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

или

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

Это формула квантоваиия энергии осциллятора (6.18), полученная ранее в результате точного решеиия 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.

Решение.

Потенциальная энергия задана условием:

$$U(x, y, z)=0, \text{ если } \begin{cases} 0<x<a, \\ 0<y<b, \\ 0<z<c, \end{cases}$$

$$U(x, y, z)=\infty, \text{ если } \begin{cases} x\leqslant 0, \ x\geqslant a, \\ y\leqslant 0, \ y\geqslant b, \\ z\leqslant 0, \ z\geqslant b. \end{cases}$$

Уравнение Шредингера для частицы внутри ямы имеет вид

$$\Delta\psi+k^2\psi=0, \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{1}$$

Волновая функция обращается в нуль на краю ямы.

Уравнение (1) допускает разделение переменных. После подстановки

$$\psi(x, y, z)=\varphi_1(x)\varphi_2(y)\varphi_3(z)$$

получаем три однотипных уравнения

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k_1^2\varphi=0,$$

причем

$$k_1^2+k_2^2+k_3^2=k^2,$$

и выполняются граничные условия:

$$\varphi_1(0)=\varphi_1(a)=0, \quad \varphi_2(0)=\varphi_2(b)=0, \quad \varphi_3(0)=\varphi_3(c)=0.$$

Используя формулы (5.7), (5.8) и (5.9), получаем

$$\psi_{n_1n_2n_3}(x, y, z)=\left(\frac{8}{abc}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\frac{\pi n_1 x}{a} \sin\frac{\pi n_2 y}{b} \sin\frac{\pi n_3 z}{c},$$

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{n_1}{a}\right)^2+\left(\frac{n_2}{b}\right)^2+\left(\frac{n_3}{c}\right)^2\right].$$

Состояние частицы задается тройкой квантовых чисел n_1, n_2 и n_3, пробегающих независимо друг от друга значения 1, 2, 3, ...

В кубической яме $a=b=c$. В этом случае уровни энергии вырождены, т. е. одному значению энергии соответствует несколько квантовых состояний.

2. С помощью формулы (5.23) оцените вероятность прохождения электроном прямоугольного потенциального барьера высотой 10 эВ при энергии частицы 5 эВ, если ширина барьера равна $1\cdot 10^{-10}$ м, $2\cdot 10^{-10}$ м, $5\cdot 10^{-10}$ м. Константу P_0 принять равной 1.

Ответ. $P=0{,}1$; $0{,}008$; $5{,}5\cdot 10^{-7}$.

3. С помощью формулы (5.24) выведите закон Гейгера — Нэттола, связывающий период полураспада с энергией α-частицы: $\ln T=A+\frac{B}{\sqrt{E}}$.

Решение.

Предположим, что внутри ядра α-частица движется свободно. Чтобы выйти из ядра, ей нужно преодолеть потенциальный барьер, образованный силами кулоновского отталкивания (см. рис. 5.4). При $r > r_0$

$$U = \frac{\gamma}{r}, \quad \gamma = 2Z\varkappa e^2,$$

где Z — заряд ядра. Для коэффициента прохождения через барьер имеем формулу

$$P = P_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m}\int\limits_{r_0}^{R}\sqrt{U(r)-E}\,dr}$$

В ней P_0 — постоянная, зависящая от свойств ядра; точка R определяется из условия $U(R)=0$; нижний предел интегрирования полагаем равным r_0.

Период полураспада обратно пропорционален вероятности вылета α-частицы за единицу времени, которая в свою очередь пропорциональна коэффициенту прохождения P. Поэтому $T = \frac{\text{const}}{P}$ и

$$\ln T = \text{const} - \ln P = \text{const} + \frac{2\sqrt{2m}}{\hbar}\int\limits_{r_0}^{R}\sqrt{\frac{\gamma}{r} - E}\,dr.$$

После подстановки $r = \frac{\gamma x}{E}$ имеем

$$\ln T = \text{const} + \frac{2\gamma\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{E}}\int\limits_{\frac{Er_0}{\gamma}}^{1}\sqrt{\frac{1}{x} - 1}\,dx = A + \frac{B}{\sqrt{E}},$$

где

$$B = \frac{2\gamma\sqrt{2m}}{\hbar}\int\limits_{\frac{Er_0}{\gamma}}^{1}\sqrt{\frac{1-x}{x}}\,dx. \qquad (2)$$

Так как энергия α-частицы значительно ниже пика барьера, то нижний предел в формуле (2) можно принять равным нулю.

4. Запишите выражения для волновой функции гармонического осциллятора при $n = 0, 1, 2$.

Ответ.

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}x_0^{1/2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}(2x_0)^{1/2}}e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\frac{2x}{x_0},$$

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

5. С помощью формулы (6.14) вычислите коэффициенты полиномов Чебышева — Эрмита H_3 и H_4.

6. Запишите выражения плотности вероятности для координаты x в случае гармонического осциллятора, находящегося в квантовых состояниях при $n=0$, 1, 2. (Данные возьмите из задачи 4.)

Сравните результаты с плотностью вероятности для классического осциллятора.

Указание. Вероятность обнаружения классической материальной точки на отрезке dx пропорциональна времени нахождения частицы на этом отрезке. Так как

$$dt=\frac{dx}{v}=\frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}(E-U)}},$$

то

$$dW=\frac{\text{const}}{\sqrt{E-U}}.$$

7. Колебательные подуровни молекулы водорода расположены на расстоянии 0,545 эВ друг от друга. Вычислите энергию нулевых колебаний и частоту колебаний.

Указание. Ознакомьтесь с материалом § 19, п. 5.

ГЛАВА III. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ И ОСНОВНЫЕ ЗАКОНЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Полное и последовательное изучение основных законов квантовой механики и решение большинства ее задач невозможно без специального математического аппарата. Он разобран в данной главе. Мы не стремились к математической строгости и общности освещения затрагиваемых вопросов: они рассмотрены на элементарном уровне и лишь в той мере, которая необходима для понимания следующих глав, где изучается строение атомов и молекул.

§ 7. ЛИНЕЙНЫЕ САМОСОПРЯЖЕННЫЕ ОПЕРАТОРЫ

7.1. Разложение функций в обобщенный ряд и интеграл Фурье. Применение принципа суперпозиции состояний (см. § 2, п. 4) в квантовой механике тесно связано с разложением функций в ряд или интеграл Фурье. Напомним основные математические положения о разложениях функций. Пусть задана функция $\varphi=\varphi(k, x)$, причем k есть дискретно изменяющаяся величина, играющая роль параметра, а под x понимается совокупность трех координат точки пространства. Если значения k пронумеровать в определенном порядке, то можно рассматривать систему функций, в которой функции можно различать по номеру и писать $\varphi_k(x)$ вместо $\varphi(k, x)$, причем $k=1, 2, 3$ и т. д.