

Лекция 5.

Многочастичная квантовая система.

До сих пор мы рассматривали движение одной частицы в произвольном потенциальном поле. Остановимся теперь на некоторых особенностях многочастичных квантовых систем. Мы ограничимся случаем двухчастичной квантовой системы, поскольку обобщение на случай многих частиц делается элементарно.

Введем волновую функцию системы из двух частиц $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, находящихся в некотором внешнем потенциальном поле. Величина $\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ представляет собой двухчастичную плотность вероятности, т.е. плотность вероятности того, что одна из частиц находится в точке с координатой \vec{r}_1 , а вторая – с координатой \vec{r}_2 . При этом вероятность обнаружить одну из частиц в некоторой точке пространства получается путем интегрирования двухчастичной плотности по координате другой частицы. Например,

$$\rho_1(\vec{r}) = \int |\psi(\vec{r}, \vec{r}_2)|^2 d^3 r_2 \quad (5.1)$$

есть плотность вероятности обнаружить первую частицу в точке с координатой \vec{r} . Аналогично, интегрируя по первой координате, получим одночастичную плотность вероятности для второй частицы.

$$\rho_2(\vec{r}) = \int |\psi(\vec{r}_1, \vec{r})|^2 d^3 r_1. \quad (5.2)$$

Рассмотрим теперь задачу на собственные значения и собственные функции оператора Гамильтона двухчастичной системы. Пусть оператор Гамильтона системы записывается в виде

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}_1(\vec{r}_1) + \hat{H}_2(\vec{r}_2) + \hat{V}_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (5.3)$$

где

$$\hat{H}_i(\vec{r}_i) = \hat{T}_i + \hat{V}_i(\vec{r}_i) \quad (5.4)$$

- гамильтониан i – той частицы ($i = 1, 2$), включающий в себя ее кинетическую энергию, а также взаимодействие с внешним потенциальным полем, и зависящий от совокупности координат только i – той частицы, $\hat{V}_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ - оператор взаимодействия, зависящий от координат обеих частиц.

Например, если мы рассматриваем простейший многоэлектронный атом, атом гелия, то в одночастичный гамильтониан (5.4) входит кинетическая энергия электрона и взаимодействие электрона с ядром, а оператор $\hat{V}_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ описывает межэлектронное взаимодействие.

Стационарные состояния двухчастичной системы могут быть найдены из стационарного уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (5.5)$$

Казалось бы, каждый из электронов должен характеризоваться своей волновой функцией $\psi_i(\vec{r}_i)$, поэтому решение уравнения (5.5) следует искать в виде произведения одночастичных функций

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2). \quad (5.6)$$

Тогда, в частности, из выражений (5.1) и (5.2) получим уже привычные для нас соотношения

$$\rho_1(\vec{r}_1) = |\psi_1(\vec{r}_1)|^2 \quad \text{и} \quad \rho_2(\vec{r}_2) = |\psi_2(\vec{r}_2)|^2. \quad (5.7)$$

Однако, мы сейчас покажем, что факторизация двухчастичной волновой функции на произведение двух одночастичных возможна лишь в случае невзаимодействующих между собой частиц. В противном случае введение одночастичных функций в многочастичной квантовой системе оказывается невозможным. Действительно, подставим разложение (5.6) в уравнение (5.5). Учитывая, что операторы \hat{H}_1 и \hat{H}_2 действуют в подпространствах функций, зависящих от \vec{r}_1 и \vec{r}_2 соответственно, получим

$$\psi_2(\hat{H}_1\psi_1) + \psi_1(\hat{H}_2\psi_2) = (E - \hat{V}_{12})\psi_1\psi_2. \quad (5.8)$$

Разделив все теперь на произведение $\psi_1\psi_2$, получим

$$\frac{\hat{H}_1\psi_1}{\psi_1} = -\frac{\hat{H}_2\psi_2}{\psi_2} + E - \hat{V}_{12}. \quad (5.9)$$

Если $\hat{V}_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv 0$, то левая и правая части в (5.9) могут зависеть от координат только первой и только второй частицы соответственно. Это возможно только если

$$\frac{\hat{H}_1\psi_1}{\psi_1} = E_1 \text{ и } \frac{\hat{H}_2\psi_2}{\psi_2} = E_2 = E - E_1, \quad (5.10)$$

где E_1 и E_2 - некоторые постоянные величины. В результате получаем два одночастичных уравнения Шредингера, а E_1 и E_2 имеют, очевидно, смысл энергий стационарных состояний первой и второй частицы соответственно. Если частицы взаимодействуют между собой, т.е. $\hat{V}_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \neq 0$, то факторизация (5.6) оказывается невозможной. Одночастичные функции в системе взаимодействующих между собой частиц ввести нельзя.

Однако, в квантовой теории многочастичных систем (многоэлектронные атомы, электронная подсистема твердого тела, атомное ядро) широко используется понятие одночастичного состояния и одночастичной волновой функции. Эти понятия могут быть введены лишь приближенно, например, в рамках концепции самосогласованного поля. Основная идея этого подхода заключается в следующем. Мы выделяем одну из частиц, например, один из атомных электронов, и рассматриваем его движение в потенциале созданном ядром плюс всеми остальными атомными электронами. И так поочередно поступаем для каждого электрона. В результате каждый из электронов характеризуется своей одноэлектронной волновой функцией, которая через электростатический потенциал зависит от волновых функций одноэлектронных состояний всех остальных электронов. В теории многоэлектронных атомов такой подход был развит Д.Хартри¹ в 1928 году, и будет обсуждаться нами при изучении строения многоэлектронных атомов. В теории атомного ядра представление о самосогласованном поле лежит в основе так называемой одночастичной оболочечной модели.

В заключение, отметим, что если речь идет о системе одинаковых (тождественных) частиц, например, электронов, ввести одночастичные волновые функции оказывается не всегда возможно даже в отсутствие взаимодействия между частицами. Более подробно на этом «парадоксе» мы остановимся в Л_10 при обсуждении принципа тождественности микрообъектов.

Движение волновых пакетов. Предельный переход к классической механике.

Как мы уже отмечали, в квантовой механике у движущейся частицы отсутствует понятие траектории. В каждый момент времени ее состояние задается некоторым волновым пакетом, имеющим конечную область пространственной локализации. Мы теперь

¹ D.Hartree (1897-1958) – английский физик – теоретик.

обсудим условия, при выполнении которых квантовомеханическое движение может быть описано в классическом пределе и возникает представление о движении микрообъекта по классической траектории.

Докажем прежде всего справедливость следующего утверждения (теорема Эренфеста). *Основное уравнение классической механики, описывающее движение частицы в потенциальном поле $V(\vec{r})$*

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} = -\nabla V,$$

в квантовой теории справедливо для усредненных по квантовому состоянию величин, т.е.

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle, \quad (5.11)$$

где

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{p} \psi(\vec{r}, t) d^3 r, \quad (5.12)$$

$$\langle \nabla V \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t) \nabla V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) d^3 r. \quad (5.13)$$

Докажем это утверждение. Дифференцируя (5.12) по времени, получим

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{p} \psi + \psi^* \frac{\partial}{\partial t} (\hat{p} \psi) \right) d^3 r = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{p} \psi + \psi^* \hat{p} (\partial \psi / \partial t) \right) d^3 r.$$

Выражения для производных по времени от ψ и ψ^* возьмем из уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H} \psi^*.$$

Тогда получим

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = \frac{i}{\hbar} \int \left((\hat{H} \psi^*) (\hat{p} \psi) - \psi^* \hat{p} \hat{H} \psi \right) d^3 r = \frac{i}{\hbar} \int \left(\psi^* \hat{H} \hat{p} \psi - \psi^* \hat{p} \hat{H} \psi \right) d^3 r = \frac{i}{\hbar} \int \psi^* [\hat{H}, \hat{p}] \psi d^3 r.$$

Здесь мы воспользовались свойством эрмитовости оператора Гамильтона $\int \psi^* \hat{H} \psi d\tau = \int (\hat{H} \psi^*) \psi d\tau$. Вычисляя коммутатор операторов \hat{H} и \hat{p}

$$[\hat{H}, \hat{p}] = [\hat{V}, \hat{p}] = i\hbar \nabla V,$$

окончательно получим

$$\frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = -\int \psi^* (\nabla V) \psi d^3 r = -\langle \nabla V \rangle = \langle \vec{F}(\vec{r}) \rangle. \quad (5.14)$$

Таким образом, теорема Эренфеста доказана.

Уравнение Эренфеста (5.14) по форме совпадает с уравнением классической механики. Это совпадение будет выглядеть еще более полным, если доказать следующее утверждение (см. задачу 5.1)

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle, \quad (5.15)$$

то есть производная по времени от среднего значения координаты частицы равна среднему значению скорости $\langle \vec{p} \rangle / m$. С учетом соотношения (5.15) уравнение (5.14) можно переписать в виде

$$\frac{d^2 \langle \vec{r} \rangle}{dt^2} = \frac{1}{m} \langle \nabla V \rangle. \quad (5.16)$$

Казалось бы, для определения средних значений физических величин достаточно классических уравнений движения. На самом деле это не так. Уравнение (5.16) не может быть непосредственно использовано для решения задач динамики, так как для определения средних значений необходима информация о волновой функции системы, которая может быть получена из решения уравнения Шредингера. Рассмотрим, однако, случай, когда величина среднего по квантовому состоянию значения импульса частицы существенно превышает его неопределенность Δp , т.е.

$$\langle p \rangle \gg \Delta p \sim \hbar/a, \quad (5.17)$$

a - начальная ширина волнового пакета. В такой ситуации перемещение частицы за некоторое время t

$$L = \langle p \rangle t / m$$

окажется много больше, чем неопределенность координаты частицы (ширина пакета) $\Delta x \sim \hbar t \tau / (ma)$, обусловленная расплыванием волнового пакета во времени

$$L \gg \Delta x(t),$$

т.е. можно приближенно считать, что частица характеризуется определенным значением координаты, совпадающим с положением «центра тяжести» пакета $\langle x(t) \rangle$.

Для того чтобы из (5.16) следовал классический закон движения для $\langle x(t) \rangle$, необходимо также выполнение условия

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle),$$

то есть среднее значение силы должно совпадать с величиной силы в «средней» точке. Последнее условие, очевидно, выполнено, если на размере Δx , определяющем ширину волнового пакета, величина $F(x)$ почти не меняется, т.е. потенциальная функция есть плавная функция координаты

$$|\nabla V| \ll V(x) / \Delta x. \quad (5.18)$$

Таким образом, условием перехода к классическому описанию движения микрообъекта является его движение с большой скоростью (см. условие (5.17)) в плавно меняющемся в пространстве силовом поле (см. (5.18)).

Оптико-механическая аналогия.

Мы уже неоднократно обращали внимание на сходство в описании движения микрочастиц в квантовой механике и распространение электромагнитных волн в пространстве. Покажем теперь, что при выполнении некоторых условий уравнения электродинамики Максвелла сводятся к уравнению, с математической точки зрения эквивалентного уравнению Шредингера.

Рассмотрим пространственно неоднородную среду, характеризующуюся диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\vec{r})$. Тогда система уравнений Максвелла для напряженностей электрического и магнитного полей может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} \text{rot} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \\ \text{rot} \vec{H} &= \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \\ \text{div}(\epsilon \vec{E}) &= 0, \\ \text{div} \vec{H} &= 0. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Воспользовавшись известной формулой векторного анализа

$$\text{rot rot} \vec{E} = \text{grad div} \vec{E} - \nabla^2 \vec{E},$$

и учитывая, что диэлектрическая проницаемость среды не зависит от времени, получим

$$\frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \nabla^2 \vec{E} - \text{grad div} \vec{E}. \quad (5.20)$$

В пространственно однородной среде $\text{div} \vec{E} = 0$ и мы получаем обычное волновое уравнение. В нашем случае ситуация оказывается более сложной, поскольку

$$\text{div}(\varepsilon \vec{E}) = \varepsilon \text{div} \vec{E} + (\vec{E} \nabla) \varepsilon = 0. \quad (5.21)$$

Пусть диэлектрическая проницаемость среды является плавной функцией координаты, т.е. на расстоянии порядка длины волны излучения величина ε практически не меняется:

$$|\nabla \varepsilon| \ll k \varepsilon,$$

$k = 2\pi/\lambda$ - волновой вектор. В этом приближении получаем, что

$$\text{div} \vec{E} \approx 0,$$

т.е. процесс распространения электромагнитной волны описывается волновым уравнением

$$\frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \nabla^2 \vec{E}, \quad (5.22)$$

где диэлектрическая проницаемость есть функция пространственной координаты. Будем искать решение уравнения (5.22) в виде линейно поляризованного пучка света, распространяющегося вдоль оси z с плавно меняющейся по пространству амплитудой:

$$E(\vec{r}, t) = E_0(\vec{r}) \exp(i(kz - \omega t)), \quad (5.23)$$

где $k = \omega/c$. Приближение медленно меняющейся амплитуды означает, что

$$|\nabla E_0| \ll k E_0. \quad (5.24)$$

Получим теперь уравнение для медленно меняющейся амплитуды $E_0(\vec{r})$. Вычисляя

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial z} &= \left(ik E_0 + \frac{\partial E_0}{\partial z} \right) \exp(i(kz - \omega t)), \\ \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} &\approx \left(-k^2 E_0 + 2ik \frac{\partial E_0}{\partial z} \right) \exp(i(kz - \omega t)) \end{aligned}$$

(здесь в силу условия (5.24) мы пренебрегли слагаемым $\partial^2 E_0 / \partial z^2$), найдем

$$\nabla^2 E \approx \left(-k^2 E_0 + 2ik \frac{\partial E_0}{\partial z} + \nabla_{\perp}^2 E_0 \right) \exp(i(kz - \omega t)). \quad (5.25)$$

Здесь $\nabla_{\perp}^2 = \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2$ - оператор Лапласа по координатам, лежащим в плоскости перпендикулярной направлению распространения пучка. Дифференцирование выражения (5.23) по времени дает

$$\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = -\omega^2 E_0 \exp(i(kz - \omega t)). \quad (5.26)$$

Вспоминая, что

$$\varepsilon = 1 + 4\pi\chi$$

(χ - восприимчивость вещества), из уравнения (5.22) с учетом (5.25) и (5.26), получим

$$ik \frac{\partial E_0}{\partial z} = -\frac{1}{2} \nabla_{\perp}^2 E_0 + \eta(\vec{r}_{\perp}, z) E_0. \quad (5.27)$$

Здесь $\eta(\vec{r}_{\perp}, z) = -2\pi k^2 \chi(\vec{r}_{\perp}, z)$, а вектор $\vec{r}_{\perp} = \{x, y\}$.

Как видно, уравнение (5.27) с математической точки зрения эквивалентно нестационарному уравнению Шредингера. Задача о временной эволюции волновой функции двумерной системы оказывается аналогична задаче о вычислении стационарного распределения амплитудного значения напряженности электрического поля в пространстве при распространении электромагнитной волны в среде. При этом координата z , вдоль которой распространяется световой пучок, аналогична времени в квантовой теории, а функция $\eta(\vec{r}_{\perp}, z)$, определяемая поляризуемостью среды, имеет смысл потенциала $V(\vec{r}_{\perp}, t)$. В частности, если $\eta(\vec{r}_{\perp}, z) = 0$ (вакуум), то задача (5.27) эквивалентна задаче о свободном движении частицы. Отметим, что среды с показателем преломления $n = \sqrt{\epsilon} > 1$ (для таких сред $\chi > 0$) в оптике называются фокусирующими. В квантовой механике им надо поставить в соответствие притягивающий потенциал $V < 0$. Наоборот, среды с $n = \sqrt{\epsilon} < 1$ ($\chi < 0$) называются дефокусирующими, в квантовой механике таким средам соответствует отталкивающий потенциал $V > 0$.

Математическая тождественность уравнения метода медленно меняющихся амплитуд в оптике и уравнения Шредингера является основой оптико – механической аналогии. Существует огромное количество квантово-механических процессов, оптические аналоги которых давно известны и хорошо изучены. В частности можно показать, что рассмотренный нами предельный переход к классической механике эквивалентен переходу от волновой оптики к геометрической, когда возникает представление о световых лучах, а интерференционные эффекты становятся пренебрежимо малыми.

Стационарное уравнение Шредингера. Спектры простейших одномерных систем.

В этом разделе мы рассмотрим ряд простейших одномерных задач об определении уровней энергии и волновых функций стационарных состояний частицы в потенциальном поле.

Свободное движение частицы.

Рассмотрим простейшую задачу об определении стационарных состояний свободной частицы. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad (5.28)$$

а стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E}{dx^2} = E \psi_E. \quad (5.29)$$

Здесь E - собственное значение оператора Гамильтона, а индекс « E » у функции подчеркивает ее принадлежность к собственному значению E . Вводя $k^2 = 2mE/\hbar^2 > 0$, перепишем (5.29) в виде

$$\psi_E'' + k^2 \psi_E = 0,$$

откуда получаем, что собственному значению E соответствуют две функции

$$\psi_E = \begin{cases} \exp(ikx), \\ \exp(-ikx), \end{cases} \quad E = \hbar^2 k^2 / 2m. \quad (5.30)$$

На значение волнового вектора k никаких ограничений не возникло, т.е. система имеет непрерывный спектр.

Найденные функции стационарных состояний совпадают с введенными ранее собственными функциями оператора импульса. Состояния (5.30) одновременно являются собственными состояниями оператора импульса, соответствующими собственным значениям $p = \pm \hbar k$. Это не удивительно, и могло быть предсказано заранее. Поскольку оператор импульса и оператор кинетической энергии (в рассматриваемом случае операторы Гамильтона и кинетической энергии тождественны) коммутируют между собой, то можно найти состояния, в которых обе физические величины энергия (кинетическая) и импульс имеют точно определенные значения.

Как видно, существует два разных состояния, которые соответствуют одному и тому же значению энергии. Такие состояния называются вырожденными. Кратность вырождения в рассматриваемом случае равна двум. Отметим, что наличие вырождения в системе позволяет построить неограниченное число состояний с одним и тем же значением энергии. Действительно, любая линейная комбинация базисных функций (5.30)

$$\psi_E = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) \quad (5.31)$$

дает состояние с тем же точно определенным значением энергии E . В частности, может быть удобен другой набор базисных состояний

$$\psi_E = \begin{cases} \sin(kx), \\ \cos(kx). \end{cases} \quad (5.32)$$

Отметим при этом, что состояния (5.32) (как и состояния (5.31) при ненулевых значениях коэффициентов A и B) уже не являются состояниями с точно определенным значением импульса.

Частица в прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме.

Рассмотрим теперь стационарные состояния частицы в потенциале

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2, \\ \infty, & |x| > a/2. \end{cases}$$

Стационарное уравнение Шредингера записывается в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x) \psi = E \psi. \quad (5.33)$$

Наша задача заключается в нахождении таких значений энергии E , при которых уравнение (5.33) имеет ненулевое решение, и соответствующих волновых функций.

В классической механике движение частицы происходит в области $x \in (-a/2, a/2)$. Естественно предположить, что и в квантовой теории частица не может быть обнаружена в области бесконечно высокого потенциала, т.е. $\psi(|x| > a/2) \equiv 0$, то есть уравнение (5.33) можно переписать в виде:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (5.34)$$

Здесь $x \in (-a/2, a/2)$. Полагая волновую функцию непрерывной, мы должны потребовать, чтобы на границах ямы она обращалась в нуль, т.е.

$$\psi(x = \pm a/2) = 0. \quad (5.35)$$

Вводя $k^2 = 2mE/\hbar^2$, запишем общее решение (5.34) в виде

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx). \quad (5.36)$$

Условия (5.35) дают:

$$\begin{aligned} A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} &= 0, \\ -A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} &= 0. \end{aligned} \quad (5.37)$$

Мы получили систему однородных уравнений для определения неизвестных коэффициентов A и B . Эта система имеет ненулевое решение, если ее определитель обращается в ноль, т.е.

$$\begin{vmatrix} \sin \frac{ka}{2} & \cos \frac{ka}{2} \\ -\sin \frac{ka}{2} & \cos \frac{ka}{2} \end{vmatrix} = 0,$$

откуда находим $\sin(ka) = 0$, то есть

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Тогда для энергии состояний имеем

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.38)$$

Решение с $n = 0$ следует отбросить, так как в этом случае из (5.35) и (5.36) получаем $\psi(x) \equiv 0$.

Таким образом, в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме формируется дискретный энергетический спектр, определяемый соотношением (5.38). Положение энергетических уровней представлено на рис.5.1. В частности, минимальная энергия частицы в яме (энергия основного состояния) есть

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (5.39)$$

и не равна нулю, как это следовало ожидать с точки зрения классической механики. Происхождение этой ненулевой энергии основного состояния легко понять исходя из соотношения неопределенностей. Действительно, если частица локализована в размере a (ширина ямы), то у нее есть неопределенность значения импульса $\Delta p \sim \hbar/a$, а с этой неопределенностью связано наличие у частицы кинетической энергии. Поскольку в рассматриваемых нами условиях среднее значение импульса частицы равно нулю (это очевидно: частица находится в одномерном статическом потенциале), то характерную величину кинетической энергии можно определить как

$$T \cong \frac{(\Delta p)^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \quad (5.40)$$

что качественно совпадает с точным значением (5.39). Конечно, речь идет лишь о качествен-

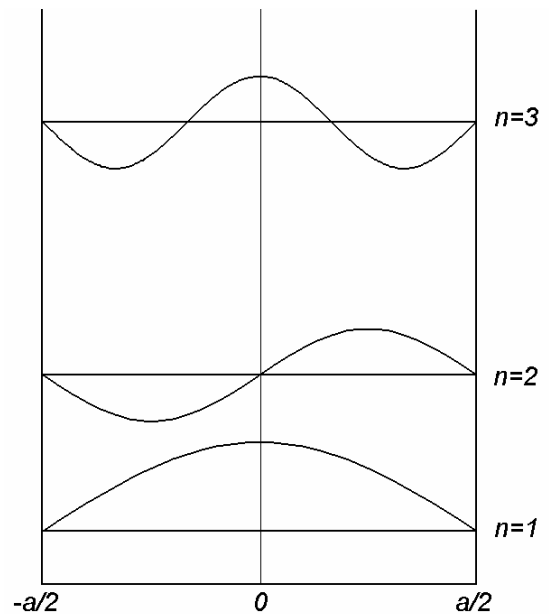


Рис.5.1. Прямоугольная потенциальная яма бесконечной глубины.

ном понимании эффекта, однако мы установили фундаментальный факт: ограничение области пространственной локализации частицы неизбежно ведет к появлению у нее чисто квантовой добавки к энергии, которая тем больше, чем меньше размер области локализации частицы. В частности, для электрона, локализованного в размере $a \sim 1 \text{ \AA}$, получаем энергию в несколько электронвольт. Аналогично, если нуклон локализован в размере $\sim 10^{-13} \text{ см}$, то его кинетическая энергия окажется порядка нескольких мегаэлектронвольт. Таким образом, зная пространственный размер системы, в квантовой теории мы тут же можем оценить некоторый минимальный масштаб энергии системы.

Закончим теперь решение задачи и найдем систему собственных функций оператора Гамильтона для частицы в яме. Из соотношений (5.37) имеем

$$B/A = \pm \operatorname{tg}(k_n a/2) = \pm \operatorname{tg}(\pi n/2).$$

Это означает, что для нечетных n $A = 0$, $B \neq 0$, а для четных, наоборот $A \neq 0$, $B = 0$, т.е. система характеризуется следующим набором состояний

$$\psi_n(x) = \begin{cases} B_n \cos \frac{n\pi x}{a}, & n = 1, 3, 5, \dots \\ A_n \sin \frac{n\pi x}{a}, & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (5.41)$$

Коэффициенты B_n и A_n должны быть определены из условия нормировки квадрата модуля волновой функции на единицу. Несложный расчет дает $A_n = B_n = \sqrt{2/a}$. Волновые функции нескольких нижних состояний также приведены на рис.5.1.

Итак, система волновых функций стационарных состояний построена. Легко в частности убедиться, что условие ортонормированности базиса выполнено, т.е.

$$\int_{-a/2}^{a/2} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}.$$

Остановимся на еще одном важном свойстве полученных базисных функций. Все они характеризуются определенной четностью: состояния с $n = 1, 3, 5, \dots$ характеризуются четными волновыми функциями, состояния с $n = 2, 4, 6, \dots$ - нечетными. С математической точки зрения удобно ввести новую физическую величину – четность и соответствующий ей оператор четности \hat{P} . Определим этот оператор следующим образом

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x). \quad (5.42)$$

А теперь рассмотрим задачу на собственные значения оператора четности:

$$\hat{P}\psi(x) = \lambda\psi(x) \quad (5.43)$$

Поддействуем на соотношение (5.43) оператором четности еще раз:

$$\hat{P}(\hat{P}\psi(x)) = \hat{P}(\lambda\psi(x)) = \lambda\hat{P}\psi(x) = \lambda^2\psi(x).$$

С другой стороны из (5.42) имеем

$$\hat{P}(\hat{P}\psi(x)) = \hat{P}(\psi(-x)) = \psi(x).$$

Поэтому $\lambda^2 = 1$, или

$$\lambda = \pm 1,$$

т.е. из (5.42), (5.43) следует, что

$$\psi(-x) = \pm\psi(x),$$

то есть собственные функции оператора четности должны быть либо четными, либо нечетными функциями координаты. Именно такому условию удовлетворяют найденные нами функции стационарных состояний. То есть мы нашли состояния, в которых сразу

две величины (энергия и четность) имеют точно определенные значения. Значит операторы, соответствующие этим величинам должны коммутировать между собой, т.е.

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0.$$

В последнем равенстве легко убедиться непосредственно, учитывая свойство симметрии потенциала $V(x) = V(-x)$. Это означает, что мы могли заранее облегчить себе задачу и искать набор функций стационарных состояний в виде системы четных и нечетных функций. Мы воспользуемся этим приемом при анализе следующей системы.

Частица в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины.

Рассмотрим теперь задачу об определении стационарных состояний частицы в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины. Пусть потенциал задан в следующем виде:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq a/2, \\ V_0, & |x| > a/2. \end{cases} \quad (5.44)$$

Запишем стационарное уравнение Шредингера в каждой из областей непрерывности потенциала (см. рис.5.2)

области I, III	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V_0 \psi = E \psi,$
область II	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi.$

Рис.5.2. Прямоугольная потенциальная яма конечной глубины.

Мы должны рассмотреть две возможности: $E < V_0$, что соответствует связанному состоянию частицы в яме, и $E > V_0$, что соответствует инфинитному движению частицы в пространстве.

Более подробно остановимся на случае связанных состояний частицы в яме $E < V_0$. Введем $k^2 = 2mE/\hbar^2$ и $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Обе введенные величины являются положительными. Тогда в каждой из областей непрерывности потенциала уравнение Шредингера имеет вид

области I, III	$\psi'' - \kappa^2 \psi = 0,$
область II	$\psi'' + k^2 \psi = 0.$

Решения этих уравнений запишем в виде

область I	$\psi_I(x) = A_I \exp(-\kappa x) + B_I \exp(\kappa x),$	(5.45)
область II	$\psi_{II}(x) = A_{II} \sin(kx) + B_{II} \cos(kx),$	
область III	$\psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-\kappa x) + B_{III} \exp(\kappa x).$	

Волновая функция должна удовлетворять условию квадратичной интегрируемости. Поэтому необходимо потребовать, чтобы коэффициенты $A_I = B_{III} = 0$. Остается четыре коэффициента $B_I, A_{II}, B_{II}, A_{III}$, для которых из условий непрерывности волновой функции и ее первой производной² легко получить четыре уравнения.

² С физической точки зрения эти условия означают требование непрерывности вектора плотности тока вероятности в точках разрыва потенциала.

Однако, можно существенно упростить решение задачи, если учесть, что в рассматриваемом нами случае состояния также характеризуются определенной четностью. Поэтому из набора функций (5.45) мы должны выделить решения, характеризующиеся определенной четностью. Рассмотрим сначала систему четных волновых функций, т.е. функций, не меняющих свой знак при инверсии координаты $\psi(x) = \psi(-x)$. Очевидно, соответствующие решения имеют вид

$$\begin{aligned} \text{область I} & \quad \psi_I(x) = B_I \exp(\kappa x), \\ \text{область II} & \quad \psi_{II}(x) = B_{II} \cos(kx), \\ \text{область III} & \quad \psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-\kappa x). \end{aligned} \quad (5.46)$$

При этом $B_I = A_{III}$. «Сшивая» функции и первые производные в точке разрыва потенциала $x = a/2$, найдем³

$$\begin{aligned} B_{II} \cos(ka/2) &= A_{III} \exp(-\kappa a/2), \\ -\kappa B_{II} \sin(ka/2) &= -\kappa A_{III} \exp(-\kappa a/2). \end{aligned}$$

Поделив одно уравнение на другое, и, учитывая, что $\kappa = \sqrt{2mV_0/\hbar^2 - k^2}$, получим

$$ka \cdot \operatorname{tg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}. \quad (5.47)$$

Полученное уравнение есть уравнение для определения энергетического спектра системы.

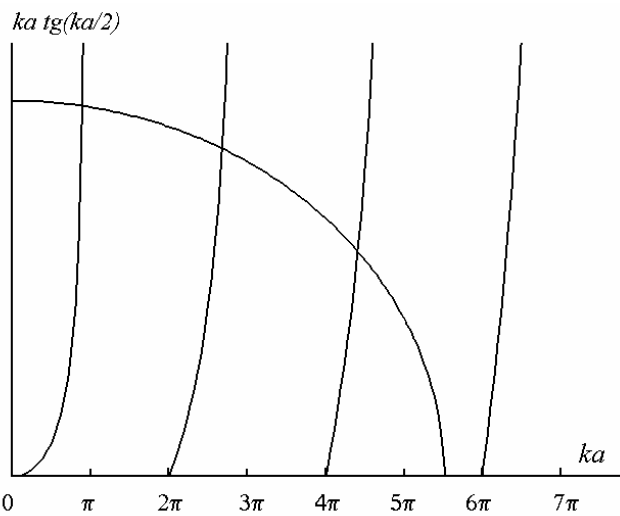


Рис.5.3. Определение положения четных состояний в прямоугольной яме конечной глубины

Будем анализировать решение уравнения (5.47) графически. Корни уравнения могут быть определены как абсциссы точек пересечения функции $f_1(\xi) = \xi \cdot \operatorname{tg}(\xi/2)$ и дуги окружности $f_2(\xi) = \sqrt{B - \xi^2}$ (здесь $\xi = ka$) радиуса $\sqrt{B} = \sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2}$ (см. рис.5.3). Как видно, хотя бы один корень уравнения, т.е. одно четное связанное состояние всегда существует. С увеличением радиуса окружности (глубины ямы, или ее ширины) число связанных состояний возрастает.

Аналогичным образом легко рассмотреть случай нечетных состояний $\psi(-x) = -\psi(x)$. Запишем для этого случая решения стационарного уравнения Шредингера в виде

$$\begin{aligned} \text{область I} & \quad \psi_I(x) = B_I \exp(\kappa x), \\ \text{область II} & \quad \psi_{II}(x) = B_{II} \sin(kx), \\ \text{область III} & \quad \psi_{III}(x) = A_{III} \exp(-\kappa x), \end{aligned} \quad (5.48)$$

причем $B_I = -A_{III}$. Так же как и в предыдущем случае из условия непрерывности функции и ее первой производной получаем уравнение для определения значений энергии нечетных состояний

³ Условия непрерывности в точке $x = -a/2$ дают такие же соотношения.

$$-ka \cdot \operatorname{ctg}(ka/2) = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} - (ka)^2}. \quad (5.49)$$

Структуру энергетического спектра, получающегося из решения уравнения (5.49), иллюстрирует рис.5.4. В рассматриваемом случае, если яма достаточно мелкая, связанного состояния может и не быть. Из графика видно, что условием его возникновения является неравенство

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \geq \pi^2. \quad (5.50)$$

При дальнейшем увеличении радиуса окружности \sqrt{B} появляются новые связанные состояния, характеризующиеся нечетной волновой функцией. Сопоставление рис.5.3 и 5.4 показывает, что, как и в случае ямы бесконечной глубины, четные и нечетные состояния чередуются: основное состояние является четным, следующее состояние – нечетное, потом – снова четное и т.д.

Важной особенностью рассматриваемой задачи является то, что структура спектра определяется параметром $B = 2mV_0 a^2 / \hbar^2$. Например, если глубина ямы увеличилась в 4 раза, а ее ширина уменьшилась в два раза, общее число связанных состояний и их относительное расположение по энергиям остается неизменным. Глубокой ямой мы будем считать яму, в которой имеется большое число состояний, т.е. $B \gg 1$. Отметим также, что решение задачи о яме бесконечной глубины является предельным случаем полученного нами решения для ямы конечной глубины при выполнении условия $B \rightarrow \infty$. Действительно, из данных, представленных на рис.5.2,

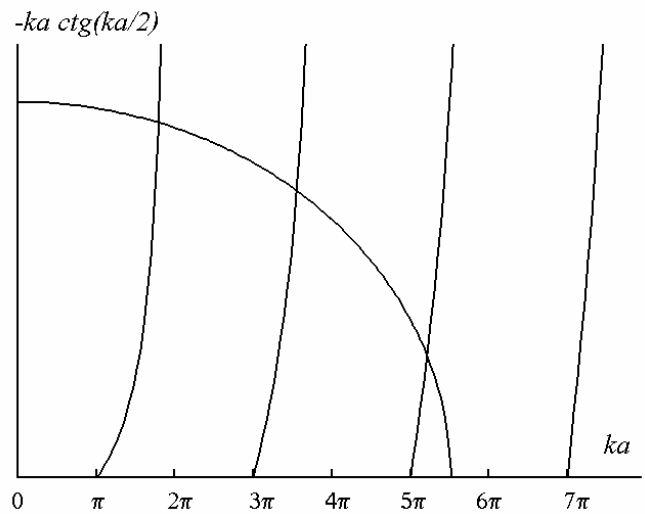


Рис.5.4. Определение положения нечетных состояний в прямоугольной яме конечной глубины.

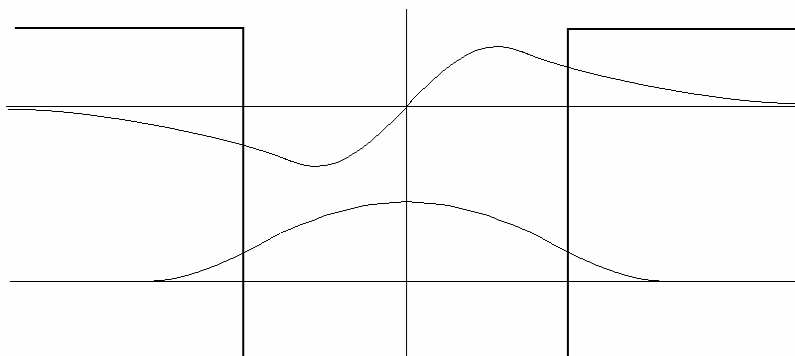


Рис.5.5. Волновые функции стационарных состояний прямоугольной ямы конечной глубины.

5.3, видно, что в этом случае корни уравнения соответствуют точкам

$$ka \rightarrow n\pi$$

($n = 1, 3, 5, \dots$ для четных и $n = 2, 4, 6, \dots$ для нечетных состояний), что как раз соответствует энергетическому спектру бесконечно глубокой ямы.

На рис. 5.5 представлены волновые функции двух нижних

состояний в потенциальной яме конечной глубины. Важной особенностью этих волновых функций является ненулевая вероятность обнаружить частицу в области классиче-

ски запрещенного движения, то есть для значений координаты $|x| > a/2$. Эту вероятность можно определить как

$$w = 2 \int_{a/2}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx.$$

Причем, чем ближе энергия состояния к величине V_0 , тем медленнее убывает волновая функция в области классически запрещенного движения, и тем больше величина w .

В заключение этого раздела остановимся на случае $E > V_0$, соответствующего инфинитному движению частицы. Решение стационарного уравнения Шредингера можно найти аналогично случаю, рассмотренному выше. При этом оказывается, что это решение существует для любого значения энергии, т.е. инфинитному движению частицы соответствует непрерывный энергетический спектр, причем стационарные состояния также двукратно вырождены: каждому значению энергии можно поставить в соответствие два разных состояния, характеризующихся различной пространственной четностью.

На этом примере отметим важную закономерность. Всякий раз, когда движение системы ограничено некоторой пространственной областью у системы возникает дискретный энергетический спектр, и, наоборот, если движение инфинитно, энергетический спектр является сплошным. Возникает континуум состояний. При этом волновые функции состояний континуума (в простейшем случае, рассмотренном нами, это волны де Бройля) не могут быть нормированы на единицу в соответствии с условием

$$\int |\psi|^2 d\tau = 1,$$

поскольку на бесконечности волновая функция таких состояний не стремится к нулю, хотя и остается ограниченной. Можно показать, что условие нормировки на δ -функцию (см. Л_4) является общим условием нормировки состояний непрерывного спектра. Как мы уже отмечали, невозможность удовлетворить условию квадратичной интегрируемости означает, что стационарные состояния в континууме не могут быть реально реализованы. На практике состояние частицы в этом случае может быть представлено как волновой пакет, составленный из состояний континуума и обладающий некоторой энергетической шириной.

Задачи.

- 5.1. Показать, что для частицы, движущейся в произвольном потенциальном поле $V(x)$, среднее по квантовому состоянию значение импульса удовлетворяет соотношению $\langle p_x \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$. Здесь $\langle x \rangle$ - среднее значение координаты, m - масса частицы.
- 5.2. Показать, что для частицы, движущейся в гармоническом потенциале $V = m\omega^2 x^2/2$, изменение во времени среднего значения координаты $\langle x(t) \rangle$ определяется классическим законом движения.
- 5.3. Частица массы m находится в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной a . Написать волновые функции хотя бы двух состояний, в которых среднее значение энергии частицы равно $\langle E \rangle = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$.
- 5.4. Состояние частицы в свободном пространстве характеризуется волновой функцией $\psi(x, y, z) = A(y, z) \sin kx$. Какие значения x - проекции импульса могут быть измерены в этом случае?

- 5.5. Частица массы m находится в основном состоянии в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной a . Найти значения p_x , которые могут быть измерены в этом состоянии. Какова вероятность их измерения? Чему равно среднее значение величины p_x ?

- 5.6. Частица массы m находится в одномерном потенциале $V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, \\ 0, & 0 \leq x \leq a. \\ V_0, & x > a. \end{cases}$

Определить, сколько связанных состояний находится в яме в следующих случаях: а) $V_0 a^2 = 75 \hbar^2 / m$, б) $V_0 a^2 = \hbar^2 / m$.

- 5.7. Определить энергию нижнего стационарного состояния частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме конечной глубины в случаях: а) $2mV_0 a^2 / \hbar^2 \ll 1$, б) $2mV_0 a^2 / \hbar^2 \gg 1$ (V_0 - глубина потенциальной ямы, a - ее ширина).
- 5.8. Показать, что волновая функция системы из двух взаимодействующих частиц может быть представлена в виде произведения волновых функций, описывающих относительное движение частиц и движение центра масс.
- 5.9. Дейтрон имеет энергию связи $E = 2.23$ МэВ, среднее расстояние между протоном и нейтроном $a = 2 \cdot 10^{-13}$ см, возбужденного состояния у дейтрона нет. Используя эти данные, оценить глубину потенциальной ямы поля ядерных сил. Указание: Яму считать прямоугольной, а ее размер положить равным расстоянию a .
- 5.10. Частица находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме в состоянии $\psi(x, t = 0) = \alpha \phi_1(x) + \beta \phi_2(x)$, $\phi_1(x)$ и $\phi_2(x)$ - волновые функции нижних стационарных состояний, α и β - действительные числа, причем $\alpha^2 + \beta^2 = 1$. Определить среднее значение и дисперсию координаты частицы как функцию времени.