

Подставляя это выражение в уравнение (23.9) и сравнивая коэффициенты, найдем, что оно удовлетворяется при любом значении a_4 , как это и должно быть согласно общей теории. Далее, находим $a_2 = -3a_4$, $a_0 = -^{1/4}a_2 = ^3/4a_4$, $a_3 = a_1 = 0$. Итак,

$$P_4(\xi) = a_4 (\xi^4 - 3\xi^2 + 3/4).$$

Корни этого полинома

$$\xi = \pm \sqrt{^{1/2}(3 \pm \sqrt{6})}$$

вещественны и некратны.

Аналогично,

$$P_1(\xi) = a_1 \xi,$$

$$P_2(\xi) = a_2 (\xi^2 - 1/2),$$

$$P_3(\xi) = a_3 (\xi^3 - ^3/2 \xi),$$

$$P_5(\xi) = a_5 (\xi^5 - 5\xi^3 + ^{15}/4\xi).$$

Волновые функции получаются умножением этих полиномов на $e^{-\xi^2/2}$. Их обычно нормируют к единице, т. е. подчиняют условию

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |P(\xi) e^{-\xi^2/2}|^2 d\xi = 1.$$

§ 24. Одномерные прямоугольные потенциальные ямы

1. Квантование на основе уравнения Шредингера (22.1) полезно уяснить на примере одномерной симметричной «потенциальной ямы» прямоугольной формы. Так называется потенциальная функция $U(x)$, принимающая на интервале $-a < x < +a$ постоянное значение $-U_0$ и обращающаяся в нуль вне этого интервала (рис. 44). Для этого случая легко получить

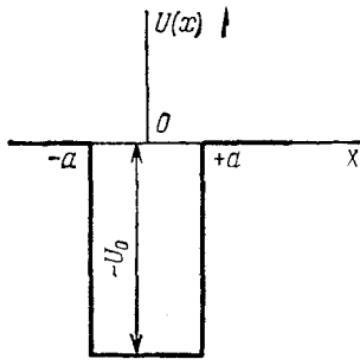


Рис. 44

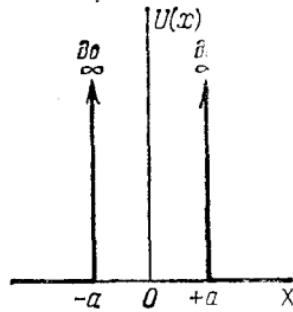


Рис. 45

точное решение уравнения Шредингера и на его основе рассмотреть задачу о квантовании энергии. Но этим значение прямоугольных потенциальных ям не исчерпывается. В ряде случаев (например, в ядерной физике) истинный ход потенциальной функции $U(x)$ неизвестен. Апроксимируя $U(x)$ потенциальной ямой прямоугольной формы, получают в таких случаях

не только качественные, но даже количественные результаты оценочного характера.

2. Наиболее простым в математическом отношении является случай *бесконечно глубокой* потенциальной ямы, когда величина U_0 обращается в бесконечность. В этом случае целесообразно за нуль потенциальной функции принять ее значение на «дне» потенциальной ямы, т. е. на интервале $-a < x < +a$. Тогда на «стенках» ямы (т. е. при $x = \pm a$) функция $U(x)$ будет претерпевать разрыв от 0 до $+\infty$. Такая потенциальная яма изображена на рис. 45.

Математическое упрощение задачи при переходе от ямы конечной глубины к бесконечно глубокой яме связано с тем, что в последнем случае вне интервала $-a < x < +a$, где U всюду бесконечно велика, функция ψ должна обращаться в нуль. Действительно, согласно классической физике, частица с конечной энергией \mathcal{E} не может попасть в область, где $U(x) = +\infty$. В квантовой механике это утверждение заменяется требованием обращения в нуль плотности вероятности $\psi^* \psi$, а следовательно, и самой функции ψ . Таким образом, достаточно рассмотреть решение уравнения Шредингера только в интервале $-a < x < +a$, что и ведет к упрощению задачи.

Внутри интервала $-a < x < +a$ $U(x) = 0$ и уравнение (22.1) принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (24.1)$$

где введено обозначение

$$k^2 = 2m\mathcal{E}/\hbar. \quad (24.2)$$

Не теряя общности, достаточно ограничиться положительными значениями k , что и предполагается ниже. Общее решение уравнения (24.2) имеет вид

$$\psi = A \cos kx + B \sin kx,$$

причем на стенках ямы $x = \pm a$ должно быть $\psi = 0$. Это дает

$$A \cos ka + B \sin ka = 0 \quad \text{при } x = +a,$$

$$A \cos ka - B \sin ka = 0 \quad \text{при } x = -a.$$

Если $A \neq 0$, то $A \cos ka = 0$ и, следовательно, $\cos ka = 0$, $\sin ka \neq 0$, $B = 0$. Наоборот, если $B \neq 0$, то $B \sin ka = 0$ и, следовательно, $\sin ka = 0$, $\cos ka \neq 0$, $A = 0$. Таким образом, все решения уравнения (24.2) распадаются на два класса:

1) с четными функциями

$$\psi = A \cos kx, \quad ka = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \dots,$$

2) с нечетными функциями

$$\psi = B \sin kx, \quad ka = 2(\pi/2), 4(\pi/2), 6(\pi/2), \dots$$

Возможность $ka = 0$ во втором случае исключается, так как тогда было бы $\psi = 0$, что не имеет физического смысла. Постоянные A и B обычно определяются из условия нормировки

$$\int_{-a}^{+a} |\psi|^2 dx = 1 \quad (\text{для разбираемого нами вопроса это не имеет значения}).$$

Тогда получается

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{n\pi x}{2a} & \text{при нечетных } n, \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{2a} & \text{при четных } n. \end{cases} \quad (24.3)$$

В обоих случаях $k = n\pi/2a$, так что при любом целом n

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar\pi^2}{8ma^2} n^2. \quad (24.4)$$

Отсюда видно, что энергия квантуется. Энергетические уровни *дискретны*, при $U_0 = +\infty$ число их бесконечно велико. Так как значение $n = 0$ исключается, то энергия наименьшего уровня равна $\hbar\pi^2/(8ma^2)$. Это — нулевая энергия, необходимость которой следует из общих положений.

Против приведенного решения можно выдвинуть следующее возражение. На всякой поверхности разрыва потенциальной функции $U(x)$ должны выполняться граничные условия

$$\psi_1(x - 0) = \psi_2(x + 0), \quad \frac{d\psi_1(x - 0)}{dx} = \frac{d\psi_2(x + 0)}{dx}, \quad (24.5)$$

где $\psi_1(x)$ — функция $\psi(x)$ по одну сторону поверхности разрыва, а $\psi_2(x)$ — по другую (см. § 22, пункт 1). В нашем случае внутри интервала $-a < x < +a$ $\psi = \psi_1$ дается выражениями (24.3), а вне этого интервала $\psi \equiv \psi_2 = 0$. Первое условие (24.5) выполняется, тогда как второе не выполняется. Таким образом, на стенах потенциальной ямы первая производная найденной нами функции $\psi(x)$ претерпевает разрыв непрерывности. Однако это противоречие с общими требованиями, которым должна удовлетворять функция $\psi(x)$, является только кажущимся и возникает в результате *математического перехода к пределу*. Во всяком реальном случае глубина ямы U_0 конечна, хотя и может быть очень большой. В этом случае вблизи стенки по обе стороны от нее $\psi(x)$ и $d\psi/dx$, вообще говоря, отличны от нуля, и условия (24.5) строго выполняются. Но при переходе к пределу бесконечно глубокой ямы они могут и не выполняться для предельных значений этих величин. Действительно, из соотношений (24.5) не следует, что должны выполняться

и предельные соотношения

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_1(x) = \lim_{x \rightarrow +\infty} \psi_2(x),$$

$$\frac{d}{dx} \lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_1(x) = \frac{d}{dx} \lim_{x \rightarrow +\infty} \psi_2(x).$$

Это на самом деле и происходит с производными функции $\psi(x)$. Найденное нами решение относится не к реальной функции $\psi(x)$ при очень большом значении U_0 , а к ее *пределному значению* при $U_0 \rightarrow \infty$.

На этом примере с особой отчетливостью проявляется отмеченная выше аналогия между задачей о квантовании энергии и задачей о колебании струны с закрепленными концами. Действительно, в случае прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной ямы обе задачи математически тождественны.

3. Рассмотрим теперь случай симметричной прямоугольной ямы *конечной* глубины (рис. 44). Потенциальную функцию $U(x)$ вне ямы примем равной нулю. Внутри ямы $U(x) = U_0 < 0$. За начало координат возьмем центр дна ямы O . Исследуем сначала случай, когда полная энергия \mathcal{E} отрицательна, причем $U_0 < \mathcal{E} < 0$. Введем обозначения

$$k = +\sqrt{2m(\mathcal{E} - U_0)/\hbar^2}, \quad a = +\sqrt{-2m\mathcal{E}/\hbar^2}. \quad (24.6)$$

Тогда уравнение Шредингера внутри ямы будет

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (24.7)$$

а вне ямы

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - a^2\psi = 0. \quad (24.8)$$

Общее решение уравнения (24.7) имеет вид

$$\psi = A \cos kx + B \sin kx. \quad (24.9)$$

Решением уравнения (24.8) является $e^{\pm ax}$. Здесь надо выбрать такой знак, чтобы решение обращалось в нуль при $x = \pm\infty$. Таким образом, вне ямы должно быть

$$\psi = Ce^{-ax} \quad \text{при } x > a,$$

$$\psi = De^{ax} \quad \text{при } x < -a.$$

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, D надо выбрать так, чтобы на краях ямы функция ψ и ее производная $d\psi/dx$ были непрерывны. На границе $x = +a$ это дает

$$A \cos ka + B \sin ka = Ce^{-aa},$$

$$-kA \sin ka + kB \cos ka = -aCe^{-aa},$$

а на границе $x = -a$

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

$$kA \sin ka + kB \cos ka = aDe^{-\alpha a}.$$

Отсюда

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

$$2kA \sin ka = a(C + D)e^{-\alpha a}, \quad 2kB \cos ka = -a(C - D)e^{-\alpha a}.$$

Если $A \neq 0$ и $C = D$, то

$$k \operatorname{tg} ka = a. \quad (24.10)$$

Если же $B \neq 0$ и $C = -D$, то

$$k \operatorname{ctg} ka = -a. \quad (24.11)$$

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 (24.10) или уравнения (24.11), в которых положительные величины k и α определяются выражениями (24.6). Для графического решения введем безразмерные величины

$$\xi = ak, \quad \eta = a\alpha. \quad (24.12)$$

Тогда

$$\xi^2 + \eta^2 = -2mU_0a^2/\hbar^2, \quad (24.13)$$

причем для решений с четной волновой функцией из (24.10) следует

$$\eta = \xi \operatorname{tg} \xi, \quad (24.10a)$$

а для решений с нечетной волновой функцией из (24.11) получаем

$$\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi. \quad (24.11a)$$

На рис. 46, а построены кривые $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$, на рис. 46, б — кривые $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$. Вертикальными пунктирными линиями изображены асимптоты этих кривых. Ввиду положительности ξ и η нужны только участки кривых, расположенные в положительном квадранте ($\xi > 0, \eta > 0$). Пересечем эти кривые окружностью (24.13), радиус которой $\sqrt{-2mU_0} a/\hbar$ должен считаться известным, поскольку известны величины U_0 и a . Координаты точек пересечения этой окружности с кривыми (24.10а) и (24.11а) дадут возможные значения ξ и η , а следо-

вательно, k и α . После этого по формулам (24.6) легко найти значения \mathcal{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. Так как величина k существенно отлична от нуля, то из (24.6) следует, что $\mathcal{E} > U_0$. Все уровни

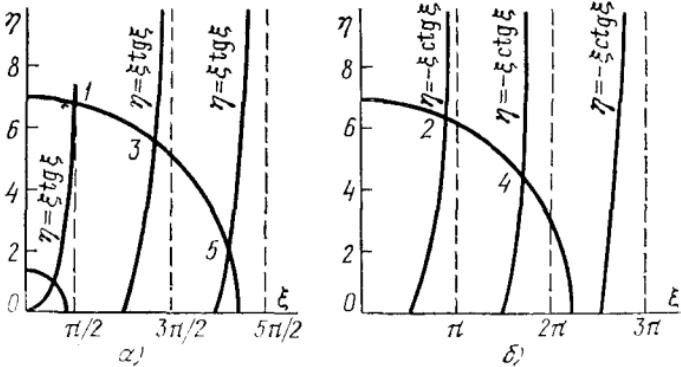


Рис. 46

энергии, в том числе и самый низший, лежат выше дна потенциальной ямы. Опять наше решение приводит к необходимости существования нулевой энергии.

4. Остается рассмотреть случай, когда $\mathcal{E} > 0$. В этом случае величина α чисто мнимая: $\alpha = i\beta$. Вместо (24.8) получается уравнение

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \beta^2\psi = 0. \quad 24.8a)$$

Его решения:

$$\begin{aligned}\psi &= A' \cos \beta x + B' \sin \beta x \quad \text{при } x > +a, \\ \psi &= A'' \cos \beta x + B'' \sin \beta x \quad \text{при } x < -a.\end{aligned}$$

Оба решения остаются конечными при любых значениях x , в частности сколь угодно больших по абсолютной величине. Они содержат четыре произвольных постоянных A' , B' , A'' , B'' . Эти решения надо сшить с решением внутри интервала $-a < x < +a$, которое представляется формулой (24.9), чтобы при этом оставались непрерывными ψ и $d\psi/dx$ на обеих стенках потенциальной ямы. Таким путем получаются четыре линейных уравнения относительно коэффициентов A' , B' , A'' , B'' , содержащие A и B в качестве параметров. Этого как раз достаточно, чтобы выразить эти неизвестные коэффициенты через A и B . При этом A и B могут принимать любые значения. Отсюда сле-

дует, что при $\mathcal{E} > 0$ энергия не квантуется — энергетический спектр *непрерывен*. Волновая функция не стремится к нулю при $x \rightarrow \pm\infty$, т. е. движение частицы *инфinitно*, как того и требует общая теория.

§ 25. Квантование в случае сферически симметричного силового поля

1. В атомной физике более важен случай, когда потенциальная функция U не одномерна, а *сферически симметрична* относительно некоторого силового центра. Примером может служить положительно заряженное атомное ядро, в электрическом поле которого движется электрон. Силовой центр (например, атомное ядро) мы сначала будем считать *бесконечно тяжелым* и *неподвижным*. Начало координат поместим в силовом центре. Обозначим через r радиус-вектор, проведенный из начала координат к рассматриваемой частице. Тогда в случае сферической симметрии $U = U(r)$, где $r \equiv |\mathbf{r}|$. В этом случае волновая функция ψ , т. е. решение уравнения Шредингера (21.7), может зависеть не только от r , но и от угловых переменных, определяющих направление радиус-вектора r . Однако мы ограничимся здесь только *сферически симметричными решениями*, т. е. решениями, зависящими только от $|r|$; $\psi = \psi(r)$. Тогда уравнение Шредингера для стационарных состояний (21.7) запишется в виде

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} \right) + [\mathcal{E} - U(r)] \psi = 0. \quad (25.1)$$

Это уравнение отличается от исследованного выше одномерного уравнения (22.1) наличием дополнительного члена $\frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr}$. Однако подстановкой

$$\psi = \chi/r \quad (25.2)$$

оно приводится к виду

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + [\mathcal{E} - U(r)] \chi = 0. \quad (25.3)$$

Это уравнение математически тождественно с уравнением (22.1) для одномерного случая. Поэтому все результаты, полученные в § 22, сохраняют силу для вспомогательной функции $\chi(r)$. Единственное отличие состоит в том, что при $r = 0$ функция χ должна быть не только конечной, но и обращаться в нуль, так как в противном случае функция $\psi = \chi/r$ обращалась бы в бесконечность при $r = 0$. Поэтому половина решений, полученных в § 22, должна быть исключена. Надо оставить только решения, изображающиеся кривыми, проходящими через начало координат (рис. 47). При $\mathcal{E} < 0$ эти решения для положительных r представлены сплошными кривыми, а их продолжения