ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО СВЯЗИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ПОВОЛЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЙ И ИНФОРМАТИКИ»

Кафедра физики

И.В. Матвеев

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА
Применение уравнения Шрёдингера к расчёту связанных состояний

Методические указания по выполнению лабораторных работ

Самара,
2017

УДК 530.145
БКК
М

Рекомендовано к изданию методическим советом ПГУТИ, протокол № 50, от 14.03.2017 г.

Матвеев, И. В.
М **Квантовая физика. Применение уравнения Шрёдингера к расчёту связанных состояний:** методические указания по выполнению лабораторных работ / И. В. Матвеев, – Самара: ПГУТИ, 2017. – 50 с.

Методические указания по выполнению лабораторных работ «Квантовая физика. Применение уравнения Шрёдингера к расчёту связанных состояний» содержат краткую теорию и порядок выполнения лабораторных работ по курсу «Квантовая физика», разработаны в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 12.03.03 «Фотоника и оптоинформатика» и предназначены для студентов 2-го курса факультета БТО для самостоятельной подготовки к лабораторным работам.

ISBN

Содержание

Лабораторная работа № 1.
Операторы физических величин

Цель работы

Ознакомиться с операторами физических величин в различных системах координат. Найти коммутаторы и антикоммутаторы физических величин.

Операторы

Оператором $\hat{A}$ называется *правило, согласно которому, каждой функции u(x) из некоторого класса функций сопоставляется другая функция* $v(x)$. Данная операция символически записывается в виде умножения $\hat{A}$ на u: $\hat{A}u(x) = v(x)$.

Оператор $\hat{A}$ называется *линейным*, если он обладает следующим свойством:

$$\hat{A}\left(c_1 u_1 + c_2 u_2\right) = c_1 \hat{A} u_1 + c_2 \hat{A} u_2,$$

где u_1 и u_2 — две произвольные функции, а c_1 и c_2 — произвольные постоянные.

Линейный оператор $\hat{A}$ называют *самосопряжённым* или *эрмитовым*, если имеет место равенство:

$$\int u_1^*(x) \cdot \hat{A} u_2(x) \cdot \mathrm{d}x = \int u_2(x) \cdot \hat{A} u_1^*(x) \cdot \mathrm{d}x,$$

где интеграл взят по всей области изменения переменной x, а $u_1^*(x)$ и $u_2(x)$ — две произвольные функции со следующими свойствами: они интегрируемы и имеют производные, равные нулю, на границах области интегрирования. Если переменных много, то под $\mathrm{d}x$ следует подразумевать $\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$.

Произведением операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ является такой оператор $\hat{C}$, что $\hat{C}\psi = \hat{A}\left(\hat{B}\psi\right)$, т.е. сперва на функцию ψ действует оператор $\hat{B}$, а потом на этот результат действует оператор $\hat{A}$. Символически это записывается следующим образом: $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$.

В общем случае, операторы $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ и $\hat{C}' = \hat{B}\hat{A}$ не равны. Коммутатором операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называют следующий оператор:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Антикоммутатором операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называют следующий оператор:

$$\left\{\hat{A}, \hat{B}\right\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}.$$

Каждой механической величине A в квантовой механике сопоставляется изображающий её линейный самосопряжённый оператор $\hat{A}$. В координатном представлении операторами координат являются сами координаты. Оператором импульса является следующий оператор:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla; \quad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}; \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

Если имеется классическая величина A, как функция координат и импульсов $A \equiv A(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$, то линейный и самосопряжённый оператор $\hat{A}$, построенный за счёт замены импульсов (в координатном представлении) их операторами будет равен:

$$\hat{A} = A(x, y, z, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z).$$

В результате действия оператора на некоторую функцию состояния системы, получаем:

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a,$$

где a — собственное значение оператора $\hat{A}$, а ψ_a — собственная функция оператора.

Операторами физических величин являются только эрмитовы операторы, а собственные значения этих операторов всегда вещественны.

Среднее значение физической величины, представленной оператором $\hat{A}$:

$$\overline{A(x, y, z, p_x, p_y, p_z)} =$$

$$= \int \Psi^*(x, y, z) A\left(x, y, z, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right)\Psi(x, y, z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z =$$

$$= \int \Psi^*(x, y, z)\hat{A}(x, y, z, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)\Psi(x, y, z)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z.$$

Построим оператор момента импульса. Момент импульса определяется как векторное произведение радиус-вектора точки на её импульс: $\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$. Заменив в этом равенстве импульс его оператором, получим выражение для оператора момента импульса. В декартовой системе координат момент импульса будет равен:

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ \hat{\mathrm{p}}_x & \hat{\mathrm{p}}_y & \hat{\mathrm{p}}_z \end{vmatrix} =$$

$$= \vec{e}_x \left(y\hat{\mathrm{p}}_z - z\hat{\mathrm{p}}_y \right) + \vec{e}_y \left(z\hat{\mathrm{p}}_x - x\hat{\mathrm{p}}_z \right) + \vec{e}_z \left(x\hat{\mathrm{p}}_y - y\hat{\mathrm{p}}_x \right).$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2;$$

$$\hat{L}_z^2 = (-i\hbar)^2 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) =$$

$$= -\hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial y} x \frac{\partial}{\partial y} - x \frac{\partial}{\partial y} y \frac{\partial}{\partial x} - y \frac{\partial}{\partial x} x \frac{\partial}{\partial y} + y \frac{\partial}{\partial x} y \frac{\partial}{\partial x} \right) =$$

$$= -\hbar^2 \left(x^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - x \cancel{\frac{\partial y}{\partial y}}^{1} \frac{\partial}{\partial x} - xy \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} - y \cancel{\frac{\partial x}{\partial x}}^{1} \frac{\partial}{\partial y} - yx \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) =$$

$$= -\hbar^2 \left(x^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - x \frac{\partial}{\partial x} - 2xy \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} - y \frac{\partial}{\partial y} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right).$$

Сферическая система координат

Найдём оператор момента импульса относительно оси Oz в сферической системе координат. Связь между сферическими и декартовыми координатами запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} &x = r \sin\theta \cos\varphi; && r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}; \\ &y = r \sin\theta \sin\varphi; && \cos\theta = z \Big/ \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}; \\ &z = r\cos\theta; && \operatorname{tg}\varphi = y/x. \end{aligned}$$

Рассмотрим производную по координате x. Данная производная действует на некоторую функцию ψ:

$$\frac{\partial}{\partial x} \to \frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

Рассмотрим дифференциал функции:

$$\mathrm{d}\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{\partial \psi}{\partial r} \mathrm{d}r + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \mathrm{d}\theta + \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \mathrm{d}\varphi$$

или

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Найдём производную $\partial r / \partial x$:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{\partial x} = \frac{2x}{2\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{r\sin\theta\cos\varphi}{r} = \sin\theta\cos\varphi.$$

Возьмём дифференциал от $\cos\theta = z\Big/\sqrt{x^2+y^2+z^2}$, в предположении, что координаты y и z постоянны:

$$-\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = \left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right)\mathrm{d}x = -\frac{z\cdot 2x}{2\left(x^2+y^2+z^2\right)^{3/2}}\mathrm{d}x,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{z\cdot x}{\left(x^2+y^2+z^2\right)^{3/2}\sin\theta} = \frac{r\sin\theta\cos\varphi\cdot r\cos\theta}{r^3\sin\theta} = \frac{\cos\varphi\cos\theta}{r}.$$

Дальнейшие преобразования провести самостоятельно.

Цилиндрическая система координат

Связь между цилиндрическими и декартовыми координатами:

$$\begin{aligned} x &= \rho\cos\varphi; & \rho &= \sqrt{x^2+y^2}; \\ y &= \rho\sin\varphi; & \operatorname{tg}\varphi &= y/x; \\ z &= z; & z &= z. \end{aligned}$$

Используя связь между проекциями векторов в разных системах координат:

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{p}_x\mathbf{e}_x + \hat{p}_y\mathbf{e}_y + \hat{p}_z\mathbf{e}_z = \hat{p}_r\mathbf{e}_r + \hat{p}_\theta\mathbf{e}_\theta + \hat{p}_\varphi\mathbf{e}_\varphi = \hat{p}_\rho\mathbf{e}_\rho + \hat{p}_\varphi\mathbf{e}_\varphi + \hat{p}_z\mathbf{e}_z$$

и значения скалярных произведений ортов:

$$\left(\mathbf{e}_x,\mathbf{e}_y\right) = \left(\mathbf{e}_y,\mathbf{e}_z\right) = \left(\mathbf{e}_z,\mathbf{e}_x\right) = 0; \quad \left(\mathbf{e}_x,\mathbf{e}_x\right) = \left(\mathbf{e}_y,\mathbf{e}_y\right) = \left(\mathbf{e}_z,\mathbf{e}_z\right) = 1;$$

$$\left(\mathbf{e}_r,\mathbf{e}_\theta\right) = \left(\mathbf{e}_\theta,\mathbf{e}_\varphi\right) = \left(\mathbf{e}_\varphi,\mathbf{e}_r\right) = 0; \quad \left(\mathbf{e}_r,\mathbf{e}_r\right) = \left(\mathbf{e}_\theta,\mathbf{e}_\theta\right) = \left(\mathbf{e}_\varphi,\mathbf{e}_\varphi\right) = 1;$$

$$\left(\mathbf{e}_\rho,\mathbf{e}_z\right) = \left(\mathbf{e}_z,\mathbf{e}_\varphi\right) = \left(\mathbf{e}_\varphi,\mathbf{e}_\rho\right) = 0; \quad \left(\vec{e}_\rho,\mathbf{e}_\rho\right) = \left(\mathbf{e}_\varphi,\mathbf{e}_\varphi\right) = \left(\mathbf{e}_z,\mathbf{e}_z\right) = 1;$$

$$\mathbf{e}_r = \sin\theta\cos\varphi\,\mathbf{e}_x + \sin\theta\sin\varphi\,\mathbf{e}_y + \cos\theta\,\mathbf{e}_z;$$

$$\mathbf{e}_\theta = \cos\theta\cos\varphi\,\mathbf{e}_x + \cos\theta\sin\varphi\,\mathbf{e}_y - \sin\theta\,\mathbf{e}_z;$$

$$\mathbf{e}_\varphi = -\sin\varphi\,\mathbf{e}_x + \cos\varphi\,\mathbf{e}_y; \quad \mathbf{e}_\rho = \cos\varphi\,\mathbf{e}_x + \sin\varphi\,\mathbf{e}_y;$$

$$\left(\mathbf{e}_r,\mathbf{e}_x\right)=\sin\theta\cos\varphi;\quad \left(\mathbf{e}_r,\mathbf{e}_y\right)=\sin\theta\sin\varphi;\quad \left(\mathbf{e}_r,\mathbf{e}_z\right)=\cos\theta;$$

$$\left(\mathbf{e}_\theta,\mathbf{e}_x\right)=\cos\theta\cos\varphi;\quad \left(\mathbf{e}_\theta,\mathbf{e}_y\right)=\cos\theta\sin\varphi;\quad \left(\mathbf{e}_\theta,\mathbf{e}_z\right)=-\sin\theta;$$

$$\left(\mathbf{e}_\varphi,\mathbf{e}_x\right)=-\sin\varphi;\quad \left(\mathbf{e}_\varphi,\mathbf{e}_y\right)=\cos\varphi;\quad \left(\mathbf{e}_\varphi,\mathbf{e}_z\right)=0;$$

$$\left(\mathbf{e}_\rho,\mathbf{e}_x\right)=\cos\varphi;\quad \left(\mathbf{e}_\rho,\mathbf{e}_y\right)=\sin\varphi;\quad \left(\mathbf{e}_\rho,\mathbf{e}_z\right)=0$$

$$\mathbf{e}_x=\sin\theta\cos\varphi\,\mathbf{e}_r+\cos\theta\cos\varphi\,\mathbf{e}_\theta-\sin\varphi\,\mathbf{e}_\varphi;$$

$$\mathbf{e}_y=\sin\theta\sin\varphi\,\mathbf{e}_r+\cos\theta\sin\varphi\,\mathbf{e}_\theta+\cos\varphi\,\mathbf{e}_\varphi;$$

$$\mathbf{e}_z=\cos\theta\,\mathbf{e}_r-\sin\theta\,\mathbf{e}_\theta;$$

Можно выразить проекции векторов в сферической или цилиндрической системах координат через проекции векторов в декартовой системе координат.

Физические величины, которые не поддаются одновременному измерению с произвольной степенью точности, т.е. величины, для которых выполняется соотношение неопределённостей, обладают отличным от нуля коммутатором соответствующих им операторов.

Задание на выполнение

1. Получите в декартовой системе координат операторы проекций момента импульса: $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ и квадрата момента импульса: $\hat{L}^2$.

2. Выразите в сферической системе координат операторы: $\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z,\hat{p}_r,\hat{p}_\theta,\hat{p}_\varphi,\hat{p}^2,\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z,\hat{L}_r,\hat{L}_\theta,\hat{L}_\varphi,\hat{L}^2$.

3. Выразите в цилиндрической системе координат операторы: $\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z,\hat{p}_\rho,\hat{p}_\varphi,\hat{p}^2,\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z,\hat{L}_\rho,\hat{L}_\varphi,\hat{L}^2$.

При вычислении операторов учесть:

$$\frac{\partial\mathbf{e}_r}{\partial\theta}=\cos\theta\cos\varphi\,\mathbf{e}_x+\cos\theta\sin\varphi\,\mathbf{e}_y-\sin\theta\,\mathbf{e}_z=\mathbf{e}_\theta;$$

$$\frac{\partial\mathbf{e}_r}{\partial\varphi}=-\sin\theta\sin\varphi\,\mathbf{e}_x+\sin\theta\cos\varphi\,\mathbf{e}_y=\sin\theta\,\mathbf{e}_\varphi;$$

$$\frac{\partial\mathbf{e}_\theta}{\partial\theta}=-\sin\theta\cos\varphi\,\mathbf{e}_x-\sin\theta\sin\varphi\,\mathbf{e}_y-\cos\theta\,\mathbf{e}_z=-\mathbf{e}_r;$$

$$\frac{\partial\mathbf{e}_\theta}{\partial\varphi}=-\cos\theta\sin\varphi\,\mathbf{e}_x+\cos\theta\cos\varphi\,\mathbf{e}_y=\cos\theta\,\mathbf{e}_\varphi;$$

$$\frac{\partial \mathbf{e}_\varphi}{\partial \varphi} = -\cos\varphi\,\mathbf{e}_x - \sin\varphi\,\mathbf{e}_y = -\sin\theta\,\mathbf{e}_r - \cos\theta\,\mathbf{e}_\theta;$$

$$\frac{\partial \mathbf{e}_r}{\partial r} = \frac{\partial \mathbf{e}_\theta}{\partial r} = \frac{\partial \mathbf{e}_\varphi}{\partial r} = \frac{\partial \mathbf{e}_\varphi}{\partial \theta} = 0.$$

3. Найдите следующие коммутаторы (покажите равенство коммутатора нулю или выразите его через новый оператор):

$[x, \hat{p}_x]$; $[y, \hat{p}_x]$; $[z, \hat{p}_x]$; $[x, \hat{p}_y]$; $[y, \hat{p}_y]$; $[z, \hat{p}_y]$; $[x, \hat{p}_z]$; $[y, \hat{p}_z]$; $[z, \hat{p}_z]$;
$[\hat{p}_x, \hat{p}_y]$; $[\hat{p}_z, \hat{p}^2]$; $[\hat{p}_x, \hat{p}_z]$; $[\hat{p}_y, \hat{p}^2]$; $[\hat{p}_x, \hat{p}_y]$; $[\hat{p}_z, \hat{p}^2]$;
$[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$; $[\hat{L}_y, \hat{L}_z]$; $[\hat{L}_z, \hat{L}_x]$; $[\hat{L}_x, \hat{L}^2]$; $[\hat{L}_y, \hat{L}^2]$; $[\hat{L}_z, \hat{L}^2]$; $[\hat{L}_z, \varphi]$

Контрольные вопросы

1. Что называют оператором?
2. Запишите операторы координат в декартовой системе координат.
3. Запишите операторы координат в цилиндрической системе координат.
4. Запишите операторы координат в сферической системе координат.
5. Запишите операторы импульса в декартовой системе координат.
6. Запишите операторы момента импульса в декартовой системе координат.
7. Что называют коммутатором операторов и какой его физический смысл?

Лабораторная работа № 2.
Квантовый осциллятор

Цель работы

Ознакомиться с квантовым решением для колебательной системы (осциллятор). Разобрать функции и полиномы Эрмита.

Квантовый осциллятор

Рассмотрим оператор полной энергии, который складывается из операторов кинетической и потенциальной энергий:

$$\hat{E} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + U(x). \tag{1}$$

В данном примере мы ограничимся одномерным движением. Решая задачу на собственные значения энергии: $\hat{E}\Psi = E\Psi$, получим стационарное уравнение Шрёдингера:

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

Данное уравнение записывают обычно с единичным множителем перед второй производной от Ψ-функции:

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\big[E - U(x)\big]\Psi(x) = 0. \tag{2}$$

Поместим точку равновесия колебательной системы в начало координат. В точке равновесия производная от потенциальной энергии равна нулю. Тогда, в разложении потенциальной энергии в ряд Маклорана, слагаемое с первой производной будет отсутствовать.

$$U(x) = U(0) + U''(0)\frac{x^2}{2} + U^{(3)}(0)\frac{x^3}{3!} + \dots$$

Обозначив вторую производную потенциальной энергии в точке равновесия $U''(0) = k$, постоянную составляющую $U(0)$ положим нулю и, отбросив производные третьего и более высоких порядков, получим выражение для потенциальной энергии упруго деформируемого тела: $U(x) = kx^2/2$. В таком поле будет действовать квазиупругая сила:

$$F_x = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} = -kx.$$

В результате решения классической задачи о колебаниях в данной системе, мы получим гармонические колебания с собственной частотой $\omega = \sqrt{k/m}$, что позволяет нам выразить k через собственную частоту колебательной системы (осциллятора): $k = m\omega^2$.

Запишем уравнение Шрёдингера для осциллятора

$$\Psi''(x) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\right]\Psi(x) = 0. \tag{3}$$

Будем искать решение задачи в виде произведения некоторой функции $p(x)$ и экспоненты:

$$\Psi(x) = p(x)e^{-\alpha x^2}. \tag{4}$$

Здесь α — некоторая константа требующая определения. Обозначив $\sqrt{2mE}/\hbar = æ$ и подставив (4) в (3) получим уравнение относительно неизвестной функции $p(x)$:

$$p''(x) - 4\alpha x p'(x) + \left(4\alpha^2x^2 - 2\alpha + æ^2 - \frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\right)p(x) = 0.$$

Будем искать решение в виде конечного полинома степени n:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k. \tag{5}$$

Так как при $a_n = 0$ степень полинома уменьшается, то положим по определению $a_n \neq 0$.

Подставим данный полином в дифференциальное уравнение:

$$\sum_{k=2}^{n} k(k-1)a_k x^{k-2} - 4\alpha x\sum_{k=1}^{n} k a_k x^{k-1} +$$
$$+\left(æ^2 - 2\alpha\right)\sum_{k=0}^{n} a_k x^k + \left(4\alpha^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\right)\sum_{k=0}^{n} a_k x^{k+2} = 0.$$

В первой сумме перейдём к индексу суммирования $k' = k-2$, в последней к индексу $k'' = k+2$. Опуская штрихи получим:

$$\begin{gathered}\sum_{k=0}^{n-2}(k+2)(k+1)a_{k+2}x^k - 4\alpha\sum_{k=1}^{n} k a_k x^k + \\ +\left(æ^2 - 2\alpha\right)\sum_{k=0}^{n} a_k x^k + \left(4\alpha^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\right)\sum_{k=2}^{n+2} a_{k-2} x^k = 0.\end{gathered} \tag{6}$$

Для нахождения решения нужно приравнять в (6) коэффициенты при одинаковых степенях x нулю. Так при x^{n+2}:

$$\left(4\alpha^2 - m^2\omega^2/\hbar^2\right)a_n = 0.$$

Учитывая, что $a_n \neq 0$, можем выразить постоянную α:

$$4\alpha^2 - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} = 0; \quad \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}. \tag{7}$$

Уравнение (6) для определения коэффициентов a_k упростится:

$$\sum_{k=0}^{n-2}(k+2)(k+1)a_{k+2}x^k + \sum_{k=0}^{n}\left(æ^2 - 2\alpha - 4\alpha k\right)a_k x^k = 0. \tag{6$'$}$$

При x^n $(k = n)$:

$$\left(æ^2 - 2\alpha - 4\alpha n\right)a_n = 0.$$

Учитывая, что $a_n \neq 0$, можем выразить $æ^2$:

$$æ^2 = 2\alpha + 4\alpha n. \tag{8}$$

Выразив $æ$ через энергию и учитывая (7), получим

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = 2\frac{m\omega}{2\hbar}(1+2n) \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}(1+2n) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Таким образом, каждой Ψ-функции, выраженной через полином n-ой степени соответствует энергия

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Т.е. энергия принимает дискретный ряд значений.

Действуя аналогично, запишем условия равенства нулю коэффициентов при x^{n-1} $(k = n-1)$. С учётом (8) получим:

$$\left(2\alpha + 4\alpha n - 2\alpha - 4\alpha k\right)a_k\Big|_{k=n-1} = \left(4\alpha n - 4\alpha(n-1)\right)a_{n-1} = 4\alpha a_{n-1} = 0.$$

Так как α отлично от нуля, то нулю равен коэффициент a_{n-1}.

Снова перепишем (6$'$) с учётом (8):

$$\sum_{k=0}^{n-2}(k+2)(k+1)a_{k+2}x^k + \sum_{k=0}^{n}4\alpha\left(n-k\right)a_k x^k = 0. \tag{6$''$}$$

Для $k = \overline{0, n-2}$ условие равенства нулю коэффициентов перед x^k в (6$''$) запишется следующим образом:

$$(k+2)(k+1)a_{k+2} + 4\alpha\left(n-k\right)a_k = 0. \tag{9}$$

Данное соотношение называется рекуррентным и позволяет по двум известным коэффициентам a_0, a_1 или a_n, a_{n-1} получить последовательно все остальные коэффициенты. Так как $a_{n-1} = 0$, то из рекуррентных соотношений следует, что также равны нулю a_{n-3}, a_{n-5}, a_{n-7} и т.д. Т.е., если n — чётное, то все слагаемые с нечётными степенями x отсутствуют, т.е. полином будет чётной функцией переменной x. И если n — нечётное, то отсутствовать будут слагаемые с чётными степенями x, а полином будет нечётной функцией переменной x.

В данной задаче лучше перейти к переменной $\xi = \sqrt{2\alpha}x$ и новому полиному

$$h_n(\xi) = \sum_{k=0}^{n} b_k \xi^k.$$

Тогда, коэффициенты данных полиномов (при условии что данные полиномы равны: $p_n(x) = h_n(\sqrt{2\alpha}x)$) будут связаны соотношением $a_k = b_k(2\alpha)^{k/2}$. В этом случае, рекуррентное соотношение (9) для коэффициентов b_k перепишется в виде:

$$(k+2)(k+1)b_{k+2} \cdot (2\alpha)^{k/2} \cdot 2\alpha + 4\alpha\left(n-k\right)b_k \cdot (2\alpha)^{k/2} = 0$$

или

$$b_{k+2} = -\frac{2(n-k)}{(k+1)(k+2)} b_k. \tag{9'}$$

Положим для полиномов $h_n(\xi)$, где n — чётное:

$$b_0 = (-1)^{n/2} \frac{n!}{(n/2)!}, \quad b_1 = 0, \tag{10a}$$

а для полиномов $h_n(\xi)$, где n — нечётное:

$$b_1 = 2(-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{n!}{((n-1)/2)!}, \quad b_0 = 0. \tag{10b}$$

Здесь $n!$ — факториал целого числа n:

$$n! = n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdot \ldots \cdot 2 \cdot 1; \quad 0! = 1.$$

Пси-функция состояния будет равна:

$$\Psi_n(x) = C_n h_n(\sqrt{2\alpha}x) \exp\left(-\alpha x^2\right), \tag{11}$$

где $\alpha = m\omega/2\hbar$, а коэффициент C_n находится из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi_n(x)\right|^2 \mathrm{d}x = \frac{\left|C_n\right|^2}{\sqrt{2\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[h_n(\xi)\right]^2 e^{-\xi^2} \mathrm{d}\xi = 1. \tag{12}$$

Основное состояние осциллятора

Рассмотрим основное состояние $n = 0$.

Энергия состояния: $E_0 = \hbar\omega/2$.

Условие нормировки:

$$\frac{|C_0|^2}{\sqrt{2\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}\,\mathrm{d}\xi = \frac{|C_0|^2}{\sqrt{2\alpha}}\sqrt{\pi} = 1 \quad\Rightarrow\quad C_0 = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}.$$

Пси-функция:

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right).$$

Средние значения координаты и импульса:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)x\Psi(x)\,\mathrm{d}x = |C_0|^2\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x = 0;$$

$$\langle p_x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\left(\hat{p}_x\Psi(x)\right)\mathrm{d}x = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\frac{\mathrm{d}\Psi(x)}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x = 0.$$

Средние значения квадратов отклонений координаты и импульса с учётом равенства нулю соответствующих средних значений:

$$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle = \left\langle\left(x-\langle x\rangle\right)^2\right\rangle = \left\langle x^2\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)x^2\Psi(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{|C_0|^2}{(2\alpha)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\xi^2 e^{-\xi^2}\,\mathrm{d}\xi = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2}\frac{1}{(2\alpha)^{3/2}}\frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{1}{4\alpha} = \frac{\hbar}{2m\omega};$$

$$\left\langle(\Delta p_x)^2\right\rangle = \left\langle(p_x)^2\right\rangle = -\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x)\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x =$$

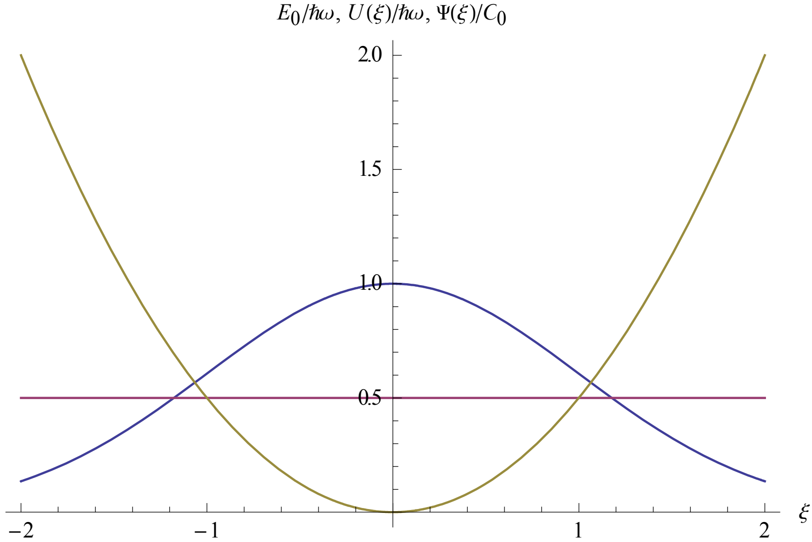
$$= -\hbar^2|C_0|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\alpha x^2}\left(4\alpha^2x^2-2\alpha\right)\mathrm{d}x = -\hbar^2|C_0|^2\sqrt{2\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}\left(\xi^2-1\right)\mathrm{d}\xi =$$

$$= -\hbar^2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\sqrt{2\alpha}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}-\sqrt{\pi}\right) = \hbar^2\alpha = \frac{1}{2}m\hbar\omega.$$

Проверим выполнение соотношения неопределённостей Гейзенберга:

$$\sqrt{\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle}\sqrt{\left\langle(\Delta p_x)^2\right\rangle} = \sqrt{\frac{1}{4\alpha}}\sqrt{\hbar^2\alpha} = \frac{\hbar}{2}.$$

Графическая зависимость от ξ: $U(\xi) = \dfrac{1}{2}\hbar\omega\xi^2$; $\quad E_0 = \dfrac{1}{2}\hbar\omega$.



Среднее значение кинетической энергии:

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2m}\left\langle (p_x)^2\right\rangle = \frac{1}{2m}\cdot\frac{1}{2}m\hbar\omega = \frac{1}{4}\hbar\omega = \frac{1}{2}E_0.$$

Среднее значение потенциальной энергии:

$$\langle U\rangle = \alpha\hbar\omega\left\langle x^2\right\rangle = \alpha\hbar\omega\cdot\frac{1}{4\alpha} = \frac{1}{4}\hbar\omega = \frac{1}{2}E_0.$$

Задание на выполнение

1. Для заданных преподавателем значений n получите по формулам (9′,10) явный вид полиномов $h_n(\xi)$.

2. Постройте полиномы Эрмита

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n} e^{-\xi^2}$$

и сравните их с полиномами $h_n(\xi)$.

3. Из условия (12) получите коэффициенты C_n. Для вычисления можете использовать табличные значения интегралов:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \xi^{2n} e^{-\xi^2}\,\mathrm{d}\xi = \begin{cases} \sqrt{\pi}, \quad n = 0; \\ \dfrac{1\cdot 3\cdot 5\cdot \ldots \cdot (2n-1)}{2^n}\sqrt{\pi}, \quad n - \text{целое}. \end{cases}$$

4. Проверьте ортогональность полученных пси-функций:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_{n1}{}^{*}(x)\Psi_{n2}(x)\,\mathrm{d}x = \begin{cases} 0, \text{ при } n1 \neq n2; \\ 1, \text{ при } n1 = n2. \end{cases}$$

5. Постройте графики функций $\Psi_n(x)$ (см. формулу (11)).

6. Найдите средние значения координаты и импульса для одного из заданных n, а также их средние квадратов отклонений и проверьте выполнение соотношения неопределённостей Гейзенберга:

$$\langle x\rangle, \langle p_x\rangle, \left\langle(\Delta x)^2\right\rangle, \left\langle(\Delta p_x)^2\right\rangle, \sqrt{\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle}\sqrt{\left\langle(\Delta p_x)^2\right\rangle}.$$

7. Найдите среднее значение кинетической и потенциальной энергий:

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2m}\left\langle(p_x)^2\right\rangle.$$

$$\langle U\rangle = \frac{m\omega^2\left\langle x^2\right\rangle}{2} = \alpha\hbar\omega\left\langle x^2\right\rangle.$$

Сравните их с полной энергией.

8. Сделайте выводы.

Контрольные вопросы

1. Дайте определение осциллятора.

2. Запишите уравнение Шрёдингера для стационарных состояний.

3. Запишите уравнение Шрёдингера для нестационарных состояний.

4. Поясните физический смысл пси-функции.

5. Перечислите основные свойства пси-функции.

6. Запишите условие нормировки и поясните его физический смысл.

7. Как определяется среднее значение физической величины?

8. Поясните вид операторов кинетической и потенциальной энергий в декартовой системе координат.

9. Запишите уравнение Шрёдингера для одномерного квантового осциллятора.

10. Запишите уравнение Шрёдингера для трёхмерного квантового осциллятора в общем виде и в декартовой системе координат.

11. Какие значения может принимать энергия квантового осциллятора?

12. Какой общий вид имеет пси-функция квантового осциллятора?

13. Дайте определение неопределённости координаты, импульса.

14. Запишите и поясните физический смысл соотношений неопределённостей Гейзенберга.

Лабораторная работа № 3.
Потенциальная яма с бесконечными стенками

Цель работы

Ознакомиться с решениями уравнения Шрёдингера для потенциальных ям с бесконечными стенками со сложным профилем дна. Рассмотреть влияние профиля дна на стационарные уровни энергии и волновые функции.

Одномерная потенциальная яма

Рассмотрим одномерное уравнение Шрёдингера

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \mathbf{U}(x)\right]\Psi(x) = 0 \tag{1}$$

для потенциальной ямы с бесконечными стенками:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < l; \\ \infty, & x < 0 \text{ или } x > l. \end{cases} \tag{2}$$

С учётом граничных условий:

$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0, \tag{3}$$

значение пси-функции вне интервала $0 < x < l$ равно нулю, а в данном интервале подчиняется уравнению

$$\Psi''(x) + k^2\Psi(x) = 0, \tag{4}$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Решение уравнения (4):

$$\Psi(x) = a\sin kx + b\cos kx. \tag{5}$$

Применим к (5) граничные условия (3):

$$\Psi(0) = b = 0; \quad \Psi(l) = a\sin kl = 0. \tag{6}$$

Из последнего равенства получим условие для k и энергии:

$$k_n l = \pi n, \quad n = 1, 2, ..., \infty; \tag{7}$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2, \quad n = 1, 2, ..., \infty; \tag{8}$$

Константа a определяется из условия нормировки:

$$\int_0^l \Psi^2(x)\,\mathrm{d}x = 1. \tag{9}$$

Подставив (5) в (9), с учётом (6) и (7) получим:

$$\int_0^l a^2 \sin^2(\pi n x/l)\,\mathrm{d}x = \frac{a^2}{2}\int_0^l \left[1-\cos(2\pi n x/l)\right]\mathrm{d}x = \frac{la^2}{2} = 1; \quad a = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Пси-функция и плотность вероятности примут следующий вид:

$$\begin{gathered} \Psi_n(x) = \sqrt{2/l}\,\sin(\pi n x/l); \\ \rho_n(x) = \left|\Psi_n(x)\right|^2 = \frac{2}{l}\sin^2\left(\frac{\pi n x}{l}\right), \quad n = 1, 2, ..., \infty. \end{gathered} \tag{10}$$

Перейдём к безразмерной координате $z = x/l$, $z \in [0,1]$), безразмерным пси-функции и плотности вероятности:

$$\begin{gathered} \psi_n(z) = \sqrt{l}\,\Psi_n(zl) = \sqrt{2}\,\sin(\pi n z); \\ \tilde{\rho}_n(z) = l\rho_n(zl) = 2\sin^2(\pi n z), \quad n = 1, 2, ..., \infty. \end{gathered} \tag{11}$$

Средние значения:

$$\begin{gathered} \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(x)\,x\,\mathrm{d}x; \quad \langle p_x \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)\frac{\mathrm{d}\Psi(x)}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x; \\ \left\langle x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(x)\,x^2\,\mathrm{d}x; \quad \left\langle (p_x)^2 \right\rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2}\,\mathrm{d}x; \\ \Delta x = \sqrt{\left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle} = \sqrt{\left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2}; \\ \Delta p_x = \sqrt{\left\langle \left(p_x - \langle p_x \rangle\right)^2 \right\rangle} = \sqrt{\left\langle p_x^2 \right\rangle - \langle p_x \rangle^2}. \end{gathered} \tag{12}$$

Двухмерная потенциальная яма

Рассмотрим двухмерное уравнение Шрёдингера

$$\frac{\partial^2 \Psi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x,y)}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(x,y)\right]\Psi(x,y) = 0 \tag{13}$$

для потенциальной ямы с бесконечными стенками:

$$U(x,y) = \begin{cases} 0, & (x,y) \in \Omega; \\ \infty, & (x,y) \notin \Omega. \end{cases} \tag{14}$$

Здесь область $\Omega = \left(0 < x < a\right) \cap \left(0 < y < b\right)$. С учётом граничных условий:

$$\Psi(0,y) = \Psi(a,y) = \Psi(x,0) = \Psi(x,b) = 0, \tag{15}$$

значение пси-функции вне области Ω равно нулю, а внутри неё подчиняется уравнению

$$\frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial y^2}+k^2\Psi(x,y)=0, \tag{16}$$

где $k=\sqrt{2mE}/\hbar$. Решение уравнения (16), будем искать в виде:

$$\Psi(x,y)=C\mathbb{X}(x)\mathbb{Y}(y).$$

Вынося в (16) из под знака производной функции, не зависящие от переменной дифференцирования, и деля на $\mathbb{X}(x)\mathbb{Y}(y)$, получим:

$$\frac{1}{\mathbb{X}(x)}\frac{\partial^2\mathbb{X}(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{\mathbb{Y}(y)}\frac{\partial^2\mathbb{Y}(y)}{\partial y^2}+k^2=0$$

или в более кратком виде:

$$\frac{\mathbb{X}''}{\mathbb{X}}+\frac{\mathbb{Y}''}{\mathbb{Y}}+k^2=0. \tag{17}$$

Граничные условия (15) перепишем для новых функций:

$$\begin{gathered}\mathbb{X}(0)\mathbb{Y}(y)=\mathbb{X}(a)\mathbb{Y}(y)=0\Rightarrow\mathbb{X}(0)=\mathbb{X}(a)=0;\\ \mathbb{X}(x)\mathbb{Y}(0)=\mathbb{X}(x)\mathbb{Y}(b)=0\Rightarrow\mathbb{Y}(0)=\mathbb{Y}(b)=0.\end{gathered} \tag{18}$$

Первое слагаемое в (17) зависит только от переменной x, а второе — от переменной y. Так, если значение переменной y постоянно, то второе и третье слагаемые в (17) неизменны. Но это значит, что и первое слагаемое является константой, даже если значение переменной x изменяется:

$$\frac{\mathbb{X}''}{\mathbb{X}}=-k_x^2. \tag{19}$$

Так как первое и третье слагаемые в (17) константы, то и второе слагаемое тоже постоянно:

$$\frac{\mathbb{Y}''}{\mathbb{Y}}=-k_y^2. \tag{20}$$

Уравнения (19) и (20) имеют решения (с учётом (18))

$$\mathbb{X}_{n_x}(x)=\sin(\pi n_x x/a);\quad \mathbb{Y}_{n_y}(y)=\sin\left(\pi n_y y/b\right),$$

где $k_x=\pi n_x/a$, $k_y=\pi n_y/b$, $k^2=k_x^2+k_y^2$,

$$E_{n_x,n_y}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}\right). \tag{21}$$

Полное решение $\Psi_{n_x,n_y}(x,y)=C\sin(\pi n_x x/a)\sin\left(\pi n_y y/b\right)$ содержит константу C, которую найдём из условия нормировки:

$$\iint\limits_{\Omega} \Psi^2(x)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y = 1.$$

Подставив (5) в (9), с учётом (6) и (7) получим:

$$C^2 \int\limits_0^a \sin^2(\pi n_x x/a)\,\mathrm{d}x \int\limits_0^b \sin^2(\pi n_y y/b)\,\mathrm{d}y = C^2\,\frac{a}{2}\,\frac{b}{2} = 1; \quad C = \frac{2}{\sqrt{ab}}.$$

Пси-функция и плотность вероятности примут следующий вид:

$$\Psi_{n_x,n_y}(x,y) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin\bigl(\pi n_x x/a\bigr) \sin\bigl(\pi n_y y/b\bigr);$$
$$\rho(x,y) = \left|\Psi\right|^2 = \frac{4}{ab} \sin^2\left(\frac{\pi n_x}{a}\,x\right) \sin^2\left(\frac{\pi n_y}{b}\,y\right), \quad n_x, n_y = 1, 2, ..., \infty. \tag{22}$$

Средние значения:

$$\left\langle x\right\rangle = \iint\limits_{\Omega} \Psi^2(x,y)\,x\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y; \quad \left\langle p_x\right\rangle = -i\hbar \iint\limits_{\Omega} \Psi(x)\,\frac{\partial\Psi(x,y)}{\partial x}\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y;$$
$$\left\langle y\right\rangle = \iint\limits_{\Omega} \Psi^2(x,y)\,y\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y; \quad \left\langle p_y\right\rangle = -i\hbar \iint\limits_{\Omega} \Psi(x)\,\frac{\partial\Psi(x,y)}{\partial y}\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y;$$
$$\left\langle x^2\right\rangle = \iint\limits_{\Omega} \Psi^2(x,y)\,x^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y; \quad \left\langle p_x^2\right\rangle = -\hbar^2 \iint\limits_{\Omega} \Psi(x)\,\frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial x^2}\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y; \tag{23}$$
$$\left\langle y^2\right\rangle = \iint\limits_{\Omega} \Psi^2(x,y)\,y^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y; \quad \left\langle p_y^2\right\rangle = -\hbar^2 \iint\limits_{\Omega} \Psi(x)\,\frac{\partial^2\Psi(x,y)}{\partial y^2}\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y;$$
$$\Delta x = \sqrt{\left\langle \bigl(x - \langle x\rangle\bigr)^2 \right\rangle} = \sqrt{\left\langle x^2\right\rangle - \left\langle x\right\rangle^2}; \quad \Delta y = \sqrt{\left\langle y^2\right\rangle - \left\langle y\right\rangle^2};$$
$$\Delta p_x = \sqrt{\left\langle \bigl(p_x - \langle p_x\rangle\bigr)^2 \right\rangle} = \sqrt{\left\langle p_x^2\right\rangle - \left\langle p_x\right\rangle^2}; \quad \Delta p_y = \sqrt{\left\langle p_y^2\right\rangle - \left\langle p_y\right\rangle^2}.$$

Кинетическая энергия:

$$\left\langle T\right\rangle = \frac{1}{2m}\Bigl(\left\langle p_x^2\right\rangle + \left\langle p_y^2\right\rangle\Bigr). \tag{24}$$

Трёхмерная потенциальная яма

Рассмотрим трёхмерное уравнение Шрёдингера

$$\frac{\partial^2\Psi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi(x,y,z)}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\bigl[E - U(x,y,z)\bigr]\,\Psi(x,y,z) = 0$$

для потенциальной ямы с бесконечными стенками:

$$U(x,y,z)=\begin{cases}0, & (x,y,z)\in\Omega;\\ \infty, & (x,y,z)\notin\Omega.\end{cases}$$

Здесь область $\Omega=(0<x<a)\cap(0<y<b)\cap(0<z<c)$. Значение пси-функции вне области Ω равно нулю, а внутри неё подчиняется уравнению

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

где $k=\sqrt{2mE}/\hbar$. Решение уравнения (16), будем искать в виде:

$$\Psi(x,y)=C\mathbb{X}(x)\mathbb{Y}(y)\mathbb{Z}(z).$$

Разделяя переменные, получим:

$$\frac{1}{\mathbb{X}(x)}\frac{\partial^2\mathbb{X}(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{\mathbb{Y}(y)}\frac{\partial^2\mathbb{Y}(y)}{\partial y^2}+\frac{1}{\mathbb{Z}(z)}\frac{\partial^2\mathbb{Z}(z)}{\partial z^2}+k^2=0 \qquad (24)$$

или в более кратком виде:

$$\frac{\mathbb{X}''}{\mathbb{X}}+\frac{\mathbb{Y}''}{\mathbb{Y}}+\frac{\mathbb{Z}''}{\mathbb{Z}}+k^2=0. \qquad (24')$$

Граничные условия:

$$\mathbb{X}(0)=\mathbb{X}(a)=0;\;\; \mathbb{Y}(0)=\mathbb{Y}(b)=0;\;\; \mathbb{Z}(0)=\mathbb{Z}(c)=0. \qquad (18)$$

Из (24) получим:

$$\mathbb{X}''+k_x^2\mathbb{X}=0;\;\; \mathbb{Y}''+k_y^2\mathbb{Y}=0;\;\; \mathbb{Z}''+k_z^2\mathbb{Z}=0;\;\; k_x^2+k_y^2+k_z^2=k^2. \qquad (19)$$

Уравнения (19) имеют решения (с учётом (18))

$$\mathbb{X}_{n_x}(x)=\sin(\pi n_x x/a);\quad \mathbb{Y}_{n_y}(y)=\sin(\pi n_y y/b);\quad \mathbb{Z}_{n_z}(z)=\sin(\pi n_z z/c),$$

где $k_x=\pi n_x/a$, $k_y=\pi n_y/b$, $k_z=\pi n_z/c$,

$$E_{n_x,n_y,n_z}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}+\frac{n_z^2}{x^2}\right). \qquad (21)$$

Решение $\Psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z)=C\sin(\pi n_x x/a)\sin(\pi n_y y/b)\sin(\pi n_z z/c)$ содержит константу C, которую находится из условия нормировки:

$$\iiint\limits_{\Omega}\Psi^2(x)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=1.$$

Средние значения:

$$\langle x\rangle = \iiint\limits_{\Omega} x\Psi^2(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z; \quad \langle p_x\rangle = -i\hbar\iiint\limits_{\Omega} \Psi(x,y)\frac{\mathrm{d}\Psi(x,y)}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z;$$

$$\left\langle x^2\right\rangle = \iiint\limits_{\Omega} x^2\Psi^2(x,y)\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z; \quad \left\langle p_x^2\right\rangle = -\hbar^2\iiint\limits_{\Omega} \Psi(x,y)\frac{\mathrm{d}\Psi^2(x,y)}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z; \qquad (23)$$

$$\Delta x = \sqrt{\left\langle \left(x-\langle x\rangle\right)^2\right\rangle} = \sqrt{\left\langle x^2\right\rangle - \langle x\rangle^2}; \quad \Delta p_x = \sqrt{\left\langle \left(p_x-\langle p_x\rangle\right)^2\right\rangle} = \sqrt{\left\langle p_x^2\right\rangle - \langle p_x\rangle^2}.$$

Кинетическая энергия:

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2m}\left(\left\langle p_x^2\right\rangle + \left\langle p_y^2\right\rangle + \left\langle p_z^2\right\rangle\right). \qquad (23)$$

Задание на выполнение

1. Для заданных преподавателем значений a,b,c и m получите первые 5 уровней энергии, их кратность вырождения и квантовые состояния им соответствующие.

2. Найдите средние значения координат и импульсов, их средне-квадратичные значения.

3. Проверьте выполнение соотношения неопределённостей для $\Delta x\Delta p_x$, $\Delta y\Delta p_y$, $\Delta z\Delta p_z$.

4. Найдите вероятность нахождения частицы в области:

$$\Omega_{1/8} = \left(0 < x < a/2\right)\cap\left(0 < y < b/2\right)\cap\left(0 < z < c/2\right).$$

5. Найдите среднее значение кинетической энергии и сравните её с полной энергией.

6. Сделайте выводы.

Контрольные вопросы

1. Запишите уравнение Шрёдингера для стационарных состояний.

2. Запишите уравнение Шрёдингера для нестационарных состояний.

3. Поясните физический смысл пси-функции.

4. Перечислите основные свойства пси-функции.

5. Запишите условие нормировки и поясните его физический смысл.

6. Как определяется среднее значение физической величины?

7. Поясните вид операторов кинетической и потенциальной энергий в декартовой системе координат.

8. Дайте определение неопределённости координаты, импульса.

9. Запишите и поясните физический смысл соотношений неопределённостей Гейзенберга.

10. Поясните понятие потенциальная яма.

11. Запишите уравнение Шрёдингера для одномерной потенциальной ямы с бесконечными стенками.

12. Запишите уравнение Шрёдингера для трёхмерной квантовой ямы с бесконечными стенками.

13. Решите уравнение Шрёдингера для одномерной потенциальной ямы с бесконечными стенками. Получите выражения для энергии и пси-функции.

Лабораторная работа № 4.
Потенциальная яма с одной бесконечной стенкой

Цель работы

Ознакомиться с решениями уравнения Шрёдингера для потенциальных ям. Рассмотреть влияние изменения параметров ям на стационарные уровни энергии и волновые функции.

Потенциальная яма с одной бесконечной стенкой

Стационарное уравнение Шрёдингера получается из равенства суммы операторов кинетической и потенциальной энергии полной энергии квантовой частицы:

$$\frac{\mathbf{P}^2}{2m}\Psi(\vec{r}) + \mathbf{U}(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}).$$

Учитывая выражение для оператора импульса $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla$, получим **уравнение Шрёдингера**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}) + \mathbf{U}(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

или

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}\big[E - \mathbf{U}(\vec{r})\big]\Psi(\vec{r}) = 0.$$

Одномерное уравнение Шрёдингера выглядит так:

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\big[E - \mathbf{U}(x)\big]\Psi(x) = 0. \quad (1)$$

Рассмотрим решение одномерного уравнения Шрёдингера для «потенциальной ямы» следующего вида:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ 0, & 0 < x < l; \\ U_0 & x > l. \end{cases} \quad (2)$$

В области $x < 0$ тождественно равна нулю, поэтому данная область из рассмотрения выпадает. Таким образом, поиск решения будет проводиться в двух областях: $0 < x < l$ (I) и $x > l$ (II).

При построении графиков и анализе численных значений удобно пользоваться нормированными (безразмерными) координатами и функциями. Для этого координату можно нормировать на естественную норму длины — ширину потенциальной ямы (или иначе: перейти к безразмерной координате $z = x/l$, $z \in [0,1]$), а от размерных пси-функции и плотности вероятности перейти к безразмерным их аналогам:

$$\begin{gathered}\psi_n(z) = \sqrt{l}\Psi_n(zl) = \sqrt{2}\sin(\pi n z);\\ \tilde{\rho}_n(z) = l\rho_n(zl) = 2\sin^2(\pi n z), \quad n = 1,2,\dots,\infty.\end{gathered} \tag{3}$$

Также перепишем в новых обозначениях одномерное уравнение Шрёдингера и условие нормировки:

$$\begin{gathered}\sqrt{l}\Psi''(x) = \frac{\mathrm{d}^2\sqrt{l}\Psi(zl)}{\mathrm{d}^2(zl)} = \frac{1}{l^2}\psi''(z); \quad \boxed{\psi''(z) + \frac{2ml^2}{\hbar^2}\left[E - \mathbf{U}(zl)\right]\psi(z) = 0};\\ \int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi^2(x)\,\mathrm{d}x = l\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi^2(z)\,\mathrm{d}z = \boxed{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi^2(z)\,\mathrm{d}z = 1}.\end{gathered} \tag{4}$$

Нас будет интересовать только дискретный спектр энергии. Дискретный спектр появляется в случае финитного (ограниченного) движения, т.е. при $E < U_0$. Для каждой области запишем уравнение Шрёдингера:

$$\psi_{\mathrm{I}}''(z) + \frac{2ml^2}{\hbar^2}E\psi_{\mathrm{I}}(z) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_{\mathrm{I}}''(z) + p^2\psi_{\mathrm{I}}(z) = 0, \quad 0 < z < 1; \tag{5}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}''(z) + \frac{2ml^2}{\hbar^2}\left[E - U_0\right]\psi_{\mathrm{II}}(z) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_{\mathrm{II}}''(z) - q^2\psi_{\mathrm{II}}(z) = 0, \quad z > 1, \tag{6}$$

где

$$p = \frac{l}{\hbar}\sqrt{2mE}; \;\; q = \frac{l}{\hbar}\sqrt{2m\left(U_0 - E\right)}.$$

Выразим потенциальную энергию через безразмерный параметр α, а энергию через U_0 и безразмерный параметр ξ:

$$\begin{gathered}U_0 = \alpha\cdot\hbar^2/2ml^2; \quad E = \xi U_0; \quad \xi \le 1;\\ p = \frac{l}{\hbar}\sqrt{2m\xi U_0} = \sqrt{\alpha\xi} \le \sqrt{\alpha}; \quad q = \frac{l}{\hbar}\sqrt{2m(1-\xi)U_0} = \sqrt{\alpha(1-\xi)}.\end{gathered} \tag{7}$$

Таким образом, ξ есть значение энергии, выраженное в единицах U_0.

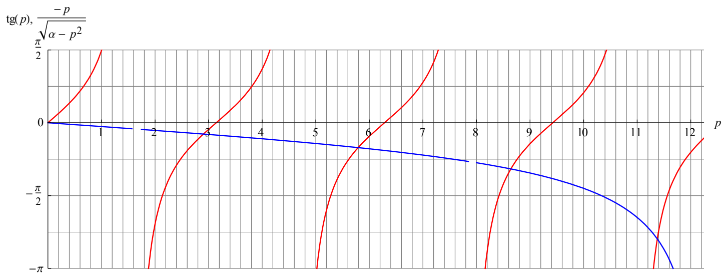


Рисунок 1. Графики левой (синяя линия) и правой (красная линия) частей трансцендентного уравнения (10) для $\alpha = 150$

Граничные условия будут следующие:

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = 0; \quad \psi_{\mathrm{II}}(+\infty) = 0; \quad \psi_{\mathrm{I}}(1) = \psi_{\mathrm{II}}(1); \quad \psi'_{\mathrm{I}}(1) = \psi'_{\mathrm{II}}(1). \tag{8}$$

Запишем решения (5) и (6):

$$\begin{aligned} \psi_{\mathrm{I}}(z) &= A\sin(pz) + B\cos(pz); \\ \psi_{\mathrm{II}}(z) &= C\exp(-qz) + D\exp(qz). \end{aligned} \tag{9}$$

Для определения A, B, C и D в (9) учтём граничные условия (8):

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = B = 0; \quad \psi_{\mathrm{II}}(+\infty) = C\exp(-\infty) + D\exp(+\infty) = 0 \quad \Rightarrow \quad D = 0;$$

$$\psi_{\mathrm{I}}(1) = \psi_{\mathrm{II}}(1): \quad A\sin p = C\exp(-q) \quad \Rightarrow \quad C = A\,e^{q}\sin p;$$

$$\psi'_{\mathrm{I}}(1) = \psi'_{\mathrm{II}}(1): \quad Ap\cos p = A\,e^{q}\sin p\cdot(-q)e^{-q} \quad \Rightarrow \quad p\cos p = -q\sin p.$$

Последнее уравнение является трансцендентным и из него, с учётом (7), можно определить значения параметра p и энергии E:

$$\operatorname{tg} p = -p\big/\sqrt{\alpha - p^2} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{p^2\hbar^2}{2ml^2} = \frac{p^2}{\alpha}U_0 = \xi U_0. \tag{10}$$

Так как значения p не превышают $\sqrt{\alpha}$, то число возможных значений энергии будет конечным. На рис. 1 представлен графики левой и правой частей трансцендентного уравнения (10). Точки пересечения данных графиков и определяют значения p и энергии E.

Уравнение (10), с учётом (7), можно записать непосредственно для ξ — энергии, выраженной в единицах U_0:

$$\operatorname{tg}\sqrt{\alpha\xi} = -\sqrt{\xi/(1-\xi)}. \tag{11}$$

Решением уравнения (11) является непосредственно безразмерная энергия ξ. Данное уравнение удобно выразить через арктангенс:

$$\sqrt{\alpha\xi} = \pi n - \operatorname{arctg}\sqrt{\xi/(1-\xi)}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots . \tag{12}$$

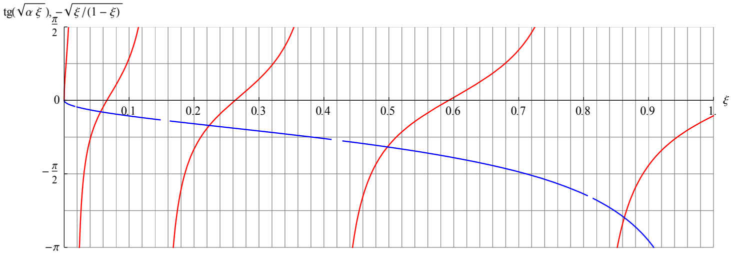


Рисунок 2. Графики левой (синяя линия) и правой (красная линия) частей трансцендентного уравнения (11) для $\alpha = 150$

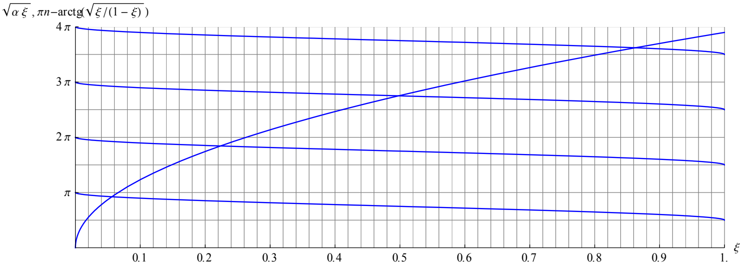


Рисунок 3. Графики левой и правой частей уравнения (12) для $\alpha = 150$

Аналогичный график для уравнений (11) и (12) представлен на рис. 2,3. Из рисунка 3 видно, что n в (12) равно номеру корня.

Решение уравнения Шрёдингера (см. рисунок 4):

$$\psi_n(z) = \begin{cases} 0, & z < 0; \\ A_n \sin(p_n z), & 0 < z < 1; \\ A_n e^{q_n} \sin(p_n) \exp(-q_n z), & z > 1, \end{cases} \tag{13}$$

где $p_n = \sqrt{\alpha \xi_n}$; $q_n = \sqrt{\alpha(1-\xi_n)}$, а ξ_n — решение трансцендентного уравнения (11) или (12). A_n определим из условия нормировки (4):

$$\int_0^\infty \psi^2(z)\,\mathrm{d}z = \left(A_n\right)^2 \int_0^1 \sin^2(p_n z)\,\mathrm{d}z + \left[A_n e^{q_n} \sin(p_n)\right]^2 \int_1^\infty \exp(-2q_n z)\,\mathrm{d}z = 1;$$

$$A_n = 1 \Big/ \sqrt{\int_0^1 \sin^2(p_n z)\,\mathrm{d}z + e^{2q_n} \sin^2 p_n \int_1^\infty \exp(-2q_n z)\,\mathrm{d}z}\,. \tag{14}$$

Вероятность обнаружить частицу за пределами ямы (при $z > 1$):

$$\int_1^\infty \psi^2(z)\,\mathrm{d}z = \left(A_n\right)^2 e^{2q_n} \sin^2 p_n \int_1^\infty \exp(-2q_n z)\,\mathrm{d}z. \tag{15}$$

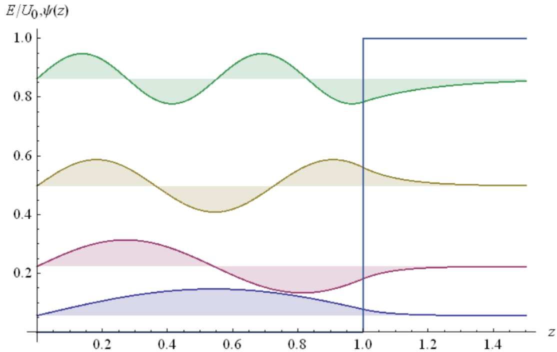


Рисунок 4. Графики $\psi_n(z)$, поднятые на высоту уровня энергии, для $\alpha = 150$

Средние значения координат:

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int_0^\infty x\Psi^2(x)\,\mathrm{d}x = l\int_0^\infty zl\Psi^2(zL)\,\mathrm{d}z = l\int_0^\infty z\psi^2(z)\,\mathrm{d}z = \langle z\rangle l;\\ \langle x^2\rangle &= \int_0^\infty x^2\Psi^2(x)\,\mathrm{d}x = l^2\int_0^\infty z^2 l\Psi^2(zl)\,\mathrm{d}z = l^2\int_0^\infty z^2\psi^2(z)\,\mathrm{d}z = \langle z^2\rangle l^2\end{aligned} \tag{16}$$

и импульсов частицы:

$$\begin{aligned}\langle P_x\rangle &= \int_0^\infty \Psi(x)\mathbf{P}_x\Psi(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^\infty \Psi(x)\left[-i\hbar\frac{\mathrm{d}\Psi(x)}{\mathrm{d}x}\right]\mathrm{d}x =\\ &= -i\hbar\int_0^\infty \Psi(lz)\frac{\mathrm{d}\Psi(lz)}{\mathrm{d}(lz)}\,\mathrm{d}(lz) = -i\frac{\hbar}{l}\int_0^\infty \psi(z)\psi'(z)\,\mathrm{d}z;\\ \left\langle (P_x)^2\right\rangle &= \int_0^\infty \Psi(x)\left(\mathbf{P}_x\right)^2\Psi(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^\infty \Psi(x)\left[(-i\hbar)^2\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2}\right]\mathrm{d}x =\\ &= -\hbar^2\int_0^\infty \Psi(lz)\frac{\mathrm{d}^2\Psi(lz)}{\mathrm{d}(lz)^2}\,\mathrm{d}(lz) = -\left(\frac{\hbar}{l}\right)^2\int_0^\infty \psi(z)\psi''(z)\,\mathrm{d}z.\end{aligned} \tag{17}$$

Среднее значение кинетической энергии можно найти через среднее значение квадрата импульса (см. (17)):

$$\langle T\rangle = \frac{\left\langle (P_x)^2\right\rangle}{2m} = \frac{\left\langle (P_x)^2\right\rangle}{(\hbar/l)^2}\frac{(\hbar/l)^2}{2m} = \frac{\left\langle (P_x)^2\right\rangle}{(\hbar/l)^2}\frac{\hbar^2}{2ml^2} = \frac{\left\langle (P_x)^2\right\rangle}{\alpha(\hbar/l)^2}U_0. \tag{18}$$

Задание на выполнение

1. Для потенциальной ямы (2) и заданного преподавателем параметра α найти ξ_n — энергию, выраженную в единицах U_0. Для этого численно решить либо уравнение (10), либо уравнение (11). Определить число дискретных энергетических уровней.

2. Для каждого энергетического уровня рассчитать вероятность обнаружить частицу за пределами потенциальной ямы, т.е. при $z > 1$ (см. (15)).

3. Для каждого энергетического уровня для нормированной координаты рассчитать её среднее значение $\langle z \rangle$, среднее её квадрата $\langle z^2 \rangle$ и среднеквадратичное значение $\sqrt{\langle z^2 \rangle}$ (см. (16)).

4. Для каждого энергетического уровня для импульса частицы рассчитать его среднее значение $\langle P_x \rangle$, среднее его квадрата $\langle P_x^2 \rangle$ и среднеквадратичное значение $\sqrt{\langle P_x^2 \rangle}$ (см. (17)). Проверьте выполнение соотношения неопределённостей Гейзенберга.

5. Для каждого энергетического уровня рассчитать среднее значение кинетической энергии частицы (см. (18)). Сравнить его с полной энергией частицы.

6. Для каждого энергетического уровня рассчитать положения нулей и точек экстремума (для нормированной координаты) пси-функции (нули и максимумы плотности вероятности). Определить в точках экстремума значение плотности вероятности.

7. Для каждого энергетического уровня построить графики пси-функции $\psi_n(z) = \sqrt{l}\Psi_n(zl) = \sqrt{l}\Psi_n(x)$ и плотности вероятности $\rho_n(z) = \left|\psi_n(z)\right|^2 = l\left|\Psi_n(zl)\right|^2 = l\rho_n(x)$.

8. Сделать выводы.

Контрольные вопросы

1. Запишите уравнение Шрёдингера для стационарных состояний.

2. Запишите уравнение Шрёдингера для нестационарных состояний.

3. Поясните физический смысл пси-функции.

4. Перечислите основные свойства пси-функции.

5. Запишите условие нормировки и поясните его физический смысл.

6. Как определяется среднее значение физической величины?

7. Поясните вид операторов кинетической и потенциальной энергий в декартовой системе координат.

8. Дайте определение неопределённости координаты, импульса.

9. Запишите и поясните физический смысл соотношений неопределённостей Гейзенберга.

10. Поясните понятие потенциальная яма.

11. Запишите уравнение Шрёдингера для потенциальной ямы, используемой в работе.

12. Решите уравнение Шрёдингера для потенциальной ямы, используемой в работе. Получите выражения для энергии и пси-функции.

Лабораторная работа № 5.
Потенциальная яма конечной глубины

Цель работы

Ознакомиться с решениями уравнения Шрёдингера для потенциальных ям конечной глубины. Рассмотреть влияние на стационарные уровни энергии и волновые функции возрастание одной из стенок до бесконечности.

Потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим потенциальную яму со стенками конечной высоты:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < l; \\ U_0, & x < 0 \text{ или } x > l. \end{cases} \tag{13}$$

Поиск решения будет проводиться в трёх областях: $z < 0$ (I); $0 < z < 1$ (II) и $z > 1$ (III). Будем искать решения только при финитном движении частицы, т.е. при $E < U_0$.

Потенциальную и полную энергии выразим через безразмерные параметры α и ξ:

$$U_0 = \alpha \frac{\hbar^2}{2ml^2}; \quad E = \xi U_0; \quad \xi \le 1.$$

Для каждой области запишем уравнение Шрёдингера:

$$\psi''_{\mathrm{II}}(z) + \frac{2ml^2}{\hbar^2} E\psi_{\mathrm{II}}(z) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi''_{\mathrm{II}}(z) + p^2\psi_{\mathrm{II}}(z) = 0; \tag{14}$$

$$\psi''_{\mathrm{I,III}}(z) + \frac{2ml^2}{\hbar^2}\left[E - U_0\right]\psi_{\mathrm{I,III}}(z) = 0 \;\Rightarrow\; \psi''_{\mathrm{I,III}}(z) - q^2\psi_{\mathrm{I,III}}(z) = 0, \tag{15}$$

где

$$p = \frac{l}{\hbar}\sqrt{2mE} = \sqrt{\alpha\xi}; \quad q = \frac{l}{\hbar}\sqrt{2m\left(U_0 - E\right)} = \sqrt{\alpha\left(1-\xi\right)}.$$

Функции $\psi_{\mathrm{I,II,III}}(z)$ будут удовлетворять граничным условиям:

$$\begin{gathered} \psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0); \quad \psi_{\mathrm{III}}(1) = \psi_{\mathrm{II}}(1); \\ \psi'_{\mathrm{I}}(0) = \psi'_{\mathrm{II}}(0); \quad \psi'_{\mathrm{III}}(1) = \psi'_{\mathrm{II}}(1) \end{gathered} \tag{16}$$

и условиям на бесконечности: $\psi_{\mathrm{I}}(-\infty) = \psi_{\mathrm{III}}(\infty) = 0$.

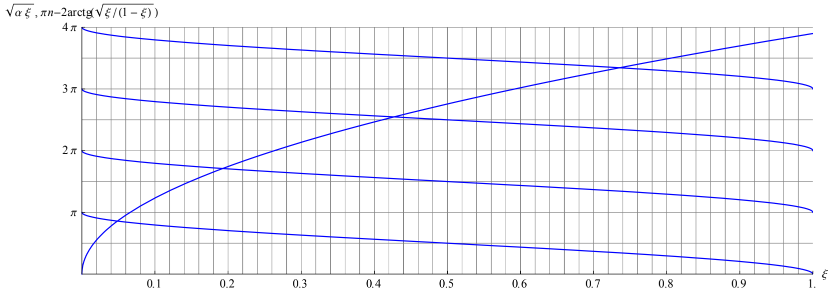


Рисунок 1. Графики левой и правой частей уравнения (20) для $\alpha = 150$

Решения (14) и (15) с учётом поведения на бесконечности:

$$\psi_{\mathrm{II}}(z) = A\sin(pz + \varphi_0); \quad \psi_{\mathrm{I}}(z) = Be^{qz}; \quad \psi_{\mathrm{III}}(z) = Ce^{-qz}. \tag{17}$$

Для нахождения A, B, C и D в (17) учтём граничные условия (16):

$$\begin{gathered} \psi_{\mathrm{I}}(0) = \psi_{\mathrm{II}}(0): \quad B = A\sin\varphi_0; \\ \psi_{\mathrm{II}}(1) = \psi_{\mathrm{III}}(1): \quad A\sin(p + \varphi_0) = Ce^{-q}; \\ \psi_{\mathrm{I}}'(0) = \psi_{\mathrm{II}}'(0): \quad qB = pA\cos\varphi_0; \\ \psi_{\mathrm{II}}'(1) = \psi_{\mathrm{III}}'(1): \quad pA\cos(p + \varphi_0) = -qCe^{-q}. \end{gathered} \tag{18}$$

Из первых двух уравнений (18) выразим B и C:

$$B = A\sin\varphi_0; \quad C = Ae^{q}\sin(p + \varphi_0). \tag{19}$$

Из 1-го и 3-го, а также 2-го и 4-го уравнений (18) получим систему уравнений для определения параметра φ_0 и p (или энергии ξ):

$$\operatorname{tg}\varphi_0 = p/q; \quad \operatorname{tg}(p + \varphi_0) = -p/q;$$

$$\operatorname{tg}\varphi_0 + \operatorname{tg}(p + \varphi_0) = \frac{\sin(p + 2\varphi_0)}{\cos\varphi_0\cos(p + \varphi_0)} = 0.$$

Из первого и последнего равенств получаем уравнение для нахождения параметра p (или энергии ξ):

$$p + 2\varphi_0 = \pi k; \quad p = \pi k - 2\operatorname{arctg}(p/q); \quad k = 1, 2, \dots .$$

$$\sqrt{\alpha\xi} = \pi k - 2\operatorname{arctg}\sqrt{\xi/(1 - \xi)}, \quad k = 1, 2, \dots . \tag{20}$$

Из графика на рисунке 1 видно, что каждому значению k соответствует одно решение уравнения (20). Число решений уравнения (20) $k_{\max}$ определяется следующим соотношением:

$$k_{\max} - 1 \le \sqrt{\alpha}/\pi < k_{\max}.$$

Решение уравнения Шрёдингера запишется в виде:

$$\psi_n(z) = \begin{cases} a_n \sin\varphi_n e^{q_n z}, & z < 0; \\ a_n \sin(p_n z + \varphi_n) & 0 < z < 1; \\ a_n e^{q_n(1-z)} \sin(p_n + \varphi_n), & z > 1, \end{cases} \tag{21}$$

где $p_n = \sqrt{\alpha \xi_n}$; $q_n = \sqrt{\alpha(1-\xi_n)}$; $\varphi_n = (\pi n - p_n)/2$; ξ_n — решение трансцендентного уравнения (20), а a_n определяются из условия нормировки.

Симметричная потенциальная яма

Рассмотрим потенциальную яму со стенками конечной высоты:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| < l; \\ U_0, & |x| > l. \end{cases} \tag{22}$$

Поиск решения будет проводиться в трёх областях: $z < -1$ (I); $-1 < z < 1$ (II) и $z > 1$ (III). Будем искать решения только при финитном движении частицы, т.е. при $E < U_0$.

Потенциальную и полную энергии выразим через безразмерные параметры α и ξ:

$$U_0 = \alpha \frac{\hbar^2}{2ml^2}; \quad E = \xi U_0; \quad \xi \le 1.$$

Уравнения Шрёдингера для всех областей совпадут с (14) и (15). Функции $\psi_{\mathrm{I,II,III}}(z)$ (17) будут удовлетворять граничным условиям:

$$\begin{gathered} \psi_{\mathrm{I}}(-1) = \psi_{\mathrm{II}}(-1); \quad \psi_{\mathrm{III}}(1) = \psi_{\mathrm{II}}(1); \\ \psi'_{\mathrm{I}}(-1) = \psi'_{\mathrm{II}}(-1); \quad \psi'_{\mathrm{III}}(1) = \psi'_{\mathrm{II}}(1). \end{gathered} \tag{23}$$

и условиям на бесконечности: $\psi_{\mathrm{I}}(-\infty) = \psi_{\mathrm{III}}(\infty) = 0$.

Для нахождения *A*, *B* и *C* в (17) учтём граничные условия (23):

$$\begin{gathered} \psi_{\mathrm{I}}(-1) = \psi_{\mathrm{II}}(-1): \quad Be^{-q} = A\sin(\varphi_0 - p); \\ \psi_{\mathrm{II}}(1) = \psi_{\mathrm{III}}(1): \quad A\sin(p + \varphi_0) = Ce^{-q}; \\ \psi'_{\mathrm{I}}(-1) = \psi'_{\mathrm{II}}(-1): \quad qBe^{-q} = pA\cos(\varphi_0 - \mathrm{p}); \\ \psi'_{\mathrm{II}}(1) = \psi'_{\mathrm{III}}(1): \quad pA\cos(p + \varphi_0) = -qCe^{-q}. \end{gathered} \tag{24}$$

Из первых двух уравнений (24) выразим *B* и *C*:

$$B = Ae^{q}\sin(\varphi_0 - p); \quad C = Ae^{q}\sin(p + \varphi_0). \tag{25}$$

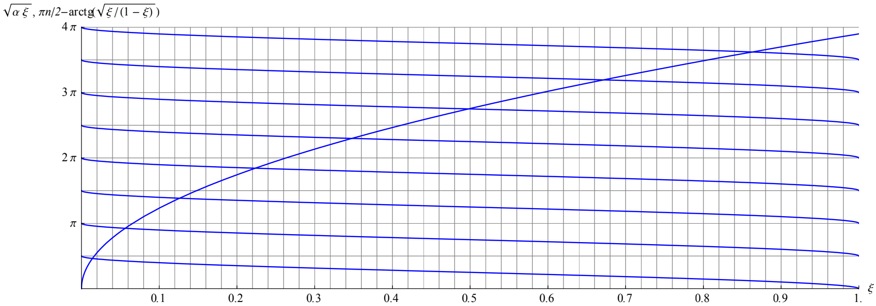


Рисунок 2. Графики левой и правой частей уравнения (26) для $\alpha = 150$

Из 1-го и 3-го, а также 2-го и 4-го уравнений (18) получим систему уравнений для определения параметра φ_0 и p (или энергии ξ):

$$\mathrm{tg}(\varphi_0 - p) = p/q; \quad \mathrm{tg}(\varphi_0 + p) = -p/q;$$

$$\mathrm{tg}(\varphi_0 - p) + \mathrm{tg}(\varphi_0 + p) = \frac{\sin(2\varphi_0)}{\cos(\varphi_0 - p)\cos(\varphi_0 + p)} = 0;$$

$$2\varphi_0 = \pi n; \quad p = \varphi_0 - \mathrm{arctg}\left(p/q\right) = \pi n/2 - \mathrm{arctg}\left(p/q\right),$$

$$\sqrt{\alpha\xi} = \pi n/2 - \mathrm{arctg}\left(\sqrt{\xi/(1-\xi)}\right). \tag{26}$$

Учитывая (25), найдём выражения для $\psi_{\mathrm{I,II,III}}(z)$ (верхние формулы справедливы для нечётных значений $n = 2k-1$, нижние — для чётных значений $n = 2k$):

$$\begin{gathered}
\psi_{\mathrm{II},n}(z) = A\sin(pz + \pi n/2) = A\begin{Bmatrix}\sin(pz + \pi k - \pi/2)\\ \sin(pz + \pi k)\end{Bmatrix} = \\
= A\begin{Bmatrix}-\cos(pz + \pi k)\\ \sin(pz + \pi k)\end{Bmatrix} = A(-1)^k\begin{Bmatrix}-\cos(pz)\\ \sin(pz)\end{Bmatrix} = a_n\begin{Bmatrix}\cos(pz)\\ \sin(pz)\end{Bmatrix}; \\
\psi_{\mathrm{I}}(z) = A\sin(-p + \pi n/2)e^{q(1+z)} = a_n\begin{Bmatrix}\cos p\\ -\sin p\end{Bmatrix}e^{q(1+z)}; \\
\psi_{\mathrm{III}}(z) = A\sin(p + \pi n/2)e^{q(1-z)} = a_n\begin{Bmatrix}\cos p\\ \sin p\end{Bmatrix}e^{q(1-z)}.
\end{gathered} \tag{17}$$

где

$$n = \begin{Bmatrix}2k-1\\ 2k\end{Bmatrix}; \quad \mathrm{a}_n = A(-1)^k\begin{Bmatrix}-1\\ 1\end{Bmatrix}.$$

Задание на выполнение

1. Для потенциальной ямы (нечётные бригады — (13), чётные бригады — (22)) и заданного в лабораторной работе №1 параметра α найти ξ_n — энергию, выраженную в единицах U_0. Для этого численно решить уравнение (20) или (26). Определить число дискретных энергетических уровней.

2. Для каждого энергетического уровня рассчитать вероятность обнаружить частицу за пределами потенциальной ямы.

3. Для каждого энергетического уровня для нормированной координаты рассчитать её среднее значение $\langle z \rangle$, среднее её квадрата $\langle z^2 \rangle$ и среднеквадратичное значение $\sqrt{\langle z^2 \rangle}$.

4. Для каждого энергетического уровня для импульса частицы рассчитать его среднее значение $\langle P_x \rangle \cdot l/\hbar$, среднее его квадрата $\langle P_x^2 \rangle \cdot (l/\hbar)^2$ и среднеквадратичное значение $\sqrt{\langle P_x^2 \rangle} \cdot l/\hbar$. Проверьте выполнение соотношения неопределённостей Гейзенберга.

5. Для каждого энергетического уровня рассчитать среднее значение кинетической энергии частицы. Сравнить его с полной энергией частицы.

6. Для каждого энергетического уровня рассчитать положения нулей и точек экстремума (для нормированной координаты) пси-функции (нули и максимумы плотности вероятности). Определить в точках экстремума значение плотности вероятности.

7. Для каждого энергетического уровня построить графики нормированной пси-функции $\psi_n(z)$ и плотности вероятности $\rho_n(z)$.

8. Сравнить полученные результаты с результатами лабораторной работы №4 и сделать выводы.

Контрольные вопросы

1. Запишите уравнение Шрёдингера для стационарных состояний.

2. Запишите уравнение Шрёдингера для нестационарных состояний.

3. Поясните физический смысл пси-функции.

4. Перечислите основные свойства пси-функции.

5. Запишите условие нормировки и поясните его физический смысл.

6. Как определяется среднее значение физической величины?

7. Поясните вид операторов кинетической и потенциальной энергий в декартовой системе координат.

8. Дайте определение неопределённости координаты, импульса.

9. Запишите и поясните физический смысл соотношений неопределённостей Гейзенберга.

10. Поясните понятие потенциальная яма.

11. Запишите уравнение Шрёдингера для потенциальной ямы, используемой в работе.

12. Решите уравнение Шрёдингера для потенциальной ямы, используемой в работе. Получите выражения для энергии и пси-функции.

Лабораторная работа № 6.
Влияние профиля дна потенциальной ямы

Цель работы

Ознакомиться с решениями уравнения Шрёдингера для потенциальных ям с бесконечными стенками со сложным профилем дна. Рассмотреть влияние профиля дна на стационарные уровни энергии и волновые функции.

Потенциальная яма с бесконечными стенками

Рассмотрим одномерное уравнение Шрёдингера

$$\Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \mathbf{U}(x)\right]\Psi(x) = 0 \tag{1}$$

для потенциальной ямы с бесконечными стенками:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < l; \\ \infty, & x < 0 \text{ или } x > l. \end{cases} \tag{2}$$

С учётом граничных условий:

$$\Psi(0) = \Psi(l) = 0, \tag{3}$$

значение пси-функции вне интервала $0 < x < l$ равно нулю, а в данном интервале подчиняется уравнению

$$\Psi''(x) + k^2\Psi(x) = 0, \tag{4}$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Решение уравнения (4):

$$\Psi(x) = a\sin kx + b\cos kx. \tag{5}$$

Применим к (5) граничные условия (3):

$$\Psi(0) = b = 0; \quad \Psi(l) = a\sin kl = 0. \tag{6}$$

Из последнего равенства получим условие для k и энергии:

$$k_n l = \pi n, \quad n = 1, 2, ..., \infty; \tag{7}$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2, \quad n = 1, 2, ..., \infty; \tag{8}$$

Константа a определяется из условия нормировки:

$$\int_0^l \Psi^2(x)\,\mathrm{d}x = 1. \tag{9}$$

Подставив (5) в (9), с учётом (6) и (7) получим:

$$\int_0^l a^2 \sin^2(\pi n x/l)\,\mathrm{d}x = \frac{a^2}{2}\int_0^l \left[1-\cos(2\pi n x/l)\right]\mathrm{d}x = \frac{la^2}{2} = 1; \quad a = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Пси-функция и плотность вероятности примут следующий вид:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{2/l}\,\sin(\pi n x/l);$$
$$\rho_n(x) = \left|\Psi_n(x)\right|^2 = \frac{2}{l}\sin^2\left(\frac{\pi n x}{l}\right), \quad n = 1, 2, \ldots, \infty. \tag{10}$$

Перейдём к безразмерной координате $z = x/l$, $z \in [0,1]$), безразмерным пси-функции и плотности вероятности:

$$\psi_n(z) = \sqrt{l}\,\Psi_n(zl) = \sqrt{2}\,\sin(\pi n z);$$
$$\tilde{\rho}_n(z) = l\rho_n(zl) = 2\sin^2(\pi n z), \quad n = 1, 2, \ldots, \infty. \tag{11}$$

Уравнение Шрёдингера и условие нормировки:

$$\sqrt{l}\,\Psi''(x) = \frac{1}{l^2}\psi''(z); \quad \boxed{\psi''(z) + \frac{2ml^2}{\hbar^2}\left[E - \mathrm{U}(zl)\right]\psi(z) = 0};$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(x)\,\mathrm{d}x = l\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(z)\,\mathrm{d}z = \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(z)\,\mathrm{d}z = 1}. \tag{12}$$

Потенциальная яма со сложным профилем

Рассмотрим потенциальную яму с бесконечными стенками следующего вида:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < \gamma l; \\ U_0, & \gamma l < x < l; \\ \infty, & x < 0,\, x > l. \end{cases} \qquad U(z) = \begin{cases} 0, & 0 < z < \gamma; \\ U_0, & \gamma < z < 1; \\ \infty, & z < 0,\, z > 1. \end{cases} \tag{13}$$

Поиск решения будет проводиться в двух областях: $0 < z < \gamma$ (I) и $\gamma < z < 1$ (II). Решения при $E < U_0$ и $E > U_0$ будут отличаться. Поэтому данные два случая нужно рассматривать отдельно.

1. $E < U_0$, $\xi < 1$

Потенциальную и полную энергии выразим через безразмерные параметры α и ξ:

$$U_0 = \alpha\frac{\hbar^2}{2ml^2}; \quad E = \xi U_0; \quad \xi \le 1.$$

Для каждой области запишем уравнение Шрёдингера:

$$\psi_{\mathrm{I}}''(z)+\frac{2ml^2}{\hbar^2}E\psi_{\mathrm{I}}(z)=0 \quad\Rightarrow\quad \psi_{\mathrm{I}}''(z)+p^2\psi_{\mathrm{I}}(z)=0; \tag{14}$$

$$\psi_{\mathrm{II}}''(z)+\frac{2ml^2}{\hbar^2}\left[E-U_0\right]\psi_{\mathrm{II}}(z)=0 \;\Rightarrow\; \psi_{\mathrm{II}}''(z)-q^2\psi_{\mathrm{II}}(z)=0, \tag{15}$$

где $$p=\frac{l}{\hbar}\sqrt{2mE}=\sqrt{\alpha\xi};\quad q=\frac{l}{\hbar}\sqrt{2m\left(U_0-E\right)}=\sqrt{\alpha\left(1-\xi\right)}.$$

Функции $\psi_{\mathrm{I}}(z)$ и $\psi_{\mathrm{II}}(z)$ будут удовлетворять граничным условиям:

$$\psi_{\mathrm{I}}(0)=0;\quad \psi_{\mathrm{II}}(1)=0;\quad \psi_{\mathrm{I}}(\gamma)=\psi_{\mathrm{II}}(\gamma);\quad \psi_{\mathrm{I}}'(\gamma)=\psi_{\mathrm{II}}'(\gamma). \tag{16}$$

Запишем решения (14) и (15):

$$\psi_{\mathrm{I}}(z)=A\sin(pz)+B\cos(pz);\quad \psi_{\mathrm{II}}(z)=Ce^{-qz}+De^{qz}. \tag{17}$$

Для нахождения A, B, C и D в (17) учтём граничные условия (16):

$$\psi_{\mathrm{I}}(0)=B=0;\quad \psi_{\mathrm{II}}(1)=Ce^{-q}+De^{q}=0 \quad\Rightarrow\; D=-Ce^{-2q};$$

$$\psi_{\mathrm{I}}(z)=A\sin(pz);\quad \psi_{\mathrm{II}}(z)=Ce^{-q}\left(e^{q-qz}-e^{qz-q}\right)=2Ce^{-q}\,\mathrm{sh}\left[(1-z)q\right];$$

$$\psi_{\mathrm{I}}(\gamma)=\psi_{\mathrm{II}}(\gamma):\quad A\sin(\gamma p)=2Ce^{-q}\,\mathrm{sh}\left[(1-\gamma)q\right];$$

$$C=\frac{Ae^{q}\sin(\gamma p)}{2\,\mathrm{sh}\left[(1-\gamma)q\right]};\quad \psi_{\mathrm{II}}(z)=A\sin(\gamma p)\frac{\mathrm{sh}\left[(1-z)q\right]}{\mathrm{sh}\left[(1-\gamma)q\right]};$$

$$\psi_{\mathrm{I}}'(\gamma)=\psi_{\mathrm{II}}'(\gamma):\quad Ap\cos(\gamma p)=-A\sin(\gamma p)\cdot q\,\frac{\mathrm{ch}\left[(1-\gamma)q\right]}{\mathrm{sh}\left[(1-\gamma)q\right]};$$

$$q\,\mathrm{tg}(\gamma p)=-p\,\mathrm{th}[(1-\gamma)q].$$

$$\gamma\sqrt{\alpha\xi_n}=\pi n-\mathrm{arctg}\left[\sqrt{\frac{\xi_n}{1-\xi_n}}\,\mathrm{th}\left[\left(1-\gamma\right)\sqrt{\alpha\left(1-\xi_n\right)}\right]\right],\quad n=1,2,3,\ldots. \tag{18}$$

Из уравнения (18) находится безразмерная энергия ξ. Решение уравнения Шрёдингера можно записать в виде:

$$\psi_n(z)=\begin{cases}0, & z<0,\, z>1;\\ a_n\,\dfrac{\sin(zp_n)}{\sin(\gamma p_n)}, & 0<z<\gamma;\\ a_n\,\dfrac{\mathrm{sh}\left[(1-z)q_n\right]}{\mathrm{sh}\left[(1-\gamma)q_n\right]}, & \gamma<z<1,\end{cases} \tag{19}$$

где $p_n=\sqrt{\alpha\xi_n}$; $q_n=\sqrt{\alpha(1-\xi_n)}$, а ξ_n — решение уравнения (18). Постоянные a_n определяются из условия нормировки.

2. $E > U_0$, $\xi > 1$

Уравнение Шрёдингера:

$$\psi_{\mathrm{I}}''(z) + \frac{2ml^2}{\hbar^2} E\psi_{\mathrm{I}}(z) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_{\mathrm{I}}''(z) + p^2\psi_{\mathrm{I}}(z) = 0, \quad 0 < z < \gamma; \qquad (20)$$

$$\psi_{\mathrm{II}}''(z) + \frac{2ml^2}{\hbar^2}\left[E - U_0\right]\psi_{\mathrm{II}}(z) = 0 \;\Rightarrow\; \psi_{\mathrm{II}}''(z) + q^2\psi_{\mathrm{II}}(z) = 0, \;\; \gamma < z < 1, \qquad (21)$$

где $$p = \frac{l}{\hbar}\sqrt{2mE} = \sqrt{\alpha\xi}; \quad q = \frac{l}{\hbar}\sqrt{2m\left(E - U_0\right)} = \sqrt{\alpha\left(\xi - 1\right)}.$$

Функции $\psi_{\mathrm{I}}(z)$, $\psi_{\mathrm{II}}(z)$ будут удовлетворять граничным условиям:

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = 0; \quad \psi_{\mathrm{II}}(1) = 0; \quad \psi_{\mathrm{I}}(\gamma) = \psi_{\mathrm{II}}(\gamma); \quad \psi_{\mathrm{I}}'(\gamma) = \psi_{\mathrm{II}}'(\gamma). \qquad (22)$$

Запишем решения (20) и (21):

$$\psi_{\mathrm{I}}(z) = A\sin(pz) + B\cos(pz); \quad \psi_{\mathrm{II}}(z) = C\sin(qz) + D\cos(qz). \qquad (23)$$

Для нахождения параметров A, B, C и D в (23) применим граничные условия (22):

$$\psi_{\mathrm{I}}(0) = B = 0; \quad \psi_{\mathrm{II}}(1) = C\sin(q) + D\cos(q) = 0 \quad \Rightarrow \; D = -C\,\mathrm{tg}\,q;$$

$$\psi_{\mathrm{II}}(z) = C\sin(qz) - C\,\mathrm{tg}\,q\cos(qz) = C\left[\cos q\sin(qz) - \sin q\cos(qz)\right]/\cos q;$$

$$\psi_{\mathrm{I}}(z) = A\sin(pz); \quad \psi_{\mathrm{II}}(z) = -C\sin\left[q(1 - z)\right]/\cos q;$$

$$\psi_{\mathrm{I}}(\gamma) = \psi_{\mathrm{II}}(\gamma): \quad A\sin(p\gamma) = -C\sin\left[q(1 - \gamma)\right]/\cos q;$$

$$\frac{-C}{\cos q} = \frac{A\sin(p\gamma)}{\sin\left[q(1 - \gamma)\right]}; \quad \psi_{\mathrm{II}}(z) = A\sin(p\gamma)\frac{\sin\left[q(1 - z)\right]}{\sin\left[q(1 - \gamma)\right]};$$

$$\psi_{\mathrm{I}}{}'(\gamma) = \psi_{\mathrm{II}}{}'(\gamma): \quad p\cos(\gamma p) = -q\sin(\gamma p)\frac{\cos\left[q(1 - \gamma)\right]}{\sin\left[q(1 - \gamma)\right]};$$

Последнее уравнение является трансцендентным и из него можно определить значения энергии:

$$\sqrt{\xi - 1}\,\mathrm{tg}\left[\gamma\sqrt{\alpha\xi}\right] = -\sqrt{\xi}\,\mathrm{tg}\left[(1 - \gamma)\sqrt{\alpha(\xi - 1)}\right]. \qquad (24)$$

Из уравнения (24) находится безразмерная энергия ξ. Решение уравнения Шрёдингера запишется в виде:

$$\psi_n(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, z > \gamma; \\ a_n\sin(p_n z)/\sin(p_n\gamma), & 0 < z < \gamma; \\ a_n\sin\left[q_n(z - 1)\right]/\sin\left[q_n(\gamma - 1)\right], & \gamma < z < 1, \end{cases} \qquad (25)$$

где $p_n = \sqrt{\alpha\xi_n}$; $q_n = \sqrt{\alpha(\xi_n - 1)}$, а ξ_n — решение уравнения (24). Постоянные a_n определяются из условия нормировки.

Задание на выполнение

1. Для потенциальной ямы (13) и заданных преподавателем параметров α и γ найти ξ_n — энергию, выраженную в единицах U_0. Для этого численно решить либо уравнение (24), либо уравнение (21). Для значений $\xi_n < 1$ найти все корни, для значений $\xi_n > 1$ найти первые три корня.

2. Для каждого энергетического уровня построить графики пси-функции $\psi_n(z) = \sqrt{l}\Psi_n(zl) = \sqrt{l}\Psi_n(x)$ и плотности вероятности $\rho_n(z) = \left|\psi_n(z)\right|^2 = l\left|\Psi_n(zl)\right|^2 = l\rho_n(x)$.

3. Для каждого энергетического уровня рассчитать вероятность обнаружить частицу за пределами потенциальной ямы, т.е. при $z > 1$.

4. Для каждого энергетического уровня для нормированной координаты рассчитать её среднее значение $\langle z \rangle$, среднее её квадрата $\left\langle z^2 \right\rangle$ и среднеквадратичное значение $\sqrt{\langle z^2 \rangle}$.

5. Для каждого энергетического уровня для импульса частицы рассчитать его среднее значение $\left\langle P_x \right\rangle \cdot l/\hbar$, среднее его квадрата $\left\langle (P_x)^2 \right\rangle \cdot (l/\hbar)^2$ и среднеквадратичное значение $\sqrt{\left\langle (P_x)^2 \right\rangle} \cdot l/\hbar$. Проверьте выполнение соотношения неопределённостей Гейзенберга.

7. Для каждого энергетического уровня рассчитать среднее значение кинетической энергии частицы. Сравнить его с полной энергией частицы.

8. Для каждого энергетического уровня рассчитать положения нулей и точек экстремума (для нормированной координаты) пси функции (нули и максимумы плотности вероятности). Определить в точках экстремума значение плотности вероятности.

9. Сравнить полученные результаты с результатами для потенциальной ямы (2) и сделать выводы.

Контрольные вопросы

1. Запишите уравнение Шрёдингера для стационарных состояний.

2. Запишите уравнение Шрёдингера для нестационарных состояний.

3. Поясните физический смысл пси-функции.

4. Перечислите основные свойства пси-функции.

5. Запишите условие нормировки и поясните его физический смысл.

6. Как определяется среднее значение физической величины?

7. Поясните вид операторов кинетической и потенциальной энергий в декартовой системе координат.

8. Дайте определение неопределённости координаты, импульса.

9. Запишите и поясните физический смысл соотношений неопределённостей Гейзенберга.

10. Поясните понятие потенциальная яма.

11. Запишите уравнение Шрёдингера для потенциальной ямы, используемой в работе.

12. Решите уравнение Шрёдингера для потенциальной ямы, используемой в работе. Получите выражения для энергии и пси-функции.

Лабораторная работа № 7.
Электрон в атоме водорода

Цель работы

Ознакомиться с решениями уравнения Шрёдингера для электрона в атоме водорода. Рассмотреть стационарные состояния электрона и соответствующие им уровни энергии.

Операторы момента импульса

Рассмотрим операторы момента импульса в сферической системе координат:

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}; \quad \hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

Применим оператор проекции момента на выделенную ось (ось z) к пси-функции:

$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}\psi(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi} = L_z\psi(\varphi).$$

Разделим переменные и проинтегрируем:

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\psi} = \frac{i}{\hbar}L_z\mathrm{d}\varphi \Rightarrow \psi(\varphi) = C\exp\left\{\frac{i}{\hbar}L_z\varphi\right\}.$$

Учтём периодичность пси-функции:

$$\psi(\varphi+2\pi) = \psi(\varphi) \Rightarrow C\exp\left\{(i/\hbar)L_z(\varphi+2\pi)\right\} = C\exp\left\{(i/\hbar)L_z\varphi\right\} \Rightarrow$$
$$\Rightarrow \exp\left\{(i/\hbar)L_z 2\pi\right\} = 1 \Rightarrow L_z 2\pi/\hbar = 2\pi m, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$

Таким образом, значения, которые может принимать проекция момента импульса на выделенную ось, равны:

$$L_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots \pm l, \quad \psi(\varphi) = Ce^{im\varphi}. \tag{1}$$

где l — максимальное значение магнитного квантового числа m.

Найдём среднее значение (в случае изотропности среды) квадрата момента импульса:

$$\left\langle L^2\right\rangle=\left\langle L_x{}^2\right\rangle+\left\langle L_y{}^2\right\rangle+\left\langle L_z{}^2\right\rangle=3\left\langle L_z{}^2\right\rangle=3\,\frac{1}{2l+1}\hbar^2\sum_{m=-l}^{l}m^2=$$
$$=\frac{3\cdot2\hbar^2}{2l+1}\left(1+2^2+\ldots+l^2\right)=\frac{6\hbar^2}{2l+1}\frac{l\left(l+1\right)\left(2l+1\right)}{6}=\hbar^2 l\left(l+1\right). \qquad (2)$$

Уравнение Шрёдингера для атома водорода

Рассмотрим уравнение Шрёдингера для атома водорода

$$\frac{\hat{P}^2}{2m}\Psi(\mathbf{r})+U(r)\Psi(\mathbf{r})=E\Psi(\mathbf{r})$$

для электрона в радиальном поле ядра:

$$U(r)=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}. \qquad (3)$$

Учитывая выражение для оператора квадрата импульса в сферической системе координат:

$$\hat{\mathbf{P}}^2=-\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\right\},$$

получим уравнение для определения пси-функции электрона:

$$\Delta\Psi(\mathbf{r})+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)\Psi(\mathbf{r})=0, \qquad (4)$$

где $\Delta=\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}+\dfrac{2}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}$; $\Delta_{\theta,\varphi}=\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$.

Решение уравнения (4) будем искать в виде произведения следующих функций:

$$\Psi(\mathbf{r})\equiv\Psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi). \qquad (5)$$

Подставим в (4) пси-функцию в виде (5) и разделим всё уравнение на пси-функцию:

$$\frac{1}{R(r)}\left(\frac{\partial^2R(r)}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2Y(\theta,\varphi)}\Delta_{\theta,\varphi}Y(\theta,\varphi)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)=0,$$

Умножив данное уравнение на r^2, можно заметить, что второе слагаемое не зависит от расстояния r. Таким образом, данное уравнение разбивается на два уравнения:

$$\hat{L}^2Y(\theta,\varphi)=-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}Y(\theta,\varphi)=\hbar^2\mu Y(\theta,\varphi) \qquad (6)$$

и

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}-\frac{\hbar^2\mu}{2mr^2}\right)R(r)=0. \tag{7}$$

Как видно из (1), функция $\Phi(\varphi)$ имеет вид: $\Phi(\varphi)=C_\varphi e^{im\varphi}$. Найдём значение константы из условия нормировки:

$$\int_0^{2\pi}\left|\Phi(\varphi)\right|^2\mathrm{d}\varphi=1\Rightarrow 2\pi\left|C_\varphi\right|^2=1\Rightarrow C_\varphi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

С учётом вида функции $\Phi(\varphi)$

$$\Phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \tag{8}$$

из (6) получим уравнение для $\Theta(\theta)$:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Theta(\theta)\,\mathrm{e}^{im\varphi}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Theta(\theta)\,\mathrm{e}^{im\varphi}=-\mu\Theta(\theta)\,\mathrm{e}^{im\varphi}.$$

Вычислим производные:

$$\Theta''(\theta)+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\Theta'(\theta)+\left[\mu-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta(\theta)=0.$$

Перейдём к переменной $x=\cos\theta$. Тогда $\Theta(\theta)=P(\cos\theta)=P(x)$;

$$\Theta'(\theta)=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\theta}\frac{\mathrm{d}P(x)}{\mathrm{d}x}=-\sin\theta P'(x)=-\sqrt{1-x^2}P'(x);$$

$$\Theta''(\theta)=-\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\sqrt{1-x^2}P'(x)\right)=-xP'(x)+\left(1-x^2\right)P''(x);$$

Дифференциальное уравнение для новой функции $P(x)$ примет следующий вид:

$$\left(1-x^2\right)P''(x)-2xP'(x)+\left[\mu-\frac{m^2}{1-x^2}\right]P(x)=0. \tag{9}$$

Уравнение (9) имеет решение при значении $\mu=l(l+1)$. Как видно из (2) и (6), l — орбитальное квантовое число. Решением уравнения (9), являются присоединённые функции Лежандра первого рода:

$$P_l^{|m|}(x)=(-1)^{|m|}\left(1-x^2\right)^{|m|/2}\frac{\mathrm{d}^{|m|}P_l(x)}{\mathrm{d}x^{|m|}};\quad P_l(x)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}\left(1-x^2\right)^l,$$

где $P_l(x)$ — полиномы Лежандра.

Окончательно решение уравнения (6) запишем:

$$\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}C_{lm}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi}. \qquad (10)$$

Данные функции являются ортогональными:

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\mathrm{Y}_{l'm'}(\theta,\varphi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\delta_{l,l'}\delta_{m,m'}.$$

Из условия нормировки можно определить константу C_{lm} :

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left|\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\right|^2\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=1. \qquad (11)$$

Перейдём в уравнении (7) к переменной $\rho=r/a$, где

$$a=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

есть первый боровский радиус:

$$\left(\frac{1}{a^2}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{2}{a^2\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)R(\rho)+\left(\frac{2m}{\hbar^2}E+\frac{2}{a}\frac{1}{a\rho}-\frac{l(l+1)}{a^2\rho^2}\right)R(\rho)=0.$$

Умножим на a^2:

$$R''(\rho)+\frac{2}{\rho}R'(\rho)+\left(-æ^2+\frac{2}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R(\rho)=0. \qquad (12)$$

где

$$\frac{2ma^2}{\hbar^2}E=-æ^2;\quad E=-\frac{æ^2\hbar^2}{2ma^2}=-\frac{æ^2\hbar^2}{2m}\frac{m^2e^4}{16\pi^2{\varepsilon_0}^2\hbar^4}=-\frac{æ^2me^4}{32\pi^2{\varepsilon_0}^2\hbar^2}.$$

Рассмотрим асимптотическое поведение искомой функции на бесконечности. Для этого в уравнении (12) отбросим слагаемые с отрицательными степенями ρ:

$$R''_\infty(\rho)-æ^2R_\infty(\rho)=0.$$

Решением будет $R_\infty(\rho)=e^{-æ\rho}$. Подставим в (12) решение в виде $R(\rho)=q(\rho)e^{-æ\rho}$:

$$q''+\left(\frac{2}{\rho}-2æ\right)q'+\left(\frac{2(1-æ)}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)q=0. \qquad (13)$$

Представим функцию $q(\rho)=\sum a_k\rho^k$ в виде полинома:

$$\sum k(k-1)a_k\rho^{k-2}+\left(\frac{2}{\rho}-2æ\right)\sum k a_k\rho^{k-1}+\left(\frac{2(1-æ)}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\sum a_k\rho^k=0.$$

$$\sum k(k-1)a_k\rho^{k-2}+2\sum k a_k\rho^{k-2}-2æ\sum(k-1)a_{k-1}\rho^{k-2}+$$
$$+2(1-æ)\sum a_{k-1}\rho^{k-2}-l(l+1)\sum a_k\rho^{k-2}=0.$$

$$\left[k(k+1)-l(l+1)\right]a_k+2\left[(1-æ)-æ(k-1)\right]a_{k-1}=0. \qquad (14)$$

Из последнего уравнения при $k=l$ и $a_l\neq 0$ получим:

$$a_{l-1}=-\frac{l(l+1)-l(l+1)}{2\left[(1-æ)-æ(l-1)\right]}a_l=0.$$

Таким образом, все коэффициенты $a_k=0$ при $k=l-1$ и меньше.

Сделаем замену $k\to k+1$ в (14):

$$a_{k+1}=2\frac{æk+æ-1}{(k+1)(k+2)-l(l+1)}a_k.$$

Определим k, при котором ряд обрывается $a_{k+1}=0$:

$$æk+æ-1=0 \quad\Rightarrow\quad k=\frac{1-æ}{æ}=\frac{1}{æ}-1=n-1.$$

$æ=1/n$. По теории Бора, n — главное квантовое число:

$$E_n=-\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}æ^2=-\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0{}^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}.$$

Так как k изменяется от l до $n-1$, то l не может превышать $n-1$. Решение для радиальной функции запишется в виде:

$$R_{n,l}(\rho)=M_{n,l}e^{-\rho/n}\sum_{k=l}^{n-1}a_k\rho^k. \qquad (15)$$

Положим $a_l=1$, а остальные коэффициенты рассчитаем с помощью рекуррентных соотношений:

$$a_{k+1}=\frac{2}{n}\frac{k+1-n}{(k+1)(k+2)-l(l+1)}a_k. \qquad (16)$$

Представим $q(\rho)=(2\rho/n)^l p(2\rho/n)=x^l p(x)$, $x=2\rho/n$ и подставим в (13):

$$xp''(x)+\left(2(l+1)-x\right)p'(x)+(n-l-1)p(x)=0.$$

Решением полученного уравнения являются обобщённые многочлены Лагерра: $p(x)=L_{n-l-1}^{2l+1}(x)$. Радиальная функция запишется в виде:

$$
\begin{aligned}
R_{n,l}(\rho) &= N_{n,l} e^{-\rho/n} \left(\frac{2\rho}{n}\right)^{l} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho/n);\\
L_k^{\alpha}(x) &= \frac{e^{x}}{k!\,x^{\alpha}} \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}\left(x^{\alpha+k}e^{-x}\right).
\end{aligned} \tag{17}
$$

Из условия нормировки можно определить константы $M_{n,l}$ и $N_{n,l}$:

$$
\int\limits_0^{\infty} \left|R(r)\right|^2 r^2 \mathrm{d}r = a^3 \int\limits_0^{\infty} \left|R_{n,l}(\rho)\right|^2 \rho^2 \mathrm{d}\rho = 1. \tag{18}
$$

Задание на выполнение

1. Для заданных преподавателем значений n и l получите явное выражение для функции $R_{nl}(r)$ по формулам (15-16) и (17). Сравнить полученные функции. Нормировочные константы $M_{n,l}$ и $N_{n,l}$ определить из (18).

2. Постройте зависимость $R_{nl}(\rho)$ от безразмерной переменной ρ.

3. Определите среднее значение расстояния электрона от ядра $\langle r\rangle$, его среднеквадратическое расстояние

$$
r_{\text{ср.кв.}} = \sqrt{\langle r^2\rangle}
$$

и среднее значение обратного расстояния $\langle 1/r\rangle$. Сравнить с радиусом соответствующей орбиты электрона по теории Бора.

$$
\begin{aligned}
\langle f(r)\rangle &= \iiint \left|\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)\right|^2 f(r) r^2 \mathrm{d}r \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi =\\
&= \int\limits_0^{\infty} \left|R_{nl}(r)\right|^2 f(r) r^2 \mathrm{d}r = a^3 \int\limits_0^{\infty} \left|R_{nl}(\rho)\right|^2 f(a\rho)\rho^2 \mathrm{d}\rho.
\end{aligned}
$$

4. Для заданных преподавателем значений n и l по формулам (10-11) получите явные выражения для функций $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ и нормировочных постоянных C_{lm}. При этом следует учитывать, что значения квантового числа m принимают значения $m = 0, \pm 1, ..., \pm l$.

5. Постройте в полярной системе координат графики функций $\left|Y_{lm}(\theta)\right|$ для всех возможных значений квантовых чисел.

Контрольные вопросы

1. Запишите уравнение Шрёдингера для стационарных состояний.

2. Запишите уравнение Шрёдингера для нестационарных состояний.

3. Поясните физический смысл пси-функции.

4. Перечислите основные свойства пси-функции.

5. Запишите условие нормировки и поясните его физический смысл.

6. Как определяется среднее значение физической величины?

7. Запишите оператор момента импульса в сферической системе координат.

8. Перечислите квантовые числа электрона в атоме водорода и физические величины, которые они определяют.

9. Запишите уравнение Шрёдингера для атома водорода.