7}
$$

Учитывая, что $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$, получим:

$$
k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E=\frac{\pi^2}{l_1^2}n_1^2+\frac{\pi^2}{l_2^2}n_2^2 \tag{8}
$$

Отсюда найдём энергетический спектр частицы в потенциальной яме:

$$
E_{n_1,n_2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{l_1^2}+\frac{n_2^2}{l_2^2}\right) \tag{9}
$$

Предположим, что потенциальная яма квадратная, тогда $l_1=l_2=l$. В этом случае энергетический спектр частицы:

$$
E_{n_1,n_2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(n_1^2+n_2^2) \tag{10}
$$

Энергия частицы полностью определяется выражением $n_1^2+n_2^2$, которое зависит от двух квантовых чисел n_1 и n_2. В таблице 1 приведены несколько значений n_1 и n_2, соответствующих нескольким первым энергетическим уровням.

Таблица 1.

№ уровня	n_1	n_2	$n_1^2+n_2^2$

1	1	1	2
2	1	2	5
	2	1	
3	2	2	8
4	1	3	10
	3	1	
5	2	3	13
	3	2	

Как видно из таблицы 1, возможно, что в нескольких различных квантовых состояниях, описываемых различными пси-функциями, энергия частицы имеет одно и то же значение. Такие состояния называются вырожденными, а количество таких состояний, в которых частица имеет одно и то же значение энергии, называется кратностью вырождения энергетического уровня.
Значения энергии на первых четырёх уровнях равняются:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot 2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2} \\ E_2 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot 5 = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \\ E_3 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot 8 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{ml^2} \\ E_4 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot 10 = \frac{5\pi^2\hbar^2}{ml^2} \end{aligned} \tag{11}$$

Ответ: а) энергия частицы в потенциальной яме заданного вида равняется:

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(n_1^2 + n_2^2)$$

где $n_1 = 1, 2, 3, ...$ и $n_2 = 1, 2, 3, ...$
б) Энергии частицы, соответствующие первым четырём энергетическим уровням равняются:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot 2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2} \\ E_2 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot 5 = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \\ E_3 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot 8 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{ml^2} \\ E_4 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\cdot 10 = \frac{5\pi^2\hbar^2}{ml^2} \end{aligned}$$

Задача № 5.132.

Частица находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 < x < a, 0 < y < b$). Определить вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области $0 < x < \frac{a}{3}$.

Решение:

Вид потенциальной ямы, в которой находится частица, представлен на рисунке 1:

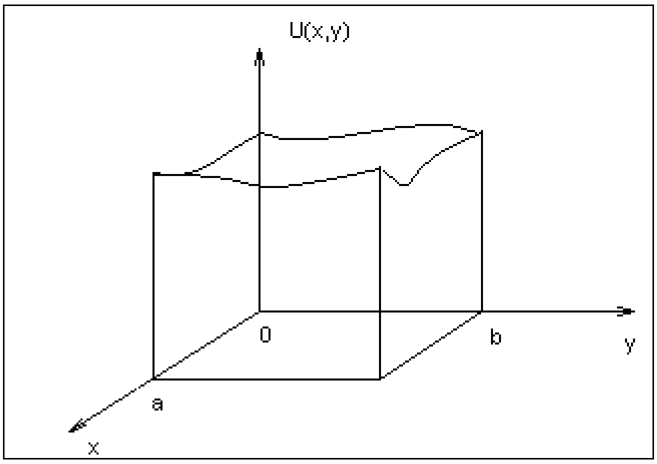

Рисунок 1

Потенциальная энергия имеет вид:

$$U(x,y) = \begin{cases} 0, M \in \Omega \\ \infty, M \notin \Omega \end{cases} \qquad \Omega = \begin{cases} 0 < x < a \\ 0 < y < b \end{cases} \qquad M(x,y)$$

Составим уравнение Шредингера для области Ω:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \tag{1}$$

Или в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + k^2 \psi = 0 \tag{2}$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x,y) = A\sin(k_1 x + \alpha_1)\sin(k_2 x + \alpha_2) \tag{3}$$

Пси-функция, описывающая состояние квантового объекта в потенциальной яме, должна удовлетворять стандартным условиям, накладываемым на пси-функцию: непрерывность, гладкость, конечность, однозначность. Воспользовавшись условием нормировки, имеем:

$$\begin{aligned}
&\psi(0,y)=0 \Rightarrow \sin\alpha_1=0 \Rightarrow \alpha_1=0\\
&\psi(x,0)=0 \Rightarrow \sin\alpha_2=0 \Rightarrow \alpha_2=0\\
&\psi(a,y)=0 \Rightarrow \sin k_1 a=0 \Rightarrow k_1 a=\pm\pi n_1,\, n_1=1,2,3,...\\
&\psi(x,b)=0 \Rightarrow \sin k_2 b=0 \Rightarrow k_2 b=\pm\pi n_2,\, n_2=1,2,3,...
\end{aligned} \qquad (4)$$

Таким образом, пси-функция примет вид:

$$\psi(x,y)=A\sin\left(\frac{\pi}{a}n_1 x\right)\sin\left(\frac{\pi}{b}n_2 y\right) \qquad (5)$$

Найдём вторые производные пси-функции (5) и подставим в уравнение Шредингера (2):

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-k_1^2 A\sin(k_1 x)\sin(k_2 y)=-k_1^2\psi\\
&\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-k_2^2 A\sin(k_1 x)\sin(k_2 y)=-k_2^2\psi
\end{aligned} \qquad (6)$$

$$-k_1^2\psi-k_2^2\psi+k^2\psi=0$$

Откуда, учитывая, что $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$, получим:

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E=\left(\frac{\pi}{a}n_1\right)^2+\left(\frac{\pi}{b}n_2\right)^2=\pi^2\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}\right) \qquad (7)$$

Из выражения (6) определим энергетический спектр частицы:

$$E_{n_1,n_2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}\right) \qquad (8)$$

Как видно из выражения (7) энергия частицы зависит от двух квантовых чисел n_1 и n_2. Минимальная энергия частицы в данной потенциальной яме (при $n_1=1, n_2=1$) равняется:

$$E_{1,1}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}\right) \qquad (9)$$

Определим в выражении (5) для пси-функции, описывающей состояние частицы в потенциальной яме данного вида, постоянную А, используя условие нормировки пси-функций:

$$\int_0^a\int_0^b|\psi|^2\,dxdy=1 \Rightarrow A^2\int_0^a\int_0^b\sin^2\left(\frac{\pi}{a}n_1 x\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{b}n_2 y\right)dxdy=1 \Rightarrow A=\sqrt{\frac{4}{ab}} \qquad (10)$$

Таким образом, пси-функция примет вид:

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y)=\sqrt{\frac{4}{ab}}\sin\left(\frac{\pi}{a}n_1 x\right)\sin\left(\frac{\pi}{b}n_2 y\right) \qquad (11)$$

В состоянии с минимальным значением энергии квантовые числа равняются: $n_1 = 1, n_2 = 1$. В этом состоянии пси-функция равняется:

$$\psi_{1,1}(x,y)=\sqrt{\frac{4}{ab}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{b}y\right) \qquad (12)$$

Графически эта пси-функция состояния частицы, в котором она имеет минимальную энергию, представлена на рисунке 2:

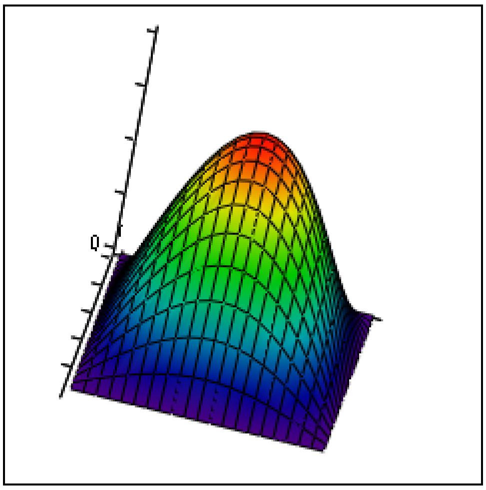

Рисунок 2

Как видно из рисунка пси-функция не удовлетворяет условию гладкости на границах области Ω. Всё дело в том, что потенциальная яма с бесконечно высокими стенками – это идеализация реальной потенциальной ямы с высокими, но не бесконечными стенками. В результате мы и получили пси-функцию, которая удовлетворяет условию непрерывности, но не удовлетворяет условию гладкости.
Физический смысл пси-функции состоит в том, что квадрат модуля пси-функции определяет плотность вероятности нахождения частицы. Таким образом, плотность вероятности нахождения частицы в состоянии, в котором она имеет минимальную энергию, равняется:

$$\rho(x,y)=\left|\psi_{1,1}\right|^2=\frac{4}{ab}\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{b}y\right) \qquad (13)$$

Графически распределение плотности вероятности представлено на рисунке 3:

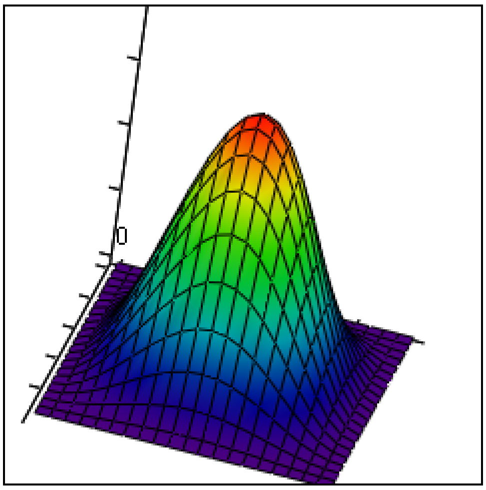

Рисунок 3

Вероятность нахождения частицы в области $0 < x < \frac{a}{3}$ равняется:

$$P = \frac{4}{ab}\int_0^{\frac{a}{3}}\int_0^{b} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{b}y\right)dxdy = 0.1955 = 19.55\%$$

Ответ: Вероятность нахождения частицы в области $0 < x < \frac{a}{3}$ равняется 19.55%.

Задача № 5.133.

Частица массы m находится в трёхмерной кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Ребро куба равно a. Найти:
а) собственные значения энергии частицы;
б) разность энергий 3-го и 4-го уровней;
в) энергию 6-го уровня и соответствующее ему число состояний (кратность вырождения).

Решение:

Потенциальная яма имеет вид (рисунок 1):

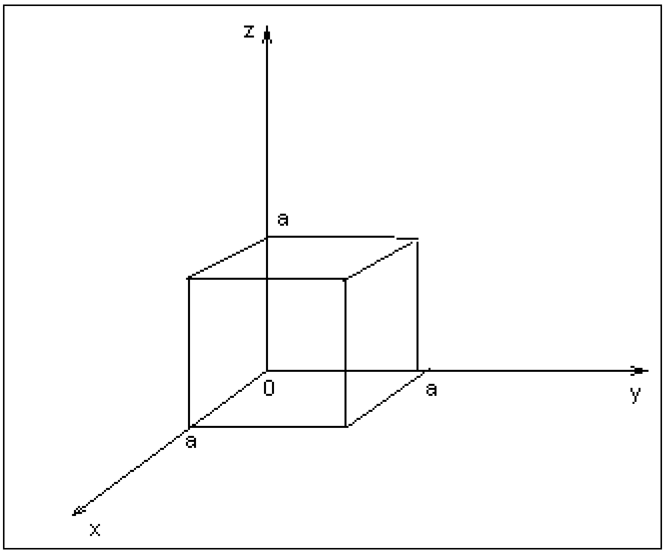

Рисунок 1

$$\Omega = \begin{cases} 0 < x < a \\ 0 < y < a \\ 0 < z < a \end{cases} \qquad M(x,y,z) \qquad U(x,y,z) = \begin{cases} 0, M \in \Omega \\ \infty, M \notin \Omega \end{cases}$$

Составим уравнение Шредингера для области Ω:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \qquad (1)$$

Или в виде:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + k^2\psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$. Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\psi(x,y,z) = A\sin(k_1x + \alpha_1)\sin(k_2y + \alpha_2)\sin(k_3z + \alpha_3) \qquad (3)$$

На волновую функцию частицы накладываются стандартные условия: непрерывность, конечность, однозначность и гладкость. Используя условие непрерывности пси-функции, получим:

$$\begin{aligned}
&\psi(0,y,z)=0 \Rightarrow \sin\alpha_1=0 \Rightarrow \alpha_1=0\\
&\psi(x,0,z)=0 \Rightarrow \sin\alpha_2=0 \Rightarrow \alpha_2=0\\
&\psi(x,y,0)=0 \Rightarrow \sin\alpha_3=0 \Rightarrow \alpha_3=0\\
&\psi(a,y,z)=0 \Rightarrow \sin k_1a=0 \Rightarrow k_1a=\pm\pi n_1, n_1=1,2,3,...\\
&\psi(x,a,z)=0 \Rightarrow \sin k_2a=0 \Rightarrow k_2a=\pm\pi n_2, n_2=1,2,3,...\\
&\psi(x,y,a)=0 \Rightarrow \sin k_3a=0 \Rightarrow k_3a=\pm\pi n_3, n_3=1,2,3,...
\end{aligned} \tag{4}$$

Таким образом, пси-функция примет вид:

$$\psi(x,y,z)=A\sin\left(\frac{\pi}{a}n_1x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}n_2y\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}n_3z\right) \tag{5}$$

Найдём вторые производные от пси-функции частицы по x, y и z и подставим в уравнение Шредингера:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-k_1^2A\sin(k_1x)\sin(k_2y)\sin(k_3z)=-k_1^2\psi\\
&\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-k_2^2A\sin(k_1x)\sin(k_2y)\sin(k_3z)=-k_2^2\psi\\
&\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=-k_3^2A\sin(k_1x)\sin(k_2y)\sin(k_3z)=-k_3^2\psi
\end{aligned} \tag{6}$$

$$-k_1^2\psi-k_2^2\psi-k_3^2\psi+k^2\psi=0$$

Откуда, учитывая, что $k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$, получим:

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E=\frac{\pi^2}{a^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2) \tag{7}$$

Из выражения (7) найдём собственный энергетический спектр частицы:

$$E_{n_1,n_2,n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2) \tag{8}$$

Как видно из выражения (8), энергия частицы зависит от трёх квантовых чисел n_1, n_2, n_3. Выражение $n_1^2+n_2^2+n_3^2$ однозначно определяет значение энергии частицы в данном квантовом состоянии.

В таблице 1 перечислены несколько первых энергетических уровней и тройки квантовых чисел, соответствующих данным значениям энергии:

Таблица 1:

№ энергетического уровня	n_1	n_2	n_3	$n_1^2+n_2^2+n_3^2$
1	1	1	1	3
2	1	1	2	6
	1	2	1	
	2	1	1	
3	1	2	2	9
	2	1	2	
	2	2	1	
4	1	1	3	11
	1	3	1	
	3	1	1	
5	2	2	2	12
6	1	2	3	14
	1	3	2	
	2	1	3	
	2	3	1	
	3	1	2	
	3	2	1	

Как видно из таблицы 1 в нескольких различных состояниях, описываемых различными пси-функциями, энергия частицы может иметь одинаковое значение. В этом случае такие состояния называются вырожденными, а количество различных квантовых состояний, в которых частица имеет одно и то же значение энергии называется кратностью вырождения.

Разность энергий 3-го и 4-го уровней:

$$\Delta E_{43} = E_4 - E_3 = 11\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - 9\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} \qquad (9)$$

Энергия 6-го уровня:

$$E_6 = 14\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{7\pi^2\hbar^2}{ma^2} \qquad (10)$$

Кратность вырождения 6-го энергетического уровня равняется 6.

Ответ: а) $E_{n_1,n_2,n_3} = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)$,

б) $\Delta E_{43} = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$,

в) $E_6 = \dfrac{7\pi^2\hbar^2}{ma^2}$, кратность вырождения 6-го энергетического уровня равняется 6.

Задача № 5.134.

Показать с помощью уравнения Шредингера, что в точке, где потенциальная энергия частицы $U(x)$ имеет конечный разрыв, волновая функция остаётся гладкой, то есть её первая производная по координате непрерывна.

Решение:

Уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \qquad (1)$$

Рассмотрим одномерный случай. Пусть функция потенциальной энергии в точке $x = a$ имеет конечный разрыв (рисунок 1):

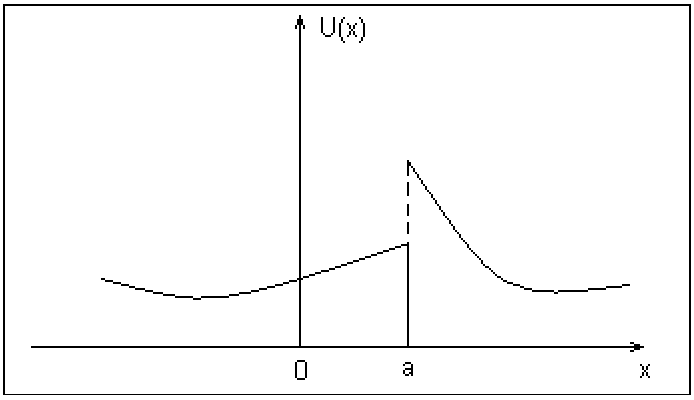

Рисунок 1

Уравнение Шредингера запишем в виде:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi \qquad (2)$$

Выделим узкий участок от $a-\delta$ до $a+\delta$. Проинтегрируем обе части уравнения (2) по интервалу $a-\delta < x < a+\delta$ и получим:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}(a+\delta) - \frac{\partial\psi}{\partial x}(a-\delta) = -\int\limits_{a-\delta}^{a+\delta}\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi\,dx \qquad (3)$$

Если разрыв конечный, тогда при $\delta \to 0$ правая часть уравнения (3) также стремится к нулю. В этом случае придём к условию гладкости волновой фунбкции в точке $x = a$, так как тогда $\frac{\partial\psi}{\partial x}(a+\delta) \to \frac{\partial\psi}{\partial x}(a-\delta)$ при $\delta \to 0$.

Ответ: волновая функция остаётся гладкой при наличии конечного разрыва функции потенциальной энергии $U(x)$.

Задача № 5.135.

Частица массы m находится в одномерном потенциальном поле $U(x)$, вид которой показан на рисунке 1, где $U(0)=\infty$. Найти:
а) уравнение, определяющее возможные значения энергии частицы в области $E<U_0$; привести это уравнение к виду

$$\sin kl = \pm kl\sqrt{\frac{\hbar^2}{2ml^2U_0}},\ \text{где}\ k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Показать с помощью графического решения данного уравнения, что возможные значения энергии частицы образуют дискретный спектр;

б) минимальное значение величины l^2U_0, при котором появляется первый энергетический уровень в области $E<U_0$. При каком минимальном значении l^2U_0 появляется n-й уровень?

Решение:

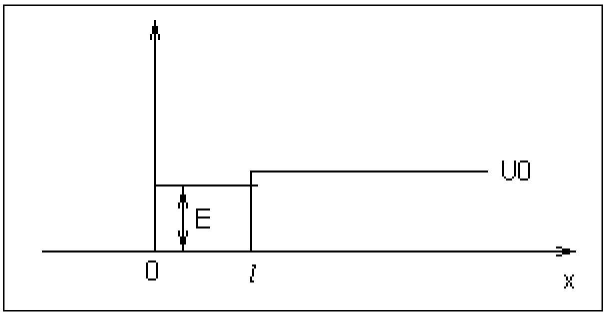

Рисунок 1

Составим уравнение Шредингера для области $0<x<l$:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0 \qquad (1)$$

Составим уравнение Шредингера для области $x>l$:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi=0 \qquad (2)$$

Запишем уравнения (1) и (2) в виде:

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}+k_1^2\psi=0 \qquad (3)$$

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+k_2^2\psi=0 \qquad (4)$$

где $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)$.

Решение дифференциального уравнения (3) имеет вид:

$$\psi_1(x) = A\sin(k_1 x + \alpha) \tag{5}$$

Используя условие непрерывности пси-функции в точке $x = 0$, получим:

$$\psi_1(0) = 0 \Rightarrow \sin\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0 \tag{6}$$

Таким образом, пси-функция (5) примет вид:

$$\psi_1(x) = A\sin k_1 x \tag{7}$$

Решение дифференциального уравнения (4) имеет вид:

$$\psi_2(x) = Be^{ik_2 x} + Ce^{-ik_2 x} \tag{8}$$

Учитывая условие конечности, накладываемое на пси-функцию, придём к выводу, что коэффициент $B = 0$, так как при $x \to \infty$ пси-функция должна стремиться к нулю $\psi_2(x) \to 0$. Таким образом, выражение для пси-функции $\psi_2(x)$ примет вид:

$$\psi_2(x) = Ce^{-ik_2 x} \tag{9}$$

Так как $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$, тогда $ik_2 = i\frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} = \kappa$. Мы будем рассматривать случай, когда $E < U_0$. В этом случае пси-функция (9) равняется:

$$\psi_2(x) = Ce^{-\kappa x} \tag{10}$$

Используя условие непрерывности в точке $x = l$, получим:

$$\psi_1(l) = \psi_2(l) \Rightarrow A\sin k_1 l = Ce^{-\kappa l} \tag{11}$$

Используя условие гладкости пси-функции в точке $x = l$, получим:

$$\left.\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right|_{x=l} = \left.\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\right|_{x=l} \Rightarrow k_1 A\cos k_1 l = -\kappa Ce^{-\kappa l} \tag{12}$$

Разделим уравнение (11) на уравнение (12) и, сделав некоторые преобразования, получим:

$$tgk_1 l = -\frac{k_1}{\kappa} \tag{13}$$

Используя тригонометрическое соотношение $1+ctg^2 k_1 l = \frac{1}{\sin^2 k_1 l}$ и учитывая, что $tgk_1 l = \frac{1}{ctgk_1 l}$, получим:

$$1+\frac{\kappa^2}{k_1^2} = \frac{1}{\sin^2 k_1 l}$$

Учитывая, что $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, $\kappa^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$, получим:

$$\frac{k_1^2+\kappa^2}{k_1^2} = \frac{2mE + 2m(U_0 - E)}{\hbar^2 k_1^2} = \frac{2mU_0}{\hbar^2 k_1^2} = \frac{1}{\sin^2 k_1 l}$$

Отсюда следует, что:

$$\sin k_1 l = \frac{\pm\hbar k_1 l}{\sqrt{2ml^2 U_0}} = \pm C k_1 l \qquad (14)$$

где $C = \frac{\hbar}{\sqrt{2ml^2 U_0}}$. Мы получили трансцендентное уравнение (14). Решим его графически (рисунок 2):

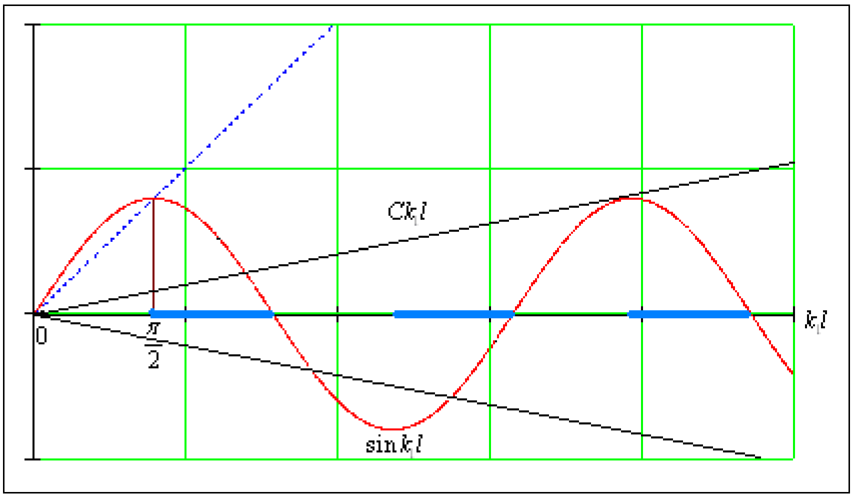

Рисунок 2

Собственным значениям энергии частицы E $k_1 l$

$E < U_0$ дискретный. Как видно из рисунка 2, такие решения существуют не всегда. Первое решение появляется при $k_1 l = \frac{\pi}{2}$, при этом $Ck_1 l = 1$.

Учитывая, что $C = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2ml^2U_0}}$, определим минимальное значение l^2U_0, при котором в области $E < U_0$ появляется первый энергетический уровень:

$$(l^2U_0)_{1\min} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \tag{15}$$

Учитывая, что $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, найдём значение энергии первого собственного энергетического уровня:

$$k_1 l = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} l = \frac{\pi}{2} \Rightarrow E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ml^2} \tag{16}$$

Теперь рассмотрим, например, случай, когда в области $E < U_0$ появляется 3-ий энергетический уровень. Минимальное значение $k_1 l$ в этом случае равняется $\dfrac{5\pi}{2}$. На рисунке 2 пара чёрных прямых пересекают синусоиду 3 раза в точках с абсциссами, лежащими в чётных четвертях, что соответствует трём собственным значениям энергии. В этом случае минимальное значение $(l^2U_0)_{3\min}$, при котором появляется третий энергетический уровень, определим из соотношения:

$$Ck_1 l = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(l^2U_0)_{3\min}}} \cdot \frac{3\pi}{2} = 1 \Rightarrow (l^2U_0)_{3\min} = \frac{9\pi^2\hbar^2}{8m} \tag{17}$$

Таким образом, n-ый энергетический уровень появляется при минимальном значении $(l^2U_0)_{n\min}$, которое равняется:

$$(l^2U_0)_{n\min} = (2n-1)^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \tag{18}$$

Ответ: а) возможные значения энергии частицы имеют дискретный спектр;

б) минимальное значение l^2U_0, при котором появляется первый энергетический уровень в области $E < U_0$, равняется:

$$(l^2U_0)_{1\min} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$$

б) минимальное значение l^2U_0, при котором появляется n-ый энергетический уровень в области $E < U_0$, равняется:

$$(l^2U_0)_{n\min} = (2n-1)^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$$

Задача № 5.136.

Воспользовавшись решением предыдущей задачи, определить вероятность нахождения частицы с энергией $E = \frac{U_0}{2}$ в области $x > l$, если $l^2 U_0 = \left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 \frac{\hbar^2}{m}$.

Решение:

На рисунке1 представлен вид потенциального поля, в котором находится частица:

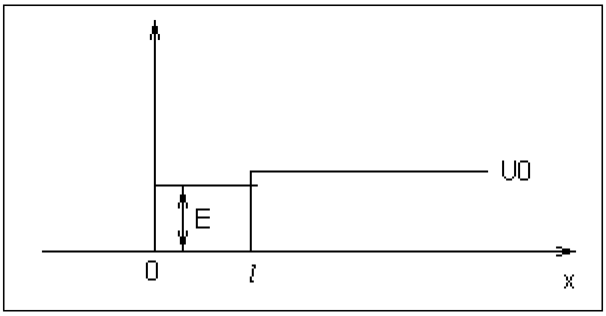

Рисунок 1

Пусть P_1 - вероятность нахождения частицы в области $0 < x < l$, а P_2 - вероятность нахождения частицы в области $x > l$. Пси-функции собственных состояний имеют вид (задача № 5.135):

Для области $0 < x < l$: $\qquad \psi_1(x) = A \sin k_1 x \qquad (1)$

Для области $x > l$: $\qquad \psi_2(x) = Be^{-\kappa x} \qquad (2)$

где $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ и $\kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$. В нашем случае $U_0 = \left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 \frac{\hbar^2}{ml^2}$ и $E = \frac{U_0}{2} = \left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2ml^2}$. Поэтому:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2ml^2}} = \frac{3\pi}{4l} \qquad (3)$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\left(\left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 \frac{\hbar^2}{ml^2} - \left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2ml^2}\right)} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\left(\frac{3\pi}{4}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2ml^2}} = \frac{3\pi}{4l} \qquad (4)$$

Физический смысл пси-функции состоит в том, что квадрат модуля пси-функции определяет плотность вероятности местонахождения частицы. Таким образом, вероятность P_1 нахождения частицы в области $0 < x < l$, равняется:

$$P_1 = \int_0^l |\psi_1(x)|^2\, dx = A^2 \int_0^l \sin^2(k_1 x) dx = \frac{A^2}{2}\int_0^l (1-\cos(2k_1 x))dx = \frac{A^2}{2}\left(l - \frac{1}{2k_1}\sin(2k_1 l) \right) =$$
$$= \frac{A^2}{2}\left(l - \frac{4l}{6\pi}\sin\left(2\frac{3\pi}{4l} l \right) \right) = \frac{A^2}{2} l \left(1 + \frac{2}{3\pi} \right) \qquad (5)$$

Вероятность P_2 нахождения частицы в области $x > l$:

$$P_2 = \int_l^\infty |\psi_2(x)|^2\, dx = B^2 \int_l^\infty e^{-2\kappa x} dx = \frac{B^2}{2\kappa} e^{-2\kappa l} = \frac{4B^2}{6\pi} l e^{-2\cdot\frac{3\pi}{4l}\cdot l} = \frac{2B^2}{3\pi} l e^{-\frac{3\pi}{2}} \qquad (6)$$

Разделим выражение (5) на (6) и получим:

$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{\frac{A^2}{2} l \left(1 + \frac{2}{3\pi} \right)}{\frac{2B^2}{3\pi} l e^{-\frac{3\pi}{2}}} = \left(\frac{A}{B} \right)^2 \frac{3\pi}{4} \frac{1 + \frac{2}{3\pi}}{e^{-\frac{3\pi}{2}}} = \left(\frac{A}{B} \right)^2 \frac{\frac{3\pi}{2} + 1}{2e^{-\frac{3\pi}{2}}} \qquad (7)$$

Отношение коэффициентов A и B найдём из условия непрерывности пси-функции в точке $x = l$:

$$\psi_1(l) = \psi_2(l) \qquad (8)$$

$$A \sin k_1 l = B e^{-\kappa l} \Rightarrow \frac{A}{B} = \frac{e^{-\kappa l}}{\sin k_1 l} = \frac{e^{-\frac{3\pi}{4l} l}}{\sin\left(\frac{3\pi}{4l} l \right)} = \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}}}{\sin\left(\frac{3\pi}{4} \right)} = \sqrt{2} e^{-\frac{3\pi}{4}} \qquad (9)$$

Таким образом, отношение вероятностей P_1 и P_2 равняется:

$$\frac{P_1}{P_2} = 2 \cdot e^{-\frac{3\pi}{2}} \cdot \frac{\frac{3\pi}{2} + 1}{2e^{-\frac{3\pi}{2}}} = \frac{3\pi}{2} + 1 \qquad (10)$$

Частица в области $x > 0$ находится достоверно, так как $U(0) = \infty$. Поэтому:

$$P_1 + P_2 = 1 \qquad (11)$$

Из уравнения (10) найдём $P_1 = \left(\frac{3\pi}{2} + 1 \right) P_2$ и подставим в уравнение (11):

$$\left(\frac{3\pi}{2} + 1 \right) P_2 + P_2 = 1 \Rightarrow P_2 = \frac{2}{3\pi + 4} \approx 0.149 = 14.9\% \qquad (12)$$

Ответ: Вероятность нахождения частицы в области $x > l$ при заданных условиях равняется $P_2 = 14.9\%$.

Задача № 5.137.

Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме (рисунок 1). Найти энергию основного состояния, если на краях ямы ψ-функция вдвое меньше, чем в середине ямы.

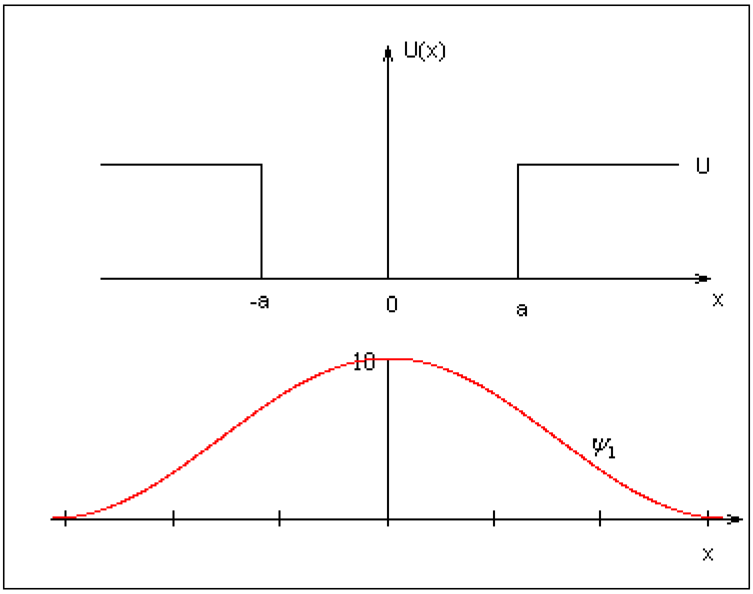

Рисунок 1

Решение:

Составим уравнение Шредингера для области $-a < x < a$:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + k^2\psi = 0 \qquad (2)$$

где $k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}E$.

Решение дифференциального уравнения (2) имеет вид:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad (3)$$

Ввиду симметричности пси-функции, имеем:

$$\psi(a) = \psi(-a) \qquad (4)$$

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = Ae^{-ika} + Be^{ika}$$
$$A(e^{ika} - e^{-ika}) = B(e^{ika} - e^{-ika})$$

Откуда следует, что $A = B$. Таким образом, пси-функция примет вид:

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) \qquad (5)$$

Учитывая формулу Эйлера $e^{ikx} = \cos kx + i\sin kx, e^{-ikx} = \cos kx - i\sin kx$, получим:

$$\psi(x) = A(\cos kx + i\sin kx + \cos kx - i\sin kx) = 2A\cos kx \qquad (6)$$

Учитывая, что пси-функция на краях ямы вдвое меньше, чем в середине, получим:

$$\psi(a) = \frac{\psi(0)}{2} \qquad (7)$$

$$2A\cos ka = \frac{2A}{2} \Rightarrow \cos ka = \frac{\pi}{3} \pm 2\pi n, n = 0,1,2,3,... \qquad (8)$$

В основном состоянии $k_1 a = \frac{\pi}{3} \Rightarrow k_1 = \frac{\pi}{3a}$. Учитывая, что $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, получим:

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E_1 = \frac{\pi^2}{9a^2} \Rightarrow E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{18ma^2} \qquad (9)$$

Ответ: Энергия частицы в основном состоянии равняется $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{18ma^2}$.

Задача № 5.138.

Найти возможные значения энергии частицы m, находящейся в сферически-симметричной потенциальной яме $U(r)=0$ при $r<r_0$ и $U(r_0)=\infty$, для случая, когда движение частицы описывается волновой функцией $\psi(r)$, зависящей только от радиуса r. Указание: При решении уравнения Шредингера воспользоваться подстановкой $\psi(r)=\dfrac{\chi(r)}{r}$.

Решение:

Потенциальная яма имеет вид, представленный на рисунке 1:

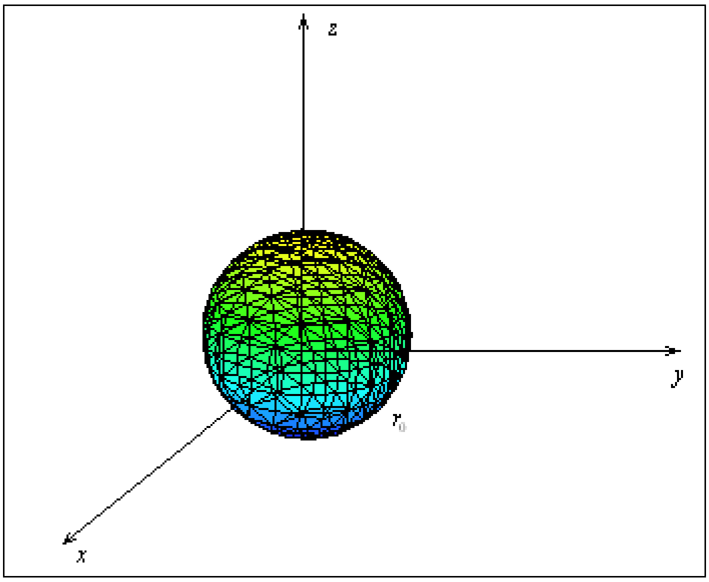

Рисунок 1

Потенциальная энергия:

$$U(r)=\begin{cases}0, r<r_0\\ \infty, r>r_0\end{cases}$$

Составим уравнение Шредингера для области $r<r_0$:

$$\Delta\psi+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0 \tag{1}$$

Так как потенциальная яма в нашем случае сферически-симметричная, то будем использовать оператор Лапласа в сферических координат. Оператор Лапласа в сферических координатах имеет вид:

$$\Delta=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{2}$$

В нашем случае потенциальная яма сферически-симметричная и пси-функция не зависит от угловых координат θ и φ. Поэтому будем использовать только радиальную составляющую оператора Лапласа:

$$\Delta_r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} \tag{3}$$

Уравнение Шредингера в этом случае примет вид:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \tag{4}$$

или в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + k^2\psi = 0 \tag{5}$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$. Для решения дифференциального уравнения (4) воспользуемся подстановкой $\psi(r) = \frac{\chi(r)}{r}$. В этом случае:

$$\begin{gathered}\frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{1}{r}\frac{\partial \chi}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\chi(r) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial \chi}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \frac{2}{r^3}\chi(r) - \frac{1}{r^2}\frac{\partial \chi}{\partial r} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} - \frac{2}{r^2}\frac{\partial \chi}{\partial r} + \frac{2}{r^3}\chi(r)\end{gathered} \tag{6}$$

Тогда дифференциальное уравнение (4) примет вид:

$$\begin{gathered}\frac{1}{r}\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} - \frac{2}{r^2}\frac{\partial \chi}{\partial r} + \frac{2}{r^3}\chi(r) + \frac{2}{r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \chi}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\chi(r)\right) + k^2\frac{1}{r}\chi(r) = 0 \\ \frac{1}{r}\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + k^2\frac{1}{r}\chi(r) = 0 \\ \frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + k^2\chi(r) = 0\end{gathered} \tag{7}$$

Решение этого дифференциального уравнения имеет вид:

$$\chi(r) = A\sin(kr) \tag{8}$$

В этом случае пси-функции собственных состояний имеют вид:

$$\psi(r) = \frac{\chi(r)}{r} = \frac{A}{r}\sin(kr) \tag{9}$$

Используя условие непрерывности пси-функции, получим:

$$\psi(r_0) = \frac{A}{r_0}\sin(kr_0) = 0 \Rightarrow kr_0 = \pm\pi n, n = 1, 2, 3, ... \tag{10}$$

Учитывая, что $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, найдём энергетический спектр частицы в потенциальной яме заданного вида:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{\pi^2}{r_0^2}n^2 \Rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mr_0^2} \tag{11}$$

Ответ: Энергетический спектр частицы в потенциальной яме заданного вида:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mr_0^2}.$$

Задача № 5.139.

Имея в виду условия предыдущей задачи, найти:
а) нормированные собственные функции частицы в состояниях, где $\psi(r)$ зависит только от r;
б) для основного состояния частицы наиболее вероятное значение $r_{вер}$, а также вероятность нахождения частицы в области $r < r_{вер}$.

Решение:

Потенциальная яма имеет вид, представленный на рисунке 1:

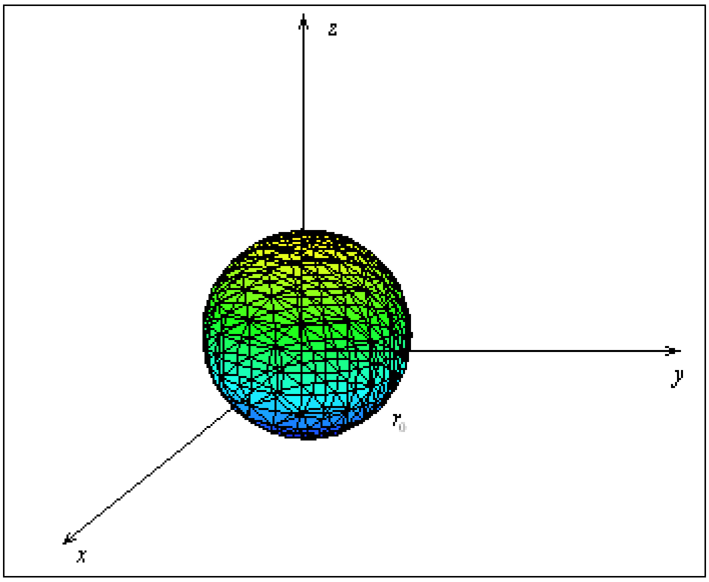

Рисунок 1

В предыдущей задаче мы определили, что пси-функции собственных состояний имеют вид:

$$\psi(x) = \frac{A}{r}\sin(kr) = \frac{A}{r}\sin\left(\frac{\pi}{r_0}nr\right) \qquad (1)$$

Используя условие нормировки, найдём значение постоянной A:

$$\iiint\limits_{x^2+y^2+z^2<r_0^2} |\psi(x,y,z)|^2\,dxdydz = 1 \Rightarrow \int_0^{r_0} |\psi(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = 1$$

$$\int_0^{r_0} |\psi(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = A^2 \int_0^{r_0} \frac{1}{r^2}\sin^2\left(\frac{\pi}{r_0}nr\right)\cdot 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^{r_0} \sin^2\left(\frac{\pi}{r_0}nr\right)dr = 2\pi r_0 A^2 = 1 \qquad (2)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}}$$

Таким образом, нормированные собственные волновые функции частицы:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{r_0} nr\right)}{r} \tag{3}$$

Пси-функция основного состояния имеет вид:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \frac{\sin\left(\frac{\pi}{r_0} r\right)}{r} \tag{4}$$

Физический смысл пси-функции состоит в том, что квадрат модуля пси-функции является плотностью вероятности местонахождения частицы. Вероятность нахождения частицы в шаровом слое радиуса r и толщины dr равняется:

$$dP = |\psi|^2 \cdot 4\pi r^2 dr \tag{5}$$

Отсюда следует, что вероятность нахождения частицы в шаровом слое единичной толщины равняется:

$$\rho_ш(r) = |\psi|^2 \cdot 4\pi r^2 \tag{6}$$

Учитывая, что пси-функция основного состояния определяет выражение (4), найдём функцию вероятности нахождения частицы в шаровом слое единичной толщины для основного состояния:

$$\rho_{ш1}(r) = |\psi_1|^2 \cdot 4\pi r^2 = \frac{1}{2\pi r_0} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi}{r_0} r\right)}{r^2} \cdot 4\pi r^2 = \frac{2}{r_0}\sin^2\left(\frac{\pi}{r_0} r\right) = \frac{1}{r_0}\left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{r_0} r\right)\right) \tag{7}$$

Найдём максимум функции (7) в интервале $0 < r < r_0$. Производная от функции (7):

$$\frac{\partial \rho_{ш1}}{\partial r} = \frac{2}{r_0}\sin\left(\frac{2\pi}{r_0} r\right)$$

В точке экстремума $\left.\frac{\partial \rho_{ш1}}{\partial r}\right|_{r=r_{вер}} = 0$. Таким образом, придём к уравнению:

$$\frac{2}{r_0}\sin\left(\frac{2\pi}{r_0} r_{вер}\right) = 0 \Rightarrow \sin\left(\frac{2\pi}{r_0} r_{вер}\right) = 0 \Rightarrow \frac{2\pi}{r_0} r_{вер} = \pm\pi n_1, n_1 = 1, 2, 3, ...$$

Отсюда, получим, что в интервале $0 < r < r_0$ лежит один корень этого уравнения $r_{вер} = \frac{r_0}{2}$.

Графически функция (7) представлена на рисунке 2:

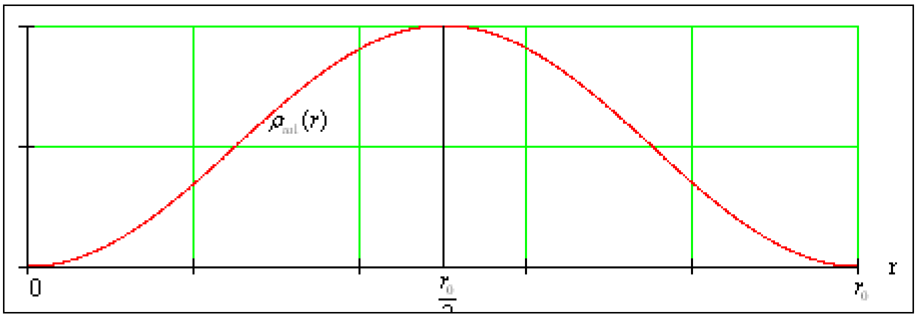

Рисунок 2

Найдём вероятность нахождения частицы в области $r < r_{вер}$:

$$P = \int_0^{r_{вер}} \rho_{ш1}(r)dr = \frac{1}{r_0}\int_0^{\frac{r_0}{2}}\left(1-\cos\left(\frac{2\pi}{r_0}r\right)\right)dr = 0.5 = 50\% \qquad (8)$$

Ответ: а) нормированные собственные пси-функции частицы имеют вид:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}}\frac{\sin\left(\frac{\pi}{r_0}nr\right)}{r}$$

б) наиболее вероятное значение $r_{вер} = \frac{r_0}{2}$ для основного состояния частицы, вероятность нахождения частицы в основном состоянии в области $r < r_{вер}$ равняется $P = 50\%$.

Задача № 5.140.

Частица массы m находится в сферически-симметричной потенциальной яме $U(r)=0$ при $r<r_0$ и $U(r)=U_0$ при $r>r_0$.

а) Найти с помощью подстановки $\psi(r)=\dfrac{\chi(r)}{r}$ уравнение, определяющее собственные значения энергии частицы при $E<U_0$, когда движение описывается волновой функцией $\psi(r)$, зависящей только от r. Привести это уравнение к виду

$\sin kr_0 = \pm kr_0\sqrt{\dfrac{\hbar^2}{2mr_0^2U_0}}$, где $k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

б) Определить значение $r_0^2U_0$, при котором появляется первый уровень.

Решение:

Потенциальное поле имеет вид:

$$U(r)=\begin{cases}0, r<r_0\\ \infty, r>r_0\end{cases}$$

Составим уравнение Шредингера для области $r<r_0$:

$$\Delta\psi_1+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_1=0 \qquad (1)$$

или в виде:

$$\Delta\psi_1+k_1^2\psi_1=0 \qquad (2)$$

где $k_1^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}E$.

Составим уравнение Шредингера для области $r<r_0$:

$$\Delta\psi_2+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi_2=0 \qquad (3)$$

или в виде:

$$\Delta\psi_2+k_2^2\psi_2=0 \qquad (4)$$

где $k_2^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)$.

Так как потенциальная яма в нашем случае сферически-симметричная, то воспользуемся оператором Лапласа в сферических координатах:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{5}$$

А так как мы ищем пси-функции собственных состояний, зависящие только от r, то используем только радиальную часть оператора Лапласа в сферических координатах:

$$\Delta_r = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} \tag{6}$$

С учётом этого дифференциальные уравнения (2) и (4) примут вид:

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi_1}{\partial r} + k_1^2\psi_1 = 0 \tag{7}$$

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi_2}{\partial r} + k_2^2\psi_2 = 0 \tag{8}$$

Так как оба дифференциальных уравнения (7) и (8) имеют в общем одинаковый вид, то рассмотрим решение дифференциального уравнения такого вида:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + k^2\psi = 0 \tag{9}$$

Для этого будем использовать подстановку $\psi(r) = \dfrac{\chi(r)}{r}$. В этом случае:

$$\begin{gathered}
\frac{\partial\psi}{\partial r} = -\frac{1}{r^2}\chi + \frac{1}{r}\frac{\partial\chi}{\partial r} \\
\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = \frac{2}{r^3}\chi - \frac{1}{r^2}\frac{\partial\chi}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{\partial\chi}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} - \frac{2}{r^2}\frac{\partial\chi}{\partial r} + \frac{2}{r^3}\chi
\end{gathered} \tag{10}$$

В этом случае дифференциальное уравнение (9) примет вид:

$$\begin{gathered}
\frac{1}{r}\frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} - \frac{2}{r^2}\frac{\partial\chi}{\partial r} + \frac{2}{r^3}\chi + \frac{2}{r}\left(-\frac{1}{r^2}\chi + \frac{1}{r}\frac{\partial\chi}{\partial r}\right) + k^2\frac{\chi}{r} = 0 \\
\frac{1}{r}\frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} + k^2\frac{\chi}{r} = 0 \\
\frac{\partial^2\chi}{\partial r^2} + k^2\chi = 0
\end{gathered} \tag{11}$$

Для дифференциальных уравнений (7) и (8) эти уравнения примут вид:

$$\frac{\partial^2\chi_1}{\partial x^2} + k_1^2\chi_1 = 0 \tag{12}$$

$$\frac{\partial^2\chi_1}{\partial x^2} + k_2^2\chi_1 = 0 \tag{13}$$

Решение уравнения (12) будем искать в виде:

$$\chi_1(r) = A\sin(k_1 r) \tag{14}$$

А решение уравнения (13) в виде:

$$\chi_2(r) = Be^{-ik_2 r} + Ce^{ik_2 r} \tag{15}$$

Учитывая, что $\psi(r) = \dfrac{\chi(r)}{r}$, найдём пси-функции собственных состояний частицы для области $r < r_0$ и для области $r > r_0$:

$$\psi_1(r) = \frac{\chi_1(r)}{r} = A\frac{\sin(k_1 r)}{r} \tag{16}$$

$$\psi_2(r) = \frac{\chi_2(r)}{r} = B\frac{e^{-ik_2 r}}{r} + C\frac{e^{ik_2 r}}{r} \tag{17}$$

Коэффициент C в выражении (17) должен быть равен нулю для того, чтобы выполнялось условие конечности волновой функции ψ_2. Иначе, если $C \neq 0$, то тогда $\lim\limits_{r\to\infty}\dfrac{e^{ik_2 r}}{r} = \infty$, что противоречит условию конечности волновой функции. В этом случае выражение (!7) примет вид:

$$\psi_2(r) = B\frac{e^{-ik_2 r}}{r} = B\frac{e^{-\kappa r}}{r} \tag{18}$$

где $\kappa = ik_2 = i\dfrac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} = \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$. Воспользуемся условием непрерывности волновой функции при $r = r_0$ и получим:

$$\psi_1(r_0) = \psi_2(r_0) \Rightarrow A\frac{\sin(k_1 r_0)}{r_0} = B\frac{e^{-\kappa r_0}}{r_0} \tag{19}$$

Воспользуемся условием гладкости пси-функции при $r = r_0$:

$$\left.\frac{\partial\psi_1}{\partial r}\right|_{r=r_0}=\left.\frac{\partial\psi_2}{\partial r}\right|_{r=r_0}$$

$$\frac{\partial\psi_1}{\partial r}=-A\frac{\sin(k_1 r)}{r^2}+k_1A\frac{\cos(k_1 r)}{r}=-\frac{A}{r^2}\left[\sin(k_1 r)-k_1 r\cos(k_1 r)\right]$$

$$\frac{\partial\psi_2}{\partial r}=-B\frac{e^{-\kappa r}}{r^2}-\kappa B\frac{e^{-\kappa r}}{r}=-\frac{B}{r^2}\left[e^{-\kappa r}+\kappa re^{-\kappa r}\right] \tag{20}$$

$$-\frac{A}{r_0^2}\left[\sin(k_1 r_0)-k_1 r_0\cos(k_1 r_0)\right]=-\frac{B}{r_0^2}\left[e^{-\kappa r_0}+\kappa r_0e^{-\kappa r_0}\right]$$

$$A(\sin(k_1 r_0)-k_1 r_0\cos(k_1 r_0))=Be^{-\kappa r_0}(1+\kappa r_0)$$

Разделим уравнение (20) на (19) и получим:

$$1-k_1 r_0\frac{\cos(k_1 r_0)}{\sin(k_1 r_0)}=1+\kappa r_0\Rightarrow tg(k_1 r_0)=-\frac{k_1}{\kappa} \tag{21}$$

Учитывая тригонометрическое соотношение $1+ctg^2(k_1 r_0)=\dfrac{1}{\sin^2(k_1 r_0)}$, придём к уравнению:

$$\sin^2(k_1 r_0)=\frac{1}{1+\left(\dfrac{\kappa}{k_1}\right)^2}=\frac{k_1^2}{k_1^2+\kappa^2}=\frac{k_1^2\hbar^2}{2m(U_0-E)+2mE}=\frac{\hbar^2k_1^2r_0^2}{2mr_0^2U_0}$$

Отсюда получим:

$$\sin(k_1 r_0)=\pm\frac{\hbar k_1 r_0}{\sqrt{2mr_0^2U_0}}=\pm Ck_1 r_0 \tag{22}$$

где $C=\dfrac{\hbar}{\sqrt{2mr_0^2U_0}}$. Найдём решения этого уравнения графически (рисунок 1):

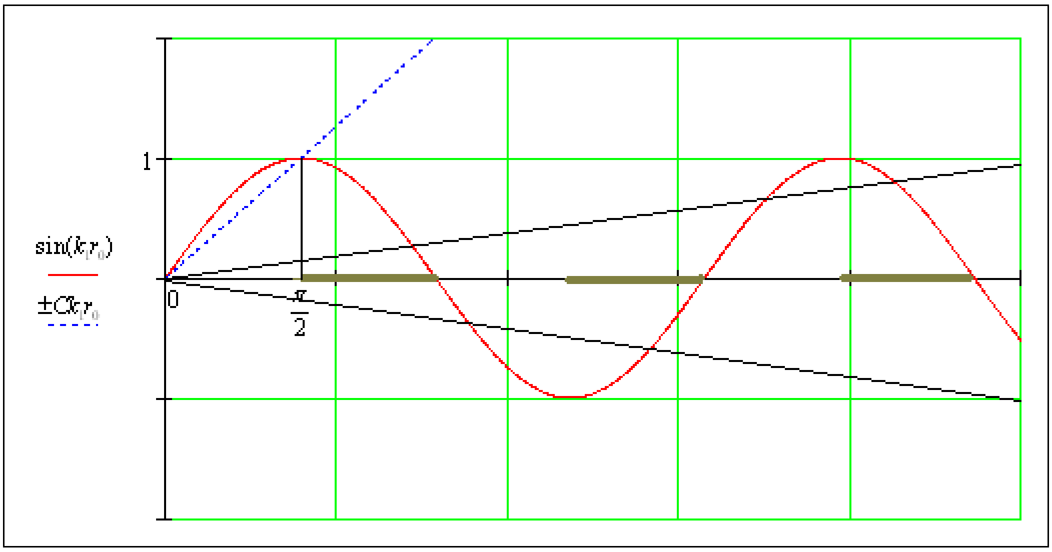

Рисунок 1

Собственным значениям энергии соответствуют такие решения уравнения (22), при которых выполняется условие (21). Значит, нас интересуют такие решения уравнения (21), которые лежат в чётных четвертях окружности. Как видно из рисунка 1 энергетический спектр частицы дискретный и такие решения существуют не всегда. Первый энергетический уровень появляется в случае, когда при $k_1 r_0 = \dfrac{\pi}{2}$ выполняется $Ck_1 r_0 = 1$.

Учитывая, что $C = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2mr_0^2 U_0}}$, можем определить минимальное значение $r_0^2 U_0$, при котором появляется первый энергетический уровень:

$$C\frac{\pi}{2} = 1 \Rightarrow \frac{\hbar}{\sqrt{2m\left(r_0^2 U_0\right)_{1\min}}}\frac{\pi}{2} = 1 \Rightarrow \left(r_0^2 U_0\right)_{1\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \qquad (23)$$

В этом случае энергия частицы:

$$k_1 r_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r_0 = \frac{\pi}{2} \Rightarrow E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mr_0^2} \qquad (24)$$

Ответ: минимальное значение $r_0^2 U_0$, при котором появляется первый энергетический уровень, равняется:

$$\left(r_0^2 U_0\right)_{1\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$$

Задача № 5.141.

Волновая функция частицы массой m для основного состояния в одномерном потенциальном поле $U(x)=\frac{kx^2}{2}$ имеет вид: $\psi(x)=A\exp(-\alpha x^2)$, где A и α - некоторые постоянные ($\alpha>0$). Найти с помощью уравнения Шредингера постоянную α и энергию E частицы в этом состоянии.

Решение:

Потенциальное поле, в котором находится частица, имеет вид, представленный на рисунке 1:

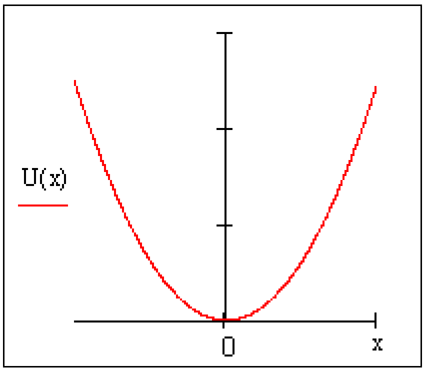

Рисунок 1

$$U(x)=\frac{kx^2}{2}$$

Составим уравнение Шредингера:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{kx^2}{2}\right)\psi=0 \qquad (1)$$

По условию $\psi(x)=A\exp(-\alpha x^2)$ - волновая функция основного состояния частицы в таком потенциальном поле, поэтому эта функция является решением дифференциального уравнения (1). Найдём её вторую производную по x:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=-2\alpha x\cdot A\exp(-\alpha x^2)$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-2\alpha\cdot A\exp(-\alpha x^2)+4\alpha^2x^2\cdot A\exp(-\alpha x^2)=(4\alpha^2x^2-2\alpha)\psi \qquad (2)$$

Подставим выражение (2) в уравнение Шредингера (1):

$$(4\alpha^2x^2-2\alpha)\psi+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{kx^2}{2}\right)\psi=0 \qquad (3)$$

После некоторых алгебраических преобразований, получим:

$$\left(4\alpha^2 - \frac{m}{\hbar^2}k\right)x^2 + \left(\frac{2m}{\hbar^2}E - 2\alpha\right) = 0 \qquad (4)$$

Уравнение (4) должно выполнятся для любых значений координаты x, поэтому получим:

$$4\alpha^2 - \frac{m}{\hbar^2}k = 0 \qquad (5)$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}E - 2\alpha = 0 \qquad (6)$$

Из уравнения (5), получим $\alpha = \pm\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}$, но так как по условию $\alpha > 0$, то берём положительный корень:

$$\alpha = \frac{\sqrt{mk}}{2\hbar} \qquad (7)$$

Подставим значение (7) в уравнение (6) и найдём энергию частицы E в этом состоянии:

$$E = \frac{\alpha\hbar^2}{m} = \frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}\frac{\hbar^2}{m} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}} \qquad (8)$$

Обозначим $\sqrt{\frac{k}{m}} = \omega$, тогда выражения (7) и (8) примут вид:

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \qquad E = \frac{\hbar\omega}{2} \qquad \text{где } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Ответ: $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$, $E = \frac{\hbar\omega}{2}$, где $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

Задача № 5.142.

Частица массы m находится в одномерном потенциальном поле $U(x)$ в стационарном состоянии $\psi(x) = A\exp(-\alpha x^2)$, где A и α - постоянные ($\alpha > 0$). Найти энергию частицы и вид $U(x)$, если $U(0) = 0$.

Решение:

Уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0 \tag{1}$$

По условию $\psi(x) = A\exp(-\alpha x^2)$ - волновая функция стационарного состояния частицы, поэтому она является решением уравнения Шредингера в нашем случае. Найдём её вторую производную по x:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\psi}{\partial x} = -2\alpha x \cdot A\exp(-\alpha x^2)\\
&\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -2\alpha \cdot A\exp(-\alpha x^2) + 4\alpha^2 x^2 \cdot A\exp(-\alpha x^2) = (4\alpha^2 x^2 - 2\alpha)\psi
\end{aligned} \tag{2}$$

Подставим выражение (2) в уравнение Шредингера (1):

$$(4\alpha^2 x^2 - 2\alpha)\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi = 0 \tag{3}$$

После некоторых алгебраических преобразований, получим:

$$\left(2\alpha^2 x^2 - \frac{m}{\hbar^2}U(x)\right) + \left(\frac{m}{\hbar^2}E - \alpha\right) = 0 \tag{4}$$

Так как по условию задачи $U(0) = 0$, то при $x = 0$, получим:

$$\frac{m}{\hbar^2}E - \alpha = 0 \Rightarrow E = \frac{\alpha\hbar^2}{m} \tag{5}$$

При найденном значении энергии уравнение (4) примет вид:

$$2\alpha^2 x^2 - \frac{m}{\hbar^2}U(x) = 0 \Rightarrow U(x) = \frac{2\alpha^2\hbar^2}{m}x^2 \tag{6}$$

Ответ: энергия частицы равняется $E = \dfrac{\alpha\hbar^2}{m}$, потенциальное поле имеет вид: $U(x) = \dfrac{2\alpha^2\hbar^2}{m}x^2$.

Задача № 5.143.

Электрон атома водорода находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(r) = A\exp\left(-\dfrac{r}{r_1}\right)$, где A и r - некоторые постоянные. Найти значения:

а) нормировочного коэффициента A;
б) энергии E электрона и r_1 (с помощью уравнения Шредингера).

Решение:

Постоянную A определим из условия нормировки волновых функций:

$$\int |\psi|^2 dV = A^2 \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) \cdot 4\pi r^2 dr = 1 \Rightarrow 4\pi A^2 \frac{r_1^3}{4} = 1 \qquad (1)$$

Отсюда получим, что нормировочный коэффициент A равняется:

$$A = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \qquad (2)$$

Тогда волновая функция примет вид:

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \qquad (3)$$

Электрон в атоме водорода находится в потенциальном поле ядра, которое имеет вид:

$$U(r) = -\frac{e^2}{r} k \qquad (4)$$

где $k = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}$. Уравнение Шредингера в нашем случае имеет вид:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}k\right)\psi = 0 \qquad (5)$$

где $\Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial r^2} + \dfrac{2}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}$ - радиальная составляющая оператора Лапласа, так как в нашем случае пси-функция зависит только от координаты r. Таким образом, уравнение Шредингера примет вид:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}k\right)\psi = 0 \qquad (6)$$

Найдём первую и вторую производную по r от выражения (3):

$$\frac{\partial\psi}{\partial r}=\sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}}\left(-\frac{1}{r_1}\right)\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \qquad (7)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}=\sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}}\left(\frac{1}{r_1^2}\right)\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \qquad (8)$$

Подставим (3), (7) и (8) в уравнение Шредингера (6) и получим:

$$\frac{1}{r_1^2}\sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}}\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)-\frac{2}{rr_1}\sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}}\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}k\right)\sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}}\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)=0 \qquad (9)$$

Разделим обе части уравнения (9) на $\sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}}\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)$:

$$\frac{1}{r_1^2}-\frac{2}{rr_1}+\frac{2m}{\hbar^2}E+\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^2}{r}k=0$$

$$\left(\frac{2me^2k}{\hbar^2}-\frac{2}{r_1}\right)\frac{1}{r}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E+\frac{1}{r_1^2}\right)=0 \qquad (10)$$

Уравнение (10) должно выполнятся для любых значений r, поэтому:

$$\begin{aligned}&\frac{2me^2k}{\hbar^2}-\frac{2}{r_1}=0\Rightarrow r_1=\frac{\hbar^2}{me^2}\frac{1}{k}\\&\frac{2m}{\hbar^2}E+\frac{1}{r_1^2}=0\Rightarrow E=-\frac{\hbar^2}{2mr_1^2}\end{aligned} \qquad (11)$$

Подставим значение r_1 во второе уравнение (11) и найдём значение энергии частицы в этом состоянии:

$$E=-\frac{\hbar^2}{2mr_1^2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{me^2}{\hbar^2}k\right)^2=-\frac{me^4}{2\hbar^2}k^2 \qquad (12)$$

Ответ: а) значение постоянной A в выражении для пси-функции равняется: $A=\sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}}$;

б) постоянная r_1 равняется: $r_1=\frac{\hbar^2}{me^2}\frac{1}{k}$, энергия частицы в данном состоянии:

$E=-\frac{me^4}{2\hbar^2}k^2$.

Задача № 5.144.

Определить энергию электрона атома водорода в состоянии, для которого волновая функция имеет вид $\psi(r) = A(1+ar)e^{-\alpha r}$, где A, a и α - некоторые постоянные.

Решение:

Потенциальное поле, в котором находится электрон в атоме водорода, имеет вид:

$$U(r) = -\frac{e^2}{r}k \qquad (1)$$

где $k = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}$. Составим уравнение Шредингера:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}k\right)\psi = 0 \qquad (2)$$

Так как волновая функция в нашем случае зависит только от координаты r, то в нашем случае будем использовать только радиальную часть оператора Лапласа:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} \qquad (3)$$

С учётом выражения (3) уравнение Шредингера примет вид:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}k\right)\psi = 0 \qquad (4)$$

Волновая функция электрона в заданном состоянии имеет вид:

$$\psi(r) = A(1+ar)e^{-\alpha r} \qquad (5)$$

Найдём её первую и вторую производные по r:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\psi}{\partial r} &= Ae^{-\alpha r} - A\alpha(1+ar)e^{-\alpha r} = A(a - \alpha - a\alpha r)e^{-\alpha r} \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} &= A(\alpha^2 - a\alpha)e^{-\alpha r} - Aa\alpha e^{-\alpha r} + Aa\alpha^2 re^{-\alpha r} = A(\alpha^2 - 2a\alpha + a\alpha^2 r)e^{-\alpha r}\end{aligned} \qquad (6)$$

$$A(\alpha^2 - 2a\alpha + a\alpha^2 r)e^{-\alpha r} + \frac{2}{r}A(a - \alpha - a\alpha r)e^{-\alpha r} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}k\right)A(1+ar)e^{-\alpha r} = 0 \qquad (7)$$

$$\alpha^2 - 2a\alpha + a\alpha^2 r + \frac{2a}{r} - \frac{2\alpha}{r} - 2a\alpha + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + Ear + \frac{e^2}{r}k + ae^2k\right) = 0$$

$$r\left(a\alpha^2+\frac{2m}{\hbar^2}Ea\right)+\frac{1}{r}\left(2a-2\alpha+\frac{2m}{\hbar^2}e^2k\right)+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E+\alpha^2-4a\alpha+\frac{2m}{\hbar^2}ae^2k\right)=0 \qquad (8)$$

Уравнение (8) должно выполняться для любых значений r, поэтому:

$$\begin{aligned}
&a\alpha^2+\frac{2m}{\hbar^2}Ea=0\Rightarrow E=-\frac{\alpha^2\hbar^2}{2m}\\
&2a-2\alpha+\frac{2m}{\hbar^2}e^2k=0\\
&\frac{2m}{\hbar^2}E+\alpha^2-4a\alpha+\frac{2m}{\hbar^2}ae^2k=0
\end{aligned} \qquad (9)$$

Из первого уравнения (9) выражение для энергии электрона подставим в последнее уравнение и получим:

$$-\alpha^2+\alpha^2-4a\alpha+\frac{2m}{\hbar^2}ae^2k=0$$

Из этого уравнения найдём α:

$$\alpha=\frac{me^2}{2\hbar^2}k \qquad (10)$$

Подставим (10) в выражение для энергии электрона, найденное из первого уравнения (9) и определим значение энергии электрона в данном состоянии:

$$E=-\frac{\alpha^2\hbar^2}{2m}=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{k^2}{4} \qquad (11)$$

Что соответствует значению энергии при $n=2$, то есть второй энергетический уровень электрона в атоме водорода.

Ответ: $E=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{k^2}{4}$, второй энергетический уровень $n=2$.

Задача № 5.145.

В основном состоянии атома водорода волновая функция электрона $\psi(r) = A\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)$, где A - постоянная, r_1 - первый боровский радиус. Найти:

а) наиболее вероятное расстояние $r_{вер}$ между электроном и ядром;

б) вероятность нахождения электрона в области $r < r_{вер}$.

Решение:

Физический смысл волновой функции состоит в том, что квадрат модуля волновой функции является плотностью вероятности местонахождения частицы. Таким образом, вероятность нахождения частицы в шаровом слое радиуса r и толщиной dr равняется:

$$dP = |\psi|^2 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr \qquad (1)$$

Из выражения (1) видно, что вероятность нахождения электрона в шаровом слое единичной толщины равняется:

$$\rho_ш(r) = 4\pi A^2 r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) \qquad (2)$$

Найдём значение $r = r_{вер}$, при котором функция (2) имеет максимум:

$$\frac{\partial \rho_ш}{\partial r} = 4\pi A^2 \left(2r\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) + r^2\left(-\frac{2}{r_1}\right)\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)\right) = 8\pi A^2 r\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)\left(1 - \frac{r}{r_1}\right)$$

$$\left.\frac{\partial \rho_ш}{\partial r}\right|_{r=r_{вер}} = 0 \Rightarrow 1 - \frac{r_{вер}}{r_1} = 0 \Rightarrow r_{вер} = r_1 \qquad (3)$$

Таким образом, мы получили, что наиболее вероятное расстояние электрона от ядра в нашем случае равняется первому Боровскому радиусу: $r_{вер} = r_1$. Графически функция (2) представлена на рисунке 1:

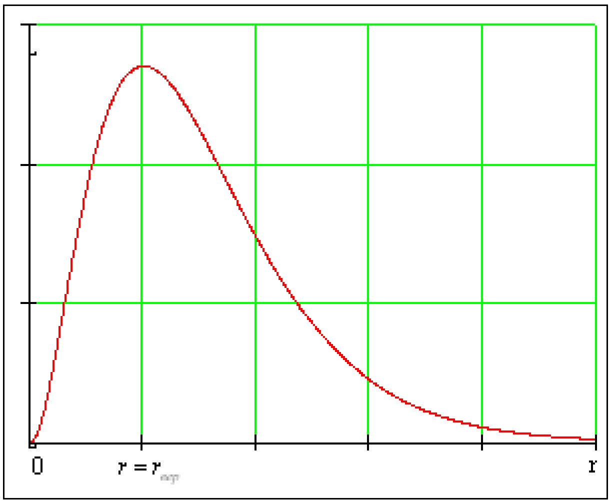

Рисунок 1

Определим постоянную A в выражении для волновой функции, воспользовавшись условием нормировки:

$$\int_0^\infty |\psi|^2 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \tag{4}$$

Тогда пси-функция заданного состояния имеет вид:

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \tag{5}$$

Вероятность нахождения электрона в шаровом слое единичной толщины равняется:

$$\rho_ш(r) = 4\pi A^2 r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) = \frac{4}{r_1^3} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) \tag{6}$$

Найдём вероятность нахождения частицы в области $r < r_{вер}$. Для этого необходимо вычислить следующий интеграл:

$$P = \frac{4}{r_1^3} \int_0^{r_1} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr = 1 - \frac{5}{e^2} \approx 0.323 = 32.3\% \tag{7}$$

Ответ: а) Наиболее вероятное расстояние электрона от ядра $r_{вер} = r_1$, б) Вероятность нахождения электрона в области $r < r_{вер}$ равняется $P = 32.3\%$.

Задача № 5.146.

Найти для электрона атома водорода в основном состоянии $\psi(r) = A\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)$ отношение среднего расстояния от ядра $< r >$ к наиболее вероятному $r_{вер}$.

Решение:

Определим постоянную A в выражении для пси-функции, используя условие нормировки:

$$\int_0^\infty |\psi|^2 4\pi r^2 dr = 1 \Rightarrow 4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \quad (1)$$

Таким образом, заданная пси-функция имеет вид:

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \quad (2)$$

Физический смысл пси-функции состоит в том, что квадрат модуля волновой функции является плотностью вероятности местонахождения частицы. Таким образом, вероятность нахождения частицы в шаровом слое радиуса r и толщиной dr равняется:

$$dP = |\psi|^2 4\pi r^2 dr = \frac{4}{r_1^3} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr \quad (3)$$

Таким образом, вероятность нахождения частицы в шаровом слое единичной толщины равняется:

$$\rho_ш(r) = \frac{4}{r_1^3} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) \quad (4)$$

Найдём значение $r = r_{вер}$, при котором функция (4) имеет максимум:

$$\frac{\partial \rho_ш}{\partial r} = \frac{4}{r_1^3}\left(2r\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) - \frac{2r^2}{r_1}\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)\right) = \frac{8r}{r_1^3}\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)\left(1 - \frac{r}{r_1}\right) \quad (5)$$

Условие экстремума:

$$\left.\frac{\partial \rho_ш}{\partial r}\right|_{r=r_{вер}} = 0 \Rightarrow 1 - \frac{r_{вер}}{r_1} = 0 \Rightarrow r_{вер} = r_1 \quad (6)$$

Таким образом, мы получили, что наиболее вероятное расстояние электрона от ядра равняется $r_{вер} = r_1$.

Найдём среднее значение $<r>$. Среднее значение определяется из выражения:

$$<r> = \int \psi^* \hat{r} \psi \, dV = \frac{1}{\pi r_1^3} \int_0^\infty r \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) 4\pi r^2 dr = \frac{4}{r_1^3} \int_0^\infty r^3 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr = \frac{3r_1}{2} \quad (7)$$

Таким образом, отношение среднего значения к наиболее вероятному равняется:

$$\frac{<r>}{r_{вер}} = \frac{3}{2} = 1.5 \quad (8)$$

Ответ: отношение среднего значения расстояния электрона от ядра к наиболее вероятному равняется: $\frac{<r>}{r_{вер}} = 1.5$.

Задача № 5.147.

Электрон в атоме водорода находится в основном состоянии $\psi(r) = Ae^{-\alpha r}$, где A и α - постоянные. Определить вероятность нахождения этого электрона вне классических границ поля.

Решение:

Электрон в атоме водорода находится в потенциальном поле, которое имеет вид:

$$U(r) = -\frac{e^2}{r}k \qquad (1)$$

где $k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$. Классические границы определяются из решения уравнения:

$$U(r_{гр}) = E \qquad (2)$$

где E - энергия электрона в этом состоянии. Согласно классическим представлениям электрон не может находиться в области, где потенциальная энергия превышает его полную энергию $U(r) > E$. Графически вид потенциального поля, в котором находится электрон, представлен на рисунке 1:

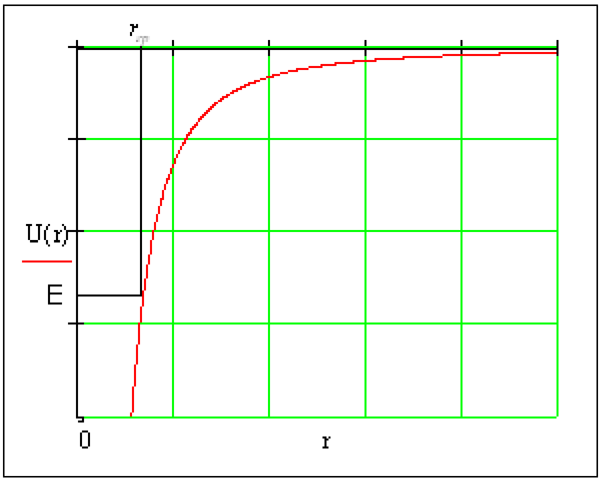

Рисунок 1

$r_{гр}$ - определяет классические границы поля. Найдём значение энергии электрона в заданном состоянии.

Определим постоянную A в выражении для пси-функции электрона, воспользовавшись условием нормировки:

$$\int |\psi|^2 dV = 1 \Rightarrow \int_0^\infty |\psi|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = 1 \Rightarrow 4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r} dr = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} \qquad (3)$$

Тогда пси-функция заданного состояния равняется:

$$\psi(r)=\sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}e^{-\alpha r} \tag{4}$$

Уравнение Шредингера в нашем случае имеет вид:

$$\Delta\psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U(r))\psi=0 \tag{5}$$

В нашем случае потенциальное поле, в котором движется электрон определяет выражение (1), а в качестве оператора Лапласа будем применять его радиальную часть $\Delta_r=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}$, так как в нашем случае волновая функция зависит только от координаты r. С учётом этого уравнение (5) примет вид:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}k\right)\psi=0 \tag{6}$$

Найдём первую и вторую производные по r от выражения (4):

$$\begin{gathered}\frac{\partial\psi}{\partial r}=-\alpha\sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}e^{-\alpha r}\\ \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}=\alpha^2\sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}e^{-\alpha r}\end{gathered} \tag{7}$$

Подставим выражение (4) и выражения (7) в уравнение Шредингера (6):

$$\alpha^2\sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}e^{-\alpha r}-\frac{2}{r}\alpha\sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}e^{-\alpha r}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}k\right)\sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}e^{-\alpha r}=0 \tag{8}$$

Разделим обе части выражения (8) на $\sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}}e^{-\alpha r}$ и преобразуем к виду:

$$\frac{1}{r}\left(\frac{2me^2}{\hbar^2}k-2\alpha\right)+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E+\alpha^2\right)=0 \tag{9}$$

Это уравнение должно выполняться при любом значении r, поэтому получим:

$$\frac{2me^2}{\hbar^2}k-2\alpha=0 \tag{10}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}E+\alpha^2=0 \tag{11}$$

Из уравнения (10) получим, что $\alpha = \frac{me^2}{\hbar^2}k = \frac{1}{r_1}$, где r_1 - первый боровский радиус.

Подставим это значение в уравнение (11) и найдём значение энергии в заданном состоянии:

$$\frac{2m}{\hbar^2}E + \frac{m^2e^4}{\hbar^4}k^2 = 0 \Rightarrow E = -\frac{me^4}{2\hbar^2}k^2 \qquad (12)$$

Теперь найдём классические границы поля из решения уравнения (2):

$$-\frac{e^2}{r_{гр}}k = -\frac{me^4}{2\hbar^2}k^2 \Rightarrow r_{гр} = \frac{2\hbar^2}{me^2}\frac{1}{k} = 2r_1 \qquad (13)$$

Учитывая, что $\alpha = \frac{me^2}{\hbar^2}k = \frac{1}{r_1}$, получим, что пси-функция заданного состояния имеет вид:

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}}\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \qquad (14)$$

Физический смысл пси-функции состоит в том, что квадрат модуля пси-функции является плотностью вероятности местонахождения частицы. Тогда вероятность нахождения частицы в шаровом слое радиусом r и толщиной dr равняется:

$$dP = 4\pi r^2 \left|\psi\right|^2 dr = \frac{4}{r_1^3}r^2\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)dr \qquad (15)$$

Таким образом, вероятность нахождения электрона в шаровом слое единичной толщины, равняется:

$$\rho_ш(r) = \frac{4}{r_1^3}r^2\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) \qquad (16)$$

Для того, чтобы найти вероятность нахождения электрона вне классических границ поля, необходимо вычислить следующий интеграл:

$$P = \int_{r_{гр}}^{\infty}\rho_ш(r)dr = \frac{4}{r_1^3}\int_{2r_1}^{\infty}r^2\exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right)dr = \frac{13}{\exp(4)} \approx 0.238 = 23.8\% \qquad (17)$$

Ответ: вероятность нахождения электрона вне классических границ поля равняется $P = \frac{13}{\exp(4)} \approx 0.238 = 23.8\%$.

Задача № 5.148.

Состояние $1s$ -электрона атома водорода описывается волновой функцией $\psi(r) = A\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)$, где A - нормировочный коэффициент, где r_1 - первый боровский радиус. Найти для этого состояния средние значения:
а) модуля кулоновской силы, действующей на электрон;
б) потенциальной энергии взаимодействия электрона с ядром.

Решение:

Определим постоянную A в выражении для пси-функции, используя условие нормировки. Квадрат модуля пси-функции определяет плотность вероятности местонахождения частицы. Тогда вероятность нахождения частицы в шаровом слое радиуса r и толщиной dr равняется:

$$dP = 4\pi r^2 \left|\psi\right|^2 dr = 4\pi A^2 r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr \qquad (1)$$

Частица достоверно находится в области $0 < r < \infty$, поэтому:

$$4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \qquad (2)$$

Таким образом, пси-функция примет вид:

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \qquad (3)$$

Модуль кулоновской силы, действующей на электрон, равняется:

$$F = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \qquad (4)$$

Потенциальная энергия электрона в заданном состоянии, равняется:

$$U = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (5)$$

В квантовой механике среднее значение физической величины Q в квантовом состоянии, описываемом пси-функцией ψ, равняется следующему интегралу:

$$< Q > = \int \psi^* \hat{Q} \psi \, dV \qquad (6)$$

где ψ^* ψ, $\hat{Q}$ - оператор физической величины Q

(3), в качестве элементарного объёма dV выберем объём шарового слоя $dV = 4\pi r^2 dr$ и проинтегрируем по всей области $0 < r < \infty$:

Среднее значение модуля кулоновской силы, действующей на электрон в атоме водорода в заданном состоянии, равняется:

$$< F >= \int_0^\infty \psi^* \hat{F} \psi 4\pi r^2 dr = 4\pi \frac{1}{\pi r_1^3} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{2e^2}{r_1^2} \qquad (7)$$

Среднее значение потенциальной энергии электрона:

$$< U >= \int_0^\infty \psi^* \hat{U} \psi 4\pi r^2 dr = -4\pi \frac{1}{\pi r_1^3} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int_0^\infty r \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_1} \qquad (8)$$

Ответ: среднее значение модуля кулоновской силы, действующей на электрон:

$$< F >= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{2e^2}{r_1^2}$$

среднее значение потенциальной энергии электрона:

$$< U >= -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_1}$$

Задача № 5.149.

Электрон в атоме водорода в $2p$-состоянии описывается волновой функцией, радиальная часть которой $R(r) \sim r\exp\left(-\frac{r}{2r_1}\right)$, где r_1 - первый боровский радиус. Найти в этом состоянии:

а) наиболее вероятное расстояние $r_{вер}$ электрона от ядра;

б) среднее расстояние $< r >$ между электроном и ядром.

Решение:

Радиальная часть волновой функции электрона в атоме водорода в $2p$-состоянии имеет вид:

$$R(r) = Ar\exp\left(-\frac{r}{2r_1}\right) \tag{1}$$

где A - некоторая постоянная, которую найдём, используя условие нормировки волновой функции:

$$\int|\psi|^2 dV = 1 \Rightarrow A^2\int_0^\infty r^2\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)\cdot 4\pi r^2 dr = 1 \Rightarrow 4\pi A^2\cdot 24r_1^5 = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{4\sqrt{6\pi r_1^5}} \tag{2}$$

Таким образом, радиальная часть волновой функции электрона примет вид:

$$R(r) = \frac{1}{4\sqrt{6\pi r_1^5}}r\exp\left(-\frac{r}{2r_1}\right) \tag{3}$$

Физический смысл пси-функции состоит в том, что квадрат модуля пси-функции определяет плотность вероятности местонахождения частицы. Тогда вероятность нахождения частицы в шаровом слое радиуса r и толщиной dr равняется:

$$dP = \frac{1}{96\pi r_1^5}r^2\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)4\pi r^2 dr \tag{4}$$

Отсюда следует, что вероятность нахождения электрона в шаровом слое единичной толщины равняется:

$$\rho_ш(r) = \frac{1}{96\pi r_1^5}r^2\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)4\pi r^2 = \frac{1}{24r_1^5}r^4\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \tag{5}$$

Найдём значение $r = r_{вер}$, при котором функция (5) имеет максимум:

$$\frac{\partial\rho_ш}{\partial r} = \frac{1}{24r_1^5}\left(4r^3\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) - \frac{r^4}{r_1}\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)\right) = \frac{1}{24r_1^5}r^3\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)\left(4 - \frac{r}{r_1}\right) \tag{6}$$

$$\left.\frac{\partial \rho_ш}{\partial r}\right|_{r=r_{вер}} = 0 \Rightarrow 4 - \frac{r_{вер}}{r_1} = 0 \Rightarrow r_{вер} = 4r_1 \qquad (7)$$

Графически зависимость (5) представлена на рисунке 1:

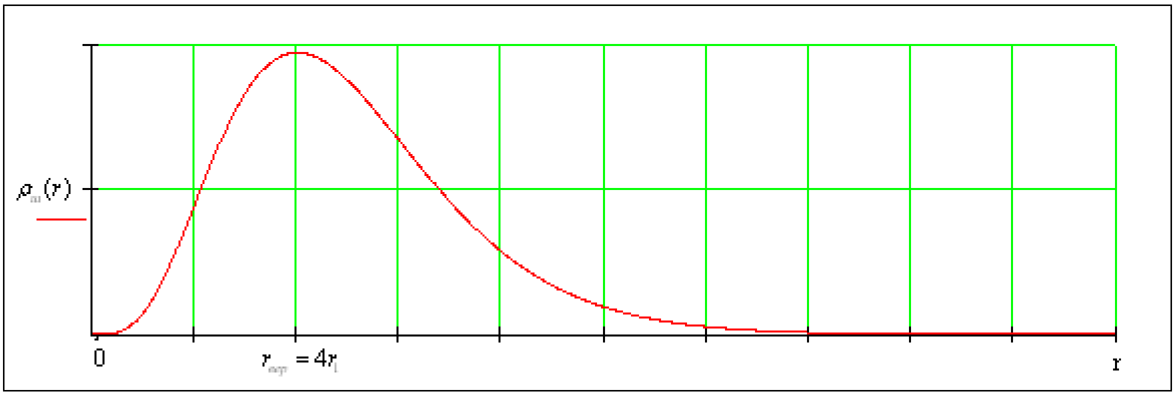

Рисунок 1

Таким образом, наиболее вероятное расстояние электрона от ядра равняется $r_{вер} = 4r_1$.
В квантовой механике среднее значение физической величины Q в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией ψ, определяется следующим выражением:

$$< Q >= \int \psi^* \hat{Q} \psi dV \qquad (8)$$

где ψ^* - функция, комплексно сопряжённая к волновой функции ψ, $\hat{Q}$ - оператор физической величины Q. В нашем случае $\hat{r} = r$, $dV = 4\pi r^2 dr$, поэтому выражение (8) примет вид:

$$< r >= \int_0^\infty \frac{1}{96\pi r_1^5} r^3 \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \cdot 4\pi r^2 dr = \frac{1}{24 r_1^5} \int_0^\infty r^5 \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) dr = 5r_1 \qquad (9)$$

Таким образом, среднее расстояние между электроном и ядром равняется $< r >= 5r_1$.

Ответ: а) $r_{вер} = 4r_1$, б) $< r >= 5r_1$.

Задача № 5.150.

Частица находится в сферически-симметричном потенциальном поле в стационарном состоянии, для которого $\psi(r) = (2\pi a)^{-\frac{1}{2}} r^{-1} e^{-\frac{r}{a}}$, где a - постоянная, r - расстояние от центра поля. Найти среднее значение $<r>$.

Решение:

Волновая функция частицы в заданном стационарном состоянии имеет вид:

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}}\frac{1}{r}\exp\left(-\frac{r}{a}\right) \tag{1}$$

В квантовой механике среднее значение физической величины Q в состоянии, описываемом волновой функцией ψ, определяется выражением:

$$<Q> = \int \psi^* \hat{Q} \psi dV \tag{2}$$

где ψ^* - функция, комплексно сопряжённая к волновой функции ψ, $\hat{Q}$ - оператор физической величины Q. Интегрирование производится по всей области возможного нахождения частицы. В нашем случае $\hat{r} = r$, $\psi^* = \psi$, волновая функция определяется выражением (1), в качестве элементарного объёма выберем объём шарового слоя, радиусом r и толщиной dr ($dV = 4\pi r^2 dr$). Тогда в нашем случае, среднее значение расстояния частицы от центра поля равняется:

$$<r> = \int_0^\infty \psi^* \hat{r} \psi \cdot 4\pi r^2 dr = \frac{4\pi}{2\pi a}\int_0^\infty \frac{1}{r^2}\exp\left(-\frac{2r}{a}\right) r \cdot r^2 dr = \frac{2}{a}\int_0^\infty r\exp\left(-\frac{2r}{a}\right) dr = \frac{a}{2} \tag{3}$$

Ответ: среднее значение расстояния частицы в заданном стационарном состоянии от центра поля равняется $<r> = \frac{a}{2}$.

Задача № 5.151.

Частица массы m находится в одномерном потенциальном поле $U(x) = \kappa x^2$, где κ - положительная постоянная. Найти среднее значение $<U>$ частицы в состоянии $\psi(x) = A\exp(-\alpha x^2)$, где A и α - неизвестные постоянные.

Решение:

Потенциальное поле, в котором находится частица, имеет вид, представленный на рисунке 1:

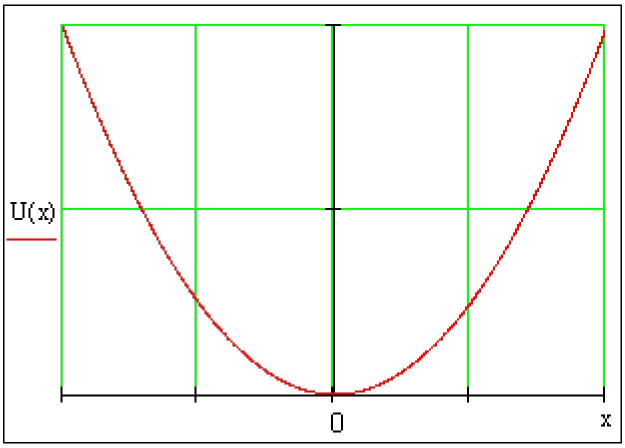

Рисунок 1

$U(x) = \kappa x^2$

Составим уравнение Шредингера для частицы в таком потенциальном поле:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \kappa x^2\right)\psi = 0 \tag{1}$$

В нашем случае пси-функция состояния частицы имеет вид:

$$\psi(x) = A\exp(-\alpha x^2) \tag{2}$$

Найдём вторую производную от выражения (2) по x:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= -2\alpha A x \exp(-\alpha x^2) = -2\alpha x \psi \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= -2\alpha A \exp(-\alpha x^2) + 4\alpha^2 x^2 A \exp(-\alpha x^2) = (4\alpha^2 x^2 - 2\alpha)\psi \end{aligned} \tag{3}$$

Подставим (3) в уравнение Шредингера (1) и получим уравнение:

$$(4\alpha^2 x^2 - 2\alpha)\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \kappa x^2\right)\psi = 0 \tag{4}$$

Разделим обе части на 2ψ и приведём к виду:

$$\left(2\alpha^2 - \frac{m\kappa}{\hbar^2}\right)x^2 + \left(\frac{m}{\hbar^2}E - 2\alpha\right) = 0 \qquad (5)$$

Уравнение (5) должно выполняться при любом значении x, поэтому получим, что:

$$2\alpha^2 - \frac{m\kappa}{\hbar^2} = 0 \qquad (6)$$

$$\frac{m}{\hbar^2}E - 2\alpha = 0 \qquad (7)$$

Из уравнения (6), получим $\alpha = \pm\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m\kappa}{2}}$, но по условию $\alpha > 0$, поэтому постоянная α равняется:

$$\alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m\kappa}{2}} \qquad (8)$$

Из уравнения (7), получим значение энергии частицы в заданном состоянии:

$$E = \frac{2\alpha\hbar^2}{m} = \frac{2}{\hbar}\sqrt{\frac{m\kappa}{2}}\frac{\hbar^2}{m} = \hbar\sqrt{2m\kappa} \qquad (9)$$

Определим постоянную A в выражении (2), используя условие нормировки пси-функции:

$$\int|\psi|^2 dx = 1 \Rightarrow A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-2\alpha x^2)dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt[4]{\frac{2\alpha}{\pi}} \qquad (10)$$

Тогда пси-функция заданного состояния примет вид:

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{2\alpha}{\pi}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m\kappa}{2}}x^2\right) \qquad (11)$$

В квантовой механике среднее значение физической величины Q в квантовом состоянии, описываемом пси-функцией ψ определяется следующим выражением:

$$< Q > = \int\psi^*\hat{Q}\psi dx \qquad (12)$$

Здесь ψ^* - функция, комплексно сопряжённая к пси-функции ψ, $\hat{Q}$ - оператор физической величины Q. Интегрирование производится по всей области возможного нахождения частицы. В нашем случае имеем:

$$
\begin{aligned}
&< U >= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \sqrt[4]{\frac{2\alpha}{\pi}} \exp\left(-\alpha x^2\right) \cdot \kappa x^2 \cdot \sqrt[4]{\frac{2\alpha}{\pi}} \exp\left(-\alpha x^2\right) dx = \\
&= \kappa \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp\left(-2\alpha x^2\right) dx = \kappa \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \cdot \frac{1}{8\alpha} \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} = \frac{\kappa}{4\alpha} = \frac{\kappa \hbar}{4} \sqrt{\frac{2}{m\kappa}} = \hbar \sqrt{\frac{\kappa}{8m}}
\end{aligned}
\tag{13}
$$

Таким образом, мы получили, что среднее значение потенциальной энергии частицы в заданном состоянии равняется $< U >= \hbar \sqrt{\frac{\kappa}{8m}}$.

Ответ: $< U >= \hbar \sqrt{\frac{\kappa}{8m}}$.

Задача № 5.152.

Частица в момент $t=0$ находится в состоянии $\psi = A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}+ikx\right)$, где A и a - постоянные. Найти:
а) $<x>$;
б) $<p_x>$ - среднее значение проекции импульса.

Решение:

Волновая функция имеет вид:

$$\psi(x) = A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}+ikx\right) \qquad (1)$$

В квантовой механике среднее значение физической величины Q в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией ψ, определяется следующим выражением:

$$<Q>=\int \psi^* \hat{Q}\psi\, dx \qquad (2)$$

где $\hat{Q}$ - оператор физической величины Q. интегрирование производится по всей области возможного нахождения частицы.

а) Найдём среднее значение координаты x. В этом случае $\hat{x}=x$, тогда получим:

$$\begin{aligned}<x>&=\int\limits_{-\infty}^{+\infty} A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}-ikx\right)\cdot x\cdot A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}+ikx\right)dx=\\&=A^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty} x\exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right)dx=0\end{aligned} \qquad (3)$$

Этот интеграл равняется нулю, так как под интегралом стоит нечётная функция. Таким образом, мы получили, что среднее значение координаты x равняется $<x>=0$.

б) Найдём среднее значение проекции импульса $<p_x>$. В этом случае оператор проекции импульса равняется:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \qquad (4)$$

Тогда получим:

$$
\begin{aligned}
< p_x >= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ikx \right) \cdot \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} - ikx \right)\right) dx = \\
= \int_{-\infty}^{+\infty} A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} - ikx \right) \cdot \frac{\hbar}{i}\left(ikA \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ikx \right)\right) = \hbar k \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, dx = \hbar k
\end{aligned} \tag{5}
$$

Здесь учитывается, что $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, dx = 1$, согласно условию нормировки. Таким образом, получили, что среднее значение проекции импульса равняется $< p_x >= \hbar k$.

Ответ: а) $< x >= 0$; б) $< p_x >= \hbar k$.

Задача № 5.153.

Найти средний электростатический потенциал, создаваемый электроном в центре атома водорода, если электрон находится в основном состоянии $\psi(r) = A\exp\left(-\frac{r}{r_1}\right)$, где A - постоянная, r_1 - первый боровский радиус.

Решение:

Найдём постоянную A в выражении для пси-функции, используя условие нормировки:

$$\int |\psi|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = 1 \Rightarrow 4\pi A^2 \int_0^\infty r^2 \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \qquad (1)$$

Тогда выражение для пси-функции имеет вид:

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right) \qquad (2)$$

Потенциал, создаваемой электроном, в центре атоме водорода, равняется:

$$\varphi = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e}{r} \qquad (3)$$

где r - расстояние от центра атома. В квантовой механике среднее значение физической величины Q в квантовом состоянии, описываемом пси-функцией ψ, определяется из следующего выражения:

$$< Q >= \int \psi^* \hat{Q} \psi dV \qquad (4)$$

где $\hat{Q}$ - оператор физической величины Q, ψ^* - функция, комплексно сопряжённая к пси-функции ψ. Интегрирование производится по всей области возможного нахождения частицы. В нашем случае в качестве элементарного объёма примем объём шарового слоя радиуса r и толщиной dr, $dV = 4\pi r^2 dr$. Тогда среднее значение потенциала равняется:

$$< \varphi >= \int_0^\infty |\psi|^2 \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{(-e)}{r} 4\pi r^2 dr = \int_0^\infty \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\rho}{r} 4\pi r^2 dr \qquad (5)$$

где $\rho = -e|\psi|^2$ - объёмная плотность электрического заряда. Вычислим интеграл (5):

$$< \varphi >= -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4}{r_1^3}\int_0^\infty r \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right) dr = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e}{r_1} \qquad (6)$$

Ответ: средний потенциал, создаваемый электроном в центре атома водорода, равняется:

$$<\varphi> = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e}{r_1}.$$

Задача № 5.154.

Частицы с массой m и энергией E, движутся слева на потенциальной барьер (рисунок 1). Найти:

а) коэффициент отражения R от этого барьера при $E > U_0$;

б) эффективную глубину проникновения частиц в область $x > 0$ при $E < U_0$, то есть расстояние от границы барьера до точки, где плотность вероятности нахождения частицы уменьшается в e раз.

Решение:

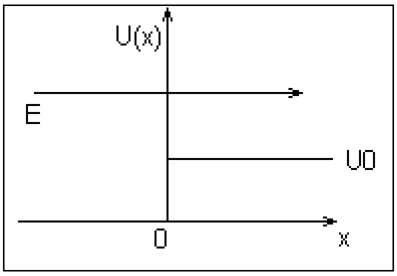

Рисунок 1

Потенциальная энергия имеет вид:

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

Составим уравнение Шредингера:

Для области $x < 0$: $\dfrac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} E\psi_1 = 0$ (1)

Для области $x > 0$: $\dfrac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\psi_2 = 0$ (2)

Запишем уравнения (1) и (2) в виде:

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k_1^2 \psi_1 = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_2 = 0 \quad (4)$$

где $k_1^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2} E$, $k_2^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)$. Решения дифференциальных уравнений (3) и (4) имеют вид:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad (5)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \quad (6)$$

Падающей дебройлевской волне соответствует первое слагаемое выражения (5), отражённой дебройлевской волне соответствует второе слагаемое выражения (5), прошедшей дебройлевской волне соответствует первое слагаемое выражения (6). Второму слагаемому выражения (6) не соответствует никакая дебройлевская волна, поэтому коэффициент $B_2 = 0$, тогда выражение (6) примет вид:

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} \tag{7}$$

На пси-функцию накладываются стандартные условия: непрерывность, гладкость, конечность и однозначность. Используя условие непрерывности волновой функции в точке $x = 0$, получим:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 \tag{8}$$

Используя условие гладкости пси-функции в точке $x = 0$, получим:

$$\left.\frac{\partial \psi_1}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial \psi_2}{\partial x}\right|_{x=0} \Rightarrow k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 \tag{9}$$

Рассмотрим случай, когда $E > U_0$:

Разделим обе части выражения (9) на k_1 и получим:

$$A_1 - B_1 = \frac{k_2}{k_1} A_2 \tag{10}$$

Разделим выражение (8) на выражение (10) и получим:

$$\frac{A_1 + B_1}{A_1 - B_1} = \frac{k_1}{k_2} \Rightarrow k_2(A_1 + B_1) = k_1(A_1 - B_1) \Rightarrow \frac{B_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \tag{11}$$

Складывая выражения (8) и (9), получим:

$$2A_1 = \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) A_2 \Rightarrow \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \tag{12}$$

Модуль вектора потока плотности вероятности пропорционален квадрату амплитуды A^2 волновой функции состояния частицы, определяющему плотность вероятности местонахождения частицы и скорости частицы, а значит и модулю её волнового вектора k.

$$P \sim kA^2 \tag{13}$$

Для падающей на потенциальный порог дебройлевской волны поток плотности вероятности:

$$P \sim k_1 A_1^2 \tag{14}$$

Для отражённой дебройлевской волны:

$$P' \sim k_1 B_1^2 \tag{15}$$

Для прошедшей дебройлевской волны:

$$P'' \sim k_2 A_2^2 \tag{16}$$

Тогда коэффициент отражения дебройлевской волны от потенциального порога равняется:

$$R = \frac{P'}{P} = \frac{k_1 B_1^2}{k_1 A_1^2} = \left(\frac{B_1}{A_1}\right)^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \tag{17}$$

Коэффициент прохождения:

$$D = \frac{P''}{P} = \frac{k_2 A_2^2}{k_1 A_1^2} = \frac{k_2}{k_1}\left(\frac{A_2}{A_1}\right)^2 = \frac{k_2}{k_1}\left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \tag{18}$$

Как видно из выражений (17) и (18) коэффициенты отражения и прохождения частицы не зависят от направления движения частицы. Кроме того, выполняется:

$$R + D = 1 \tag{19}$$

Рассмотрим случай, когда $E < U_0$. В этом случае $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} = i\frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} = i\kappa$, где $\kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$. Таким образом, коэффициент отражения в этом случае:

$$R = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - i\kappa}{k_1 + i\kappa}\right|^2 = 1 \tag{20}$$

Тогда, согласно уравнению (19), коэффициент прохождения равняется нулю $D = 0$. Таким образом, при $E < U_0$ дебройлевская волна полностью отражается от потенциального порога. Но в этом случае возможно проникновение частицы на некоторую глубину в область потенциального порога. Плотность вероятности местонахождения частицы в области потенциального порога определяет квадрат модуля пси-функции (7):

$$\rho(x) = |\psi_2|^2 = A_2^2 \exp(2ik_2 x) = A_2^2 \exp(-2\kappa x) \tag{21}$$

Пусть $l_{эфф}$ - эффективная глубина проникновения частицы в область потенциального порога, то есть расстояние от границы барьера до точки, где плотность вероятности нахождения частицы уменьшается в e раз. В этом случае:

$$\frac{\rho(l_{эфф})}{\rho(0)} = \frac{A_2^2 \exp(-2\kappa l_{эфф})}{A_2^2} = \exp(-2\kappa l_{эфф}) = \frac{1}{\exp(1)} \Rightarrow 2\kappa l_{эфф} = 1 \tag{22}$$

Отсюда получим:

$$l_{эфф} = \frac{1}{2\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{8m(U_0 - E)}} \tag{23}$$

Ответ: а) коэффициент отражения в случае $E > U_0$ равняется $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$, где $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$;

б) эффективная глубина проникновения частицы в область потенциального порога в случае $E < U_0$ равняется $l_{эфф} = \frac{1}{2\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{8m(U_0 - E)}}$.

Задача № 5.156.

Найти для электрона с энергией E вероятность D прохождения сквозь потенциальный барьер, который имеет вид, показанный на рисунке 1.

Решение:

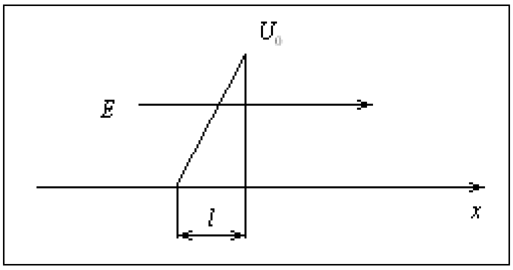

Рисунок 1

Пусть начало потенциального барьера имеет координату x_0, тогда потенциальная энергия имеет вид:

$$U(x) = \begin{cases} 0, x < x_0 \\ \dfrac{U_0}{l}(x - x_0), x_0 < x < x_0 + l \\ 0, x > x_0 + l \end{cases}$$

Вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер определяется выражением:

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right) \tag{1}$$

где пределы интегрирования x_1 и x_2 являются корнями уравнения: $U(x) = E$. В нашем случае $x_2 = x_0 + l$, а $\dfrac{U_0}{l}(x_1 - x_0) = E \Rightarrow x_1 = x_0 + \dfrac{E}{U_0} l$. Тогда в нашем случае выражение (1) имеет вид:

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_0 + \frac{E}{U_0} l}^{x_0 + l} \sqrt{2m\left(\frac{U_0}{l}(x - x_0) - E \right)} dx \right) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{2mU_0}{l}} \int_{x_0 + \frac{E}{U_0} l}^{x_0 + l} \sqrt{x - \left(x_0 + \frac{E}{U_0} l \right)} dx \right) =$$

$$= \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \sqrt{\frac{2mU_0}{l}} \cdot \left(x - \left(x_0 + \frac{E}{U_0} l \right) \right)^{\frac{3}{2}} \Bigg|_{x_0 + \frac{E}{U_0} l}^{x_0 + l} \right) = \exp\left(-\frac{4}{3\hbar} \sqrt{\frac{2mU_0}{l}} \cdot \left(l\left(1 - \frac{E}{U_0} \right) \right)^{\frac{3}{2}} \right) = \exp\left(-\frac{4l\sqrt{2m}}{3\hbar U_0} \left(U_0 - E \right)^{\frac{3}{2}} \right)$$

Таким образом, мы получили, что коэффициент прохождения частицы через потенциальный барьер заданного вида равняется:

$$D \approx \exp\left(-\frac{4l\sqrt{2m}}{3\hbar U_0}\left(U_0 - E\right)^{\frac{3}{2}}\right) \tag{2}$$

Ответ: $D \approx \exp\left(-\frac{4l\sqrt{2m}}{3\hbar U_0}\left(U_0 - E\right)^{\frac{3}{2}}\right)$.

Задача №5.157.

Найти вероятность прохождения частицы с массой m и энергией E сквозь потенциальный барьер (рисунок 1), где $U(x)=U_0\left(1-\frac{x^2}{l^2}\right)$.

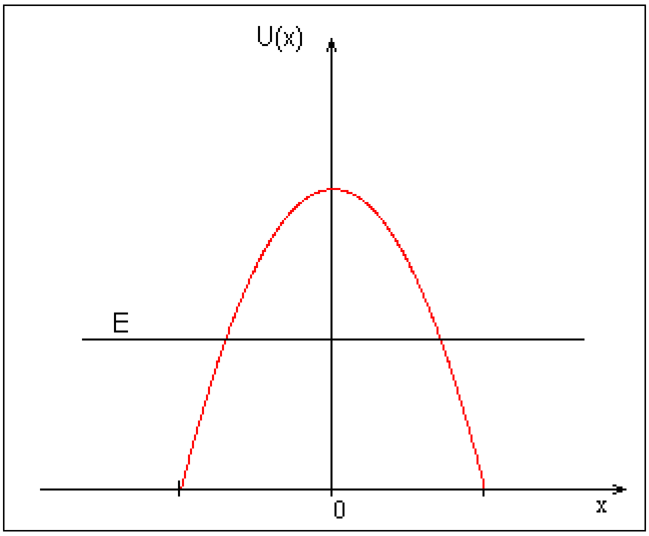

Рисунок 1

Решение:

Вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер определяется выражением:

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U(x)-E)}dx\right) \qquad (1)$$

где m - масса частицы, $U(x)$ - определяет вид потенциального барьера, E - энергия частицы, x_1, x_2 - решения уравнения $U(x)=E$. В нашем случае:

$$U_0\left(1-\frac{x^2}{l^2}\right)=E \qquad (2)$$

Решения этого уравнения:

$$x_{1,2}=\pm l\sqrt{1-\frac{E}{U_0}} \qquad (3)$$

Таким образом, для потенциального барьера данного вида, получим, что коэффициент прохождения частицы через потенциальный барьер равняется:

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{-l\sqrt{1-\frac{E}{U_0}}}^{l\sqrt{1-\frac{E}{U_0}}}\sqrt{2m\left(U_0\left(1-\frac{x^2}{l^2}\right)-E\right)}dx\right) \qquad (4)$$

Для вычисления выражения (4) рассмотрим интеграл:

$$\int\limits_{-l\sqrt{1-\frac{E}{U_0}}}^{l\sqrt{1-\frac{E}{U_0}}} \sqrt{2m\left(U_0\left(1-\frac{x^2}{l^2}\right)-E\right)}dx = \sqrt{2m}\int\limits_{-l\sqrt{1-\frac{E}{U_0}}}^{l\sqrt{1-\frac{E}{U_0}}} \sqrt{\left((U_0-E)-U_0\frac{x^2}{l^2}\right)}dx = \frac{\sqrt{2mU_0}}{l}\int\limits_{-l\sqrt{1-\frac{E}{U_0}}}^{l\sqrt{1-\frac{E}{U_0}}} \sqrt{\left(l^2\left(1-\frac{E}{U_0}\right)-x^2\right)}dx$$

Обозначим $a = l\sqrt{1-\dfrac{E}{U_0}}$, тогда интеграл в этом выражении примет простой вид:

$$\int\limits_{-a}^{a} \sqrt{a^2-x^2}\,dx = \frac{\pi a^2}{2}$$

Таким образом, выражение (4) примет вид:

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\frac{\sqrt{2mU_0}}{l}\frac{\pi l^2}{2}\left(1-\frac{E}{U_0}\right)\right) = \exp\left(-\frac{\pi l\sqrt{2mU_0}}{\hbar}\left(1-\frac{E}{U_0}\right)\right) \qquad (5)$$

Ответ: $D \approx \exp\left(-\dfrac{\pi l\sqrt{2mU_0}}{\hbar}\left(1-\dfrac{E}{U_0}\right)\right)$.