

можно понять без учета волновых свойств частиц. Он лежит в основе многих физических процессов: здесь распад и деление ядер, протекание ряда химических реакций, эмиссия электронов из металла и многие другие.

§ 6. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

6.1. Постановка задачи. Гармонический осциллятор — это материальная точка, совершающая гармонические колебания, т. е. колебания, в которых смещение точки из положения равновесия изменяется по закону синуса и косинуса. Ясно, что такое кинематическое определение непригодно в квантовой области, где нельзя указать точного положения микрочастицы в пространстве. Более общим определением гармонического осциллятора, пригодным и в микромире, является динамическое определение.

Классический осциллятор — это материальная точка, движущаяся в силовом поле, в котором потенциальная энергия имеет минимум, как, например, на рисунке 6.1. В таком случае (см. ч. I, § 26) малые отклонения частицы от точки устойчивого равновесия — минимума — приводят к гармоническим колебаниям. Приближенное значение потенциальной энергии, принимаемое в одномерном случае в расчет, следующее:

$$U = \frac{kx^2}{2}, \quad (6.1)$$

где $k > 0$ — коэффициент квазиупругой силы.

Квантовый осциллятор — это частица, движущаяся в потенциальном поле с минимумом энергии. Если полная энергия частицы E — величина малая, то потенциальную энергию можно выразить формулой (6.1). Коэффициент k удобно выразить через циклическую частоту колебаний: $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$. В таком случае вместо (6.1) имеем

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Последняя формула и определяет постановку задачи о квантовом гармоническом осцилляторе: это микрочастица, находящаяся в потенциальном поле вида (6.1).

Гармонические колебания играют очень важную роль в классической физике. Не менее важное значение имеет задача о гармоническом осцилляторе и в квантовой физике, где также говорят о гармонических колебаниях. Результаты ее решения средствами квантовой механики интересны как сами по себе, так и в качестве модельных представлений для реальных систем, в которых частица движется в силовом поле в окрестности точки минимума потенциальной энергии.

6.2. Решение уравнения Шредингера для гармонического осциллятора. Запишем уравнение Шредингера для квантового гармонического осциллятора:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad (6.2)$$

Здесь ω — частота колебаний классического осциллятора. С точки зрения квантовой физики это некоторый параметр.

Начнем решение с замены переменных, что позволит упростить форму исходного уравнения (6.2). Введем безразмерную координату z :

$$z = \frac{x}{x_0}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (6.3)$$

После подстановки получаем уравнение

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + (\lambda - z^2) \psi = 0, \quad (6.4)$$

где

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (6.5)$$

При $|z| \gg 1$ постоянную λ в уравнении (6.4) можно опустить. Тогда

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - z^2\psi = 0.$$

Если $\psi = e^{-\frac{z^2}{2}}$, то

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} = z^2 e^{-\frac{z^2}{2}} \left(1 - \frac{1}{z^2} \right).$$

Отсюда видно, что экспонента $e^{-\frac{z^2}{2}}$ описывает асимптотическое решение уравнения (6.4) при $z \rightarrow \pm \infty$. Поэтому будем искать функцию состояния осциллятора в виде

$$\psi = e^{-\frac{z^2}{2}} f(z). \quad (6.6)$$

Функция $f(z)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 f}{dz^2} - 2z \frac{df}{dz} + (\lambda - 1) f = 0, \quad (6.7)$$

которое получается из уравнения (6.4) после подстановки функции (6.6).

Далее, используя метод степенных рядов, полагаем

$$f = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k. \quad (6.8)$$

Подстановкой ряда (6.8) в уравнение (6.7) приходим к тождеству

$$\sum_k k(k-1) a_k z^{k-2} - 2z \sum_k k a_k z^{k-1} + (\lambda - 1) \sum_k a_k z^k = 0. \quad (6.9)$$

Его можно записать в виде одной суммы:

$$\sum_{m=0}^{\infty} b_m z^m = 0. \quad (6.10)$$

Для выполнения последнего равенства при любых z необходимо, чтобы были равны нулю коэффициенты при всех z^m . Составим выражение для коэффициента b_m . Для этого из первой суммы в равенстве (6.9) выпишем член с $k = m + 2$, а из второй и третьей — с $k = m$. Получаем

$$b_m = (m + 2)(m + 1)a_{m+2} - 2ma_m + (\lambda - 1)a_m. \quad (6.11)$$

Приравнявая выражение (6.11) нулю, находим формулу, которой должны удовлетворять коэффициенты ряда (6.8):

$$a_{m+2} = \frac{2m + 1 - \lambda}{(m + 2)(m + 1)} a_m. \quad (6.12)$$

Формула (6.12) относится к рекуррентным соотношениям; она позволяет повторным применением выразить все коэффициенты a_m через первые два, которые остаются неопределенными. Величины a_0 и a_1 представляют собой две произвольные постоянные, входящие в общее решение дифференциального уравнения второго порядка (6.4).

Исследование ряда (6.8) показывает, что в общем случае он расходится при $z \rightarrow \pm \infty$, причем настолько быстро, что волновая функция (6.6) обращается в бесконечность. Нам же нужны всюду ограниченные решения. Они могут быть получены, если ряд (6.8) оборвать на некотором слагаемом и превратить в полином конечной степени z . Тогда экспоненциальный множитель обеспечит затухание функций состояния (6.6) на бесконечности. Такие полиномы также будут решениями уравнения (6.7).

Итак, обрываем ряд на члене с индексом n : $a_n \neq 0$; все старшие коэффициенты, начиная с a_{n+2} , равны нулю; с помощью формулы (6.12) имеем

$$\lambda = 2n + 1. \quad (6.13)$$

Рекуррентная формула принимает вид

$$a_{m+2} = \frac{2(m-n)}{(m+2)(m+1)} a_m. \quad (6.14)$$

Полиномы с коэффициентами (6.14) обозначаются символом $H_n(z)$. В них мы можем еще распорядиться по своему усмотрению коэффициентом при низкой степени z . Это будет a_0 или a_1 (если n четно, то в полиноме содержатся только члены с четными степенями z , если n нечетно — с нечетными). Обычно постоянные выбирают так, чтобы коэффициент при высшей степени z был равен 2^n . Тогда полиномы совпадают с хорошо изученными в математике полиномами Чебышева — Эрмита. Их можно получить с помощью полиномиобразующей формулы

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z^2}). \quad (6.15)$$

Функции состояния для квантового осциллятора находим:

$$\psi_n = N_n e^{-\frac{z^2}{2}} H_n(z), \quad z = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (6.16)$$

Нормировочный множитель N_n находится из условия

$$\int |\psi_n|^2 dx = 1,$$

отсюда

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}}. \quad (6.17)$$

Далее с помощью формул (6.15) и (6.17) мы вычислим несколько ψ_n .

6.3. Анализ решения задачи о гармоническом осцилляторе. Условие (6.13) задает правило квантования энергии осциллятора. Если учесть подстановку (6.5), то

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.18)$$

Это одна из самых фундаментальных формул квантовой физики. Из нее прежде всего следует дискретный набор значений энергии, обычно называемых уровнями. Интервал между соседними уровнями постоянен и равен $\hbar\omega$, поэтому переходы между ними обеспечивают излучение или поглощение одинаковых квантов энергии. Если этим квантам сопоставляется макроскопическое волновое поле, например электромагнитное, то частота его и определяется формулой Планка (1.3). Таким образом, гипотеза Планка оказалась прямым следствием общих принципов квантовой механики.

Далее, наименьшее возможное значение энергии равно $\frac{\hbar\omega}{2}$ — это энергия так называемых нулевых колебаний. Как и в прямоугольной яме, уровни осциллятора начинаются с некоторого отличного от нуля минимального значения.

С энергией нулевых колебаний: $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ — связан целый ряд физических явлений. В частности, она свидетельствует об отсутствии покоя у частиц вещества при абсолютном нуле температуры. На ее основе сложилось представление о нулевых колебаниях вакуума как об основном (невозбужденном) состоянии электромагнитного поля и т. д.

Рассмотрим несколько функций состояния квантового осциллятора, соответствующих энергиям $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$, $E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega$, $E_2 = \frac{5}{2} \hbar\omega$ и т. д. С помощью формул (6.15) ... (6.17), а также возвращаясь к исходной переменной x на основе соотношения (6.3), получаем

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} x_0^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}},$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} (2x_0)^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \frac{2x}{x_0}, \quad (6.19)$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} (8x_0)^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \left(4 \frac{x^2}{x_0^2} - 2 \right).$$

На рисунке 6.2 показаны соответствующие диаграммы плотности вероятности. Вертикальные линии проведены через точки, соответствующие амплитудным значениям координат классического осциллятора с рассматриваемыми энергиями E_0, E_1, E_2 . Штриховые кривые изображают классическую плотность вероятности как отношение времени нахождения материальной точки в данном месте пространства к периоду колебаний. Из формул (6.19) также видно, что четность состояния определяется четностью квантового числа n : при четных n четность равна $+1$, а при нечетных -1 .

Уместно изобразить еще уровни энергии осциллятора на диаграмме его потенциальной энергии (рис. 6.3) Если сравнить эту диаграмму с диаграммой рисунка 5.3 для потенциальной ямы, то становится очевидной зависимость расстояний между уровнями от формы потенциальной кривой.

* * *

На примере разобранных одномерных задач можно указать на некоторые общие особенности квантово-механического движения.

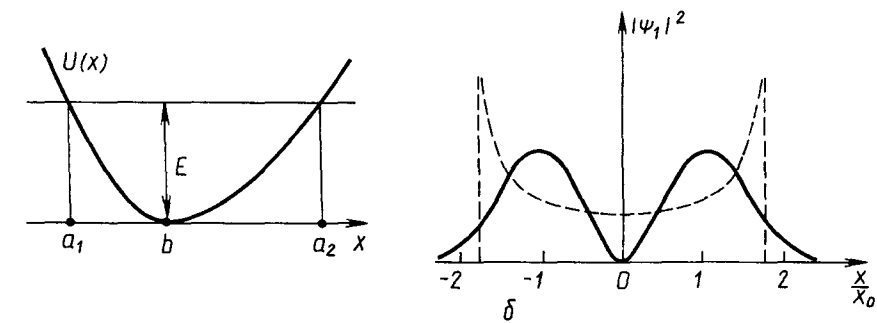


Рис. 6.1.

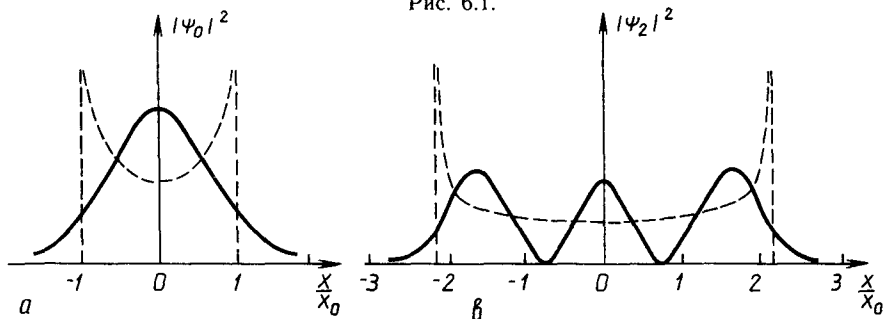


Рис. 6.2.

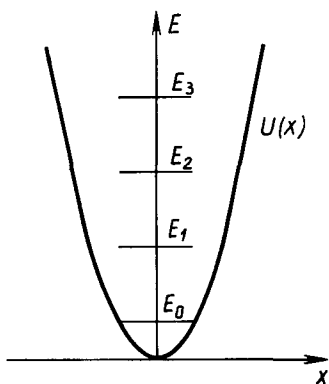


Рис. 6.3.

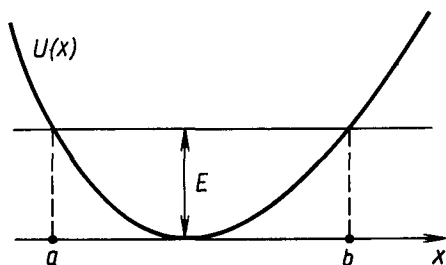


Рис. 6.4.

1. В постоянных полях типа потенциальной ямы возможны стационарные состояния с дискретными уровнями энергии.

2. У таких систем наименьшее значение энергии отлично от нуля, что соответствует невозможности абсолютного покоя и локализации частиц в точке пространства.

3. Квантование энергии характерно для связанных состояний. Для несвязанных частиц движение инфинитно, и энергия принимает непрерывный ряд значений.

4. Как координата, так и импульс в связанных состояниях неопределенны, а это значит, что подразделить энергию на кинетическую и потенциальную невозможно.

5. Квантовые частицы способны проникать в области пространства, недоступные для классических частиц.

6.4. Квазиклассическое приближение. Уравнение Шредингера допускает аналитические решения в сравнительно небольшом числе задач на движение частицы в конкретном поле. В теории развито несколько методов приближенного решения уравнения Шредингера. При изучении одномерного движения в квантовой механике широкое применение получило так называемое квазиклассическое приближение, или метод Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна (ВКБ). Мы познакомимся с его содержанием. (Другой приближенный метод — теория возмущений — изложен в главе V.)

Запишем одномерное уравнение Шредингера (5.1), обозначая штрихами производные по координате x :

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

Будем искать решение в виде

$$\psi = C e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}, \quad (6.20)$$

где C — постоянная величина, а $S(x)$ — неизвестная функция, имеющая размерность действия. Подставляя выражение (6.20) в урав-

нение Шредингера, получим новое уравнение для этой вспомогательной функции:

$$(S')^2 = 2m(E - U(x)) + i\hbar S'' \quad (6.20a)$$

Пользуясь формулой для модуля классического импульса

$$p = \sqrt{2m(E - U(x))},$$

вместо уравнения (6.20a) имеем

$$(S')^2 = p^2 + i\hbar S'' \quad (6.21)$$

Пока что никаких допущений о замене точных выражений на приближенные не делалось, поэтому уравнение (6.21) эквивалентно исходному уравнению.

Далее представим искомую функцию $S(x)$ в виде ряда

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \hbar^2 S_2(x) + \dots \quad (6.22)$$

где $S_0(x)$, $S_1(x)$, $S_2(x)$, .. — неизвестные функции, которые следует определить. Постоянную Планка \hbar считаем малым параметром, по которому выполнено разложение, т. е. второе слагаемое в разложении (6.22) имеет первый порядок малости, третье — второй и т. д.

В классическом случае можно считать $\hbar = 0$, в чисто квантовом \hbar имеет тот же порядок, что и величина рассматриваемого в задачах действия S . В промежуточном случае \hbar за нуль принимать нельзя, но малой величиной считать можно. Отсюда и название — квазиклассическое приближение.

Подставим разложение (6.22) в уравнение (6.21):

$$(S'_0)^2 + 2\hbar S'_0 S'_1 + \hbar^2 (S'_1)^2 + 2\hbar^2 S'_0 S'_2 + \dots = p^2 + i\hbar S''_0 + i\hbar^2 S''_1 + \dots$$

Приравнявая члены одинакового порядка малости в левой и правой частях этого равенства, получаем систему дифференциальных уравнений для нахождения $S_k(x)$:

$$(S'_0)^2 = p^2, \quad 2S'_0 S'_1 = iS''_0, \quad (S'_1)^2 + 2S'_0 S'_2 = iS''_1, \quad \dots,$$

или

$$S'_0 = \pm p, \quad S'_1 = \frac{i}{2} \frac{S''_0}{S'_0} = \frac{i}{2} \frac{p'}{p}, \quad \dots \quad (6.23)$$

Решая последовательно уравнения системы (6.23), находим искомые функции $S_k(x)$:

$$S_0 = \pm \int_{x_0}^x p(x) dx, \quad (6.24)$$

где x_0 — произвольная постоянная интегрирования,

$$S_1 = \frac{i}{2} \ln p(x) \quad \text{и т. д.} \quad (6.25)$$

Ограничимся первым (по степени \hbar) приближением. Оборванный на втором члене ряд (6.22) с помощью выражений (6.24) и (6.25) дает

$$S(x) = \pm \int_{x_0}^x p(x) dx + i \frac{\hbar}{2} \ln p(x),$$

а формула (6.20) — искомое приближенное решение уравнения Шредингера:

$$\psi = C e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx} e^{-\frac{1}{2} \ln p(x)},$$

или

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx}.$$

Найдено два частных решения. Из них можно построить общее:

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{p}} e^{i \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p}} e^{-i \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx}. \quad (6.26)$$

Границы применимости квазиклассического приближения определяются из уравнения (6.21). Необходимо, чтобы

$$\hbar \frac{|S''|}{(S')^2} \ll 1.$$

Это эквивалентно неравенству

$$\left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{S'} \right) \right| \ll 1.$$

Полагая $S' = p$, имеем

$$\left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p} \right) \right| \ll 1.$$

Находим производную от $p(x)$:

$$\frac{dp(x)}{dx} = \frac{d}{dx} \sqrt{2m(E - U(x))} = -\frac{m}{p} \frac{dU}{dx} = \frac{m}{p} F,$$

где F — классическая сила, действующая на частицу. В итоге условие применимости метода сводится к неравенству

$$\frac{m\hbar |F|}{p^3} \ll 1,$$

из которого видно, что импульс частицы не должен быть слишком малым.

Пример 6.1. Применение метода ВКБ к свободной частице.

Для частицы, движущейся в отсутствие сил, $U(x) = 0$ и $p = p_x$ — постоянные величины. Поэтому выражение (6.26) приводит к волновой функции

$$\psi = A_1 e^{i \frac{1}{\hbar} p_x x} + A_2 e^{-i \frac{1}{\hbar} p_x x}.$$

Это две плоские волны, движущиеся по оси Ox навстречу друг другу, уже известные нам по точному решению задачи (3.21). Таким образом, в данном случае метод ВКБ дает точное решение.

Значительный практический интерес представляют задачи на финитное движение частиц. В этом случае силовое поле задается

некоторой потенциальной ямой (рис. 6.4). Здесь точки a и b называются поворотными; в них полная энергия равна потенциальной, т. е. $T=0$ и $p=0$. В соответствии с классической механикой частица в поворотных точках изменяет направление скорости на обратное.

Согласно квантовой механике возможно движение частицы с энергией $E < U$ вне ямы за точками поворота (это области $x < a$ и $x > b$).

Метод ВКБ позволяет найти волновую функцию как в классически доступном интервале значений: x от a до b , так и за поворотными точками. Но установить связи между выражениями для волновой функции, полученной для различных областей, довольно сложно, так как непосредственное «сшивание» в точках a и b невозможно.

При $x > b$ p — чисто мнимая величина, так как $U > E$. Если принять $x_0 = b$, то

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx} + \frac{C_2}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx}.$$

Второе слагаемое неограниченно возрастает при $x \rightarrow \infty$ и должно быть отброшено. Полагая $C_1 = \frac{B}{2}$ и $C_2 = 0$, имеем

$$\psi = \frac{B}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx} \quad (x > b). \quad (6.27)$$

Опуская доказательство, укажем, что функции (6.27) соответствует в области $a < x < b$ функция

$$\psi_I = \frac{B}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx + \frac{\pi}{4} \right).$$

Аналогично в области перед поворотной точкой a

$$\psi = \frac{A}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx} \quad (x < a),$$

поэтому в интервале $a < x < b$ имеем

$$\psi_{II} = \frac{A}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx + \frac{\pi}{4} \right).$$

Исходя из требования однозначности волновых функций заключаем, что в любой точке между a и b $\psi_I(x) = \psi_{II}(x)$. Но для этого необходимо, чтобы сумма аргументов синуса в обеих функциях была кратна числу π :

$$\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx + \frac{\pi}{4}\right) + \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx + \frac{\pi}{4}\right) = (n+1)\pi, \quad n=0, 1, 2, \dots$$

Кроме того, следует положить $A = (-1)^n B$.

Итак,

$$\int_a^b p dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (6.28)$$

Финитное движение частицы в классическом случае происходит по отрезку прямой от точки a к b и обратно. Условие квантования (6.28) целесообразно поэтому записать для полного цикла движения, распространяя интегрирование на интервал от a до b и обратно от b до a . С учетом знака p как проекции импульса на ось Ox

$$\int_a^b p dx + \int_b^a (-p) dx = 2 \int_a^b p dx.$$

Далее удобно перейти к фазовому пространству с координатами p и x (см. ч. I, § 25, п. 2). В нем условие квантования выразится формулой

$$\oint p dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (6.29)$$

Левую часть формулы (6.29) можно трактовать как площадь, ограниченную замкнутой траекторией изображающей точки в фазовом пространстве.

Достоинство квазиклассического приближения состоит в том, что в нем решение уравнения Шредингера сведено к квадратурам (6.26). Кроме того, во многих случаях оно приводит к сравнительно простым и физически ясным результатам, так как усматриваются прямые связи с соответствующими задачами классической механики.

Пример 6.2. Применение метода ВКБ для расчета уровней энергии.

Положим $U=0$ при $a < x < b$ (прямоугольная потенциальная яма). Тогда из формулы (6.28) следует $\sqrt{2mE}2(b-a) = \left(n + \frac{1}{2}\right) 2\pi \hbar$, откуда

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(b-a)^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2.$$

Результат отличается от точной формулы (5.8) для уровней энергии сдвигом значений квантовых чисел на $\frac{1}{2}$. Эта погрешность скажется на энергии нижних квантовых состояний. При $n \gg 1$ точность метода ВКБ достаточно высока.

Пример 6.3. Расчет уровней энергии квантового осциллятора.

Сравним формулу классической механики для фазовой траектории осциллятора (см. ч. I, § 25)

$$\oint p dx = \frac{E}{v}$$

с условием квантования. Заключаем, что

$$\frac{E}{\nu} = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

или

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

Это формула квантования энергии осциллятора (6.18), полученная ранее в результате точного решения уравнения Шредингера.

Методические указания и рекомендации

I. Простейшие задачи, рассмотренные в главе, раскрывают квантово-механический подход к описанию движения и взаимодействия, не отягощенный еще применением абстрактного математического аппарата, дают материал для пояснения ниже сущности этого аппарата, приводят к очень общим и характерным закономерностям микромира. То, что эти задачи можно решить, не применяя понятия об операторе, операторной форме уравнения Шредингера, всей совокупности необходимых в других случаях сведений по гильбертову пространству и операторному исчислению, на наш взгляд, существенно в методическом отношении для выявления главных этапов и итогов решения.

В то же время подбор задач определяется типичностью описываемых в них ситуаций. В этом отношении обязательно нужна задача на прохождение потенциального барьера, хотя она довольно громоздка в выкладке. (Лектор может перенести вычисления на практические занятия.)

На практических занятиях нужно рассмотреть задачу о трехмерной яме, так как результаты ее решения используются далее в курсе статистической физики.

Задача об осцилляторе имеет фундаментальное для квантовой физики значение и анализируется подробно как на лекциях, так и на практических занятиях.

II. При изучении материала студентам рекомендуется ответить на следующие вопросы:

— В какой связи находится непрерывность волновой функции с определением вектора плотности потока вероятности? Как объяснить попадание микрочастиц в запрещенные законом сохранения энергии для их движения области пространства? Назовите явления, которые объясняются туннельным эффектом. Перечислите микросистемы, поведение которых можно моделировать квантовым осциллятором. Сделайте общие выводы о характерных особенностях движения в силовых полях в микромире на основе решенных в главе задач. Выполните упражнения к главе.

Упражнение II

1. Пользуясь результатами задачи об одномерной прямоугольной потенциальной яме (см. § 5, п. 2), решите задачу о трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Р е ш е н и е.