КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



І. О. Ястремський

Одновимірний рух квантових частинок в прикладах та задачах (відповіді та розв'язки)

Київ-2014

УДК 530.145
ББК 22.31я73

Рецензент
д-р фіз.-мат. наук, проф. В. С. Овечко
канд. фіз.-мат. наук, доц. М. В. Максюта

Затверджено вченою радою факультету радіофізики,
електроніки та комп`ютерних систем
(протокол № 12 від 16 червня 2014 р.)

І. О. Ястремський

Одновимірний рух квантових частинок в прикладах та задачах (відповіді та розв'язки): Навчальний посібник для студентів природничих факультетів.–К. 2014.-63 с.

У збірнику наведені задачі по розрахунку хвильових функцій та енергетичних спектрів для частинок, що знаходяться в різних одновимірних потенціалах. До збірника увійшли як традиційні, так і задачі підвищеного рівня складності. Збірник розділено на дві частини. Перша частина містить короткі теоретичні відомості, приклади, задачі для самостійної роботи та математичний додаток. У другій частині наведені відповіді та розв'язки до найбільш складних задач. Збірник може бути використаний на семінарських заняттях з курсу "Квантова механіка", для проведення атестаційних контрольних робіт, для розрахунку статистичних сум у квантових системах на семінарських заняттях з курсу "Статистична фізика". Збірник може бути рекомендований студентам, аспірантам і викладачам фізико–математичних спеціальностей вищих навчальних закладів.

Зміст

Стаціонарні стани дискретного спектру...……4

Стани неперервного спектру……..34

Системи з декількома ступенями вільності…...……..59

Значення фундаментальних фізичних сталих…….61

Список літератури……62

Стаціонарні стани дискретного спектру

1. Розглянемо області I ($x<0$) та III $\left(x>a\right)$, де $V=\infty$. Записавши рівняння Шредінгера в цих областях як

$$\frac{1}{\psi_{1,3}}\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}\left(V-E\right),$$

бачимо, що хвильова функція має скінченне значення при $x=\pm\infty$ тільки тоді, коли $\psi_{1,3}$ обертається в нуль в інтервалах ($x<0$) та $\left(x>a\right)$. В області II ($0<x<a$) рівняння Шредінгера має такий вигляд

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+k^2\psi_2=0,$$

де введено позначення $k^2=2mE/\hbar^2$. Розв'язок рівняння Шредінгера $\psi_2\left(x\right)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$. З умови неперервності хвильової функції в усіх точках, і зокрема, при переході з області I в II $\psi_1\left(0\right)=\psi_2\left(0\right)$ і з II в III $\psi_2\left(a\right)=\psi_3\left(a\right)$ маємо граничні умови для функції ψ_2:

$$\psi_2\left(0\right)=0,\ \psi_2\left(a\right)=0.$$

Підставивши $\psi_2\left(x\right)$ в граничні умови, отримуємо

$$\begin{cases}\psi_2\left(0\right)=A+B=0\\ \psi_2\left(a\right)=Ae^{ika}+Be^{-ika}=0.\end{cases}$$

Умовою існування ненульового розв'язку цієї системи є рівність нулю її детермінанта: $e^{ika}-e^{-ika}=2i\sin ka=0$. З цієї умови $k_n a=\pi n, n=0,\pm1,\pm2,\ldots$. При $n=0$ хвильова функція обертається в нуль, і ця ситуація фізично не цікава. Так як значення $+n$ та $-n$ фізично еквівалентні, можливі значення хвильового вектора будуть такими $k_n=\pi n/a,$ де $n=1,2,\ldots.$ Значення A_n шукаємо з умови нормування $\int_0^a \psi_2^* \psi_2 dx=1$. Отже,

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}n\right),\ E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}n^2, n=1,2,\ldots.$$

2. $\langle x\rangle=a/2,$ $\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle=a^2\left(\frac{1}{12}-\frac{1}{2\pi^2n^2}\right),$ $\langle p\rangle=0$ та $\left\langle(\Delta p)^2\right\rangle=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{a^2}$.

3. $A=\sqrt{30/a^5}$. Розкладемо хвильову функцію за власними функціями даного потенціалу $\psi_n(x)=\sqrt{2/a}\sin(\pi nx/a),\ n=1,2,\ldots.$ Тоді

$$c_n=\sqrt{\frac{60}{a^6}}\int_0^a x(x-a)\sin\frac{\pi nx}{a}dx=-\frac{\sqrt{240}}{\pi^3}\frac{1+(-1)^{n+1}}{n^3},$$

де $|c_n|^2$ – ймовірність того, що частинка має енергію E_n. Зокрема, $|c_1|^2\approx0{,}999$. $\langle E_n\rangle=5\hbar^2/ma^2\approx1.013E_1$.

4. $\langle x\rangle=0$, $\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle=1/2k^2$, $\langle p\rangle=0$ та $\left\langle(\Delta p)^2\right\rangle=\hbar^2k^2$.

5. Шукаємо розв'язок, що описує зв'язаний стан частинки, тобто в інтервалі енергій $-V_0 < E \le 0$. У просторовій області (I) стаціонарне рівняння Шредінгера набуває вигляду

$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{I}}(x)}{dx^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0.$$

Введемо позначення $2\mu E/\hbar^2 \equiv -\varkappa^2 \le 0$, тоді $\varkappa = \sqrt{2\mu|E|}/\hbar \ge 0$. Загальний розв'язок цього рівняння є $\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{\varkappa x} + De^{-\varkappa x}$. Для забезпечення скінченності цієї функції у всій області (I) $(-\infty < x < -a/2)$, слід покласти $D=0$, тобто $\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{\varkappa x}$. Аналогічно в області (III) отримуємо $\psi_{\mathrm{III}}(x) = Ce^{-\varkappa x}$. В області (II) рівняння Шредінгера має вигляд

$$\frac{d^2\psi_{\mathrm{II}}(x)}{dx^2} + k^2\psi_{\mathrm{II}}(x) = 0,$$

де $k^2 \equiv 2\mu(E+V_0)/\hbar^2 > 0$, $k = \sqrt{2\mu(E+V_0)}/\hbar > 0$. Загальний розв'язок рівняння для області (II)

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = B_1\cos(kx) + B_2\sin(kx).$$

Оскільки кожна власна функція повинна бути або парною, або непарною, лише одна з констант B_1, B_2 може бути відмінною від нуля в даному стані. Таким чином, всі стаціонарні стани нашого гамільтоніану можуть бути розбиті на два класи:

(A) стани додатної парності, для яких $B_2 = 0$, $A = C$;

(B) стани від'ємної парності, для яких $B_1 = 0$, $A = -C$.

Щоб знайти ці константи, використаємо умови неперервності хвильової функції та її похідних у точках розриву потенціальної енергії, а саме $x = \pm a/2$. Зшивання хвильової функції класу (A) у точці $x = -a/2$ дає

$$Ae^{-\frac{1}{2}\varkappa a} = B_1 \cos\frac{ka}{2},$$

$$\varkappa Ae^{-\frac{1}{2}\varkappa a} = kB_1 \sin\frac{ka}{2}.$$

Звідси маємо

$$\begin{aligned} A &= B_1 e^{\frac{1}{2}\varkappa a}\cos\frac{ka}{2}; \\ B_1&\left(k\sin\frac{ka}{2} - \varkappa\cos\frac{ka}{2}\right) = 0. \end{aligned} \qquad (1)$$

Зшивання в точці $x = a/2$ з урахуванням того, що $A = C$, приводить до того ж результату.

Система рівнянь (1) має нетривіальні розв'язки тоді й тільки тоді, коли k та $\varkappa$ задовольняють рівнянню

$$k \cdot \mathrm{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = \varkappa. \qquad (2)$$

Для дослідження рівняння (2) можна використовувати графічний метод, якщо помітити, що умова $k^2 + \varkappa^2 = K^2$, $K \equiv \sqrt{2\mu V_0}/\hbar > 0$, є рівнянням кола з центром у точці $(k = 0, \varkappa = 0)$ і з радіусом K. Оскільки нас цікавить лише одна чверть цього кола $(k > 0, \varkappa \geq 0)$, то рівнянню (2) відповідає гра-

фік на рис. 1. Бачимо, що рівняння (2) має хоча б один розв'язок при будь-яких значеннях параметрів потенціалу V_0 та a.

Тепер розглянемо стан класу (B). Зшивання в точці $x=-a/2$ (точка $x=+a/2$ дає аналогічну систему) призводить до системи рівнянь:

$$Ae^{-\frac{1}{2}\varkappa a}=-B_2\sin\frac{ka}{2},$$

$$\varkappa Ae^{-\frac{1}{2}\varkappa a}=kB_2\cos\frac{ka}{2},$$

з якої отримуємо

$$B_2\left(k\cos\frac{ka}{2}+\varkappa\sin\frac{ka}{2}\right)=0,$$

$$A=-C=-B_2e^{\frac{1}{2}\varkappa a}\sin\frac{ka}{2}.$$

Нетривіальний розв'язок цієї системи існує тоді й тільки тоді, коли виконується умова

$$-k\cdot\operatorname{ctg}\frac{ka}{2}=\varkappa. \qquad (3)$$

Рівнянню (3) відповідає графік на рис.2. Бачимо, що рівняння (3) має розв'язок лише при $k\geq\pi/a$.

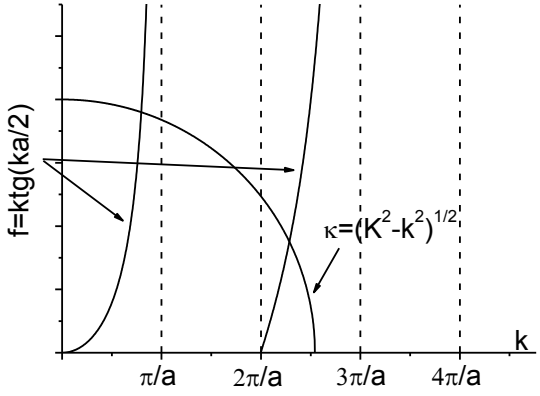


Рис. 1. Графічний аналіз рівняння $k \cdot \mathrm{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) = \varkappa$.

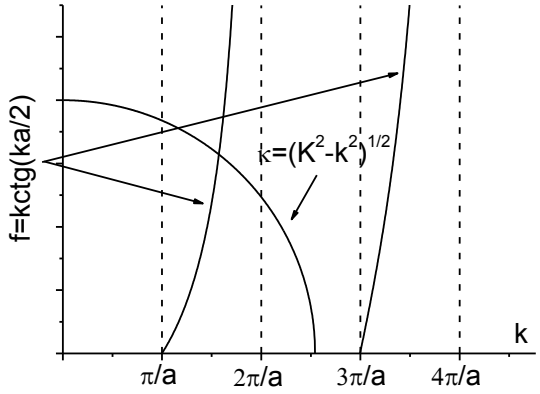


Рис. 2. Графічний аналіз рівняння $-k \cdot \mathrm{ctg}\left(\frac{ka}{2}\right) = \varkappa$.

Отже, в кожному інтервалі $(n-1)\pi/a \le k < n\pi/a$, де n=1, 2,…,N, лише одне з рівнянь (2) чи (3) може мати корінь, причому єдиний. Отже, всі корені можна пронумерувати в порядку зростання їх величини: $k_1 < k_2 \ldots < k_N$. Як було відмічено вище, корінь k_1 існує завжди. Максимальна кількість коренів N при даному значенні Ka визначається з нерівностей $(N-1)\pi/a \le K < N\pi/a$, тобто маємо

$$Ka/\pi < N \le Ka/\pi + 1.$$

Кожному кореню k_n відповідає дискретний рівень енергії

$$E_n = (\hbar^2/2\mu)k_n^2 - V_0,\ n = 1,2,3,\ldots,N.$$

Таким чином, всі власні функції, яким відповідають власні значення в інтервалі $-V_0 < E_n \le 0$, можуть бути розбиті на два класи:

(A) власні функції, що мають власні значення $E_1, E_3, E_5, \ldots$:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A_n e^{\varkappa_n x}, & x < -a/2, \\ B_n \cos k_n x, & -a/2 \le x \le a/2, \\ C_n e^{-\varkappa_n x}, & x > a/2, \end{cases}$$

$$A_n = C_n = B_n e^{\frac{1}{2}\varkappa_n a} \cos\frac{k_n a}{2}, \quad \varkappa_n = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu|E_n|}, \quad n = 1,3,5,\ldots.$$

Всі ці функції мають додатну парність.

(B) власні функції, що мають власні значення $E_2, E_4, E_6, \ldots$:

$$\psi_n(x)=\begin{cases} A_n e^{\varkappa_n x}, x<-a/2, \\ B_n \sin k_n x,\ -a/2\le x\le a/2, \\ C_n e^{-\varkappa_n x},\ x>a/2, \end{cases}$$

$$A_n=-C_n=-B_n e^{\frac{1}{2}\varkappa_n a}\sin\frac{k_n a}{2},$$

$$\varkappa_n=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu|E_n|}, n=2,4,5,\ldots.$$

Всі ці функції мають від'ємну парність.

Зауважимо, що по мірі збільшення енергії стану збільшується кількість вузлів хвильової функції (можна показати, що $\psi_n(x)$ має $n-1$ вузлів).

Для визначення множника B_n, можна скористатись умовою нормування $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n(x)|^2 dx=1.$

6. Для даного випадку рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2}+\left(\frac{m\omega^2}{2}x^2-e|\mathbf{E}|x\right)\phi=E\phi$$

може бути зведене до задачі гармонічного осцилятора виділенням повного квадрата у виразі потенціальної енергії. Вводячи

$$x_1=x-\frac{e|\mathbf{E}|}{m\omega^2},\quad \xi=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}x_1,$$

$$E_1=E+\frac{e^2|\mathbf{E}|^2}{2m\omega^2},$$

приходимо до рівняння гармонічного осцилятора

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx_1^2}+\frac{m\omega^2}{2}x_1^2\phi=E_1\phi\,.$$

Тоді власними функціями є $\phi_n=C_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)$, а власними значеннями

$$E_n=\hbar\omega\left(n+1/2\right)-e^2\left|\mathbf{E}\right|^2/2m\omega^2\,.$$

Для всіх стаціонарних станів $\beta=e^2/m\omega^2$.

7. 1) Хвильові функції парних рівнів на відрізку $0<|x|\le a$ мають наступний вигляд $\Psi^+=A\sin(k(|x|-a))$ (враховано граничну умову $\Psi(a)=0$), де $k=\sqrt{2mE/\hbar^2}>0$. Умови зшивки хвильової функції у точці $x=0$ (див. П.1) приводять до співвідношення, що визначає спектр парних рівнів:

$$-\mathrm{tg}ka=\frac{ka}{\xi}\,,\ \xi=\frac{m\alpha a}{\hbar^2}\,. \qquad (1)$$

При $\xi>>1$ для нижніх рівнів (таких, що $ka<<\xi$) у правій частині (1) стоїть мала величина. Тому $k_n a=n\pi-\varepsilon$, де $\varepsilon<<1$, а $n=1,2,...$ – порядковий номер кореня (і парного рівня); згідно (1), знаходимо $\varepsilon\approx n\pi/\xi$. Таким чином, маємо

$$E_n^+\approx\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}\left(1-\frac{2}{\xi}\right),$$

де індекс (+) вказує на парність рівня.

Для непарних рівнів хвильова функція має вигляд $\Psi^- = B\sin kx$ та умова $\Psi^-(a) = 0$ визначає їх спектр

$$E_n^- \approx \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}, n = 1,2,...$$

(так як $\Psi^-(0) = 0$, то в непарних станах частинка не відчуває наявність δ - потенціалу).

Порівняння E_n^+ та E_n^- підтверджує вказаний в умові задачі характер нижньої частини спектру.

2) Для сильно збуджених станів $ka >> \xi$ спектр парних рівнів легко знайти з (1), поклавши $k_n a = (n - 1/2)\pi + \varepsilon, \varepsilon << 1$:

$$E_n^+ \approx \frac{\hbar^2\pi^2(2n-1)^2}{8ma^2} + \frac{\alpha}{a}.$$

Тут перший доданок відповідає спектру парних рівнів у нескінченно глибокій ямі шириною $2a$, другий – зміщенню їх під дією потенціалу $\alpha\delta(x)$.

8. Рівняння Шредінгера для $x \geq 0$ заміною змінної $z = \beta(x - E/F_0)$ з $\beta = (2mF_0/\hbar^2)^{1/3}$ приводиться до вигляду $\Psi''(z) - z\Psi(z) = 0$. Його розв'язком, спадаючим при z (та x) $\to +\infty$, є функція Ейрі $\mathrm{Ai}(z)$. Відповідно, $\Psi(x) = c\mathrm{Ai}\left(\beta(x - E/F_0)\right)$, при цьому гранична умова $\Psi(0) = c\mathrm{Ai}(-\beta E/F_0) = 0$ визначає енергетичний спектр. Позначивши $-\alpha_k$, де $k = 1,2,...$, послідовність нулів функції Ейрі (вони від'ємні) у порядку зростання α_k, знаходимо рівні енергії

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2 F_0^2}{2m} \right)^{1/3} \alpha_{n+1}, n = 0,1,\ldots . \qquad (1)$$

Для основного стану, враховуючи значення $\alpha_1 \approx 2{,}338$, отримуємо $E_0 \approx 1.856(\hbar^2 F_0^2 / m)^{1/3}$.

9. Рівняння Шредінгера для заданого потенціалу має вигляд

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V_0\left(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x} \right) \right]\psi = 0 .$$

Для знаходження розв'язку цього рівняння зручно ввести нову змінну $z = e^{-\alpha x}$. Підставляючи в рівняння Шредінгера, отримуємо

$$z^2 \frac{d^2\psi}{dz^2} + z\frac{d\psi}{dz} - \beta^2 z(z-2)\psi + \varepsilon\psi = 0 ,$$

де введені нові позначення

$$\beta^2 = 2mV_0 / \hbar^2\alpha^2 , \ \varepsilon = 2mE / \hbar^2\alpha^2 . \qquad (1)$$

Дослідимо це рівняння в точках $z \to \infty \left(x \to -\infty \right)$ та $z \to 0 \left(x \to \infty \right)$. Для першого випадку отримуємо

$$\frac{d^2\psi_\infty}{dz^2} - \beta^2\psi_\infty = 0$$

(тут малі доданки $z\frac{d\psi}{dz}$, $-2\beta^2 z\psi$, $\varepsilon\psi$ – відкинуто). Розв'язок цього рівняння – $\psi_\infty = e^{-\beta z}$ (другий частинний розв'язок $e^{\beta z}$ потрібно відкинути, так як він обертається в ∞ при $z \to \infty$).

Поблизу точки $z = 0$ розв'язок будемо шукати у вигляді $\psi_0 = z^k$. Підстановка ψ_0 у рівняння дає для k вираз $k^2 = \pm\sqrt{-\varepsilon}$. Значення $\varepsilon > 0$ відповідають неперервному спектру, і обидва розв'язки $\psi_0 = z^{\pm\sqrt{-\varepsilon}} = e^{\pm\alpha i|\varepsilon|x}$ потрібно враховувати (вони є скінченими). Для випадку $\varepsilon < 0$ вимозі скінченності задовольняє лише розв'язок $\psi_0 = z^{\sqrt{-\varepsilon}}$.

Загальний розв'язок для дискретного спектру будемо шукати в вигляді

$$\psi(z) = z^{\sqrt{-\varepsilon}} e^{-\beta z} F(z).$$

Тоді, після підстановки, для $F(z)$ отримуємо рівняння

$$z^2 \frac{d^2F}{dz^2} + \left[\left(1 + 2\sqrt{-\varepsilon}\right)z - 2\beta z^2\right]\frac{dF}{dz} +$$

$$+2\beta z\left(\beta - \sqrt{-\varepsilon} - \frac{1}{2}\right)F = 0.$$

Шукаємо його розв'язок у вигляді степеневого ряду $F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$. Підставляючи $F(z)$ у рівняння й прирівнюючи коефіцієнти нулю при всіх значеннях n, отримуємо рекурентні співвідношення для a_n

$$a_{n+1} = a_n \frac{2\beta\left(n+\sqrt{-\varepsilon}-\beta+1/2\right)}{\left(n+1\right)\left(n+1+2\sqrt{-\varepsilon}\right)}\ ,\ n=0,1,2,\ldots. \qquad (2)$$

Для великих значень n це співвідношення переходить у $\frac{a_{n+1}}{a_n} \approx \frac{2\beta}{n}$ і, як наслідок, при $z\to\infty$ $F\left(z\right) \approx e^{2\beta z}$. Тому, щоб задовольнити умові скінченності $F\left(z\right)$ при $z\to\infty$, необхідно, щоб функція $F\left(z\right)$ була поліномом, тобто, потрібно обірвати ряд на деякому значенні $n=n_0$. З (2) бачимо, що це можливо, якщо буде виконуватись умова $\beta - n_0 - 1/2 = \sqrt{-\varepsilon}$ і, до того ж, величина $\sqrt{-\varepsilon}$ повинна бути невід'ємною (розглядаються зв'язані стани). Підставивши в цю умову β та ε з (1), отримуємо дискретний спектр задачі

$$E_m = -V_0\left[1-\sqrt{\frac{\hbar^2\alpha^2}{2mV_0}}\left(m+\frac{1}{2}\right)\right]^2,$$

де $m=0,1,2,\ldots$. Кількість рівнів у потенціальній ямі залежить від її глибини і визначається умовою

$$m+1/2<\beta=\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2\alpha^2}}\ .$$

Зокрема, для $\beta<1/2$ зв'язані стани відсутні.

10. Стани дискретного спектру можуть бути лише якщо $U_1>U_2/2$ (інакше потенціал не має мінімуму), причому для

значень $E < \min(0, U_1 - U_2)$. Заміна $z = -e^{x/a}$ та підстановка $\Psi = (1-z)^{-\varepsilon} z^{\mu} w(z)$ приводить рівняння Шредінгера до вигляду

$$z^2 w'' + \left[\frac{2\varepsilon z^2}{1-z} + (2\mu + 1) z \right] w' +$$

$$+ \left[\frac{\varepsilon(\varepsilon+1) z^2 - \kappa_1^2 a^2}{(1-z)^2} + \frac{(2\varepsilon\mu + \varepsilon) z + \kappa_2^2 a^2}{1-z} - \kappa^2 a^2 + \mu^2 \right] w = 0, \quad (1)$$

де $\kappa_{1,2}^2 = 2mU_{1,2} / \hbar^2, \kappa = (-2mE / \hbar^2)^{1/2}$. Якщо параметри ε та μ вибрати рівними

$$\varepsilon = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \kappa_1^2 a^2}, \mu = \sqrt{(\kappa^2 + \kappa_1^2 - \kappa_2^2) a^2},$$

то (1) зводиться до стандартного гіпергеометричного рівняння

$$z(1-z) w'' + \left[2\mu + 1 - (2\mu - 2\varepsilon + 1) z \right] w' -$$

$$- \left[\mu^2 + \kappa_1^2 a^2 - 2\varepsilon\mu - \varepsilon - \kappa^2 a^2 \right] w = 0 \quad (2)$$

з параметрами $\alpha = \mu - \varepsilon + \kappa a, \beta = \mu - \varepsilon - \kappa a, \gamma = 1 + 2\mu$. Так як $\Psi(x)$ при $x \to -\infty (z \to 0)$ має вигляд $\Psi \propto e^{\mu x/a} = z^{\mu}$, то розв'язок рівняння (2) слід вибрати у вигляді $w = cF(\alpha, \beta, \gamma, z)$. Відповідно,

$$\Psi = c \frac{1}{(1-z)^{\varepsilon}} z^{\mu} F(\alpha, \beta, \gamma, z). \quad (3)$$

Звідси, якщо z (та x) $\to +\infty$, маємо

$$\Psi \approx \tilde{c} z^{-\varepsilon+\mu} \left\{ \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)} \frac{1}{(-z)^{\alpha}} + \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)} \frac{1}{(-z)^{\beta}} \right\}. \quad (4)$$

Так як $z^{-\varepsilon+\mu-\beta} = e^{\kappa x}$ зростає при $x \to +\infty$, то необхідно вимагати виконання умови $\alpha = -n$, де n – ціле, яке визначає енергетичний спектр

$$\sqrt{-E_n} + \sqrt{U_1 - U_2 - E_n} =$$

$$= \sqrt{U_1 + \frac{\hbar^2}{8ma^2}} - \sqrt{\frac{\hbar^2}{8ma^2}} \left(n + \frac{1}{2} \right), n = 0,1,...$$

Відмітимо, що при $U_1 = U_2 \equiv U_0$ розглянутий потенціал переходить у $U = -\dfrac{U_0}{4\mathrm{ch}^2(x/2a)}$.

11. Якщо $U(x)$ спадає швидше, ніж $1/x^2$, то рівняння Шредінгера та його розв'язок при $x \to \pm\infty$ набувають вигляду $\Psi'' = 0, \Psi = A_{\pm} + B_{\pm} x$, тобто розв'язок є, взагалі кажучи, зростаючим. При довільних значеннях параметрів потенціалу не існує розв'язку рівняння Шредінгера, яке не зростало б як при $x \to +\infty$, так і при $x \to -\infty$ (точно так, як і не існує спадаючого одночасно при $x \to \pm\infty$ розв'язку рівняння Шредінгера при довільних значеннях енергії $E < 0$). Такі розв'язки існують тільки при певних значеннях параметрів потенціалу, які відповідають умовам появи нових станів дискретного спектру із зростанням глибини потенціальної ями.

Щоб пояснити сказане, розглянемо самий верхній рівень E_n дискретного спектру. Його власні функції $\Psi_n \propto \exp\{-\kappa|x|\}$ при $x \to \pm\infty$, де $\kappa = \sqrt{2m|E_n|/\hbar^2}$. Із зменшенням глибини ями всі рівні зміщуються вгору та при деяких значеннях параметрів поля самий верхній із них набуває значення $E_n = 0$, при цьому його власні функції $\Psi_n = \text{const}$ якщо $x \to \pm\infty$, а кількість нулів власних функцій дорівнює кількості наявних станів дискретного спектру з $E < 0$ (наприклад, для вільної частинки рівняння Шредінгера має розв'язок $\Psi_{E_0} = \text{const}$, в якого відсутні нулі). У відповідності до вищесказаного, як завгодно мала яма вже зв'язує частинку, і, стан який виникає, є першим за чергою.

12. Знайдемо спочатку умову появи нового за чергою стану дискретного спектру із збільшенням глибини ями. Не зростаючий розв'язок при $x \to \pm\infty$ рівняння Шредінгера з $E = 0$ має вигляд: $\Psi = A$, якщо $x < 0$; $\Psi = B\cos(\gamma x + \delta)$, якщо $0 < x < a$ (область ями), $\gamma = \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$ та $\Psi = C$ якщо $x > a$. Неперервність хвильової функції та її похідної в точках 0 та a дають:

$$A = B,\ \delta = 0,\ \gamma a = \pi n,$$

де n – ціле, $C = (-1)^n B$. Ця хвильова функція має n нулів (аргумент косинуса змінюється від 0 до πn), так що умова $\gamma a = \pi n$ є умовою появи $(n+1)$-го рівня. Звідси випливає, що кількість існуючих в ямі станів дискретного спектру $N_{зв}$ визначається умовою

$$\gamma a/\pi < N_{зв} < \gamma a/\pi + 1.$$

13. Якщо $0 < m\alpha a/\hbar^2 < 1$ – один зв'язаний стан, якщо $m\alpha a/\hbar^2 > 1$ – два.

14. а) $\sqrt{2mV_0a^2}/\pi\hbar - 1/2 < N_{зв} < \sqrt{2mV_0a^2}/\pi\hbar + 1/2$;

б) єдиний зв'язаний стан з'являється якщо $mV_0a/\hbar^2 > 1/2$.

15. Станам дискретного спектру відповідають $E < U_2$. Умову появи нових (або першого) станів дискретного спектру зі збільшенням глибини ями можна отримати з умови існування не зростаючого при $x \to \pm\infty$ розв'язку рівняння Шредінгера з $E = U_2$, (порівняти з 11). Умова має вигляд

$$\operatorname{tg}\sqrt{\frac{2mU_2a^2}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{U_1}{U_2} - 1},$$

причому порядковий номер N рівня визначається умовою

$$\left(N - \frac{3}{2}\right)\pi < \sqrt{\frac{2mU_2a^2}{\hbar^2}} < \left(N - \frac{1}{2}\right)\pi.$$

Відповідно, умова існування зв'язаних станів наступна:

$$\sqrt{\frac{2mU_2a^2}{\hbar^2}} \geq \operatorname{arctg}\sqrt{\frac{U_1 - U_2}{U_2}}.$$

Зокрема, якщо $U_1 = \infty$ необхідно, щоб $U_2 \geq \pi^2\hbar^2/8ma^2$; якщо $U_1 = U_2$, то хоча б один стан дискретного спектру існує завжди.

16. Середнє значення сили, що діє зі сторони частинки на праву яму, дається інтегралом

$$\overline{\left(F_{np}\right)_{nn}} = \int_0^\infty \frac{dU}{dx}\Psi_n^2(x)dx .$$

Виконавши інтегрування частинами та скориставшись рівнянням Шредінгера, отримуємо

$$\overline{\left(F_{np}\right)_{nn}} = E_n\Psi_n^2(0) + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi'(0)\right)^2 . \qquad (1)$$

Для парних станів $\Psi_n'(0)=0$ і, так як $E_n<0$, то $\overline{\left(F_{np}\right)_{nn}}<0$; для непарних рівнів $\Psi_n(0)=0$ та $\overline{\left(F_{np}\right)_{nn}}>0$, що доводить твердження задачі.

17. Дослідження поведінки розв'язку рівняння Шредінгера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V_0\left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a}\right)^2\right]\psi = 0$$

при $x\to\infty$ показує, що ψ має асимптотичний вигляд $\psi \sim \exp(-\xi)$, де $\xi = \sqrt{2\mu V_0}\,x^2/\hbar a$ – нова незалежна змінна. Якщо $x\to 0$, то ψ пропорційна ξ^ν, де

$$\nu = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}+1}+1\right).$$

Робимо підстановку

$$\psi = e^{-\xi/2}\xi^{\nu/2}U(\xi)$$

та отримуємо для $U(\xi)$ наступне рівняння:

$$\xi\frac{d^2U}{d\xi^2}+\left(\nu+\frac{1}{2}-\xi\right)\frac{dU}{d\xi}-\left[\frac{\nu}{2}+\frac{1}{4}-\frac{\mu a(E+2V_0)}{2\hbar\sqrt{2\mu V_0}}\right]U=0\,. \qquad (1)$$

Рівняння (1) є рівнянням для виродженої гіпергеометричної функції і загальний його розв'язок має вигляд

$$U\left(\xi\right)=c_1F\left(\alpha,\nu+\frac{1}{2},\xi\right)+c_2F(\alpha-\nu+\frac{1}{2},\frac{3}{2}-\nu,\xi)\xi^{\frac{1}{2}-\nu},$$

де через α позначено вираз у квадратних дужках рівняння (1).

З умови скінченності $\psi(0)$ випливає $c_2=0$. Крім того, необхідно щоб хвильова функція при $x\to\infty$ спадала, тобто, щоб функція $U\left(\xi\right)$ зводилась до поліномів. Це можливо, якщо $a=-n$ $(n=0,1,2,\ldots)$, звідки знаходимо рівні енергії

$$E_n=\frac{2\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}\left\{n+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1}-\sqrt{\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}}\right)\right\}.$$

Таким чином, енергетичний спектр (за відповідного вибору початку відліку енергії) такий самий, як і в гармонічного осцилятора з циклічною частотою $\omega=\sqrt{8V_0/\mu a^2}$. Цікаво відмітити,

що нульова енергія частинки для потенціалу $V(x)=V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2$ завжди перевищує нульову енергію відповідного осцилятора. Хвильові функції мають вигляд

$$\psi_n = c_n x^{\nu} e^{-\sqrt{\frac{\mu V_0}{2\hbar^2 a^2}}x^2} F\left(-n, \nu+\frac{1}{2}, \sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 a^2}}x^2\right),$$

де

$$\nu = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}+1}+1\right),$$

а постійні c_n можуть бути знайдені з умови нормування.

18. У рівнянні Шредінгера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E+\frac{V_0}{\mathrm{ch}^2(x/a)}\right]\psi = 0$$

зробимо підстановку

$$\psi = \left(\mathrm{ch}\frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} U,$$

$$\lambda = \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}+1}-1\right).$$

Тоді рівняння для U набуває наступного вигляду:

$$\frac{d^2U}{dx^2}-\frac{4\lambda}{a}\operatorname{th}\frac{x}{a}\frac{dU}{dx}+\frac{4}{a^2}\left(\lambda^2-\varkappa^2\right)U=0,$$

де $\varkappa=\sqrt{-\mu Ea^2/2\hbar^2}$ (розглянемо дискретний спектр $E<0$). Якщо ввести нову незалежну змінну $z=-\operatorname{sh}^2\left(x/a\right)$, то це рівняння зводиться до гіпергеометричного рівняння

$$z(1-z)\frac{d^2U}{dz^2}+\left[\frac{1}{2}-(1-2\lambda)z\right]\frac{dU}{dz}-\left(\lambda^2-\varkappa^2\right)U=0. \quad (1)$$

Порівнюючи загальний вигляд гіпергеометричного рівняння

$$z(1-z)\frac{d^2U}{dz^2}+[\gamma-(\alpha+\beta+1)z]\frac{dU}{dz}-\alpha\beta U=0$$

з (1), знаходимо параметри α,β,γ:

$$\gamma=1/2,\ \alpha=\varkappa-\lambda,\ \beta=-\varkappa-\lambda.$$

Два розв'язки рівняння (1), які дають відповідно парні і непарні хвильові функції ψ, мають вигляд

$$U_1=F\left(-\lambda+\varkappa,-\lambda-\varkappa,\frac{1}{2};\ z\right), \quad (2)$$

$$U_2=\sqrt{z}F\left(-\lambda+\varkappa+\frac{1}{2},-\lambda-\varkappa+\frac{1}{2},\frac{3}{2};\ z\right). \quad (3)$$

Ці розв'язки приводять до скінчених значень хвильових функцій при $x=0$ $(z=0)$. Для того, щоб хвильова функція

$$\psi=\left(\mathrm{ch}\frac{x}{a}\right)^{-2\lambda}U$$

прямувала до нуля при $x\to\pm\infty$ $(z\to-\infty)$, гіпергеометричні функції у виразах (2), (3) повинні зводитись до поліномів. Ця умова означає, наприклад для U_1, що або $\lambda-\varkappa$, або $\lambda+\varkappa$ є цілими невід'ємними числами. Але другий випадок повинен бути відкинутий, оскільки у цьому випадку хвильова функція при $x\to\pm\infty$ має експоненціальне зростання. Тому ми отримуємо $\lambda-\varkappa=k$ $(k=0,1,2,\ldots)$ і рівні енергії такі:

$$E_k=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1}-2k-\frac{1}{2}\right]^2.$$

Аналогічно для виразу (3) знаходимо, що умова скінченності хвильової функції при $x\to\pm\infty$ виконується, якщо

$$\lambda-\varkappa-\frac{1}{2}=l,\ (l=0,1,2,\ldots),$$

звідки

$$E_l=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1}-(2l+1)-\frac{1}{2}\right]^2.$$

Об'єднуючи ці вирази, знаходимо

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}+1}-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2,\ (n=0,1,2,\ldots).$$

Кількість дискретних рівнів енергій дорівнює найбільшому цілому числу N, що задовольняє нерівності

$$N < \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}+1}-\frac{1}{2}.$$

Відмітимо, що отриманий спектр енергій збігається при відповідному виборі параметрів зі спектром для потенціалу Морза.

19. У хвильовому рівнянні

$$\frac{d^2\phi}{dx^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-V_0\operatorname{ctg}^2\frac{\pi}{a}x\right)\phi=0$$

зробимо підстановку $\phi=\left(\sin\left(\pi x/a\right)\right)^{-2\lambda}u$. Вводячи

$$\lambda=\frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\pi^2\hbar^2}+1}-1\right),$$

$$\nu=\sqrt{\frac{\mu a^2}{2\pi^2\hbar^2}(E+V_0)},$$

переходимо до рівняння для u:

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 4\frac{\pi}{a}\lambda \operatorname{ctg}\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cdot\frac{du}{dx} + \frac{4\pi^2}{a^2}\left(\nu^2 - \lambda^2\right)u = 0\,.$$

Введемо незалежну змінну $z = \cos^2\left(\pi x / a\right)$. Тоді рівняння для u зводиться до гіпергеометричного

$$z\left(1-z\right)\frac{d^2u}{dz^2} + \left[\frac{1}{2} - \left(1-2\lambda\right)z\right]\frac{du}{dz} + \left(\nu^2 - \lambda^2\right)u = 0\,. \qquad (1)$$

Порівнюючи з загальним виглядом гіпергеометричного рівняння

$$z\left(1-z\right)\frac{d^2u}{dz^2} + \left[\gamma - \left(\alpha+\beta+1\right)z\right]\frac{du}{dz} - \alpha\beta u = 0\,,$$

знаходимо параметри

$$\gamma = 1/2\,,\ \alpha = -\nu - \lambda\,,\ \beta = \nu - \lambda\,.$$

Рівняння (1) має два розв'язки, один з яких не рівний нулю і скінчений якщо $z = 0$ ($x = a/2$)

$$u_1 = F\left(-\nu-\lambda,\ \nu-\lambda,\ 1/2; z\right),$$

а другий розв'язок

$$u_2 = \sqrt{z}F\left(-\nu-\lambda+1/2, \nu-\lambda+1/2, 3/2; z\right)$$

обертається в нуль при $z = 0$. Щоб знайти поведінку при $z = 1$ (відповідає точкам $x = 0$ та $x = a$), скористаємось співвідношенням

$$F(\alpha,\beta,\gamma;z)=(1-z)^{-\alpha}F(\alpha,\gamma-\beta,\gamma;z/(z-1)).$$

Тоді отримуємо

$$u_1=(1-z)^{\nu+\lambda}F\left[-\nu-\lambda,-\nu+\lambda+\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{z}{z-1}\right], \tag{2}$$

$$u_2=\sqrt{z}(1-z)^{\nu+\lambda-1/2}\times F\left[-\nu-\lambda+\frac{1}{2},-\nu+\lambda+1,\frac{3}{2};\frac{z}{z-1}\right]. \tag{3}$$

Щоб виконати умови обертання хвильової функції у нуль при $x=0$ та $x=a$, необхідно, щоб ряди за степенями $z/(z-1)$ мали скінчену кількість доданків. Гіпергеометричний ряд у рівнянні (2) для u_1 обривається, якщо, або

$\nu+\lambda$ – ціле додатне число або нуль,

або $\nu-\lambda-\frac{1}{2}$ – ціле додатне число або нуль.

Але умові $\phi=0$ при $x=0$, $x=a$ задовольняє лише другий випадок

$$\nu-\lambda-1/2=k\ \ (k=0,1,\ldots).$$

Рівні енергії при цьому

$$E_k=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left[(2k+1)^2+4(2k+1)\lambda-2\lambda\right]. \tag{4}$$

Аналогічний розгляд рівняння (3) показує, що рівні енергії визначаються умовою

$$\nu - \lambda = l \ \left(l = 1,2,3,\ldots\right).$$

Тоді, загальний вигляд для рівнів енергії має вигляд

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left(n^2 + 4n\lambda - 2\lambda\right), (n = 1,2,3,\ldots).$$

Непарним значенням n відповідають хвильові функції

$$\phi_n = C_n\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^{-2\lambda} F\left(-\frac{n}{2} - 2\lambda, \frac{n}{2}, \frac{1}{2}; \cos^2\frac{\pi x}{a}\right),$$

а парним n відповідають

$$\phi_n = C_n\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^{-2\lambda} \cos\frac{\pi x}{a} \times$$
$$F\left(-\frac{n}{2} - 2\lambda + \frac{1}{2}, \frac{n}{2} + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; \cos^2\frac{\pi x}{a}\right).$$

Нормована хвильова функція основного стану

$$\phi = \sqrt{\frac{\pi\Gamma\left(2\lambda+1\right)}{a\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(2\lambda+\frac{3}{2}\right)}}\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^{2\lambda+1}, \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}\ .$$

Розглянемо граничний випадок $V_0 \to 0$. При цьому задача зводиться до задачі про частинку в потенціальному ящику. Величина λ обертається в нуль та для рівнів енергії отримуємо очікувану формулу

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} n^2 .$$

У протилежному випадку $\lambda \gg 1$ для нижчих рівнів $n \ll \lambda$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), (n = 1,2,3,\ldots),$$

де

$$\omega = \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}} .$$

Цей результат можна отримати, розклавши в ряд потенціальну енергію поблизу точки $x = a/2$ та обмежившись квадратичними доданками.

20. Осцилятор в n-му квантовому стані характеризується хвильовою функцією

$$\psi = C_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) .$$

За визначенням

$$\left\langle x^2 \right\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 x^2 dx = C_n^2 \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2 \xi^2 d\xi .$$

Підставляючи вираз для полінома Ерміта H_n та інтегруючи n разів частинами, маємо

$$\left\langle x^2 \right\rangle_n = C_n^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (-1)^n \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \left(H_n \xi^2 \right) d\xi =$$

$$= C_n^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n \left(H_n \xi^2 \right)}{d\xi^n} d\xi .$$

Очевидно,

$$\frac{d^n \left(H_n \xi^2 \right)}{d\xi^n} = \frac{d^n}{d\xi^n} \left(a_n \xi^{n+2} + a_{n-2} \xi^n + ... \right) =$$

$$= a_n \frac{(n+2)!}{2!} \xi^2 + n! a_{n-2}.$$

При цьому $a_n = 2^n$, а $a_{n-2} = -\frac{a_n n(n-1)}{4}$. Підставляючи в $\left\langle x^2 \right\rangle_n$ інтеграли, які туди входять:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}\,, \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{2},$$

отримуємо

$$\left\langle x^2 \right\rangle_n = C_n^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\frac{(n+2)!}{2} 2^n \frac{\sqrt{\pi}}{2} - 2^n \frac{n(n-1)}{4} n! \sqrt{\pi} \right] =$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sqrt{\pi}}{4} 2^n n! \left[(n+1)(n+2) - n(n-1) \right] =$$

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

Відповідно,

$$\langle V\rangle_n = \frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle_n = \frac{\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}{2} = \frac{E_n}{2}.$$

21. Так як для одновимірного випадку оператор кінетичної енергії $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$, то

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{d^2\psi}{dx^2}dx = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{d\psi}{dx}\right|^2 dx.$$

У даному випадку $n=3$ та $\psi = \psi_3 = C_3 e^{-\xi^2/2}H_3(\xi)$, де $H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$. Виконуючи заміну змінної $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi$ та підставляючи значення $C_3^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{2^3 3!}$, отримуємо

$$\langle T\rangle_3 = \frac{\hbar\omega}{2\sqrt{\pi}}\frac{1}{2^2 3!}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{d}{d\xi}\left[e^{-\xi^2/2}\left(8\xi^3-12\xi\right)\right]\right\}^2 d\xi =$$

$$= \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\pi}3!}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}\left(4\xi^8 - 36\xi^6 + 93\xi^4 - 54\xi^2 + 9\right)d\xi.$$

Інтеграли, що тут зустрічаються, беруться просто, якщо застосувати диференціювання за параметром. Так як

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha\xi^2} d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},$$

то

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi^{2n} e^{-\alpha\xi^2} d\xi = \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha\xi^2} d\xi =$$

$$= \frac{1\cdot 3\cdot \ldots \cdot (2n-1)}{2^n} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}}$$

та

$$\langle T \rangle_3 = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\pi}3!} \cdot \frac{21}{2}\sqrt{\pi} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(3+\frac{1}{2}\right).$$

Стани неперервного спектру

22. Розглянемо області I ($x<0$) та II $(x>0)$. Записавши рівняння Шредінгера в області I

$$\frac{1}{\psi_1}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}(V-E),$$

бачимо, що хвильова функція має скінчене значення для $x=-\infty$ тільки тоді, коли ψ_1 обертається в нуль для від'ємних x. Для області II

$$\psi_2(x)=A\exp(ikx)+B\exp(-ikx),$$

де $k(E)=\sqrt{2mE/\hbar^2}$. З умови неперервності хвильової функції у точці $x=0$:

$$A=-B \text{ і } \psi_2(x,E)=A(E)\sin\left[k(E)\cdot x\right].$$

Амплітуду $A(E)$ шукаємо з умови нормування на дельта-функцію:

$$\int_0^\infty \psi_2^*(x,E)\psi_2\left(x,E'\right)dx=\delta\left(E-E'\right).$$

Підставляючи $\psi_2(x,E)$ в умову нормування та використовуючи представлення δ –функції

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx = 2\pi \cdot \delta(x),$$

отримуємо

$$\int_0^{\infty} \psi_2^*(x,E)\psi_2\left(x,E'\right)dx = \frac{|A|^2}{2}\pi \cdot \delta\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\left(\sqrt{E}-\sqrt{E'}\right)\right).$$

Розписуючи δ – функцію

$$\delta\left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\left(\sqrt{E}-\sqrt{E'}\right)\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\delta\left(E-E'\right)}{1/2\sqrt{E}},$$

отримуємо шукану хвильову функцію

$$\psi_2(x) = \sqrt[4]{\frac{2m}{\pi^2\hbar^2 E}}\sin\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}\,x\right).$$

23. Розкладемо хвильову функцію в інтеграл Фур'є

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} B(k)e^{ikx}dk,$$

де $B(k)dk$ – амплітуда хвиль з хвильовими векторами в інтервалі від k до $k+dk$. Звідси маємо

$$B(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)e^{-ikx}dx = \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i(k_0-k)x-x^2/2a^2}dx.$$

Виділимо повний квадрат в експоненті

$$B(k)=\frac{A}{2\pi}e^{-\frac{a^2(k_0-k)^2}{2}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-\left(x-ia^2(k_0-k)\right)^2/2a^2}dx\,.$$

Зробивши заміну $y=x-ia^2(k_0-k)$, зводимо шуканий інтеграл до табличного інтеграла Пуассона

$$B(k)=\frac{A}{2\pi}e^{-\frac{a^2(k_0-k)^2}{2}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2/2a^2}dy=\frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{a^2(k_0-k)^2}{2}}\,.$$

Величина

$$B(k)B^*(k)dk=\frac{A^2a^2}{2\pi}e^{-a^2(k_0-k)^2}$$

визначає ймовірність того, що частинка має хвильовий вектор в інтервалі від k до $k+dk$. Ширина хвильового пакета в k - просторі $\Delta k=1/a$.

24. Позначимо хвильову функцію для $x<0$ як $\varphi_I(x)$, а для $x\geq 0$ як $\varphi_{II}(x)$. У випадку $E>V_0$

$$\varphi_I(x)=C_1e^{ik_1x}+C_2e^{-ik_1x},\ \varphi_{II}(x)=C_3e^{ik_2x},$$

де $k_1^2=2mE/\hbar^2$, $k_2^2=2m(E-V_0)/\hbar^2$, а коефіцієнти C_i визначаються з системи

$$C_2/C_1=(k_1-k_2)/(k_1+k_2);$$

$$C_3/C_1=2k_1/(k_1+k_2)\,.$$

Звідси маємо

$$j_{пад} = \frac{\hbar k_1}{m}|C_1|^2,\ j_{від} = -\frac{\hbar k_1}{m}|C_2|^2;$$

$$R = |k_1 - k_2|^2 / |k_1 + k_2|^2,\ D = \left|4k_1k_2 / (k_1 + k_2)^2\right|.$$

Випадок $E < V_0$. $\varphi_I(x) = C_1e^{ik_1x} + C_2e^{-ik_1x}$, $\varphi_{II}(x) = C_3e^{-\lambda x}$, де $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$, $\lambda^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$;

$$R = |k_1 - i\lambda|^2 / |k_1 + i\lambda|^2 = 1,\ D = 0.$$

25. Коефіцієнти відбиття та проходження $R = |J_в / J_{пад}|$ і $D = |J_п / J_{пад}|$. Знайдемо хвильові функції, які характеризують падаючу хвилю, відбиту хвилю та хвилю, яка пройшла крізь бар'єр. Позначаючи I – область $x < 0 (V = 0)$, $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$; II – область $0 \le x \le a (V = V_0)$, $k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$ і III – область $x > a (V = 0)$. Запишемо рівняння Шредінгера та його розв'язок у кожній області:

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k_1^2\psi_I = 0, \qquad \psi_I = C_1e^{ik_1x} + C_2e^{-ik_1x};$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + k_2^2\psi_{II} = 0; \qquad \psi_{II} = C_3e^{ik_2x} + C_2e^{-ik_2x};$$

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + k_1^2\psi_{III} = 0, \qquad \psi_{III} = C_5e^{ik_1x} + C_6e^{-ik_1x}.$$

Вважаємо $C_6 = 0,$ оскільки в області III є тільки хвиля, що пройшла. Умови неперервності хвильової функції ψ та її похідних $d\psi/dx$ у точках $x = 0$ і $x = a$ приводить до наступної системи рівнянь для C_i:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0); \qquad C_1 + C_2 = C_3 + C_4;$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0}; \quad ik_1(C_1 - C_2) = ik_2(C_3 - C_4);$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a); \qquad C_3 e^{ik_2 a} + C_4 e^{-ik_2 a} = C_5 e^{ik_1 a};$$

$$\left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\psi_{III}}{dx}\right|_{x=a}; \quad ik_2\left(C_3 e^{ik_2 a} - C_4 e^{-ik_2 a}\right) = ik_1 C_5 e^{ik_1 a}.$$

Звідси можна визначити відношення між коефіцієнтами $\frac{C_i}{C_1}$ $(i = 2,3,4,5)$. Підставляючи в формулу для густини струму ймовірності $j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{d\psi^*}{dx} - \psi^*\frac{d\psi}{dx}\right)$, знаходимо

$$j_{пад} = \frac{\hbar k_1}{m}|C_1|^2; \quad j_в = -\frac{\hbar k_1}{m}|C_2|^2;$$

$$j_{пр} = \frac{\hbar k_1}{m}|C_5|^2$$

і $R = |C_2 / C_1|^2; \qquad D = |C_5 / C_1|^2$. Із системи рівнянь знаходимо вирази для відношень $C_2/C_1 = \Delta_2/\Delta_1; C_5/C_1 = \Delta_5/\Delta_1$, де

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -\frac{k_2}{k_1} & \frac{k_2}{k_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_2a} & e^{-ik_2a} & -e^{ik_1a} \\ 0 & e^{ik_2a} & -e^{-ik_2a} & -\frac{k_1}{k_2}e^{ik_1a} \end{vmatrix} =$$

$$= 4e^{ik_1a}\left[\cos k_2a - \frac{i(k_1^2+k_2^2)\sin k_2a}{2k_1k_2}\right];$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -\frac{k_2}{k_1} & \frac{k_2}{k_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_2a} & e^{-ik_2a} & -e^{ik_1a} \\ 0 & e^{ik_2a} & -e^{-ik_2a} & -\frac{k_1}{k_2}e^{ik_1a} \end{vmatrix} =$$

$$= \frac{2e^{ik_1a}}{k_1k_2} i\left(k_2^2 - k_1^2\right)\sin k_2a\,;$$

$$\Delta_5 = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & -\frac{k_2}{k_1} & \frac{k_2}{k_1} & -1 \\ 0 & e^{ik_2a} & e^{-ik_2a} & 0 \\ 0 & e^{ik_2a} & -e^{-ik_2a} & 0 \end{vmatrix} = 4\,.$$

Підставляючи $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_5$ у вирази для R і D, вважаючи при цьому, що $E > V_0$ (k_2 – дійсне число) та виконуючи деякі спрощення, одержуємо

$$R = \frac{(k_2^2 - k_1^2)\sin^2 k_2 a}{\left|2k_1 k_2 \cos k_2 a - i(k_2^2 + k_1^2)\sin k_2 a\right|^2} =$$

$$= \frac{(k_2^2 - k_1^2)\sin^2 k_2 a}{4k_1^2 k_2^2 + (k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2 k_2 a};$$

$$D = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2 k_2 a}.$$

Легко помітити, що $D + R = 1$ і для $k_2 a = \pi n$ бар'єр прозорий, тобто $D = 1, R = 0$. Розв'язок придатний як для $V_0 > 0$, так і для випадку $V_0 < 0$ (коли частинка проходить над потенціальною ямою).

Для випадків $V_0 > 0$ і $E < V_0$ отримуємо уявне $k_2 = i\beta$. Тоді $\sin k_2 a = i\,\mathrm{sh}\beta a$ і ми знаходимо вирази для R і D:

$$R = \frac{(k_1^2 + \beta^2)^2 \mathrm{sh}^2 \beta a}{4k_1^2\beta^2 + (k_1^2 + \beta^2)^2 \mathrm{sh}^2 \beta a};$$

$$D = \frac{4k_1^2\beta^2}{4k_1^2\beta^2 + (k_1^2 + \beta^2)^2 \mathrm{sh}^2 \beta a}.$$

Якщо $\beta a \gg 1$, то можна отримати

$$D \approx \frac{16k_1^2\beta^2}{(k_1^2+\beta^2)^2} e^{-2\beta a}.$$

26. Значення E, при яких частинки не відбиваються від бар'єру, є коренями рівняння

$$\mathrm{tg}k\alpha = -\frac{k\hbar^2}{\alpha m}; \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0.$$

Зазначимо, що при розв'язанні рівняння Шредінгера в асимптотиці (III) власних функцій необхідно відкинути член, який відповідає відбитим частинкам, тобто одразу покласти $A = 0$, і в точках $x = 0$ та $x = a$ скористатися умовами зшивки, встановленими в П.1**.**

27. Якщо розмістити початок координат на межі метал-вакуум, то для характеристики сил, які не дають електронам вийти з металу, припускаємо, що потенціальна енергія електронів у металі нижча їх енергії у вакуумі на V_0, тобто, $V = 0$ для $x < 0$ (у металі) і $V = V_0$ для $x > 0$. Нехай вісь *Ox* є перпендикулярною до поверхні металу. Якщо $\vec{E}$ орієнтована уздовж осі *Ox*, то для $x > 0$ потенціальна енергія дорівнює $V(x) = V_0 - e\left|\vec{E}\right|x$ і ймовірність виходу електрона через такий бар'єр буде визначатися коефіцієнтом проходження

$$D = D_o e^{-2\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{V(x)-E_x}dx}.$$

Задача виявляється одновимірною і зводиться до обчислення інтегралу, який стоїть у показнику степеня. Суттєвий тільки рух уздовж осі *Ox* і $E_x = p_x^2/2m$ – кінетична енергія цього руху. То-

чки зупинки x_1 і x_2 визначаються з умов $V(x_1)=V(x_2)=E_x$. Для даної задачі $x_1=0$ а x_2 знаходимо із рівності

$$V_0 - e|\vec{E}|x_2 = E_x .$$

Тоді

$$\int_0^{x_2}\sqrt{V_0 - E_x - e|\vec{E}|x}\,dx = -\frac{2}{3e|\vec{E}|}\left(V_0 - E_x - e|\vec{E}|x\right)^{3/2}\Bigg|_0^{x_2} =$$

$$= \frac{2}{3e|\vec{E}|}\left(V_0 - E_x\right)^{3/2}$$

і

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar e|\vec{E}|}\left(V_0 - E_x\right)^{3/2}\right],$$

тобто *D* зростає зі збільшенням $|\vec{E}|$ і E_x.

Позначимо *dn* – кількість електронів всередині металу в одиниці об'єму, які мають імпульси в межах $\vec{p}$, $\vec{p}+d\vec{p}$. Тоді густина електричного струму, що виходить у напрямку осі *Ox* з металу, рівна

$$j = e\int v_x dn \cdot D \text{, де } v_x = \frac{p_x}{m};$$

інтегрування проводиться по всім значенням p_y, p_z і при $p_x > 0$. Вважаючи, що електронний газ вироджений (тобто веде

себе так само, як при T=0), отримуємо $dn = 2dp_x dp_y dp_z \big/ h^3$ (середнє заповнення стану рівне одиниці для $p^2/2m \le \zeta$, де ζ – максимальна енергія, тобто рівень хімічного потенціалу, і dn=0 для $p^2/2m > \zeta$). Звідси, переходячи до циліндричних координат у просторі імпульсів і вважаючи $p_y = \rho\cos\phi$, $p_z = \rho\sin\phi$, отримуємо

$$j = \frac{2e}{h^3}\int_0^{\sqrt{2m\zeta}} dp_x \int_0^{\sqrt{2m\zeta - p_x^2}} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi v_x D(v_x).$$

Підставляючи $\eta = \zeta - E_x, d\eta = -v_x dp_x$ і проводячи інтегрування по ϕ і ρ, маємо

$$j = \frac{4\pi em}{h^3}\int_0^{\zeta} \eta d\eta \cdot D(\eta);$$

$$D(\eta) = D_0 \exp\left[-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar e|\vec{E}|}(V_0 - \zeta + \eta)^{3/2}\right].$$

Так як $D(\eta)$ з ростом η дуже швидко спадає, то головний вклад внесуть лише малі значення η. Тому, розклавши показник степеня в ряд за степенями η і ввівши позначення

$$\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar e|\vec{E}|}(V_0 - \zeta)^{3/2} = q \text{ і } \eta/(V_0 - \zeta) = \beta,$$

після інтегрування по β від нуля до нескінченності знаходимо

$$j = D_0 \frac{4\pi em}{h^3} e^{-\frac{2}{3}q} (V_0 - \zeta)^2 \int_0^\infty e^{-q\beta} \beta d\beta =$$

$$= D_0 \frac{4\pi em}{h^3} \frac{(V_0 - \zeta)^2}{q^2} e^{-\frac{2}{3}q} =$$

$$= A |\vec{E}|^2 \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3|\vec{E}|\hbar e} (V_0 - \zeta)^{3/2} \right].$$

28. Хвильові функції для $x < 0$ мають вигляд $\psi_k = e^{ikx} + A(k)e^{-ikz}$, де $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$ (падаючі частинки рухаються зліва направо). У випадку $x > 0$ заміною змінної

$$z = \xi \left(\frac{x}{a} - 1 + \frac{E}{U_0} \right), \text{ де } \xi = \left(\frac{2ma^2 U_0}{\hbar^2} \right)^{1/3},$$

рівняння Шредінгера зводиться до рівняння

$$\frac{d^2 \psi_k}{dz^2} + z\psi_k = 0.$$

Його розв'язок, який при $x \to +\infty$ має вигляд хвилі, що розповсюджується направо, вибираємо у вигляді

$$\psi_k = C(E)\left[\mathrm{Bi}(-z) + i\mathrm{Ai}(-z) \right] \underset{z(x)\to\infty}{\approx}$$

$$\approx C(E)\pi^{-1/2} z^{-1/4} \exp\left\{ \frac{2i}{3} z^{3/2} + \frac{i\pi}{4} \right\},$$

де $\mathrm{Ai}(z)$ та $\mathrm{Bi}(z)$ – функції Ейрі. З умов неперервності хвильових функцій та їх похідних у точці $x=0$ знаходимо A та C. При цьому

$$C(E)=\frac{2}{\mathrm{Bi}(-z_0)+i\mathrm{Ai}(-z_0)+i(\xi/ka)(\mathrm{Bi}'(-z_0)+i\mathrm{Ai}'(-z_0))}, \qquad (1)$$

де $z_0=\xi\left(E/U_0-1\right)$.

Обчисливши густину потоку частинок

$$j=\left(\hbar/2mi\right)\left(\Psi^*\,d\Psi/dx-\Psi\,d\Psi^*/dx\right)$$

для $x\to+\infty$, а саме $j_{пр}=\hbar\xi|C|^2/\pi ma$, та врахувавши, що для падаючих частинок $j_{пад}=\hbar k/m$, знаходимо коефіцієнт проходження

$$D=\frac{j_{пр}}{j_{пад}}=\frac{\xi\,|C(E)|^2}{\pi ka}. \qquad (2)$$

Розглянемо частинні випадки.

1) $E<U_0$, причому $\xi\left(1-E/U_0\right)>>1$ (та $\xi>>1$)

$$D(E)\approx\frac{4\sqrt{E(U_0-E)}}{U_0}\exp\left\{-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2ma^2(U_0-E)^3}{\hbar^2U_0^2}}\right\}<<1 \qquad (3)$$

(при цьому слід скористатися асимптотикою найбільш суттєвого в (1) доданка $i(\xi/ka)\mathrm{Bi}'(-z_0)$, див. [11]).

2) $E > U_0$, причому $\xi\left(E/U_0 - 1\right) >> 1$ (при цьому $ka >> \xi$),

$$D(E) \approx \frac{4\sqrt{E(E-U_0)}}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}\right)^2}. \qquad (4)$$

3) Якщо $E \to 0$

$$D(E) \approx \frac{4ka}{\pi\xi\left[\left(\mathrm{Bi}'(\xi)\right)^2 + \left(\mathrm{Ai}'(\xi)\right)^2\right]} \propto \sqrt{E} \to 0.$$

29. Хвильова функція має вигляд

$$\Psi(x) = \begin{cases} \left[\mathrm{Bi}(z_1) - i\mathrm{Ai}(z_1)\right] + a(E)\left[\mathrm{Bi}(z_1) + i\mathrm{Ai}(z_1)\right], & x < 0 \\ b(E)\left[\mathrm{Bi}(-z_2) + i\mathrm{Ai}(-z_2)\right], & x > 0, \end{cases}$$

де $z_{1,2} = \xi\left(x \mp E/F_0\right)$ та $\xi = \left(2mF_0/\hbar^2\right)^{1/3}$. Вона записана в такому вигляді, де кожний доданок у квадратних дужках на великих відстанях описує хвилю, що розповсюджується у відповідному напрямку; при цьому $a(E)$ та $b(E)$ є амплітудами відбитої хвилі та хвилі, що пройшла; так що $R = \left|a(E)\right|^2$, $D = \left|b(E)\right|^2$ (порівняти з попередньою задачею). Умови неперервності Ψ та Ψ' дозволяють знайти $a(E)$ та $b(E)$. Зокрема,

$$b(E) = -\frac{i}{\pi\left[\mathrm{Bi}(\eta) + i\mathrm{Ai}(\eta)\right]\left[\mathrm{Bi}'(\xi\eta) + i\mathrm{Ai}'(\eta)\right]},$$

де $\eta = -\xi E / F_0$ (при цьому враховано значення вронскіану $W\left[\mathrm{Ai}(z), \mathrm{Bi}(z)\right] = 1/\pi$).

Використовуючи асимптотики функцій Ейрі [11], отримуємо наступні вирази для $D = \left|b(E)\right|^2$:

1) у випадку $E < 0$ і $\xi|E| / F_0 >> 1$,

$$D(E) \approx \exp\left\{-\frac{8}{3}\left(\frac{2m|E|^3}{F_0^2\hbar^2}\right)^{1/2}\right\};$$

2) у випадку $E > 0$ і $\xi E / F_0 >> 1$,

$$D(E) \approx 1 - \frac{F_0^2\hbar^2}{32mE^3};$$

3) $D(E=0) = 3/4,\ R(E=0) = 1/4$.

30. Альфа-частинка в ядрі знаходиться в глибокій потенціальній ямі; можна наближено вважати, що $V = -V_0$ при $r \le r_0$; r_0 характеризує радіус дії ядерних сил. Поза ядром, при $r \ge r_0$ $V = 2Ze^2/r$. Тоді, коефіцієнт проходження частинки крізь такий бар'єр у квазікласичному наближенні такий:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{r_0}^{r_2}\sqrt{\frac{2Ze^2}{r} - E}\,dr\right), \qquad (1)$$

де E – енергія частинки, що падає на бар'єр, r_0 і r_2 – точки повороту, в яких $V = E$, тобто $r_2 = 2Ze^2/E$.

Для обчислення інтегралу в формулі (1) введемо $\cos^2 u = r/r_2$; очевидно, що при $r = r_2$ $u = 0$ і, позначаючи $r_0/r_2 = \cos^2 u_0$, отримуємо

$$I = \sqrt{E}\frac{2Ze^2}{E}\int_0^{u_0}\sqrt{\frac{1}{\cos^2 u}-1}\cdot 2\sin u\cdot\cos u\cdot du =$$

$$= \frac{2Ze^2}{\sqrt{E}}\left[u_0 - \frac{\sin 2u_0}{2}\right].$$

Вважаючи, що $\sqrt{r_0/r_2} << 1$, розкладемо в ряд

$$u_0 = \arccos\sqrt{r_0/r_2} = \frac{\pi}{2} - \sqrt{r_0/r_2}\ .$$

Тоді $\sin 2u_0 \approx 2\sqrt{r_0/r_2}$. Таким чином,

$$I = \frac{2Ze^2}{\sqrt{E}}\left[\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{r_0}{r_2}}\right],$$

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{4}{\hbar}\left(\frac{\pi Ze^2}{v_\infty} + \sqrt{2mZe^2 r_0}\right)\right],$$

де $v_\infty = \sqrt{2mE}$ – швидкість α - частинки далеко від ядра, де $V = 0$ і

$$\lambda = nD_0 \exp\left[-\frac{4}{\hbar}\left(\frac{\pi Ze^2}{v_\infty} + \sqrt{2mZe^2 r_0}\right)\right].$$

31. Перш за все зв'яжемо розв'язки $\psi(x)$ і $\psi(x+l)$. З рівнянь Шредінгера для x і $x+l$:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\psi(x) = 0,$$

$$\frac{d^2\psi(x+l)}{d(x+l)^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - V(x+l)\right)\psi(x+l) = 0,$$

бачимо, що в силу $V(x+l) = V(x)$ і $\frac{d^2}{d(x+l)^2} = \frac{d^2}{dx^2}$, одному рівню E відповідають $\psi(x)$ і $\psi(x+l)$. Вважаючи E простим власним значенням, отримуємо, що ці хвильові функції в точках x та $x+l$ можуть розрізнятись лише сталим множником, тобто: $\psi(x+l) = \rho\psi(x)$. У загальному випадку, очевидно, можна отримати

$$\psi(x+nl) = \rho^n \psi(x),\ (n = 0, \pm 1, \ldots). \qquad (1)$$

З вимоги скінченності $\psi(x)$ випливає, що $|\rho| = 1$; звідси $\rho = e^{iml}$, де m – довільне дійсне число, і

$$\psi(x+l) = e^{iml}\psi(x). \qquad (2)$$

Далі, розв'язуючи рівняння Шредінгера в інтервалах $-b \le x \le 0$ (область I), $0 \le x \le a$ (II) та $a \le x \le a+b$ (III), а також користуючись умовою (2), матимемо розв'язки для всіх x.

I область $(V = V_0)$. Рівняння має вигляд

$$\frac{d^2\psi_{\text{I}}}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_{\text{I}} = 0 .$$

Позначаючи $\lambda^2 = \frac{2\mu(V_0 - E)}{\hbar^2}$, можемо записати

$$\psi_I = C_1 e^{\lambda x} + C_2 e^{-\lambda x} .$$

II область $(V = 0)$. Рівняння

$$\frac{d^2\psi_{\text{II}}}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} E\psi_{\text{II}} = 0 .$$

має розв'язок

$$\psi_{II} = C_3 e^{ikx} + C_4 e^{-ikx} ,$$

де $k^2 = 2\mu E / \hbar^2$.

III область $(V = V_0)$. Рівняння таке ж, як і в області I, тобто

$$\frac{d^2\psi_{\text{III}}}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_{\text{III}} = 0 .$$

Його розв'язок $\psi_{III} = C_5 e^{\lambda x} + C_6 e^{-\lambda x}$.

Якщо x знаходиться в області I, то $x + l$ потрапляє в область III і, у відповідності з формулою (2), розв'язки будуть зв'язані умовою $\psi_{III}(x + l) = e^{iml}\psi_I(x)$. Отже,

$$C_5 = C_1 e^{iml-\lambda l};\ C_6 = C_2 e^{iml+\lambda l},$$

тобто $\psi_{III} = e^{iml}(C_1 e^{\lambda(x-l)} + C_2 e^{-\lambda(x-l)})$. Розв'язки ψ_I, ψ_{II} і ψ_{III} та їх похідні мають бути неперервними при переході з області I в область II (точка $x=0$), а також з області II в область III (точка $x=a$). Це приводить до рівнянь

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \qquad C_1 + C_2 = C_3 + C_4;$$

$$\frac{d\psi_I}{dx}|_{x=0} = \frac{d\psi_{II}}{dx}|_{x=0}, \quad \lambda(C_1 - C_2) = ik(C_3 - C_4);$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \qquad C_3 e^{ika} + C_4 e^{-ika} = e^{iml}(C_1 e^{-\lambda b} + C_2 e^{\lambda b});$$

$$\frac{d\psi_{II}}{dx}|_{x=a} = \frac{d\psi_{III}}{dx}|_{x=a},$$

$$ik\left(C_3 e^{ika} - C_4 e^{-ika}\right) = \lambda e^{iml}(C_1 e^{-\lambda b} - C_2 e^{\lambda b)}).$$

Отримана система чотирьох лінійних однорідних рівнянь щодо коефіцієнтів C_1, C_2, C_3 і C_4. Для існування нетривіального розв'язку необхідно, щоб детермінант цієї системи був рівний нулю:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \lambda & -\lambda & -ik & ik \\ -e^{iml-\lambda b} & -e^{iml-\lambda b} & e^{ika} & e^{-ika} \\ -\lambda e^{iml-\lambda b} & \lambda e^{iml-\lambda b} & ike^{ika} & -ike^{-ika} \end{vmatrix} = 0.$$

Обчислення цього детермінанта приводить до рівняння, яке визначає енергію частинки, що знаходиться у періодичному полі:

$$f(E) = \mathrm{ch}\lambda b \cos ka + \frac{\lambda^2 - k^2}{2\lambda k} \mathrm{sh}\lambda b \sin ka = \cos ml . \qquad (3)$$

Зліва енергія входить через величини k і λ. Щоб задовольнити це рівняння, необхідно, очевидно, щоб $|f(E)| \le 1$. Можна переконатися, що при $ka = n\pi$ воно порушується, тому що $f(E) = \pm \mathrm{ch}\lambda b$ і $|f(E)| > 1$. Таким чином, енергії

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} n^2$$

виявляються забороненими для електрона в періодичному полі (кристалі).

32. Отримане в задачі 31 рівняння (3) у граничному випадку, коли $V_0 \to \infty$, $b \to 0$ і $\mathrm{sh}\lambda b / \lambda b \to 1$, переходить у рівняння

$$f(E) = \cos kl + P \frac{\sin kl}{kl} = \cos ml , \qquad (1)$$

де

$$P = \lim_{\substack{V_0 b = A \\ b \to 0}} \left(\lambda^2 \cdot l \cdot b / 2 \right),$$

де враховано, що для даної задачі $l = a$. Якщо позначити $P/kl = \mathrm{tg}\beta$, то воно набуває вигляду

$$\cos(kl-\beta)/\cos\beta=\cos ml\ .$$

Очевидно, границі цих енергетичних зон будуть лежати поблизу $\cos(kl-\beta)=\pm\cos\beta$, тобто, при $kl=n\pi$ (знак "+") або при $kl-2\beta=n\pi$ (знак "–"). Підставляючи $kl=n\pi-\varepsilon\ (\varepsilon\ll 1)$, отримуємо

$$(-1)^n(\cos\varepsilon-\mathrm{tg}\beta\sin\varepsilon)=\cos ml\ .$$

Для $0<\varepsilon\ll 1$ вираз, який стоїть зліва, менший одиниці. Тому в точках $kl=n\pi$ починаються заборонені зони енергії. Таким же чином можна переконатися, що $kl=n\pi+2\beta-$ нижні границі дозволених зон енергії (початку). Зона енергії з номером n визначається точками kl, що лежать у межах $(n-1)\pi+2\beta\le kl\le n\pi$. Якщо $kl\gg 1$, то $\beta=\mathrm{arctg}\,P/kl\approx P/n\pi$ і ширина забороненої зони між (n)- ю і $(n+1)$- ю дозволеними зонами рівна

$$\Delta(k_n l)=2\beta=\frac{2P}{\pi n}.$$

Якщо розглянути значення $k=k_0$, якому відповідає $ml=0$, і розкласти поблизу цієї точки ліву й праву частини рівності (1), а саме

$$f(E)=A(k_0)+B(k-k_0)\ \text{і}$$

$$\cos ml=1-\frac{m^2l^2}{2},$$

то з рівняння

$$A + B\left(k - k_0\right) = 1 - m^2 l^2 / 2$$

можна отримати

$$k = C + Dm^2 .$$

Оскільки $k = \sqrt{2\mu E / \hbar^2}$, то

$$E = E_0 + Fm^2 .$$

Коефіцієнти C, D, E_0 і F можуть бути виражені через A, B і k_0.

33. Введемо $kl = \xi$ та запишемо рівняння (1) задачі 32 як

$$f\left(\xi\right) = \cos\xi + \frac{P\sin\xi}{\xi} = \cos ml .$$

У задачі 32 було показано, що правою границею дозволеної зони є точка $\xi = \pi n$, в якій $f\left(\xi\right) = \left(-1\right)^n$. В забороненій зоні, де $\xi > \pi n$, $\left|f\right| > 1$ та рівність можлива для комплексних значень ml. Якщо $f\left(\xi\right) > 1$, то $\cos ml = \mathrm{ch}\mu > 1; ml = i\mu$. Якщо $f\left(\xi\right) < -1$, то $\cos ml = -\mathrm{ch}\mu < -1;\ ml = i\mu + \pi$.

Функція $f\left(\xi\right) > 1$ при $\xi \geq 2n\pi$, коли $\sin\xi > 0$, та $f\left(\xi\right) < -1$ при $\xi \geq \left(2n+1\right)\pi$ та $\sin\xi < 0$. Таким чином, якщо ввести $\varepsilon = \pm 1$ так, щоб $\varepsilon \cdot \sin\xi > 0$, то $\cos ml = \varepsilon \cdot \mathrm{ch}\mu$ та в забороненій зоні може бути записана умова

$$\varepsilon \cdot \mathrm{ch}\mu = f(\xi) = \frac{P\sin\xi}{\xi} + \cos\xi . \qquad (1)$$

Знайдемо розв'язок рівняння Шредінгера для напівнескінченного кристалу. Умова (1) задачі 31 тепер буде справджуватися лише для $x > 0$ (так як при $x < 0$ потенціал буде вже не періодичним), і, відповідно, $|\rho|$ може бути й менше одиниці. Якщо ввести $\rho = e^{iml}$, то це значить, що можливі розв'язки й з комплексними m за умови, що $\mathrm{Im}(m) > 0$.

При $x < 0$ (зовні кристала) рівняння

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - W_0)\psi = 0$$

має розв'язок

$$\psi_{x<0} = Ae^{\sqrt{q^2-\xi^2}\frac{x}{l}},$$

де введені позначення

$$q = l\sqrt{\frac{2\mu W_0}{\hbar^2}},\ \xi = kl = l\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\ .$$

При цьому $\sqrt{q^2 - \xi^2} > 0$.

При $x > 0$ (всередині кристалу) розглянемо область I: $0 \le x \le l$; в ній

$$\psi_I = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} . \qquad (2)$$

В області II $\left(l \le x \le 2l\right)$

$$\psi_{II} = C_3 e^{ikx} + C_4 e^{-ikx}. \qquad (3).$$

Але якщо вибрати $x = 0$, то $x = l$ лежить ще в області I, і тому можна вважати $C_1 = C_3$ та $C_4 = C_2$. В силу формули (1) задачі 31 отримуємо умову:

$$C_1 e^{ikl} + C_2 e^{-ikl} = e^{iml}\left(C_1 + C_2\right),$$

тобто

$$C_2 = -C_1 \frac{1 - e^{i(\xi - ml)}}{1 - e^{-i(\xi + ml)}}, \qquad (4)$$

де, як і раніше, $\xi = kl$. Таким чином, при $x > 0$ хвильова функція визначається формулою (2) за умови (4).

Умова неперервності ψ та $\dfrac{d\psi}{dx}$ у точці $x = 0$ дає

$$A = C_1 + C_2 \text{ та}$$

$$\frac{A\sqrt{q^2 - \xi^2}}{l} = im\left(C_1 - C_2\right),$$

звідки

$$\sqrt{q^2 - \xi^2} = \frac{e^{iml} - \cos\xi}{\sin\xi}\xi. \qquad (5)$$

Розглянемо цю рівність для комплексних значень m. Тоді з рівності $e^{iml} = \varepsilon e^{-\mu}$, де $\varepsilon \cdot \sin\xi \geq 0$, та умови (5) випливає

$$\sqrt{q^2 - \xi^2}\,\frac{\sin\xi}{\xi} + \cos\xi = \varepsilon e^{-\mu}. \qquad (6)$$

Окрім цього, умова (1) також повинна виконуватися. Взявши різницю рівнянь (1) та (6), отримуємо

$$\left(P - \sqrt{q^2 - \xi^2}\right)\frac{\sin\xi}{\xi} = \varepsilon \cdot \mathrm{sh}\mu. \qquad (7)$$

Так як $\sin\xi$ та ε мають однаковий знак, а $\sqrt{q^2 - \xi^2}$, ξ та μ більше нуля, то звідси отримуємо

$$P - \sqrt{q^2 - \xi^2} > 0, \text{ тобто } \; q^2 - P^2 < \xi^2 < q^2.$$

Лише за цієї умови можливе існування додаткових рівнів, які відповідають комплексному m. Підносячи до квадрату та віднімаючи вирази (7) та (1), отримуємо рівняння, яке визначає рівні енергії (ξ):

$$\frac{q^2}{2P} - \sqrt{q^2 - \xi^2} = \xi \cdot \mathrm{ctg}\xi. \qquad (8)$$

Покажемо, що цим значенням енергії, які знаходяться в забороненій зоні, відповідає функція, яка спадає з ростом $|x|$ з обох боків межі кристал-вакуум (площина $x = 0$). Дійсно, при $x < 0$ розв'язок $\psi_{x<0} = Ae^{\sqrt{q^2-\xi^2}\frac{x}{l}}$ має цю властивість. При $x > 0$

розв'язок задовольняє умові $\psi(x+l)=e^{iml}\psi(x)$ (періодичне поле). Цю умову можна записати у вигляді

$$\frac{\psi(x)}{e^{imx}}=\frac{\psi(x+l)}{e^{im(x+l)}}=u(x),$$

де $u(x)$ є періодичною функцією. Відповідно, для комплексного m

$$\psi(x)=e^{imx}u(x)=\varepsilon e^{-\mu x/l}\cdot u(x).$$

Таким чином, знайдено стан з енергією, яка лежить в забороненій зоні, та ймовірність знайти частинку спадає експоненційно з обох боків від $x=0$ (від поверхні кристалу). Значення ξ, тобто положення рівня енергії, можна знайти розв'язавши рівняння (8).

Системи з декількома ступенями вільності

34. Вводячи координату центру інерції X_c та відносну координату $x = x_1 - x_2$, після відокремлення змінних отримуємо

$$\psi = Ce^{i\frac{PX_C}{\hbar}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi),$$

де $\xi = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} x$ та $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$,

$$E = \frac{P^2}{2(m_1 + m_2)} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \ \ (n = 0,1,...).$$

35. Очевидно, загальна потенціальна енергія в цій задачі

$$V(x_1, x_2) = \frac{k}{2}\left(x_1^2 + x_2^2\right) + \frac{k_1}{2}(x_1 - x_2)^2,$$

де k та k_1 – пружні сталі, які характеризують зв'язок частинок з точкою $x = 0$ та одна з одною. Вводячи координату центру тяжіння $X_C = \frac{x_1 + x_2}{2}$ та відносну координату $x = x_1 - x_2$, отримуємо рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\psi}{dX_C^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{M\omega^2}{2} X_C^2\psi + \mu\frac{\omega_1^2}{2} x^2\psi = E\psi,$$

де $M = 2m$ – загальна маса, $\mu = \frac{m}{2}$ – приведена маса системи,

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{M}} = \sqrt{\frac{k}{2m}} \text{ та } \omega_1 = \sqrt{\frac{k+2k_1}{2\mu}} = \sqrt{\frac{k+2k_1}{m}}\,.$$

Відокремлюючи змінні та підставляючи $\psi = f\left(X_C\right)\cdot F\left(x\right)$, отримуємо два одновимірних рівняння для гармонічного осцилятора з частотами ω та ω_1:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2 f}{dX_C^2} + \frac{M\omega^2}{2}X_C^2 f = E_1 f\,;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2 F}{dx^2} + \frac{M\omega_!^2}{2}x^2 F = E_2 F\,.$$

Вводячи

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}X_C \text{ та } u = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_1}}x,$$

записуємо розв'язок

$$\psi_{n_1 n_2} = Ce^{-\xi^2/2}H_{n_1}\left(\xi\right)e^{-u^2/2}H_{n_2}\left(u\right),$$

де $H_n -$ поліном Ерміта. Рівні енергії, що відповідають цим хвильовим функціям, мають вигляд

$$E_{n_1 n_2} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1\,.$$

Значення фундаментальних фізичних сталих

Стала Планка

$h = 6,6260755 \cdot 10^{-27}$ ерг·с $= 6,6260755 \cdot 10^{-34}$ Дж·с

$= 4,1356692 \cdot 10^{-15}$ еВ·с;

Зведена стала Планка

$\hbar = 1,0545726 \cdot 10^{-27}$ ерг·с $= 1,0545726 \cdot 10^{-34}$ Дж·с=

$= 6,5821220 \cdot 10^{-16}$ еВ·с;

Елементарний заряд

$e = 4,80319199 \cdot 10^{-10}$ од. СГСЕ $= 1,60217733 \cdot 10^{-19}$ Кл;

Маса спокою електрона

$m_e = 9,1093897 \cdot 10^{-28}$ г $= 9,1093897 \cdot 10^{-31}$ кг=

$= 5,48579903 \cdot 10^{-4}$ а.о.м.;

Маса спокою протона

$m_p = 1,6726231 \cdot 10^{-24}$ г $= 1,6726231 \cdot 10^{-27}$ кг=

$= 1,007276470$ а.о.м.;

Маса спокою нейтрона

$m_n = 1,6749286 \cdot 10^{-24}$ г $= 1,6749286 \cdot 10^{-27}$ кг=

$= 1,008664904$ а.о.м.

Швидкість світла у вакуумі

$c = 2,99792458 \cdot 10^{10}$ см·с$^{-1}$ $= 2,99792458 \cdot 10^{8}$ м·с$^{-1}$;

Гравітаційна стала

$G = 6,67259 \cdot 10^{-8}$ дин·см^2 · г$^{-2}$ $= 6,67259 \cdot 10^{-11}$ Н·м^2 · кг$^{-2}$.

Література

1. Л.Г. Гречко, В. И. Сугаков, О. Ф. Томасевич, А. М. Федорченко. Сборник задач по теоретической физике. М. : Высш. шк., 1984.

2. В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. Задачи по квантовой механике. Учебное пособие: В 2 ч. М. : Едиториал УРСС, 2001.

3. З. Флюгге. Задачи по квантовой механике: М.: Мир, 1974, Т. 1, 2.

4. И. И. Гольдман, В. Д. Кривченков. Сборник задач по квантовой механике. М. : Гостехиздат, 1957.

5. В. В. Балашов, В. К. Долинов. Курс квантовой механики. — Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2001, 336 с.

6. В. І. Висоцький. Квантова механіка та її використання у прикладній фізиці.– К.: Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2008.– 367с.

7. Овечко В.С., Шека Д.І. Фізика атомів та атомних структур (від класики до квантів). - К. : Видавничо-поліграфічний центр “Київський університет”, 2006. –184 с.

8. А. С. Давыдов. Квантовая механика. – М.: Наука, 1973.– 704 с.

9. Д. И. Блохинцев. Основы квантовой механики. – М. : Наука, 1983. – 664 с.

10. П. Н. Харченко, О. В. Прокопенко, Г. Ю. Карлаш. Атомна фізика в задачах: Навчальний посібник. – К.: "Академдрук", 2007. – 333 с.

11. М. Абрамовиц, И. Стиган. Справочник по специальным функциям. М. : Наука, 1979. – 830 с.