

4. Основные положения и простейшие задачи квантовой механики.

Основные понятия и формулы.

1. Волновая функция ψ – основная характеристика состояния квантовой системы. Физический смысл имеет $|\psi|^2$, заключающийся в том, что $|\psi|^2$ есть плотность вероятности нахождения частицы в данный момент времени в элементе объема dV в окрестности некоторой точки $M(x,y,z)$.

1.1. Вероятность нахождения частицы в объеме V :

$$P = \int_V |\psi|^2 dV = \int_V \psi \psi^* dV. \quad (4.1)$$

1.2. Свойства волновой функции: конечность, непрерывность и непрерывность первой производной, однозначность, нормированность.

1.3. Условие нормировки волновой функции:

$$\int_0^\infty |\psi|^2 dV = 1. \quad (4.2)$$

2. Постулат квантовой механики: каждой динамической переменной классической механики сопоставляется линейный самосопряженный эрмитов оператор.

2.1. Линейные операторы – операторы, удовлетворяющие требованию:

$$\hat{E}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = C_1\hat{E}\psi_1 + C_2\hat{E}\psi_2, \quad (4.3)$$

где ψ_1 и ψ_2 – любая пара функций, C_1 и C_2 – любая пара постоянных комплексных чисел.

2.2. Собственные значения λ и собственные функции ψ операторов – это величины определяемые из условия:

$$\hat{E}\psi = \lambda\psi. \quad (4.4)$$

2.3. Условие самосопряженности (эрмитовости) операторов:

$$\int \psi_i^* \hat{E}\psi_k dV = \int \psi_k (\hat{E}\psi_i)^* dV. \quad (4.5)$$

Если операторы самосопряженные, то их собственными значениями являются действительные числа.

2.4. Условие коммутативности операторов:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \quad (4.6)$$

Если операторы коммутируют, то они имеют общие собственные функции и их собственные значения могут быть определены одновременно.

3. Операторы физических величин.

3.1. Оператор импульса:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla.$$

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (4.7)$$

3.2. Оператор момента импульса:

$$\hat{\mathcal{L}}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{\mathcal{L}}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \hat{\mathcal{L}}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (4.8)$$

3.3. Оператор квадрата момента импульса в сферической системе координат:

$$\hat{\mathcal{L}}^2 = -\hbar^2 \hat{\mathcal{K}}^2, \quad \hat{\mathcal{K}} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (4.9)$$

$\hat{\Lambda}$ – Оператор Лежандра.

3.4. Оператор проекции момента импульса $\hat{\mathcal{L}}_z$ в сферической системе координат:

$$\hat{\mathcal{L}}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (4.10)$$

3.5. Оператор кинетической энергии:

$$\hat{\mathcal{E}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad (4.11)$$

где Δ – оператор Лапласа.

В декартовой системе координат:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (4.12)$$

а в сферической системе координат:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (4.13)$$

4. Уравнение Шредингера.

4.1. Стационарное уравнение Шредингера:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \hat{H} = \hat{\mathcal{E}} + \mathcal{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U, \quad (4.14)$$

где \hat{H} – оператор полной энергии (гамильтониан), U – потенциальная энергия частицы, $\psi \equiv \psi(x, y, z)$.

4.2. Временное уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad \psi \equiv \psi(x, y, z, t). \quad (4.15)$$

4.3. Стационарное уравнение Шредингера для водородоподобного атома:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \left(\frac{kze^2}{r} - E \right) \frac{2m}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (4.16)$$

5. Среднее значение физической величины A в состоянии ψ :

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dV, \quad (4.17)$$

\hat{A} – соответствующий оператор; ψ – нормированная волновая функция; dV – элемент объема.

6. Разложение функции ψ по собственным значениям ψ_n дискретного спектра некоторого оператора:

$$\psi(x) = \sum c_n \psi_n(x), \quad c_n = \int \psi \psi_n^* dx. \quad (4.18)$$

7. Энергия (4.19,а), волновые функции (4.19,б) и квадрат модуля ψ (4.19,в) частицы массы m в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a (Рис.4.1):

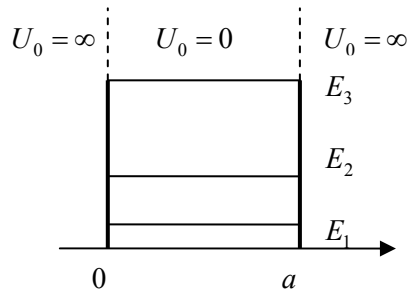


Рис.4.1,а

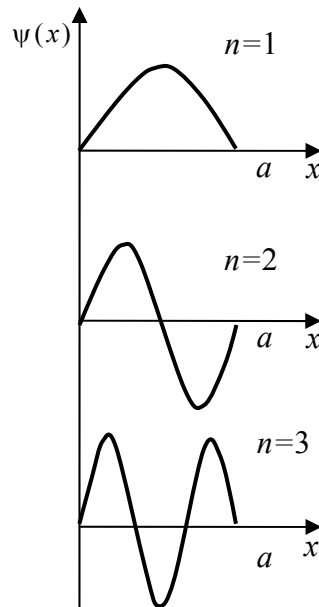


Рис. 4.1,б

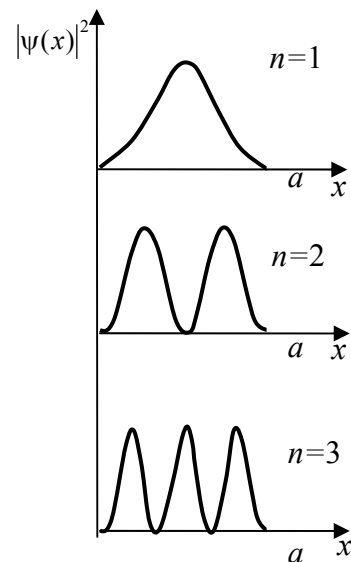


Рис.4.1,в

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad (4.19,а)$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\pi n x / a) \quad (4.19, б)$$

8. Собственные значения энергии E (4.20,а) и собственные функции ψ_n (4.20,б) частицы массы m в одномерном потенциальном поле $U(x) = \chi x^2 / 2$ (квантовый гармонический осциллятор) (Рис.4.2):

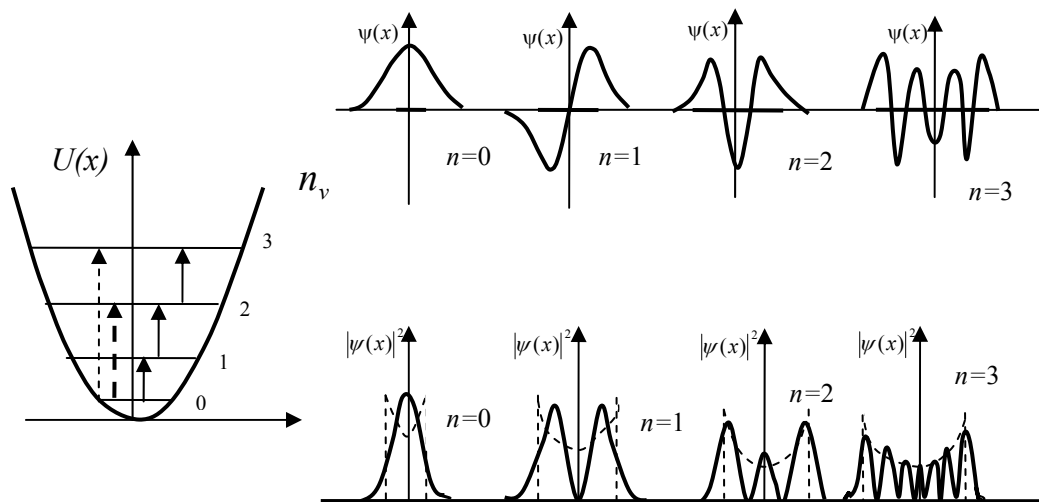


Рис. 4.2

$$E_v = \hbar \omega \left(n_v + \frac{1}{2} \right), \quad n_v = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (4.20, а)$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_0 &= A_0 \exp(-\alpha^2 x^2 / 2), \\ \psi_1 &= A_1 x \exp(-\alpha^2 x^2 / 2), \\ \psi_2 &= A_2 (2\alpha^2 x^2 - 1) \exp(-\alpha^2 x^2 / 2) \end{aligned} \right\} \quad (4.20, б)$$

где A_0, A_1, A_2 – нормировочные коэффициенты; $\alpha^2 = \sqrt{\chi m} / \hbar$, n_v – колебательное квантовое число, ω – циклическая частота колебаний.

9. Вероятность отражения (R) и прохождения (D) частицей потенциального барьера.

9.1. Барьер бесконечной ширины (рис.4.3).

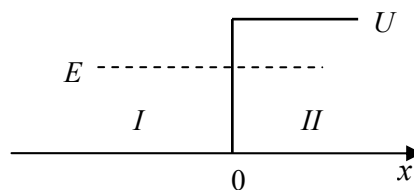


Рис. 4.3

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad D = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (4.21)$$

Здесь:

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} = \frac{p_1}{\hbar}; \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E-U)} = \frac{p_2}{\hbar}. \quad (4.22)$$

9.2. Барьер конечной ширины (4.4).

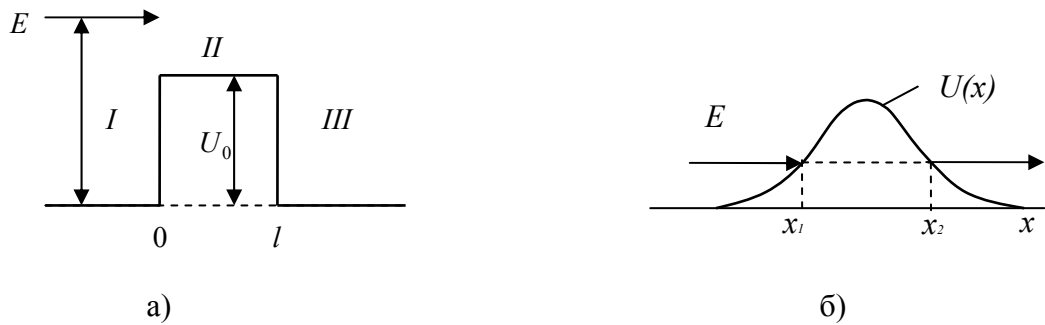


Рис.4.4

Коэффициент прозрачности барьера (а):

$$D = D_0 \exp \left[-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right], \quad (4.23)$$

где D_0 слабо меняется с изменением l , E , U_0 . В большинстве интересных случаев можно считать $D_0 \approx 1$.

Коэффициент прозрачности барьера (б):

$$D \approx \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U - E)} dx \right), \quad (4.24)$$

x_1 , x_2 – координаты точек, между которыми $U > E$.

Примеры решения задач.

Пример 4.1. Определить распределение плотности вероятности местонахождения частицы и эффективный размер области ее локализации, если состояние частицы в данный момент описывается волновой функцией $\psi(x)$,

представляющей собой суперпозицию дебройлевских волн с одинаковыми амплитудами α и мало отличающимися друг от друга волновыми числами в интервале $(k_{\lambda_0} \pm \Delta k_\lambda)$.

Решение:

Воспользуемся уравнением волны де Бройля для свободно движущейся частицы:

$$\psi_n(x) = a e^{ik_{\lambda n} x}. \quad (1)$$

Так как искомая волновая функция представляет собой суперпозицию функций одинаковой амплитуды с различными k_λ вида (1), то ее можно определить путем интегрирования (1) по k_λ .

$$\psi(x) = \int_{k_{\lambda_0} - \Delta k_\lambda}^{k_{\lambda_0} + \Delta k_\lambda} a e^{ik_\lambda x} dk_\lambda = 2a \frac{\sin(x \Delta k_\lambda)}{x}; \quad (2)$$

Исходя из физического смысла волновой функции:

$$\omega(x) = |\psi(x)|^2 = 4a^2 (\Delta k_\lambda)^2 \frac{\sin^2 \xi}{\xi^2}, \quad (3)$$

где $\xi = x \cdot \Delta k_\lambda$.

График функции $\omega(x)$ показан на рис. 4.5. Из рисунка видно, что вероятность местонахождения частицы практически отлична от нуля в области $\Delta \xi \approx 2\pi$. Отсюда $\Delta x \approx 2\pi / \Delta k_\lambda$.

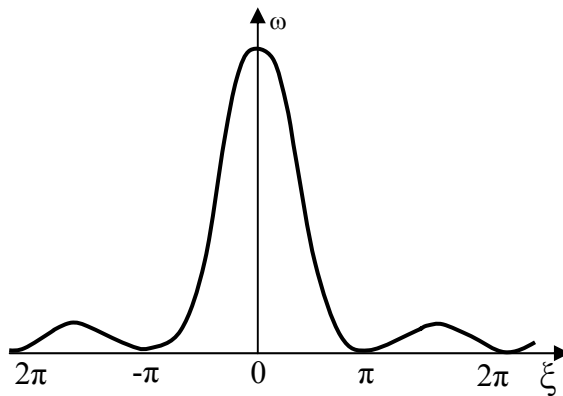


Рис.4.5

Ответ: $\Delta x \approx 2\pi / \Delta k_\lambda$.

Пример 4.2. Найти общую собственную функцию следующих операторов:

а) $\hat{\epsilon}$ и \hat{p}_x ; б) \hat{p}_x, \hat{p}_y и \hat{p}_z ; в) \hat{p}_x и \hat{p}_x^2 .

Решение:

Чтобы операторы имели общую собственную функцию необходимо, чтобы они коммутировали, т.е. их коммутатор должен быть равен нулю (см. 4.6). Исследуем на коммутативность указанные в условии задачи пары операторов.

а)

$$[\hat{\epsilon}, \hat{p}_x] = \hat{\epsilon}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{\epsilon} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)x = i\hbar. \quad (1)$$

Следовательно, операторы $\hat{\epsilon}$ и \hat{p} не имеют общей собственной функции.

б) Найдем коммутаторы второй пары операторов.

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = \hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{p}_x = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\right)\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) = 0, \quad (2)$$

аналогично $[\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0$, $[\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0$.

Таким образом, операторы \hat{p}_x , \hat{p}_y и \hat{p}_z имеют общую собственную функцию. Найдем собственные функции каждого оператора, воспользовавшись соотношением вида (4.4).

$$\hat{p}_x\psi = p_x\psi,$$

где p_x – собственное значение оператора \hat{p}_x .

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x\psi.$$

Решив полученное уравнение, получим собственную функцию оператора \hat{p}_x :

$$\psi_x = C_1 e^{ik_x x}, \quad (3)$$

где $k_x = \frac{p_x}{\hbar}$.

Аналогично получим собственные функции операторов \hat{p}_y и \hat{p}_z , $\psi_y = C_2 e^{ik_y y}$ – для оператора \hat{p}_y и $\psi_z = C_3 e^{ik_z z}$ – для оператора \hat{p}_z $\left(k_y = \frac{p_y}{\hbar}, k_z = \frac{p_z}{\hbar}\right)$. Общая собственная функция должна быть средней функцией всех трех операторов. Поскольку переменные X , Y и Z независимые, то общую собственную функцию можно найти как произведение ψ_x , ψ_y , ψ_z . Поэтому

$$\psi_{o\bar{o}} = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}, \quad A = C_1, C_2, C_3 = const. \quad (4)$$

в) Найдем коммутатор операторов \hat{p}_x и \hat{p}_x^2 :

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_x^2] = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) - \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) = 0.$$

Следовательно, операторы \hat{p}_x и \hat{p}_x^2 имеют общую собственную функцию.

Собственная функция оператора \hat{p}_x согласно (3) — $\psi_x = C_1 e^{ik_x x}$. Найдем собственную функцию оператора \hat{p}_x^2 .

$$\hat{p}_x^2 \psi = p_x^2 \psi,$$

где p_x^2 — собственное значение оператора \hat{p}_x^2 .

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = p_x^2 \psi.$$

Решая полученное уравнение, получим:

$$\psi = C_2 e^{\pm ik_x x}. \quad (5)$$

Общая собственная функция должна удовлетворять двум операторам. Функция (3) является частным случаем функции (5). Поэтому

$$\psi_{об} = C e^{\pm ik_x x}, \text{ где } k_x = \frac{p_x}{\hbar}, \quad C = const.$$

Пример 4.3. Проверить следующие правила коммутации:

$$a) [x, \hat{E}_x] = 0; \quad б) [y, \hat{E}_x] = -i\hbar z; \quad в) [z, \hat{E}_x] = i\hbar y.$$

Решение:

Сравним результаты последовательного действия на некоторую функцию $\psi(x, y, z)$ операторов: а) $x\hat{E}_x$ и $\hat{E}_x x$; б) $y\hat{E}_x$ и $\hat{E}_x y$; г) $z\hat{E}_x$ и $\hat{E}_x z$.

Оператор \hat{L}_x согласно (4.8) имеет явный вид:

$$\hat{E}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

$$a) x\hat{E}_x \psi = -i\hbar x \left(y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right);$$

$$\hat{E}_x (x\psi) = -i\hbar x \left(y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right).$$

Из полученных результатов следует, что $x\hat{E}_x = \hat{E}_x x$, т.е. коммутатор $[x, \hat{E}_x] = 0$.

$$б) y\hat{E}_x\psi = -i\hbar\left(y^2\frac{\partial\psi}{\partial z} - zy\frac{\partial\psi}{\partial y}\right);$$

$$\hat{E}_x(y\psi) = -i\hbar\left(y\frac{\partial(y\psi)}{\partial z} - z\frac{\partial(y\psi)}{\partial y}\right) = -i\hbar\left[y^2\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\left(\psi + y\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\right] = -i\hbar\left[y^2\frac{\partial\psi}{\partial z} - zy\frac{\partial\psi}{\partial y} - z\psi\right].$$

Следовательно:

$$\hat{E}_x(y\psi) = -i\hbar\left(y^2\frac{\partial\psi}{\partial z} - zy\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) + i\hbar z\psi.$$

Тогда $[y, \hat{E}_x] = y\hat{E}_x - \hat{E}_x y = -i\hbar z$.

в) Аналогичным образом легко убедиться, что $[z, \hat{E}_x] = i\hbar y$.

Пример 4.4. Доказать, что если оператор \hat{K} эрмитов, то его собственные значения вещественны.

Решение:

Пусть ψ – произвольная собственная функция оператора \hat{K} , отвечающая его собственному значению A . Условие самосопряженности согласно (4.5) $\psi_1 = \psi_2 = \psi$ записывается в виде:

$$\int \psi^* \hat{K} \psi dV = \int \psi \hat{K}^* \psi^* dV. \quad (1)$$

Если A – есть собственное значение оператора \hat{K} , а A^* – собственное значение оператора \hat{K}^* , то выполняются соотношения:

$$\hat{K}\psi = A\psi \text{ и } \hat{K}^*\psi^* = A^*\psi^*.$$

Тогда из условия (1):

$$A \int \psi^* \psi dV = A^* \int \psi \psi^* dV. \quad (2)$$

Поскольку по условиям нормировки волновой функции (4.1):

$$\int \psi \psi^* dV = 1, \text{ то } A = A^*.$$

Но последнее возможно только при вещественном A .

Пример 4.5. Вычислить средние значения кинетической и потенциальной энергий квантового осциллятора с частотой ω в основном состоянии $\psi(x) = A \exp(-\alpha^2 x^2)$, где $\alpha^2 = \chi / 2\hbar\omega$, χ – силовая постоянная.

Решение:

Средние значения кинетической и потенциальной энергий квантового осциллятора можно найти согласно (4.16) по формулам:

$$\langle T \rangle = \int \psi \hat{T} \psi^* dx; \quad (1)$$

$$\langle U \rangle = \int \psi \hat{U} \psi^* dx. \quad (2)$$

Оператор кинетической энергии имеет вид (4.11), а оператор потенциальной энергии для гармонического осциллятора можно записать в виде:

$$U = (1/2)\chi x^2. \quad (3)$$

Найдем постоянную A из условия нормировки (4.1):

$$\int_0^\infty |\psi|^2 dV = 1, \quad (4)$$

которое применительно к условию настоящей задачи запишется в виде:

$$A^2 \int_{-\infty}^\infty e^{-2\alpha^2 x^2} = 1. \quad (5)$$

Данный интеграл можно легко привести к стандартному виду. Для этого обозначим:

$$t^2 = 2\alpha^2 x^2 \Rightarrow dx = dt / \sqrt{2}\alpha$$

и учтем, что силу четности волновой функции границы интегрирования $[-\infty; +\infty]$ можно заменить на $[0; +\infty]$, увеличив при этом значение интеграла в 2 раза. Тогда интеграл (5) примет вид:

$$\frac{2A^2}{\sqrt{2}\alpha} \int_0^\infty e^{-t^2} dt = 1. \quad (6)$$

Мы имеем интеграл стандартного вида:

$$\int_0^\infty x^n e^{-x^2} dx,$$

который при $n=0$ равен $\sqrt{\pi}/2$. Поэтому из (6) получим:

$$A^2 = \alpha \sqrt{2/\pi}. \quad (7)$$

Запишем явный вид интеграла (1), заменив границы интегрирования $[-\infty; +\infty]$ на $[0; \infty]$:

$$\langle T \rangle = 2 \int_0^\infty e^{-\alpha^2 x^2} \left(-\frac{\pi^2}{2m} \right) \frac{d^2}{dx^2} [A e^{-\alpha^2 x^2}] dx \Rightarrow$$

с учетом (7):

$$\langle T \rangle = -\frac{\pi^2 \alpha \sqrt{2}}{m \sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} \frac{d^2}{dx^2} (e^{-\alpha^2 x^2}) dx. \quad (8)$$

После дифференцирования получим:

$$\langle T \rangle = -\frac{\pi^2 \alpha^3 2\sqrt{2}}{m \sqrt{\pi}} \left[\int_0^{\infty} e^{-2\alpha^2 x^2} dx - 2\alpha^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx \right].$$

Произведем замену переменной:

$$t = \sqrt{2}\alpha x, \quad dx = dt / \sqrt{2}\alpha.$$

Тогда

$$\langle T \rangle = \frac{\pi^2 \alpha^3 2\sqrt{2}}{m \sqrt{\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \int_0^{\infty} e^{-t^2} dt - \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \int_0^{\infty} t^2 e^{-t^2} dt \right]. \quad (9)$$

Табличные значения 1-го и 2-го интегралов равны:

$$\int_0^{\infty} e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi} / 2, \quad \int_0^{\infty} t^2 e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi} / 4. \quad (10)$$

Учитывая значения интегралов (10) получим:

$$\langle T \rangle = \frac{2\pi^2 \alpha^2}{m \sqrt{\pi}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{\sqrt{\pi}}{4} \right) = \frac{\pi^2 \alpha^2}{2m}.$$

По условиям задачи:

$$\alpha^2 = \chi / 2\pi\omega,$$

χ — силовая постоянная.

С учетом данного условия:

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2 \chi}{4m\hbar\omega} \Rightarrow |\omega^2 = \chi / m| \Rightarrow \langle T \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}. \quad (12)$$

Рассмотрим выражение (2), для среднего значения потенциальной энергии осциллятора.

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= 2 \int_0^{\infty} A e^{-\alpha^2 x^2} \left(\frac{\chi x^2}{2} \right) A e^{-\alpha^2 x^2} dx \Rightarrow \\ \langle U \rangle &= \frac{\chi \alpha \sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\alpha^2 x^2} dx. \end{aligned} \quad (13)$$

Произведя замену переменной подобно предыдущим случаям:

$$x = t / \alpha \sqrt{2}; \quad x^2 = t^2 / 2\alpha^2,$$

получим интеграл табличного вида (10).

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \frac{1}{2\alpha^2} \frac{\chi \alpha \sqrt{2}}{\sqrt{\pi} \alpha \sqrt{2}} \int_0^\infty t^2 e^{-t^2} dt \Rightarrow \\ \langle U \rangle &= \frac{\chi}{8\alpha^2} \Rightarrow \langle U \rangle = \frac{\hbar \omega}{4}. \end{aligned} \quad (14)$$

Из полученных результатов для среднего значения кинетической (12) и потенциальной (14) энергий следует, что они равны между собой, а их сумма равна значению полной энергии гармонического осциллятора в основном состоянии ($\hbar \omega / 2$).

$$\text{Ответ: } \langle T \rangle = \langle U \rangle = \hbar \omega / 4.$$

Пример 4.6. Частица в одномерном потенциальном ящике находится в основном состоянии. Какова вероятность P нахождения частицы: 1) в средней трети ящика; 2) в крайней трети ящика?

Решение:

Для того, чтобы найти вероятность нахождения частицы с определенной области пространства, необходимо знать явный вид волновой функции. Исходя из (4.19б), волновая функция, описывающая основное ($n = 1$) состояние частицы в потенциальном ящике (бесконечно глубокой потенциальной яме), имеет вид:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(\pi x / l).$$

В соответствии со статистическим смыслом квадрата модуля волновой функции вероятность нахождения частицы можно найти с использованием формулы (4.1).

1) Тогда для области $l/3 < x < 2l/3$ получим:

$$P_1 = \int_{l/3}^{2l/3} |\psi|^2 dx = \frac{2}{l} \int_{l/3}^{2l/3} \sin^2(\pi n x / l) dx = \left(\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \right) = 0,61.$$

2) Для области $2l/3 < x < l$:

$$P_2 = \int_{2l/3}^l |\psi|^2 dx = \frac{2}{l} \int_{2l/3}^l \sin^2(\pi n x / l) dx = \left(\frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \right) = 0,195.$$

Ответ: 1) $P_1 = 0,61$; 2) $P_2 = 0,195$.

Пример 4.7. Электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы l такова, что энергетические уровни расположены весьма густо. Найти плотность уровней dN/dE , т.е. их число на единичный интервал энергии, в зависимости от E . Вычислить dN/dE для $E = 1,0$ эВ, если $l = 1,0$ см. Оценить интервал между соседними уровнями энергии и сравнить его со средней энергией теплового движения при температуре жидкого гелия.

Решение:

Воспользуемся формулой (4.19,а) для энергии частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2l^2 m}. \quad (1)$$

Продифференцируем (1) по n :

$$dE = \frac{\hbar^2 \pi^2 n dn}{2l^2 m} = 2E \frac{dn}{n}. \quad (2)$$

Из выражения (2) найдем $\frac{dN}{dE}$:

$$\frac{dN}{dE} \equiv \frac{dn}{dE} = \frac{n}{2E} = \frac{l}{\hbar \pi} \sqrt{\frac{2m}{E}}. \quad (3)$$

Вычислим $\frac{dN}{dE}$ для $E = 1,0$ эВ и $l = 1,0$ см.

Получим:

$$\frac{dN}{dE} = 0,8 \cdot 10^7 \text{ уровней/эВ}.$$

Значение интервала δE энергии между соседними уровнями можно оценить как

$$\delta E = 1/(dN/dE).$$

В результате расчетов получим:

$$\delta E = 1,25 \cdot 10^{-7} \text{ эВ}.$$

Среднюю энергию теплового движения частиц можно оценить по формуле:

$$\langle E \rangle = 3/2 kT,$$

где k – постоянная Больцмана.

Приняв $T = 4,2$ К, после расчетов получим:

$$\langle E \rangle = 1,1 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}.$$

Полученный результат показывает, что, если область локализации электрона составляет 1 см, то даже при температуре жидкого гелия средняя энергия теплового движения значительно больше, чем интервал энергии между соседними уровнями энергии электрона.

Ответ: $\frac{dN}{dE} = \frac{l}{\hbar\pi} \sqrt{\frac{2m}{E}}$, $0,8 \cdot 10^7$ уровней/эВ.

Пример 4.8. Частица находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками $0 < x < a$, $0 < y < b$. Определить вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области $0 < x < a/3$, $0 < y < b/3$.

Решение:

Запишем уравнение Шредингера (4.14) для случая, когда частица находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками.

$$\psi''_{xx} + \psi''_{yy} + k^2\psi = 0, \quad (1)$$

$$k = \sqrt{2mE} / \hbar. \quad (2)$$

Его решение ищем в виде:

$$\psi(x, y) = A \sin(k_1 x) \sin(k_2 y). \quad (3)$$

Т.к. при $x=0$ и $y=0$, то волновая функция должна обращаться в нуль, возможные значения k_1 и k_2 находим из граничных условий:

$$\psi(a, y) = 0 \Rightarrow k_1 = n_1 \pi a, \quad n_1 = 1, 2, \dots$$

$$\psi(x, b) = 0 \Rightarrow k_2 = n_2 \pi b, \quad n_2 = 1, 2, \dots$$

Найдем A , из условий нормировки (4.2), которое в данном случае запишется в виде:

$$A^2 \int_0^a \int_0^b \sin^2(n_1 \pi x / a) \sin^2(n_2 \pi y / b) dx dy = 1.$$

После решения данного интеграла получим:

$$A = \sqrt{4/ab}. \quad (3)$$

С учетом (3) функция (2) примет вид:

$$\psi(x, y) = \sqrt{4/ab} \sin(n_1 \pi x / a) \sin(n_2 \pi y / b).$$

Тогда в соответствии с (4.1) вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области $0 < x < a/3$, $0 < y < b/3$ найдем по формуле:

$$P = \int_0^{a/3} \int_0^{b/3} |\psi|^2 dx dy .$$

$$P = \sqrt{\frac{4}{ab}} \int_0^{a/3} \int_0^{b/3} \sin^2(\pi x/a) \sin^2(\pi y/a) dx dy = \left(\frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \right)^2 = 0,038 .$$

Ответ: $P = 0,038$.

Пример 4.9. Найти волновую функцию и уровни энергии стационарных состояний частицы массой m , локализованной в симметричной одномерной потенциальной яме прямоугольной формы, глубина которой равна U_0 , а ширина $2a$. (рис.4.6).

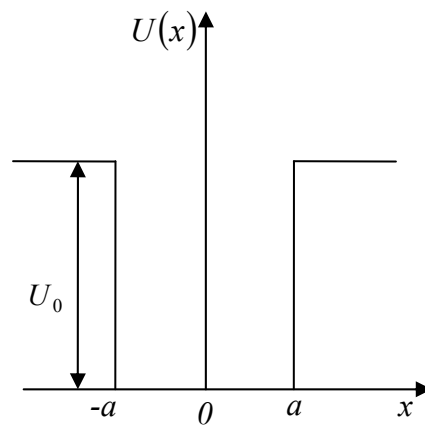


Рис 4.6

Решение:

Воспользуемся стационарным уравнением Шредингера:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 . \quad (1)$$

Данное уравнение для связанных состояний внутри ямы удобно записать в виде:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 , \quad (2)$$

а вне ямы в виде:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0 . \quad (3)$$

В (2) и (3) введены обозначения:

$$k = +\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \alpha = +\sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Здесь, как видим, мы посчитали величины k и α существенно положительными. Общее решение уравнения (2) имеет вид:

$$\psi = A \cos kx + B \sin kx. \quad (4)$$

Общее решение уравнения (4), удовлетворяющее условиям на бесконечности $x = \pm\infty$, будет:

$$\psi = Ce^{-\alpha x} \text{ при } x > a; \quad (5)$$

$$\psi = De^{\alpha x} \text{ при } x < -a. \quad (6)$$

Из соображений симметрии следует, что плотность вероятности $|\psi|^2$ должна быть симметричной функцией x относительно начала координат. Следовательно, должно быть $C^2 = D^2$, т.е. возможны два случая: $C = D$ и $C = -D$. Постоянные A , B , C и D надо выбрать так, чтобы на краях ямы функция ψ и ее производная $d\psi/dx$ были непрерывны. На границе $x = +a$ это дает:

$$A \cos ka + B \sin ka = Ce^{-\alpha a}, \quad (7)$$

$$-kA \sin ka + kB \cos ka = \alpha Ce^{-\alpha a}, \quad (8)$$

а на границе $x = -a$

$$A \cos ka - B \sin ka = De^{-\alpha a}, \quad (9)$$

$$kA \sin ka + kB \cos ka = \alpha De^{-\alpha a}. \quad (10)$$

Отсюда последовательно суммируя (7) и (9), вычитая из (10) (8), вычитая из (7) (9), суммируя (8) и (10) получим:

$$2A \cos ka = (C + D)e^{-\alpha a}; \quad 2kA \sin ka = \alpha(D - C)e^{-\alpha a}; \quad (11)$$

$$2B \sin ka = (C - D)e^{-\alpha a}; \quad 2kB \cos ka = \alpha(C + D)e^{-\alpha a}; \quad (12)$$

Если $A \neq 0$ и $C = D$, то

$$k \operatorname{tg} ka = \alpha. \quad (13)$$

Если же $B \neq 0$ и $C = -D$, то

$$k \operatorname{ctg} ka = -\alpha. \quad (14)$$

Эти условия не могут быть удовлетворены одновременно, так как в противном случае получилось бы $k^2 = -\alpha^2$, а это невозможно ввиду вещественности k и α . Решение, когда все коэффициенты A , B , C , D равны нулю, физического смысла не имеет. Таким образом, все возможные решения разделяются на два класса: решения с

четной волновой функцией, когда $A \neq 0$, $B = 0$, $C = D$ и решения с нечетной волновой функцией, когда $A = 0$, $B \neq 0$, $C = -D$. Уровни энергии найдутся путем графического или численного решения уравнения (13) или уравнения (14), в которых положительные величины k и α определяются выражениями (4).

Для графического решения введем безразмерные величины:

$$\xi = ak, \quad \eta = a\alpha. \quad (15)$$

Тогда

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}. \quad (16)$$

Уравнение (16) представляет собой уравнение окружности.

Для решений с четной волновой функцией:

$$\eta = \xi \operatorname{tg} \xi, \quad (17,a)$$

а для решений с нечетной волновой функцией:

$$\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi. \quad (17,б)$$

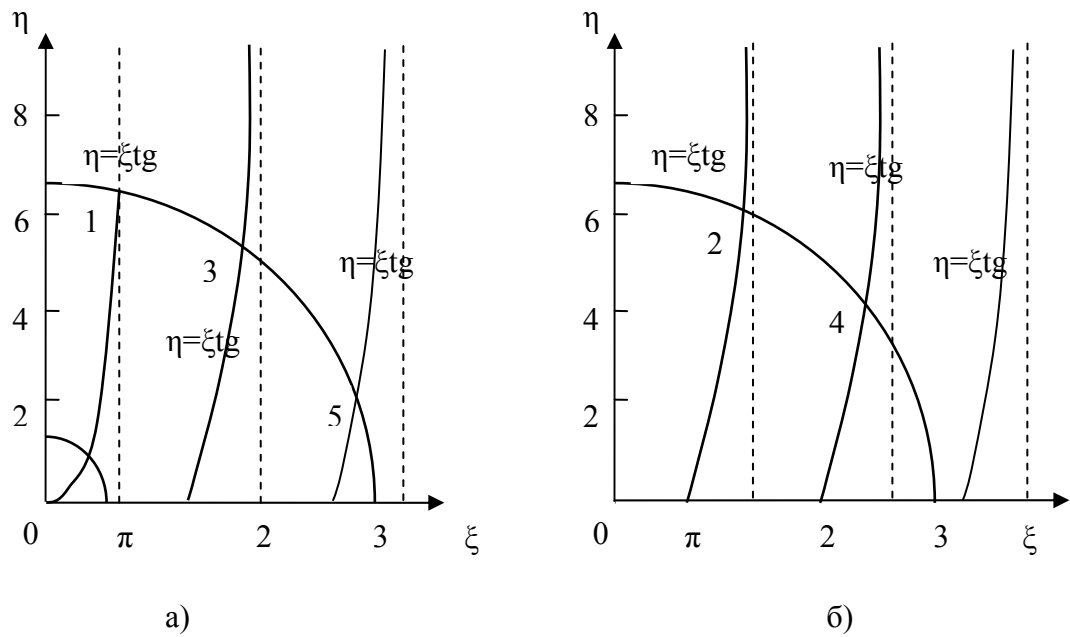


рис. 4.7

На рис. 4.7,а построены кривые $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$, на рис. 4.7,б – кривые $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$. Вертикальными пунктирными линиями изображены асимптоты этих кривых. Ввиду положительности ξ и η нужны только участки этих кривых, расположенные в положительном квадрате ($\xi > 0$, $\eta > 0$). Пересечем эти кривые окружностью (16), радиус которой $(\alpha/\hbar)\sqrt{2mU_0}$ должен считаться известным. Координаты точек

пересечения этой окружности с кривыми (17,а) и (17,б) дадут возможные значения ξ и η . После этого по формулам (4) легко найти значения E . Число уровней всегда конечно и определяется глубиной U_0 и шириной $2a$ потенциальной ямы. Например, если радиус окружности равен 7, то получается пять уровней. Точкам пересечения 1, 3, 5 соответствуют четные, а точкам 2, 4 – нечетные волновые функции. Если $0 \leq U_0 a^2 \leq \hbar^2 \pi^2 / 8m$, то имеется только одна точка пересечения, которой соответствует четная волновая функция.

Следует еще раз подчеркнуть, что в симметрической одномерной яме при любой ее глубине и ширине всегда есть хотя бы один уровень, отвечающий четной ψ – функции. Аналогично обстоит дело в двухмерном случае. Принципиально по-другому обстоит дело в случае трехмерной потенциальной прямоугольной ямы, где уровень есть не всегда.

Приведем также второй способ решения задачи.

Рассмотрим четное решение (13):

$$ktgka = \alpha ,$$

откуда:

$$1 + tg^2 ka = \frac{\alpha^2 + k^2}{k^2} ;$$

$$\frac{1}{\cos^2 ka} = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} \frac{1}{(ka)^2} ; |\cos ka| = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}} ka .$$

При этом (т.к. $tgka > 0$) годятся те четверти, где $\sin ka > 0$ и $\cos ka > 0$.

Для нечетного решения получаем $|\sin ka| = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}} ka$ и т.к. $ctgka < 0$, то годятся

те четверти, где $\sin ka$ и $\cos ka$ имеют разные знаки. Графическое решение полученных уравнений изображено на рис. 4.8, 4.9.

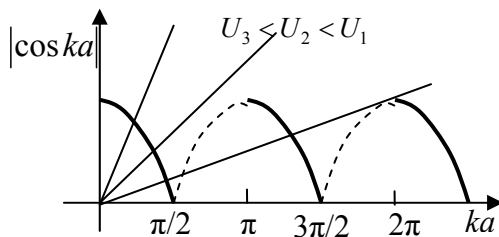


рис. 4.8

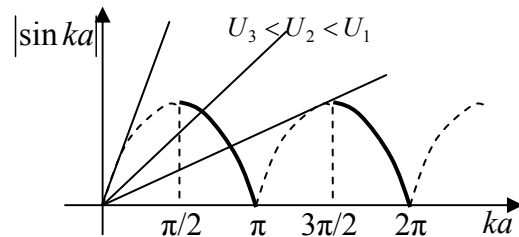


рис.4.9

Видно, что в зависимости от величины U_0 (при данном a) или a (при данном U_0) в случае четной ψ -функции хотя бы одно решение есть всегда! Это будет иметь место при $\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}} < \frac{1}{\pi/2} = \frac{2}{\pi}$ или $U_0a^2 < \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$. При дальнейшем уменьшении U_0 уровень поднимается к потолку ямы, но из ямы не выходит (рис. 4.10)!

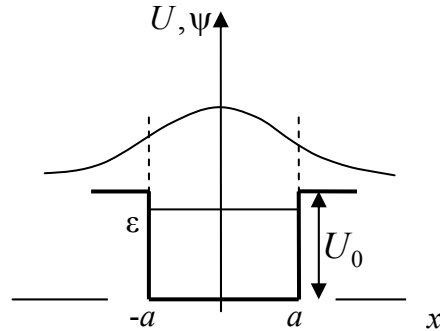


рис. 4.10

Пример 4.10. Частица массы m движется слева направо в потенциальном поле (рис.4.11), которое в точке $x=0$ испытывает скачок U_0 . Слева от точки $x=0$ энергия частицы равна E . Найти коэффициент отражения R для случаев:

- а) $E \ll |U_0|$;
- б) $E \gg |U_0|$.

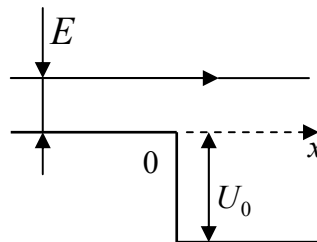


Рис.4.11

Решение:

Коэффициент отражения R для условий данной задачи в соответствии с (4.20) может быть найден по формуле:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad (1)$$

$$\text{где } k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar, \quad k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)} / \hbar. \quad (2)$$

Подставив (2) в (1) получим:

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U/E}}{1 + \sqrt{1 - U/E}} \right)^2. \quad (3)$$

Как следует из рис. 4.11, U_0 является величиной отрицательной, а E – положительной. Поэтому формулу (3) для удобства целесообразно использовать в виде:

$$R = \left(\frac{1}{1 + \sqrt{1 + |U_0|/E}} - \frac{\sqrt{1 + |U_0|/E}}{1 + \sqrt{1 + |U_0|/E}} \right)^2, \quad (4)$$

а) Рассмотрим случай, когда $E \ll |U_0|$. В этом случае можно принять:

$$\sqrt{1 + |U_0|/E} \approx \sqrt{|U_0|/E}.$$

Тогда получим:

$$R = \left(\frac{1}{1 + \sqrt{1 + |U_0|/E}} - \frac{\sqrt{1 + |U_0|/E}}{1 + \sqrt{1 + |U_0|/E}} \right)^2 \approx \left(\frac{1}{\sqrt{|U_0|/E}} - 1 \right)^2 \Rightarrow$$

$$R \approx 1 - 2\sqrt{E/|U_0|}.$$

б) Если $E \gg U_0$, то $R \approx (U_0/4E)^2$.

Ответ: а) если $E \ll |U_0|$, $R \approx 1 - 2\sqrt{E/|U_0|}$; б) если $E \gg U_0$, $R \approx (U_0/4E)^2$.

Пример 4.12. Частица массы m и энергии E движется слева направо в потенциальном поле, в котором имеется прямоугольная потенциальная яма шириной l и глубиной U_0 (рис. 4.12). Найти:

- а) коэффициент прозрачности D ямы для данной частицы;
- б) значение D для электрона при $E = U_0 = 1,0$ эВ, если $l = 0,10$ нм;
- в) значения E , при которых частица будет беспрепятственно проходить через яму.

Убедиться, что это будет происходить при условии, что ширина ямы l равна целому числу дебройлевских полуволен частицы внутри ямы. Вычислить E_{\min} для электрона в случае $U_0 = 10$ эВ и $l = 0,25$ нм.

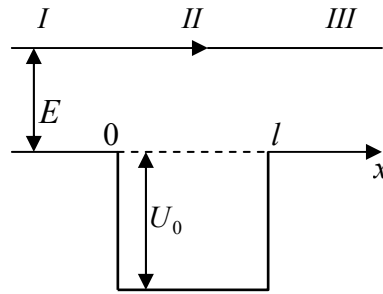


Рис. 4.12.

Решение.

а) Запишем решения уравнения Шредингера для трех областей:

$$x < 0, \quad \psi_1 = a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{2mE} / \hbar.$$

$$0 < x < l, \quad \psi_2 = a_2 e^{ik_0 x} + b_2 e^{-ik_0 x}, \quad k_0 = \sqrt{2m(E - U_0)} / \hbar,$$

$$x > l, \quad \psi_3 = a_3 e^{ikx}.$$

Эти выражения написаны с учетом того, что в I и во II области существуют как падающая, так и отраженная дебройлевские волны, а в области III только проходящая. Поэтому в волновой функции ψ_3 оставлен только один член, соответствующий проходящей волне. Из условия непрерывности ψ и ψ' на границах ямы находим:

$$\frac{a_3}{a_1} = \frac{4kk_0 e^{-ikl}}{(k + k_0)^2 e^{-ik_0 l} - (k - k_0)^2 e^{ik_0 l}},$$

$$D = \left| \frac{a_3}{a_1} \right|^2 = \left(1 + \frac{(k_0^2 - k^2)^2}{4k_0^2 k^2} \sin^2 k_0 l \right)^{-1} = \left(1 + \frac{U_0 \sin^2 k_0 l}{4E(E + U_0)} \right)^{-1}. \quad (1)$$

б) В результате расчетов найдем $D \approx 0,95$.

в) Из условия $D = 1$ следует, что $\sin k_0 l = 0$. Отсюда: $k_0 l = n\pi$, или

$$E = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2ml^2 - U_0.$$

Соотношение $k_0 l = n\pi$ можно представить в виде $2l = n\lambda$, где λ – дебройлевская длина волны частицы внутри ямы. Заметим, что в оптике подобное явление, в основе которого лежит чисто интерференционный эффект погашения волн, отраженных от двух границ раздела, называют *просветлением оптики*.

Произведя численные расчеты, для заданных в условии задачи данных найдем:

$$E_{\min} = 14 \text{ эВ } (n = 2).$$

Ответ: а) $D = \left(1 + \frac{U_0 \sin^2 k_0 l}{4E(E + U_0)}\right)$; б) $D \approx 0,95$; в) $E_{\min} = 14 \text{ эВ} (n = 2)$.

Задачи.

*

4.1. Записать явный вид операторов координат, потенциальной энергии, декартовых проекций импульса и импульса.

4.2. На основе результатов предыдущей задачи получить явный вид операторов кинетической и полной энергии, а также декартовых проекций момента импульса.

4.3. Найти коммутатор операторов $\frac{d}{dx}$ и \mathcal{E} .

4.4. Определить возможные собственные значения операторов проекции волнового числа k_λ .

4.5. Найти собственные значения оператора инверсии \mathcal{P} , действие которого на функцию заключается, как известно, в изменении знака всех декартовых координат. [1]

4.6. Получить явный вид операторов проекций момента импульса в сферических координатах.

4.7. Определить вид собственных функций операторов проекции импульса.

4.8. Написать уравнение Шредингера для электрона, находящегося в водородоподобном атоме. [4]

4.9. Написать уравнение Шредингера для линейного гармонического осциллятора. Учесть, что сила, возвращающая частицу в положение равновесия, $f = -\beta x$ (где β – коэффициент пропорциональности, x – смещение). [4]

4.10. Временная часть уравнения Шредингера имеет вид $(i\hbar/2\pi)d\psi/dt = E\psi$. Найти решение уравнения. [4]

4.11. Частица находится в 1-м возбужденном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме ширины l с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 < x < l$). Найти вероятность пребывания частицы в области $1/3l \leq x \leq 2/3l$. [1]

4.12. Электрону в потенциальном ящике шириной l отвечает волновое число $k = \pi n/l$ ($n = 1, 2, 3, \dots$). Используя связь энергии E электрона с волновым числом k , получить выражение для собственных значений энергии E_n . [4]

4.13. Электрон находится в потенциальном ящике шириной $l = 0,5 \text{ нм}$. Определить наименьшую разность ΔE энергетических уровней электрона. Ответ выразить в электрон-вольтах. [4]

4.14. Собственная функция, описывающая состояние частицы в потенциальном ящике, имеет вид $\psi_n(x) = C \sin(\pi n/l)x$. Используя условия нормировки, определить постоянную C . [4]

4.15. Как изменится волновая функция $\Psi(x,t)$, описывающая стационарные состояния, если изменить начало отсчета потенциальной энергии на некоторую величину ΔU ? [1]

4.16. Найти решение временного уравнения Шредингера для свободной частицы, движущейся с импульсом p в положительном направлении оси X . [1]

4.17. То же, что и в предыдущей задаче, но частица движется с импульсом p в произвольном направлении. [1]

4.18. Оператор \hat{A} коммутирует с операторами \hat{B} и \hat{C} . Можно ли отсюда заключить, что операторы \hat{B} и \hat{C} коммутативны? Заключение обосновать. [1]

4.19. В некотором состоянии ψ_A системы физическая величина A имеет определенное значение. Будет ли в этом состоянии определенное значение также и величины B , если соответствующие им операторы \hat{A} и \hat{B} коммутативны? [1]

4.20. Преобразование инверсии заключается в одновременном изменении знака всех декартовых координат: $x \rightarrow -x'$, $y \rightarrow -y'$, $z \rightarrow -z'$. Записать преобразование инверсии в цилиндрической и сферической системах координат. [1]

**

4.21. Какие из механических величин (энергия E , проекции импульса, проекции и квадрат момента импульса) сохраняются при движении частицы:

- а) в отсутствие поля (свободное движение);
- б) в однородном потенциальном поле $U(z) = az$, где a – постоянная;
- в) в центрально-симметричном потенциальном поле $U(r)$;
- г) в однородном переменном поле $U(z,t) = a(t)z$? [1]

4.22. Вычислить коммутатор $[\hat{p}^n, \hat{x}]$.

4.23. Показать, что энергия свободно движущейся частицы может иметь любые значения (непрерывный спектр). [1]

4.24. Воспользовавшись эрмитовостью оператора \hat{p}_x доказать эрмитовость операторов: а) \hat{p}_x^2 ; б) \hat{H} . [1]

4.25. Доказать, что если операторы \hat{A} и \hat{B} эрмитовы, то операторы $\hat{A} + \hat{B}$ и $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ также эрмитовы. [1]

4.26. В некоторый момент частица находится в состоянии $\psi(x) = A \exp(ik_\lambda x - x^2/a^2)$, где A и a – постоянные. Найти средние значения:

- а) координаты x ;
- б) проекции импульса p_x . [1]

4.27. Проверить следующие правила коммутации:

- а) $[\hat{E}_x, \hat{E}_y] = i\hbar \hat{E}_z$;
- б) $[\hat{E}_y, \hat{E}_z] = i\hbar \hat{E}_x$;
- в) $[\hat{E}_z, \hat{E}_x] = i\hbar \hat{E}_y$. [1]

4.28. С помощью правил коммутации приведенных в предыдущей задаче показать, что оператор \hat{E} коммутирует с операторами \hat{E}_x , \hat{E}_y и \hat{E}_z . [1]

4.29. Найти L_z^2 собственные значения оператора \hat{E}_z , соответствующего собственной функции $Y(\theta, \varphi) = A(\cos \theta + 2 \sin \theta \cos \varphi)$.

4.30. Доказать, что оператор \hat{E}_z эрмитов. Доказательство провести:

- а) в полярных координатах;
- б) в декартовых координатах. [1]

4.31. Определить вероятность возможных собственных значений оператора \hat{E}_z для системы, находящейся в состоянии $\psi(\varphi) = A \sin^2 \varphi$. [1]

4.32. Доказать, что оператор инверсии \hat{P} коммутирует с операторами момента импульса \hat{E}_x , \hat{E}_y , \hat{E}_z и \hat{E} . [1]

4.33. Выяснить, является ли волновая функция, представляющая собой суперпозицию стационарных состояний, $\psi(x, t) = \sum \psi_k(x) \exp(i\omega_k t)$, решением временного и стационарного уравнений Шредингера? [1]

4.34. Показать, что производная по времени от оператора \hat{E}_x равна оператору проекции момента внешних сил, т. е. $\frac{d}{dt} \hat{E}_x = \hat{M}_x = - \left(y \frac{\partial U}{\partial z} - x \frac{\partial U}{\partial y} \right)$. [1]

4.35. В некоторый момент координатная часть волновой функции имеет вид $\psi(x) = A \exp(ikx - x^2/4\sigma^2)$, где A , k , σ – постоянные. Изобразить примерный вид зависимости:

- а) действительной части ψ от x ;
- б) $|\psi|^2$ от x . [1]

4.36. Определить собственные значения и нормированные собственные функции оператора проекции момента импульса в сферических координатах.

4.37. Частица массы m находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками. Показать, что собственные значения энергии частицы и ее нормированные собственные функции ($0 < x < l$) имеют вид:

$$E_n = (\pi^2 \hbar^2 / 2ml^2) n^2, \quad \psi_n(x) = \sqrt{2/l} \sin(\pi n x / l), \quad n = 1, 2, \dots [1]$$

4.38. Непосредственным вычислением убедиться в ортогональности собственных функций оператора \hat{H} для частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками (одномерный потенциальный ящик). [1]

4.39. Частица находится в потенциальном ящике. Найти отношение разности соседних уровней $\Delta E_{n+1,n}$ к энергии E_n частицы в трех случаях: 1) $n=3$; 2) $n=10$; 3) $n \rightarrow \infty$. Пояснить полученные результаты. [4]

4.40. Частица в потенциальном ящике шириной l находится в возбужденном состоянии ($n=2$). Определить, в каких точках интервала ($0 < x < l$) плотность вероятности $|\psi(x)|^2$ нахождения частицы максимальна и минимальна. [4]

4.41. Электрон находится в потенциальном ящике шириной l . В каких точках в интервале ($0 < x < l$) плотность вероятности нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях одинакова? Вычислить плотность вероятности для этих точек. Решение пояснить графически. [4]

4.42. В одномерном потенциальном ящике шириной l находится электрон. Вычислить вероятность P нахождения электрона на первом энергетическом уровне в интервале $l/4$, равноудаленном от стенок ящика. [4]

4.43. Вычислить отношение вероятностей P_1/P_2 нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях в интервале $l/4$, равноудаленном от стенок одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямы шириной l . [4]

4.44. Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Найти:

а) массу частицы, если ширина ямы l и разность энергий 3-го и 2-го энергетических уровней равна ΔE ;

б) квантовое число n энергетического уровня частицы, если интервалы энергии до соседних с ним уровней (верхнего и нижнего) относятся как $R:l$, где $R=1,4$. [1]

4.45. Частица массы m находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Максимальное значение плотности вероятности местонахождения частицы равно P_m . Найти ширину l ямы и энергию E частицы в данном состоянии. [1]

4.46. Найти энергию электрона, при которой он беспрепятственно пройдет над прямоугольным барьером высотой $U = 5 \text{ эВ}$ и шириной $l = 1 \text{ \AA}$. [2]

4.47. Воспользовавшись формулой для коэффициента прозрачности потенциального барьера, найти для электрона с энергией E вероятность D прохождения потенциального барьера, ширина которого l и высота U_0 , если барьер имеет форму, показанную:

а) на рис. 4.13;

б) на рис. 4.14.

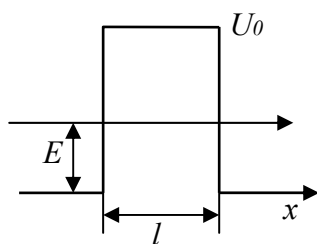


Рис. 4.13

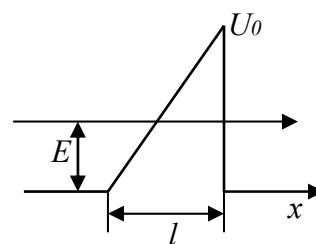


Рис. 4.14

4.48. Частица массы m находится в одномерном симметричном потенциальном поле (рис. 4.15). Найти уравнение, определяющее возможные значения энергии E частицы в области $E < U_0$. Привести его к виду:

$$kl = \pi n - 2 \arcsin(\hbar k / \sqrt{2mU_0}),$$

где $k = \sqrt{2mE} / \hbar$, n – целое число. Показать с помощью графического решения этого уравнения, что возможные значения энергии E частицы дискретны. [1]

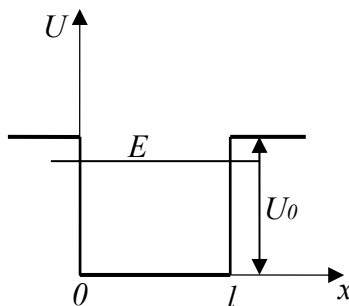


Рис. 4.15

4.49. Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме (рис. 4.16). Найти энергию E_1 основного состояния, если на краях ямы ψ – функция вдвое меньше, чем в середине ямы. [1]

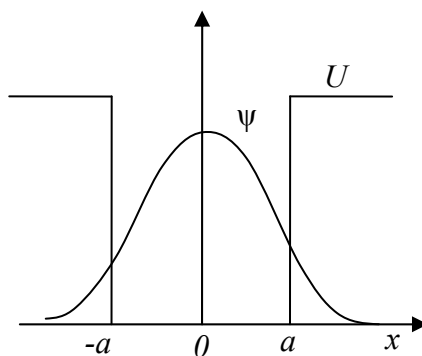


Рис.4.16

4.50. Электрон, находящийся в одномерной потенциальной яме шириной несколько сантиметров и глубиной несколько электрон-вольт, поглощает квант света с частотой $\nu = 1,01\nu_0$, где ν_0 – предельная частота света, при которой электрон может вылететь из ямы. Определить среднее число отражений N от краев ямы, которое испытывает электрон, прежде чем покинет ее. [2]

4.51. Частица массы m падает слева на прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 (рис. 4.17). Энергия частицы равна E , причем $E < U_0$. Найти эффективную глубину $x_{эф}$ проникновения частицы под барьер, т. е. расстояние от границы барьера до точки, в которой плотность вероятности w нахождения частицы уменьшается в e раз. Вычислить $x_{эф}$ для электрона, если $U_0 - E = 1,0$ эВ. [1]

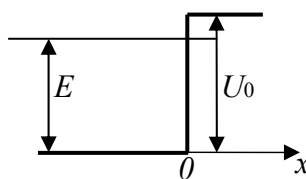


Рис. 4.17

4.52. Частица массы m падает на прямоугольный потенциальный барьер (рис. 4.18), причем ее энергия $E > U_0$. Найти первые два значения E , при которых электрон будет беспрепятственно проходить через такой барьер, если $U_0 = 10,0$ эВ и $l = 0,5$ нм. [1]

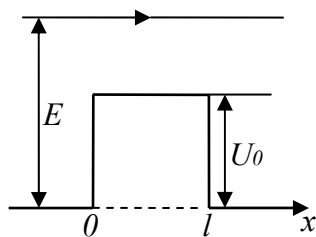


Рис. 4.18

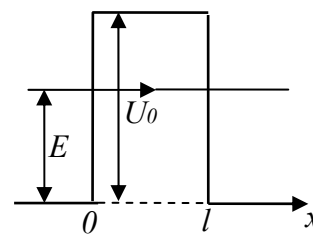


Рис. 4.19

4.53. Частица массы m падает на прямоугольный потенциальный барьер (рис. 4.19), причем ее энергия $E < U_0$. Найти вероятность прохождения электрона и протона с $E = 5,0$ эВ сквозь этот барьер, если $U_0 = 10,0$ эВ и $l = 0,10$ нм. [1]

4.54. Исходя из условия предыдущей задачи и считая, что частицы падают на барьер слева (см. рис. 4.19):

а) изобразить примерный график распределения плотности вероятности $w(x)$ местонахождения частиц;

б) найти отношение плотностей вероятности $\omega(0)/\omega(l)$ местонахождения частиц в точках $x=0$ и l для случая $E = U_0/2$. Вычислить это отношение для электрона, если $l = 0,1$ нм и $U_0 = 10$ эВ. [1]

4.55. В первом приближении маятник можно рассматривать как осциллятор. Определить энергию нулевых колебаний маятника длиной 1 м, находящегося в гравитационном поле Земли.

4.56. Поток электронов падает на экран с двумя щелями 1 и 2 (рис. 4.20). В точке P расположено входное отверстие счетчика. Пусть ψ_1 — амплитуда волны, достигшей точки P , если открыта только щель 1, а ψ_2 — то же, но если открыта только щель 2. Отношение $\psi_2/\psi_1 = \eta = 3,0$. Если открыта только щель 1, счетчик регистрирует $N = 100$ электронов в секунду. Сколько электронов ежесекундно будет регистрировать счетчик, если:

а) открыта только щель 2;

б) открыты обе щели и в точке P наблюдается интерференционный максимум;

в) то же, что в предыдущем пункте, но в точке P — минимум? [1]

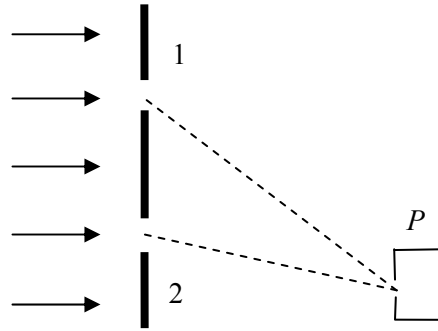


Рис. 4.20

4.57. Найти с помощью уравнения Шредингера энергию гармонического осциллятора с частотой ω в стационарном состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(x) = A \exp(-a^2 x^2)$, где A и a – постоянные. [1]

4.58. Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора с частотой ω может быть приведено к виду $\psi''_{\xi} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0$, где $\xi = \alpha x$, α – постоянная, λ – параметр. Имея в виду, что собственные значения параметра λ равны $2n+1$, где $n = 0, 1, 2$, найти собственные значения энергии осциллятора. [1]

4.59. Вычислить нормировочные коэффициенты A_0 , A_1 и A_2 собственных функций квантового гармонического осциллятора:

$$\psi_0 = A_0 \exp(-\alpha^2 x^2 / 2), \quad \psi_1 = A_1 x \exp(-\alpha^2 x^2 / 2), \\ \psi_2 = A_2 (2\alpha^2 x^2 - 1) \exp(-\alpha^2 x^2 / 2).$$

4.60. Найти наиболее вероятное значение координаты x квантового гармонического осциллятора в состоянии $\psi_1(x)$. Изобразить примерный график распределения плотности вероятности $w(x)$ различных значений x в этом состоянии. [1]

4.61. Атом находится в четном состоянии $l=0$. Пусть энергетически возможен распад этого атома на свободный электрон и ион, остающийся в нечетном состоянии с тем же значением $l=0$. Показать, что закон сохранения четности запрещает такой процесс. [1]

4.62. Определить среднее значение физической величины, описываемой оператором \hat{E}_z в состоянии $\psi(\varphi) = A \sin^2 \varphi$. [1]

4.63. Система находится в состоянии, описываемом нормированной волновой функцией $\psi(x)$, которую можно разложить по собственным функциям эрмита оператора A , т. е. $\psi(x) = \sum c_k \psi_k(x)$. Считая функции ψ_k нормированными на единицу:

а) получить выражение, определяющее коэффициенты c_k ;

б) показать, что среднее значение физической величины $\langle A \rangle = \sum A_k |c_k|^2$, где A_k – собственные значения оператора \hat{A} . Какой физический смысл величин $|c_k|^2$? [1]

4.64. Согласно теореме Эренфеста, средние значения механических величин подчиняются законам классической механики. Доказать, что при движении частицы в потенциальном поле $U(x)$: а) $\langle dx/dt \rangle = \langle p_x \rangle / m$; б) $\langle dp_x/dt \rangle = -\langle \partial U / \partial x \rangle$. [1]

4.65. В одномерном потенциальном ящике шириной b находятся N электронов. Определить минимальное значение полной энергии E_{\min} и силу F давления электронов на стенки ямы. Взаимодействием электронов пренебречь. [2]

4.66. Частица массы m находится в основном состоянии в одномерной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками. Найти:

а) силу давления, которую оказывает частица на стенку;

б) работу, которую необходимо совершить, чтобы медленно сжать яму в $\eta=3$ раза. [1]

4.67. Найти среднюю кинетическую энергию частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 < x < l$), если частица находится в состоянии: а) $\psi(x) = A \sin^2(\pi x/l)$; б) $\psi(x) = Ax(l-x)$. [1]

4.68. Стационарный поток частиц, имеющих массу m и энергию E , падает на абсолютно непроницаемую стенку (рис.4.21): $U(x)=0$ при $x>0$ и $U(x)\rightarrow\infty$ при $x\leq 0$. Определить распределение $w(x)$ плотности вероятности местонахождения частиц. Найти координаты точек, в которых $w(x)$ максимально. Изобразить примерный график зависимости $w(x)$. [1]

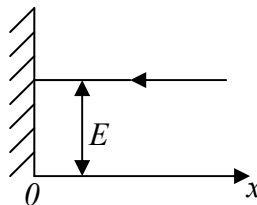


Рис. 4.21

4.69. Частица массы m находится в одномерном потенциальном поле $U(x)$, показанном на рис. 4.22, где $U(0)=\infty$. Найти:

а) уравнение, определяющее возможные значения энергии частицы в области $E < U_0$; привести его к виду $\sin kl = \pm kl \sqrt{\hbar^2 / 2ml^2 U_0}$, $k = \sqrt{2mE} / \hbar$. Показать с помощью графического решения этого уравнения, что возможные значения энергии частицы образуют дискретный спектр;

б) минимальные значения величины $l^2 U_0$, при которых появляются первый и k -й дискретные уровни. Сколько уровней содержит яма, у которой $l^2 U_0 = 75 \hbar^2 / m$? [1]

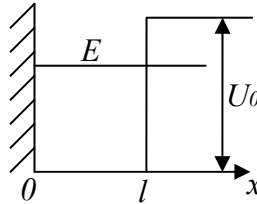


Рис. 4.22

4.70. В предыдущей задаче энергия единственного уровня $E = U_0 / 2$. Воспользовавшись решением этой задачи, определить:

- а) значение величины $l^2 U_0$ у такой ямы;
- б) наиболее вероятное значение координаты частицы; изобразить примерный график функции $\psi^2(x)$. [1]

4.71. Найти глубину ямы и энергию ионизации E_i электрона (в эВ), находящегося в основном состоянии в одномерной яме, показанной на рис.4.22, шириной $l = 0,2$ нм, если известно, что отношение значения волновой функции на границе ямы ($x = l$) к ее максимальному значению в яме равно $\alpha = \sqrt{3} / 2$. [2]

4.72. Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме, где $U(\pm l) = \infty$. Показать, что при $E > U_0$ уравнение, определяющее возможные значения энергии E , имеет вид: $k_2 \operatorname{tg} k_1 l = -k_1 \operatorname{tg} k_2 l$, где $k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar$, $k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)} / \hbar$. [1]

4.73. Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме, описанной в предыдущей задаче (см. рис.4.23). Если энергия частицы $E < U_0$, то уравнение, определяющее возможные значения E , имеет вид: $\chi \operatorname{tg} kl = -k \operatorname{th} \chi l$, где $\chi = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar$, $k = \sqrt{2mE} / \hbar$.

- а) Получить это уравнение.
- б) Найти интервал значений величины $l^2 U_0$, при которых в области $E < U_0$ не будет ни одного уровня и будет только один уровень. [1]

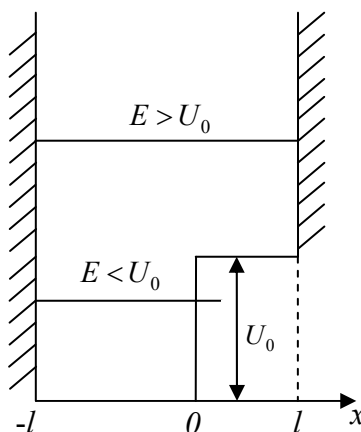


Рис. 4.23

4.74. Воспользовавшись решением задачи 48, найти значение величины $l^2 U_0$, при котором:

- а) энергия основного состояния частицы $E = U_0 / 2$;
- б) появляется второй уровень, n -й уровень. Сколько дискретных уровней содержит данная яма, если $l^2 U_0 = 75 \hbar^2 / m$? [1]

4.75. Частица массы m находится в двумерной квадратной яме с бесконечно высокими стенками. Сторона ямы равна l . Найти значения энергии E частицы для первых четырех уровней. [1]

4.76. Частица массы m находится в основном состоянии в двумерной квадратной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Найти энергию E частицы, если максимальное значение плотности вероятности местонахождения частицы равно P_m . [1]

4.77. Электрон, введенный в жидкий гелий, расталкивает атомы жидкости и образует в ней сферическую вакуумную полость, которая является для электрона потенциальной ямой с практически бесконечно высокой стенкой. Вычислить радиус полости, если поверхностное натяжение жидкого гелия равно $0,35 \text{ дин/см}$, а электрон занимает в полости самый низкий квантовый уровень. Внешнее давление считать равным нулю. [2]

4.78. В 1920г. Рамзауэр обнаружил, что в сечении рассеяния σ_s медленных электронов на атомах криптона имеется глубокий минимум (резко увеличивается проницаемость атомов) при энергии $E = 0,6 \text{ эВ}$. Этот эффект обусловлен волновыми свойствами электронов. Считая, что для электрона потенциал атома является одномерной прямоугольной ямой глубиной $U = 2,5 \text{ эВ}$, оценить радиус атома криптона. [2]

4.79. Найти с помощью формулы для коэффициента прозрачности потенциального барьера вероятность D прохождения частицы массой m с энергией E сквозь потенциальный барьер (рис. 4.24), где $U(x) = U_0(1 - x^2/l)$. (Такая модель реально отражает барьер деления тяжелых ядер)

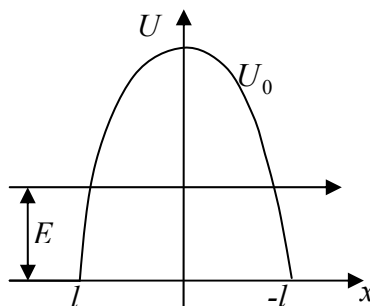


Рис. 4.24

4.80. Считая, что нуклоны в ядре находятся в трехмерном потенциальном ящике кубической формы с линейными размерами $l = 10 \text{ фм}$, оценить низший энергетический уровень нуклонов в ядре. [4]

4.81. В 1988г. появилось сенсационное сообщение об осуществлении холодного ядерного синтеза дейтерия, растворенного в металлическом палладии. Можно считать, что при этом ядра дейтерия взаимодействуют друг с другом по закону Кулона, если расстояние между ними r удовлетворяет условию $R_1 = 2 \cdot 10^{-13} \text{ см} < r \leq 5 \cdot 10^{-9} \text{ см} = R_2$. При большем расстоянии энергия электрического отталкивания $U = 0$ за счет экранирования электронами проводимости. Определить вероятность реакции синтеза $D + D$ при столкновении дейтронов внутри палладия при комнатной температуре за счет туннельного эффекта. Считать, что при $r < R_1$ реакция синтеза происходит. [2]