становке функций (21,10) в нормировочный интеграл считаем импульсы p и p' сколь угодно близкими; поэтому можно положить $\delta = \delta'$ (δ является, вообще говоря, функцией p). Далее, в подынтегральном выражении оставляем лишь те члены, которые при $p = p'$ расходятся; другими словами, опускаем члены, содержащие множители $e^{\pm i(k+k')x}$. Таким образом, получаем

$$\int \psi_p^* \psi_{p'}\, dx = \int_0^\infty e^{i(k'-k)x}\, dx + \int_0^\infty e^{-i(k'-k)x}\, dx = \int_{-\infty}^\infty e^{i(k'-k)x}\, dx,$$

что в силу (15,7) совпадает с (21,9).

Переход к нормировке на δ-функцию от энергии совершается, согласно (5,14), умножением ψ_p на

$$\left(\frac{d(p/2\pi\hbar)}{dE}\right)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v}},$$

где v — скорость частицы на бесконечности. Таким образом,

$$\psi_E = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v}}\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v}}\left(e^{i(kx+\delta)} + e^{-i(kx+\delta)}\right). \qquad (21,11)$$

заметим, что плотность потока в каждой из двух бегущих волн, на которые разделяется стоячая волна (21,11), равна $1/2\pi\hbar$. Таким образом, можно сформулировать следующее правило для нормировки волновой функции инфинитного в одну сторону движения на δ-функцию от энергии: представив асимптотическое выражение волновой функции в виде суммы двух бегущих противоположные стороны плоских волн, надо выбрать нормировочный коэффициент таким образом, чтобы плотность потока в волне, бегущей по направлению к началу координат (или в направлении от начала координат), была равна $1/2\pi\hbar$.

Аналогичным образом можно получить такое же правило для нормировки волновых функций движения, инфинитного в обе стороны. Волновая функция будет нормирована на δ-функцию от энергии, если сумма потоков в волнах, бегущих по направлению к началу координат с положительной и отрицательной сторон оси x, равна $1/2\pi\hbar$.

§ 22. Потенциальная яма

В качестве простого примера одномерного движения рассмотрим движение в прямоугольной *потенциальной яме*, т. е. в поле с функцией $U(x)$, изображенной на рис. 1: $U(x) = 0$ при $0 < x < a$, $U(x) = U_0$ при $x < 0$, $x > a$. Заранее очевидно, что при $E < U_0$ спектр будет дискретным, а при $E > U_0$ имеется непрерывный спектр двукратно вырожденных уровней.

В области $0 < x < a$ имеем уравнение Шредингера

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \tag{22,1}$$

(штрих означает дифференцирование по x), а в области вне ямы

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0. \tag{22,2}$$

При $x = 0$, a решения этих уравнений должны переходить друг в друга непрерывно и с непрерывной производной, а при $x = \pm\infty$ решение уравнения (22,2) должно оставаться конечным (для дискретного спектра, $E < U_0$ — обращаться в нуль).

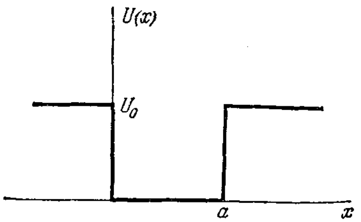

Рис. 1

При $E < U_0$ обращающееся на бесконечности в нуль решение уравнения (22,2) есть

$$\psi = \mathrm{const} \cdot e^{\mp\varkappa x},$$

$$\varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)} \tag{22,3}$$

(знаки — и + в показателе относятся соответственно к областям $x > a$ и $x < 0$). Вероятность $|\psi|^2$ нахождения частицы экспоненциально затухает в глубь области, в которой $E < U(x)$. Вместо непрерывности ψ и ψ' на границе потенциальной ямы удобно потребовать непрерывности ψ и логарифмической производной ψ'/ψ. Учитывая (22,3), получаем граничное условие в виде

$$\frac{\psi'}{\psi} = \mp\varkappa. \tag{22,4}$$

Мы не станем останавливаться здесь на определении уровней энергии в яме произвольной глубины U_0 (см. задачу 2) и разберем полностью только предельный случай бесконечно высоких стенок ($U_0 \to \infty$).

При $U_0 = \infty$ движение происходит лишь на ограниченном точками $x = 0$, a отрезке, и, как было указано в § 18, граничное условие в этих точках

$$\psi = 0. \tag{22,5}$$

(Легко видеть, что это условие получается и из общего условия (22.4). Действительно, при $U_0 \to \infty$ имеем также и $\varkappa \to \infty$ и потому $\psi'/\psi \to \infty$; поскольку ψ' не может обращаться в бесконечность, то отсюда следует $\psi = 0$.) Ищем решение уравнения (22,1) внутри ямы в виде

$$\psi = c\sin(kx + \delta), \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{22,6}$$

Условие $\psi = 0$ при $x = 0$ дает $\delta = 0$, после чего то же условие при $x = a$ дает $\sin ka = 0$, откуда $ka = n\pi$ (n — целые положительные числа, начиная с единицы [1])) или

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{22,7}$$

Этим определяются уровни энергии частицы в потенциальной яме. Нормированные волновые функции стационарных состояний —

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x. \tag{22,8}$$

На основании этих результатов можно непосредственно написать уровни энергии для частицы в прямоугольном «потенциальном ящике», т. е. для трехмерного движения в поле с потенциальной энергией $U = 0$ при $0 < x < a$, $0 < y < b$, $0 < z < c$ и $U = \infty$ вне этой области. Именно, эти уровни представляются суммами

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots, \tag{22,9}$$

а соответствующие волновые функции — произведениями

$$\psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi n_1}{a} x \cdot \sin \frac{\pi n_2}{b} y \cdot \sin \frac{\pi n_3}{c} z. \tag{22,10}$$

Отметим, что энергия основного состояния оказывается, согласно (22,7) или (22,9), порядка $E_0 \sim \hbar^2/ml^2$, где l — линейные размеры области движения частицы. Этот результат находится в соответствии с соотношениями неопределенности: при неопределенности координаты $\sim l$ неопределенность импульса, а с нею и порядок величины самого импульса $\sim \hbar/l$; соответствующая энергия $\sim(\hbar/l)^2/m$.

Задачи

1. Определить распределение вероятности различных значений импульса для нормального состояния частицы, находящейся в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме.

Решение. Коэффициенты $a(p)$ разложения функции ψ_1 (22,8) по собственным функциям импульса равны

$$a(p) = \int \psi_p^* \psi_1 dx = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right) e^{-ipx/\hbar}\, dx.$$

---

[1]) При $n = 0$ получилось бы тождественно $\psi = 0$.

Вычислив интеграл и возведя его модуль в квадрат, получим искомое распределение вероятностей

$$|a(p)|^2\frac{dp}{2\pi\hbar}=\frac{4\pi\hbar^3 a}{(p^2a^2-\pi^2\hbar^2)^2}\cos^2\frac{pa}{2\hbar}\,dp.$$

2. Определить уровни энергии для потенциальной ямы, изображенной на рис. 2.

Решение. Дискретным является спектр энергий $E<U_1$, который мы и рассматриваем. В области $x<0$ волновая функция

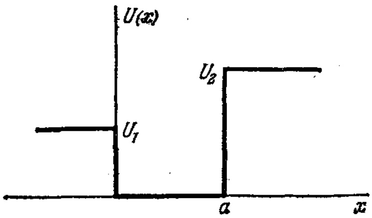

Рис. 2

$$\psi=c_1e^{\varkappa_1 x},\quad \varkappa_1=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_1-E)},$$

а в области $x>a$

$$\psi=c_2e^{-\varkappa_2 x},\quad \varkappa_2=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_2-E)}.$$

Внутри ямы ($0<x<a$) ищем ψ в виде

$$\psi=c\sin(kx+\delta),\quad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Условие непрерывности ψ'/ψ на границах ямы дает уравнения

$$k\operatorname{ctg}\delta=\varkappa_1=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}U_1-k^2},\quad k\operatorname{ctg}(ak+\delta)=-\varkappa_2=-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}U_2-k^2},$$

или

$$\sin\delta=\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_1}},\quad \sin(ka+\delta)=-\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_2}}.$$

Исключая δ, получим трансцендентное уравнение

$$ka=n\pi-\arcsin\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_1}}-\arcsin\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_2}}\tag{1}$$

(где $n=1, 2, 3, \ldots$, а значения arcsin берутся между 0 и $\frac{\pi}{2}$), корни которого определяют уровни энергии $E=k^2\hbar^2/2m$. Для каждого n имеется, вообще говоря, один корень; значения n нумеруют уровни в порядке их возрастания.

Поскольку аргумент у arcsin не может превышать 1, то ясно, что значения k могут лежать только в интервале между 0 и $\sqrt{2mU_1}/\hbar$. Левая сторона уравнения (1) есть монотонно возрастающая, а правая — монотонно убывающая функции k. Поэтому для существования корня уравнения (1) необходимо, чтобы при $k=\sqrt{2mU_1}/\hbar$ правая сторона была меньше левой. В частности, неравенство

$$a\frac{\sqrt{2mU_1}}{\hbar}\geqslant\frac{\pi}{2}-\arcsin\sqrt{\frac{U_1}{U_2}},\tag{2}$$

получающееся при $n=1$, есть условие того, чтобы в яме существовал по крайней мере один уровень энергии. Мы видим, что при данных $U_1\neq U_2$ всегда существуют настолько малые значения ширины a ямы, при которых не будет существовать ни одного дискретного уровня энергии. При $U_1=U_2$ условие (2), очевидно, всегда выполняется.

При $U_1 = U_2 \equiv U_0$ (симметричная яма) уравнение (1) сводится к

$$\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} = \frac{n\pi - ka}{2}. \tag{3}$$

Вводя переменную $\xi = ka/2$, получим при нечетном n уравнение

$$\cos \xi = \pm \gamma\xi, \quad \gamma = \frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{2}{mU_0}}, \tag{4}$$

причем должны браться те корни этого уравнения, для которых $\operatorname{tg} \xi > 0$. При четном n получим уравнение

$$\sin \xi = \pm\gamma\xi, \tag{5}$$

причем надо брать корни, для которых $\operatorname{tg} \xi < 0$. По корням этих двух уравнений определяются уровни энергии $E = 2\xi^2\hbar^2/ma^2$, число уровней (при $\gamma \neq 0$) конечно.

В частности, для мелкой ямы, в которой $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$, имеем $\gamma \gg 1$, и уравнение (5) не имеет корней вовсе. Уравнение же (4) имеет один корень (при верхнем знаке в правой части), равный $\xi \approx \frac{1}{\gamma}\left(1 - \frac{1}{2\gamma^2}\right)$. Таким образом, в яме имеется всего один уровень энергии

$$E_0 \approx U_0 - \frac{ma^2}{2\hbar^2} U_0^2,$$

расположенный вблизи ее «верха».

3. Определить давление, оказываемое на стенки прямоугольного «потенциального ящика» находящейся в нем частицей.

Решение. Сила, действующая на стенку, перпендикулярную к оси x, есть среднее значение производной $-\partial H/\partial a$ от гамильтоновой функции частицы по длине ящика вдоль оси x; давление же получается делением этой силы на площадь bc стенки. Согласно формуле (11,16) искомое среднее значение находится дифференцированием собственного значения энергии (22,9). В результате получим давление

$$p^{(x)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^3bc} n_1^2.$$

§ 23. Линейный осциллятор

Рассмотрим частицу, совершающую одномерные малые колебания (так называемый *линейный осциллятор*). Потенциальная энергия такой частицы равна $m\omega^2x^2/2$, где ω — в классической механике собственная частота колебаний. Соответственно этому, гамильтониан осциллятора

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2x^2}{2}. \tag{23,1}$$

Поскольку потенциальная энергия обращается в бесконечность при $x = \pm\infty$, то частица может совершать лишь финитное движение. В соответствии с этим весь энергетический спектр осциллятора будет дискретным.