5.2. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

Основным динамическим уравнением квантовой механики, описывающим эволюцию состояния микрочастицы во времени, является уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}=\hat{H}\Psi(\vec{r},t), \qquad (1)$$

где $\hat{H}$ — оператор Гамильтона, в общем случае зависящий параметрически от времени t:

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+U\left(\hat{\vec{r}},t\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U\left(\vec{r},t\right).$$

Здесь $U(\vec{r},t)$— функция, описывающая нестационарное потенциальное силовое поле $\vec{F}(\vec{r},t)-\nabla U(\vec{r},t)$. В квантовой механике эту функцию называют потенциалом.

Если силовое поле стационарное, т.е. $U=U\left(\vec{r}\right)$, то решение уравнения (1) можно представить в виде

$$\Psi\left(\vec{r},t\right)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi\left(\vec{r}\right), \qquad (2)$$

где E - энергия частицы**,** значения которой определяются в задаче на собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона

$$\hat{H}\psi\left(\vec{r}\right)=E\psi\left(\vec{r}\right). \qquad (3)$$

Уравнение (3) для функции $\psi\left(\vec{r}\right)$, следующее из уравнения (1) при подстановке в него функции (2), называют стационарным уравнением Шрёдингера.

Состояния частицы, описываемые пси-функциями (2), называются стационарными.

Пси-функция, удовлетворяющая уравнению (3), должна иметь некоторые общие свойства для любых потенциалов $U(\vec{r})$. Именно, она должна быть однозначной, ограниченной и непрерывной во всем координатном пространстве R^3, а также обладать непрерывными частными производными во всех точках, кроме тех, где функция $U(\vec{r})$ делает бесконечно большой скачок. Частица не может проникнуть в области пространства, где потенциал принимает бесконечно большое значение $U=\infty$. Поэтому на границах этих областей пси-функция должна обращаться в нуль. Перечисленные требования носят название стандартных условий.

Если потенциал обладает центральной симметрией, т. е. $U=U(r)$, то стационарное уравнение Шрёдингера удобнее всего решать в сферической системе координат. Учитывая выражение для оператора Лапласа ∇^2 в сферических координатах (см. прил. 9), оператор Гамильтона можно представить в виде

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)+U(r).$$

Задача 5.7. Найти в форме уравнения непрерывности закон сохранения, к которому приводит вероятностная интерпретация квадрата модуля пси-функции частицы.

Решение. Запишем уравнение Шрёдингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+U(\vec{r},t)\Psi. \qquad (1)$$

Комплексное сопряжение уравнения (1) дает

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*+U(\vec{r},t)\Psi^*. \qquad (2)$$

Умножая уравнения (1) и (2) на Y^* и Y соответственно, а затем вычитая их друг из друга, получаем

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*\right),$$

или (см. прил. 8)

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\Psi\right)=-\frac{\hbar}{2mi}\left(\nabla\left(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*\right)\right). \tag{3}$$

Уравнение (3) легко представить в форме уравнения непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\left(\nabla,\vec{j}\right)=0, \tag{4}$$

где $\rho=(\Psi^*\Psi)$ — плотность вероятности; $\vec{j}$ — вектор плотности потока вероятности:

$$\vec{j}=\frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*\right).$$

Уравнение (4) и представляет собой искомый закон сохранения в локальной (дифференциальной) форме.

Полученному результату можно дать следующую классическую интерпретацию. Если r и $\vec{j}$ умножить на заряд частицы q, то получим плотность заряда $\rho_e=q\left|\Psi\right|^2$ и плотность электрического тока $\vec{j}_e=q\vec{j}$. Тогда уравнение (4) примет форму закона сохранения заряда

$$\frac{\partial\rho_e}{\partial t}+\left(\nabla,\vec{j}_e\right)=0. \tag{5}$$

Задача 5.8. Найти: 1) закон изменения во времени среднего значения $\langle A\rangle$ физической величины, представляемой оператором $\hat{A}=f(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}})$; 2) условие сохранения среднего значения.

Решение. По определению

$$\langle A\rangle=\ \Psi,\hat{A}\Psi \tag{1}$$

Продифференцируем выражение (1) по времени с учетом того, что оператор $\hat{A}$ не зависит явно от времени:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t},\hat{A}\Psi\right)+\left(\Psi,\hat{A}\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right). \tag{2}$$

Но, согласно уравнению Шрёдингера

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi. \tag{3}$$

Подставляя (3) в (2) и учитывая свойства скалярного произведения, а также линейность оператора $\hat{A}$ и самосопряжённость оператора $\hat{H}$, получаем

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi,\hat{A}\Psi\right)+\left(\Psi,\hat{A}\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\Psi\right)=-\frac{1}{i\hbar}\left(\Psi,\hat{H}\hat{A}\Psi\right)+\frac{1}{i\hbar}\left(\Psi,\hat{A}\hat{H}\Psi\right)=\frac{1}{i\hbar}\left(\Psi,\left(\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A}\right)\Psi\right).$$

Наконец, используя обозначение коммутатора, приходим к следующему закону изменения $\langle A\rangle$:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left(\Psi,\left[\hat{H},\hat{A}\right]\Psi\right). \tag{4}$$

2. Из закона (4) очевидно следует, что если $\left[\hat{H},\hat{A}\right]=0$, то $\frac{d\langle A\rangle}{dt}=0$, и, следовательно, $\langle A\rangle=const$. Таким образом, если оператор, поставленный в соответствие некоторой физической величине, не зависит явно от времени и коммутирует с оператором Гамильтона, то среднее значение этой физической величины не зависит от времени, т. е. сохраняется.

Задача 5.9. Используя результат решения предыдущей задачи, показать, что основному уравнению классической динамики

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F},$$

где $\vec{F} = -\nabla U(\vec{r})$ — сила, действующая на частицу в потенциальном поле $U(\vec{r})$, в квантовой механике соответствует уравнению вида

$$\frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = \langle \vec{F} \rangle.$$

Решение. Согласно закону изменения квантовомеханического среднего (см. задачу 5.8)

$$\frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left(\Psi, \left[\hat{H}, \hat{\vec{p}}\right]\Psi\right). \tag{1}$$

Но

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\hat{\vec{r}}).$$

Следовательно,

$$\left[\hat{H}, \hat{\vec{p}}\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{\vec{p}}^2, \hat{\vec{p}}\right] + \left[U(\hat{\vec{r}}), \hat{\vec{p}}\right]. \tag{2}$$

Так как коммутаторы всех операторов проекций импульса друг с другом равны нулю (см. задачу 5.1), то первое слагаемое в (2) обращается в нуль. Действительно, для оператора любой проекции импульса, например $\hat{p}_x$, имеем

$$\left[\hat{\vec{p}}^2, \hat{p}_x\right] = \left[\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2, \hat{p}_x\right] = \left[\hat{p}_x^2, \hat{p}_x\right] + \left[\hat{p}_y^2, \hat{p}_x\right] + \left[\hat{p}_z^2, \hat{p}_x\right] = \hat{p}_x\left[\hat{p}_x, \hat{p}_x\right] + \left[\hat{p}_x, \hat{p}_x\right]\hat{p}_x + \hat{p}_y\left[\hat{p}_y, \hat{p}_x\right] +$$
$$+\left[\hat{p}_y, \hat{p}_x\right]\hat{p}_y + \hat{p}_z \;\; \hat{p}_z, \hat{p}_x \;\; + \;\; \hat{p}_z, \hat{p}_x \;\; \hat{p}_z = 0.$$

Второе слагаемое, согласно результату решения задачи 2 для самостоятельного решения в разделе 5.1, дает

$$\left[U(\hat{\vec{r}}), \hat{\vec{p}}\right] = i\hbar\nabla U(\vec{r}) = -i\hbar\vec{F}(\vec{r}). \tag{3}$$

Подставляя (3) в (1), получаем

$$\frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = \left(\Psi, \vec{F}(\vec{r})\Psi\right).$$

Но по определению $\left(\Psi, \vec{F}(\vec{r})\Psi\right) = \langle \vec{F} \rangle$. Следовательно,

$$\frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = \langle \vec{F} \rangle,$$

что и требовалось доказать.

Таким образом, для квантовомеханических средних $\langle \vec{p} \rangle$ и $\langle \vec{F} \rangle$ справедлив «второй закон Ньютона».

Задача 5.10. Найти энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний линейного осциллятора с частотой W.

Решение. Рассмотрим одномерное стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \tag{1}$$

с оператором Гамильтона, соответствующим линейному осциллятору,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \tag{2}$$

где m— масса осциллятора, $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$, $\hat{x} = x$.

Если ψ — нормированная собственная функция оператора (2), то, умножая уравнение (1) справа скалярно на ψ и вводя функции $\psi_1 = \hat{p}_x\psi$ и $\psi_2 = \hat{x}\psi$, с учётом самосопряжённости операторов $\hat{p}_x$ и $\hat{x}$ получаем

$$E = (\hat{H}\psi,\psi) = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2\psi,\psi) + \frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}^2\psi,\psi) = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x\psi,\hat{p}_x\psi) + \frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}\psi,\hat{x}\psi) =$$

$$= \frac{1}{2m}(\psi_1,\psi_1) + \frac{m\omega^2}{2}(\psi_2,\psi_2) > 0,$$

так как, согласно определению скалярного произведения, $(\psi_1,\psi_1) \geq 0$ и $(\psi_2,\psi_2) \geq 0$, причем знак равенства имеет место при $\psi_1 = \psi_2 = 0$ (т.е. $\psi = 0$). Таким образом, мы установили, что собственные значения оператора (2) положительны.

Введем теперь в рассмотрение операторы

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(\hat{p}_x \pm im\omega\hat{x}\right). \tag{3}$$

Умножим оператор $\hat{a}_+$ слева на оператор $\hat{a}_-$:

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{1}{2m\hbar\omega}\left(\hat{p}_x^2 - im\omega\hat{x}\hat{p}_x + im\omega\hat{p}_x\hat{x} + m^2\omega^2\hat{x}^2\right) = \frac{1}{2m\hbar\omega}\left(\hat{p}_x^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2\right) - \frac{i}{2\hbar}\left[\hat{x},\hat{p}_x\right].$$

Но $\left[\hat{x},\hat{p}_x\right] = i\hbar$ (см. задачу 5.1). Следовательно,

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2}. \tag{4}$$

Совершенно аналогично находим

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2}. \tag{5}$$

Из (4) и (5) очевидно следует

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ - \hat{a}_+\hat{a}_- = 1, \tag{6}$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right). \tag{7}$$

Из выражения (7) видно, что достаточно решить задачу на собственные значения и собственные функции оператора $\hat{\Lambda} = \hat{a}_+\hat{a}_-$, т.е.

$$\hat{\Lambda}\psi_\lambda(x) = \lambda\psi_\lambda(x). \tag{8}$$

Тогда

$$\hat{H}\psi_\lambda = \hbar\omega\left(\hat{\Lambda} + \frac{1}{2}\right)\psi_\lambda = \hbar\omega\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\psi_\lambda,$$

т.е. энергетический спектр осциллятора определяется формулой

$$E_\lambda = \hbar\omega\left(\lambda + \frac{1}{2}\right). \tag{9}$$

Для того чтобы найти возможные значения λ, умножим уравнение (8) слева на оператор $\hat{a}_-$:

$$\hat{a}_-\hat{\Lambda}\psi_\lambda = \lambda\hat{a}_-\psi_\lambda. \tag{10}$$

Но в соответствии с перестановочным соотношением (6),

$$\hat{a}_-\hat{\Lambda} = \hat{a}_-(\hat{a}_+\hat{a}_-) = (\hat{a}_-\hat{a}_+)\hat{a}_- = (\hat{a}_+\hat{a}_- + 1)\hat{a}_- = \hat{\Lambda}\hat{a}_- + \hat{a}_-. \tag{11}$$

Подставляя (11) в (10), получаем

$$\hat{\Lambda}\hat{a}_-\psi_\lambda = (\lambda - 1)\hat{a}_-\psi_\lambda. \tag{12}$$

Сравнивая уравнения (12) и (8), заключаем, что функция

$$\psi_{\lambda-1} = \hat{a}_-\psi_\lambda \tag{13}$$

также является собственной функцией оператора $\hat{\Lambda}$, но принадлежит собственному значению $\lambda - 1$.

Умножая уравнение (12) снова слева на оператор $\hat{a}_-$, приходим тем же путем к выводу, что функция $\Psi_{\lambda-2} = \hat{a}_-{}^2\Psi_\lambda$ также является собственной функцией оператора L, но с собственным значением $\lambda - 2$ и так далее, т.е. функция

$$\psi_{\lambda-n} = (\hat{a}_-)^n \psi_\lambda \tag{14}$$

является собственной функцией оператора L (а, следовательно, и $\hat{H}$!), принадлежащей собственному значению $\lambda - n$. Но тогда для всех $n > \lambda$ собственные значения энергии (9) станут отрицательными, что как мы установили невозможно. Противоречие не возникает только в том случае, если собственные значения l целочисленные, так как при этом последовательность (14) обрывается на функции ψ_0 (т.е. при $\lambda = n$), удовлетворяющей, согласно (13), уравнению

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0. \tag{15}$$

При этом в соответствии с уравнением (8), функция ψ_0 принадлежит собственному значению энергии $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Функция же ψ_n, $n = 0,1,2,...$, принадлежит собственному значению энергии

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{16}$$

Таким образом, энергетический спектр линейного осциллятора, определяемый формулой (16), оказался квантованным. Осталось построить в явном виде набор собственных функций ψ_n, $n = 0,1,2,...$. Для этого найдем, прежде всего, функцию y_0.

Подставляя в (15) явное выражение (3) для оператора $\hat{a}_-$, приходим к уравнению первого порядка

$$\frac{d\psi_0}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar} x\psi_0 = 0.$$

Разделяя переменные, получаем уравнение

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx,$$

интегрирование которого дает

$$\ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \ln c,$$

откуда

$$\psi_0 = ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \tag{17}$$

Константу интегрирования c найдем из условия нормировки $(\psi_0, \psi_0) = 1$. Принимая во внимание интеграл Пуассона

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}},$$

получаем

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x)\psi_0(x)\,dx = |c|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx = |c|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}.$$

Не уменьшая общности, можно взять

$$c = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}.$$

Итак, нормированная пси-функция основного состояния линейного осциллятора (т.е. состояния с наименьшей энергией $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$) имеет вид

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \tag{18}$$

Оператор $\hat{a}_-$, а, следовательно, и оператор $\hat{\Lambda} = \hat{a}_+\hat{a}_-$, действуя на функцию y_0, обращает ее в 0. Рассмотрим функцию $\tilde{\psi}_1 = \hat{a}_+\psi_0$. Найдем действие на нее оператора $\hat{L}$.

$$\hat{\Lambda}\tilde{\psi}_1 = (\hat{a}_+\hat{a}_-)\hat{a}_+\psi_0 = \hat{a}_+(\hat{a}_-\hat{a}_+)\psi_0 = \hat{a}_+(\hat{a}_+\hat{a}_- + 1)\psi_0 = (\hat{a}_+)^2\hat{a}_-\psi_0 + \hat{a}_+\psi_0$$

Но $\hat{a}_-\psi_0 = 0$, а $\hat{a}_+\psi_0 = \tilde{\psi}_1$. Следовательно, $\hat{L}y_1 = y_1$, т.е. функция $\tilde{\psi}_1$ является собственной функцией оператора L, принадлежащей собственному значению $l = 1$.

Действуя аналогично, для функции $\tilde{\psi}_2 = \left(\hat{a}_+\right)^2\psi_0$ имеем $\hat{\Lambda}\tilde{\psi}_2 = 2\tilde{\psi}_2$ и вообще

$$\hat{\Lambda}\tilde{\psi}_n = n\tilde{\psi}_n$$

где

$$\tilde{\psi}_n = (\hat{a}_+)^n\psi_0. \tag{19}$$

Для каждого $n = 0,1,2,...$, функция (19) является собственной функцией оператора $\hat{H}$, принадлежащей собственному значению (16). Умножая $\tilde{\psi}_n$ на числовой множитель $c_n = 1\Big/\sqrt{\left(\tilde{\psi}_n, \tilde{\psi}_n\right)}$, получим набор нормированных собственных функций оператора $\hat{H}$

$$\psi_n = c_n(\hat{a}_+)^n\psi_0,$$

принадлежащих собственным значениям

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0,1,2,...$$

образующих энергетический спектр квантового линейного осциллятора.

Определение явного вида нормировочных констант c_n производится совершенно аналогично тому, как вычислялась нормировочная константа c для функции y_0. Однако, это задача второстепенная. Отметим также, что значение минимальной энергии линейного осциллятора $E_0 = \hbar\omega/2$ в точности совпадает с найденным в задаче 5.3 с помощью соотношения неопределенностей

Задача 5.11. Найти энергетический спектр и пси-функции частицы массой m, заключенной в прямоугольный ящик со сторонами a, b, c, имеющий непроницаемые стенки.

Решение. Поместим начало координат XYZ в одну из вершин ящика, а координатные оси направим вдоль его сторон. Тогда движение частицы будет происходить в ограниченной области пространства, заданной неравенствами

$$0 \le x \le a \ ; \ 0 \le y \le b \ ; \ 0 \le z \le c \ . \tag{1}$$

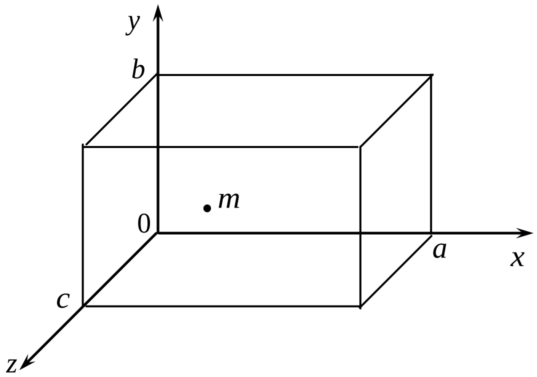

Рис 5.1

Условие непроницаемости стенок ящика моделируются потенциалом вида

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & x, y, z \in V \ , \\ \infty, & x, y, z \notin V \ , \end{cases} \tag{2}$$

где (V) – область пространства заданной неравенствами (1). Следовательно, согласно стандартным условиям $\psi(\vec{r}) = 0$ на стенках ящика. Во внешности области (V) – частица также находиться не может и поэтому в ней $\psi(\vec{r}) = 0$.

Стационарное уравнение Шрёдингера в области (V) – имеет, в соответствии с (2), вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),$$

или

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0. \tag{3}$$

Будем искать решение уравнения (3) в виде произведения трех функций

$$\psi(\vec{r}) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z), \tag{4}$$

каждая из которых удовлетворяет одномерному уравнению Шрёдингера

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \tag{5}$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dy^2} + k_2^2\psi_2 = 0,$$

$$\frac{d^2\psi_3}{dz^2} + k_3^2\psi_3 = 0,$$

где

$$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E. \tag{6}$$

Достаточно решить первое из этих уравнений, чтобы по аналогии написать решения для двух других. Общее решение уравнения (5) запишется в виде

$$\psi_1(x) = c_1 \sin k_1 x + c_2 \cos k_1 x. \tag{7}$$

Константы c_1 и c_2 найдем, используя граничные условия $\psi_1(0) = 0$ и $\psi_1(a) = 0$. Это дает

$$c_2 = 0 \ ,$$

$$c_1 \sin k_1 a = 0 \ . \tag{8}$$

Поскольку нас интересует ненулевое решение, т.е. $c_1 \neq 0$, то из уравнения (8) следует, что $\sin k_1 a = 0$, т.е.

$$k_1 = \frac{\pi n_1}{a}, \ n_1 = \pm 1, \pm 2, ... \tag{9}$$

(случай $n_1 = 0$ исключается, т.к. он приводит к $\psi_1(x) = 0$). Итак,

$$\psi_1(x) = c_1 \sin\frac{\pi n_1}{a}x \ .$$

Так как функции $\psi_1(x)$ и $-\psi_1(x)$ описывают одно и то же состояние, а функция $\sin k_1 x$ – нечётная, то n_1 можно брать только положительными, т.е. $n = 1, 2, 3, \ldots$. Константу c_1 найдем из условия нормировки $(\psi_1, \psi_1) = 1$:

$$(\psi_1, \psi_1) = |c_1|^2 \int_0^a \sin^2\frac{\pi n_1}{a}x dx = \frac{|c_1|^2}{2}\int_0^a \left(1 - \cos\frac{2\pi n_1}{a}x\right)dx = \frac{|c_1|^2}{2}\left(x - \frac{a}{2\pi n_1}\sin\frac{2\pi n_1}{a}x\right)\Bigg|_0^a = \frac{a|c_1|^2}{2} = 1 \ .$$

Не снижая общности, константу c_1 можно взять действительной, т.е. $c_1 = \sqrt{\dfrac{2}{a}}$. Таким образом, нормированные функции, удовлетворяющие уравнению (5) имеют вид

$$\psi_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{\pi n_1}{a} x, \qquad n_1 = 1, 2, 3, \ldots . \tag{10}$$

Совершенно аналогично находим решение для двух других уравнений

$$k_2 = \frac{\pi n_2}{b}, \tag{11}$$

$$\psi_{n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\frac{\pi n_2}{b} y \quad, n_2 = 1,2,3,... \tag{12}$$

$$k_3 = \frac{\pi n_3}{c} \tag{13}$$

$$\psi_{n_3}(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \sin\frac{\pi n_3}{c} z \quad, n_3 = 1,2,3,... \tag{14}$$

Подставляя выражения (9), (11) и (13) в (6) получаем энергетический спектр частицы

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right). \tag{15}$$

Подстановка функций (10), (12) и (14) в (4) приводит к следующему набору собственных функций

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(r) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{8}{abc}} \sin\left(\dfrac{\pi n_1}{a} x\right) \sin\left(\dfrac{\pi n_2}{b} y\right) \sin\left(\dfrac{\pi n_3}{c} z\right), & x, y, z \in \bar{V}\ , \\ 0, & x, y, z \notin V\ . \end{cases}$$

Здесь обозначено $(\bar{V}) = (V) \bigcup (S)$, где (S) – поверхность ящика.

Наиболее важным свойством рассмотренного движения является квантование энергии. Дискретные значения энергии (уровни энергии) задаются набором трех квантовых чисел n_1, n_2, n_3 в соответствии с формулой (15). Основному состоянию (т.е. состоянию с наименьшей энергией) отвечают квантовые числа $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ и энергия

$$E_{\min} = E_{111} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}\right) > 0.$$

Это означает, что низшее энергетическое состояние микрочастицы в ящике с непроницаемыми стенками не является состоянием покоя.

Задача 5.12. Найти возможные значения энергии частицы с массой *m*, находящейся в сферической полости с непроницаемыми стенками, когда состояния частицы описываются сферически-симметричными пси-функциями. Радиус полости — *R*.

Решение. Так как по условию задачи $\psi = \psi(r)$, то стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\psi(r) = E\psi(r) \tag{1}$$

следует решать в сферической системе координат. Тогда, учитывая, что угловая часть оператора Гамильтона обращает функцию $y(r)$ в нуль, уравнение (1) перепишется так (см. Приложение 9)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\psi) + U(r)\psi = E\psi, \tag{2}$$

где

$$U(r) = \begin{cases} 0, & 0 \le r \le R; \\ \infty, & r \ge R. \end{cases} \tag{3}$$

Вводя величину

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{4}$$

и функцию

$$\tilde{\psi} = r\psi\,, \tag{5}$$

приходим, с учетом (3), к уравнению, описывающему движение частицы внутри полости:

$$\frac{d^2\tilde{\psi}}{dr^2} + k^2\tilde{\psi} = 0, \tag{6}$$

которое нужно решать с граничными условиями $\tilde{\psi}(0) = 0 \cdot \psi\ 0\ = 0$ и $\tilde{\psi}(R) = R\psi(R) = 0$ $(\psi(R) = 0$ вследствие непроницаемости стенок полости).

Общее решение уравнения (6) запишется в виде

$$\tilde{\psi}(r) = c_1 \sin kr + c_2 \cos kr\,. \tag{7}$$

Из граничных условий вытекает, что $c_2 = 0$, а

$$c_1 \sin kR = 0\,. \tag{8}$$

Так как $c_1 \neq 0$, то из (8) следует, что

$$k = \frac{\pi n}{R}\,, \quad n = 1, 2, 3, ... \tag{9}$$

Тогда, согласно (4), (5), (7) и (9), возможные значения энергии

$$E_n = \frac{\pi \hbar^2 n^2}{2mR^2}\,, \tag{10}$$

а соответствующие им пси-функции

$$\psi_n(r) = \begin{cases} \dfrac{c_1}{r}\sin\left(\dfrac{\pi n}{R} r\right), & 0 \le r \le R; \\ 0, & r > R. \end{cases}$$

Константу c_1 найдем из условия нормировки $(\psi_n, \psi_n) = 1$:

$$(\psi_n, \psi_n) = \int\limits_{R^3} \psi_n^*(r)\psi_n(r)dV = 4\pi|c_1|^2 \int\limits_o^R \frac{1}{r^2}\sin^2\left(\frac{\pi n}{R} r\right) r^2 dr = 2\pi|c_1|^2 \int\limits_0^R \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{R} r\right)\right) dr = 2\pi|c_1|^2 R = 1$$

Не уменьшая общности, c_1 можно взять действительной, т.е. $c_1 = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi R}}$, и поэтому набор нормированных пси-функций, соответствующих спектру (10), имеет вид

$$\psi_n(r) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2\pi R}} \dfrac{\sin\left(\dfrac{\pi n}{R} r\right)}{r}, & 0 \le r \le R; \\ 0, & r > R. \end{cases}$$

Задача 5.13. Показать, что при некотором a, определяемом параметрами системы, функция $\psi = ce^{-\alpha r}$, где c — нормировочный множитель, является решением стационарного уравнения Шрёдингера для электрона в атоме водорода. Найти в соответствующем этой пси-функции состоянии: 1) энергию электрона; 2) среднее и наиболее вероятное расстояние электрона до ядра.

Решение. Оператор Гамильтона для электрона в атоме водорода имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\tilde{e}^2}{r}, \tag{1}$$

где $m = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ кг – масса электрона; $\tilde{e} = \sqrt{k}e,\ k = 9 \cdot 10^9$ м/Ф; $e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Кл – элементарный заряд.

Поскольку рассматриваемая пси-функция является центрально-симметричной, то уравнение Шрёдингера для нее, отвечающее оператору Гамильтона (1), запишется так (см. предыдущую задачу):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\psi)-\frac{\tilde{e}^2}{r}\psi=E\psi,$$

или

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2(r\psi)}{dr^2}+\tilde{e}^2\psi+Er\psi=0. \qquad (2)$$

Вычисляя вторую производную по r от функции $r\psi=cre^{-\alpha r}$, находим

$$\frac{d^2(r\psi)}{dr^2}=\frac{d^2}{dr^2}\left(cre^{-\alpha r}\right)=c\frac{d}{dr}\left[(1-\alpha r)e^{-\alpha r}\right]=\left(-2\alpha+\alpha^2 r\right)e^{-\alpha r} \qquad (3)$$

Подставляя $\psi=ce^{-\alpha r}$, а также выражение (3) в (2) и приводя подобные члены, получаем

$$c\left(\left(\frac{\hbar^2\alpha}{m}-\tilde{e}^2\right)-\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}+E\right)r\right)e^{-\alpha r}=0.$$

Так как $e^{-\alpha r}\neq 0$, то

$$\left(\frac{\hbar^2\alpha}{m}-\tilde{e}^2\right)-\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}+E\right)r=0,$$

что возможно при всех значениях переменной r, если

$$\frac{\hbar^2\alpha}{m}-\tilde{e}^2=0,$$

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

Откуда

$$\alpha=\frac{\tilde{e}^2 m}{\hbar^2}=\frac{mke^2}{\hbar^2}, \qquad (4)$$

$$E=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}=-\frac{mk^2e^4}{2\hbar^2}. \qquad (5)$$

1. Подставляя в (5) численные значения *m*, *k*, и *e*, а также учитывая, что $\hbar=1{,}05\cdot10^{-34}$ Дж с, 1 эВ $=1{,}6\cdot10^{-19}$ Дж, получаем

$$E=-13{,}6\ \text{эВ}.$$

2. Используя результаты решения задачи 5.5, запишем

$$\langle r\rangle=\frac{3}{2\alpha}=\frac{3\hbar^2}{2mke^2};$$

$$r_{\text{вер}}=\frac{2}{3}\langle r\rangle=\frac{1}{\alpha}=\frac{\hbar^2}{mke^2}.$$

Подставляя в эти формулы численные значения констант, находим

$$r_{\text{вер}}=0{,}53\cdot10^{-10}\ \text{м}=0{,}53\ \mathring{A},$$

$$\langle r\rangle=0{,}8\ \mathring{A}.$$

Рассмотренное состояние является основным состоянием электрона в атоме водорода с энергией $E=-13{,}6$ эВ. При этом a^{-1} имеет смысл наиболее вероятного расстояния электрона до ядра и носит название боровского радиуса.

Задача 5.14. Определить средний потенциал $\varphi(r)$ электрического поля, создаваемого ядром и электронным облаком атома водорода в основном состоянии.

Решение. Нормированная пси-функция основного состояния атома водорода имеет вид

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} e^{-\frac{r}{r_B}}, \tag{1}$$

где r_B — боровский радиус (см. решения задач 5.5 и 5.13).

Обозначим через -e заряд электрона. Тогда плотность заряда в электронном облаке, соответствующем пси-функции (1), может быть записана в виде

$$\rho_e = -e|\psi|^2 = -\frac{e}{\pi r_B^3} e^{-2\frac{r}{r_B}}, \tag{2}$$

(см. замечание к задаче 5.7).

Средний потенциал электронного облака $\varphi_e(r)$ можно найти из уравнения Пуассона, считая, что плотность заряда задана формулой (2), т.е.

$$\nabla^2 \varphi_e(r) = -\frac{\rho_e(r)}{\varepsilon_0} = \frac{e}{\pi r_B^3 \varepsilon_0} e^{-2\frac{r}{r_B}}. \tag{3}$$

где $\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – электрическая постоянная.

Выражая оператор Лапласа в сферических координатах, получаем уравнение

$$\frac{d^2}{dr^2}(r\varphi_e) = \frac{e}{\pi r_B^3 \varepsilon_0} r e^{-2\frac{r}{r_B}}. \tag{4}$$

Дважды интегрируя уравнение (4), приходим к выражению

$$\varphi_e(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r_B}\right) e^{-2\frac{r}{r_B}} + c_1 + \frac{c_2}{r}. \tag{5}$$

Константы интегрирования c_1 и c_2 найдем из условия конечности потенциала (5) в начале координат и обращения его в нуль на бесконечности. Первое условие дает $c_2 = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0}$, а второе — $c_1 = 0$. Следовательно,

$$\varphi_e(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r_B}\right) e^{-2\frac{r}{r_B}} - \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}. \tag{6}$$

Прибавляя к выражению (6) потенциал ядра $\varphi_n(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}$, получаем полный средний потенциал атома

$$\varphi(r) = \varphi_e(r) + \varphi_n(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r_B}\right) e^{-2\frac{r}{r_B}}. \tag{7}$$

Вблизи ядра, т.е. при $r << r_B$, потенциал (7) совпадает с кулоновским $\varphi(r) \approx \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}$. На больших расстояниях от ядра, т.е. при $r >> r_B$, найденный потенциал экспоненциально убывает — кулоновское поле ядра «экранируется» электронным облаком.

Задача 5.15. Найти вероятность прохождения микрочастицы через потенциальный барьер вида

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

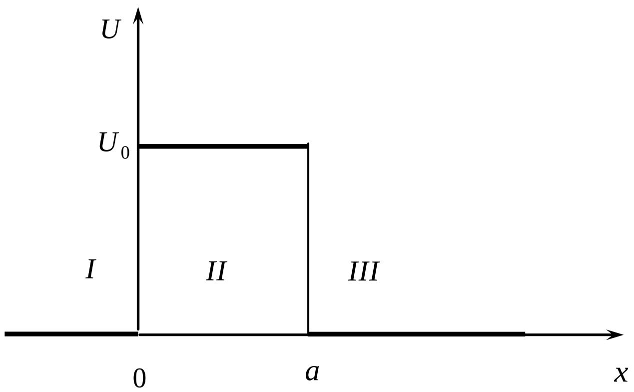

Рис. 5 2

Решение. В соответствии с видом потенциала *U(x)* разделим всю область движения на три части, как показано на рис. 5.1. Уравнение Шрёдингера в областях I и III имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \ , \tag{1}$$

а в области II

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\psi = E\psi \ . \tag{2}$$

Уравнения (1) и (2) можно переписать в виде:

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \, , \tag{3}$$

$$\psi'' + q^2\psi = 0 \, , \tag{4}$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \qquad q^2 = \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}. \tag{5}$$

Будем считать, что частица проходит из области отрицательных значений *x*. Тогда решение уравнения (3) в области I можно представить в виде суммы двух пси-функций

$$\psi_I(x) = \psi_{\text{пад}}(x) + \psi_{\text{отр}}(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} ,$$

где $\psi_{\text{пад}}$ — пси-функция «падающей» частицы:

$$\psi_{\text{пад}} = c_1 e^{ikx} .$$

$\psi_{\text{отр}}$ —пси-функция «отраженной» частицы:

$$\psi_{\text{отр}} = c_2 e^{-ikx} .$$

В области III частица может двигаться только слева направо. Поэтому решение уравнения (3) (пси-функция прошедших через барьер частиц) имеет вид

$$\psi_{III}(x) = \psi_{\text{прош}} \ x \ = c_3 e^{ikx} .$$

Для промежуточной области II общее решение уравнения (4) запишется в виде

$$\psi_{II}(x) = b_1 e^{iqx} + b_2 e^{-iqx} .$$

В качестве меры интенсивности отражения принимается отношение плотностей потоков отраженных и падающих частиц (коэффициент отражения):

$$R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} .$$

Мерой «проницаемости» барьера является отношение плотностей потоков прошедших и падающих частиц, которое называется коэффициентом прохождения:

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} .$$

С учетом того, что вектор плотности потока вероятности определяется формулой (см. задачу 5.7)

$$\vec{j}=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{d\psi}{dx}-\psi\frac{d\psi^*}{dx}\right)\vec{e}_x,$$

где $\vec{e}_x$ — орт в направлении оси X, находим

$$j_{\text{пад}}=\left|\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*_{\text{пад}}\frac{d\psi_{\text{пад}}}{dx}-\psi_{\text{пад}}\frac{d\psi^*_{\text{пад}}}{dx}\right)\right|=\frac{\hbar k}{m}|c_1|^2.$$

Аналогично

$$j_{\text{отр}}=\frac{\hbar k}{m}|c_2|^2,$$

$$j_{\text{прош}}=\frac{\hbar k}{m}|c_3|^2.$$

Следовательно, коэффициенты отражения и прохождения имеют вид:

$$R=\left|\frac{c_2}{c_1}\right|^2;\quad D=\left|\frac{c_3}{c_1}\right|^2.$$

Для определения их явного вида необходимо воспользоваться условиями непрерывности пси-функции и ее первой производной, т.е. положить на границах области $0,a$ $\Psi_I(0)=\Psi_{II}(0)$; $\Psi'_I(0)=\Psi'_{II}(0)$; $\Psi_{II}(a)=\Psi_{III}(a)$; $\Psi'_{II}(a)=\Psi'_{III}(a)$. Используя эти условия, получаем систему уравнений для определения констант c_2, c_3, b_1 и b_2 через c_1:

$$c_1+c_2=b_1+b_2, \tag{6}$$

$$c_1-c_2=\frac{q}{k}(b_1-b_2), \tag{7}$$

$$b_1e^{iqa}+b_2e^{-iqa}=c_3e^{ika}, \tag{8}$$

$$b_1e^{iqa}-b_2e^{-iqa}=\frac{k}{q}c_3e^{ika}. \tag{9}$$

Складывая уравнения (8) и (9), а затем вычитая из уравнения (8) уравнение (9), получаем

$$b_1=\frac{c_3}{2}\left(1+\frac{k}{q}\right)e^{i(k-q)a},$$

$$b_2=\frac{c_3}{2}\left(1-\frac{k}{q}\right)e^{i(k+q)a}.$$

Подставляя эти выражения в уравнения (6) и (7) и складывая их, находим

$$2c_1=\frac{c_3}{2}\left(\left(1+\frac{k}{q}\right)e^{i(k-q)a}+\left(1-\frac{k}{q}\right)e^{i(k+q)a}\right)+\frac{c_3}{2}\left(\left(1+\frac{q}{k}\right)e^{i(k-q)a}+\left(1-\frac{q}{k}\right)e^{i(k+q)a}\right),$$

или, принимая во внимание формулу Эйлера $e^{i\phi}=\cos\phi+i\sin\phi$,

$$c_1=c_3e^{ika}\left(\cos(qa)+\frac{i}{2kq}\ k^2+q^2\ \sin(qa)\right),$$

откуда

$$D=\frac{1}{\left|\cos(qa)+\frac{i}{2kq}(k^2+q^2)\sin(qa)\right|^2}. \tag{10}$$

1. Если энергия частицы E больше высоты потенциального барьера, т.е. $E > U_0$, то, согласно (5), q — действительная величина, и формула (10) перепишется в виде

$$D = \frac{1}{\cos^2(qa) + \dfrac{(k^2 + q^2)^2}{4k^2 q^2}\sin^2(qa)}$$

2. Если энергия частицы E меньше высоты потенциального барьера, т.е. $E < U_0$, то q — чисто мнимая величина. Тогда заменяя в формуле (10) q на $i|q|$ и учитывая, что $\cos(i|q|a) = ch(|q|a)$, $\sin(i|q|a) = ish(|q|a)$, получаем

$$D = \frac{1}{\left| ch(|q|a) + \dfrac{i}{2k|q|}\left(k^2 - |q|^2\right) sh\left(|q|a\right) \right|^2} = \frac{1}{ch^2\left(|q|a\right) + \dfrac{\left(k^2 - |q|^2\right)^2}{4k^2|q|^2} sh^2\left(|q|a\right)}$$

или, поскольку $ch^2\phi = 1 + sh^2\phi$,

$$D = \frac{4k^2|q|^2}{4k^2|q|^2 + \left(k^2 + |q|^2\right)^2 sh^2\left(|q|a\right)}.$$

Таким образом, в отличие от классической механики, существует отличная от нуля вероятность нахождения частицы в области III и в случае $E < U_0$. Это — чисто квантовомеханическое явление, получившее название туннельного эффекта.

ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

1. Показать, что для квантовомеханических средних момента импульса частицы и момента силы имеет место классическое уравнение (см. раздел 1.4): $\dfrac{d\langle\vec{L}\rangle}{dt} = \langle\vec{M}\rangle$. Считать, что $\vec{F} = -\nabla U$.

2. Показать, что в центрально-симметричном потенциальном поле $U(r)$ сохраняются квантовомеханические средние $\langle\vec{L}^2\rangle$ и $\langle L_z\rangle$.

3. Глубина прямоугольной потенциальной ямы равна $U_0 > 0$, ширина — a (рис. 5.3). Показать, что энергия частицы $E < U_0$ может принимать только значения, удовлетворяющие уравнению

$$\sin\frac{\pi(n+1) - \dfrac{a\sqrt{2mE}}{\hbar}}{2} = \sqrt{\frac{E}{U_0}}, \quad n = 0,1,2,...$$

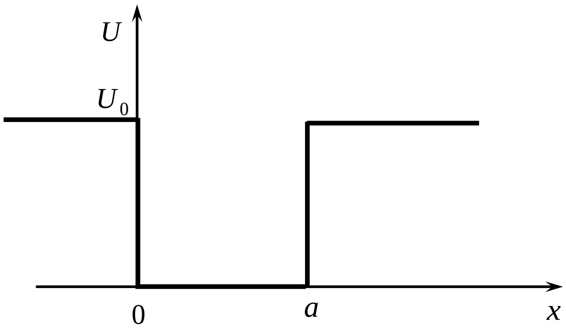

Рис. 5.3

4. Используя результаты решения задачи 5.10 найти нормированную пси- функцию первого возбужденного состояния линейного осциллятора.

Ответ: $\psi_1(x) = \left(\dfrac{4}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\dfrac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$.

5. Найти энергетический спектр и нормированную пси-функцию основного состояния частицы массой m, движущейся в потенциальном поле $U = kr^2$, $k = const > 0$ (изотропный осциллятор).

Ответ: $E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\sqrt{\dfrac{2k}{m}}\left(n_1 + n_2 + n_3 + \dfrac{3}{2}\right)$; $n_i = 0,1,2,...\,(i = 1,2,3)$; $\psi_{000}(r) = \left(\dfrac{\sqrt{2km}}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\frac{\sqrt{2km}}{2\hbar}r^2}$.

6. Вычислить энергию электрона атома водорода в стационарном состоянии, описываемом пси-функцией $\psi(r) = c(1+\beta r)e^{-\alpha r}$, где c, α, β — некоторые постоянные.

Ответ: $E = -\dfrac{me^4}{128\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} = -3{,}4$ эВ; ($\varepsilon_0 = 8{,}85\cdot 10^{-12}$ Ф/м).

7. В условиях задачи 5.15 найти коэффициент отражения R.

Ответ: $R = \left|\dfrac{q^2 - k^2\ \sin(qa)}{2kq\cos(qa) + i(k^2 + q^2)\sin(qa)}\right|^2$.

8. Найти коэффициент отражения от потенциального барьера вида

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

Ответ: $R = \left|\dfrac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}}\right|^2$.