КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

І. О. Ястремський

Одновимірний рух квантових частинок в прикладах та задачах

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: Навчальний посібник для студентів природничих факультетів.–К. 2014.-32 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

Стаціонарне рівняння Шредінгера в одновимірних системах…………………………………………………….…....4

Теоретичні відомості…………………………………...4

Приклади……………………………..………………..……9

Задачі……………………..……………………………………14

Стаціонарні стани дискретного спектру……………….14

Стани неперервного спектру……………………..…..19

Системи з декількома ступенями вільності…………....22

Тестові задачі……………………………………………….22

Значення фундаментальних фізичних сталих…..…………..…25

Математичний додаток…………………………..……..26

Список літератури………………………………………..……31

Стаціонарне рівняння Шредінгера в одновимірних системах

Теоретичні відомості

Якщо частинка рухається в одновимірному потенціалі $U(x)$, то застосовуючи метод відокремлення змінних до тривимірного стаціонарного рівняння Шредінгера, отримуємо хвильову функцію

$$\Psi(x,y,z) = Ae^{i\left(\frac{p_y y}{\hbar}+\frac{p_z z}{\hbar}\right)}\Psi_E(x),$$

яка описує вільний рух з імпульсами p_y та p_z, та одновимірна хвильова функція $\Psi_E(x)$ задовольняє стаціонарному одновимірному рівнянню Шредінгера

$$\hat{H}\Psi_E \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right]\Psi_E(x) = E\Psi_E(x). \qquad \text{(I)}$$

$\left|\Psi_E(x)\right|^2 dx$ – ймовірність того, що частинка знаходиться в інтервалі від x до $x+dx$. Рівняння Шредінгера (I) з відповідними граничними умовами (обмеженість хвильової функції, обернення її в нуль на нескінченно високих потенціальних стінках та ін.) визначає енергетичний спектр у потенціалі $U(x)$ та хвильові функції $\Psi_E(x)$ стаціонарних станів.

Для потенціалу, зображеного на рис. 1, спектр E_n в області $\min U(x) < E_n < U(-\infty)$ (в якій, згідно класичній механіці, рух частинки є фінітним) є дискретним. Ці рівні E_n є не виродженими, а відповідні власні функції $\Psi_{E_n}(x)$ – квадратично інтегрованими (тобто вони описують локалізовані стани частинки згідно з фінітним характером руху у класичній теорії). В області $U(-\infty) < E < U(+\infty)$ спектр є неперервним і реалізуються стоячі хвилі.

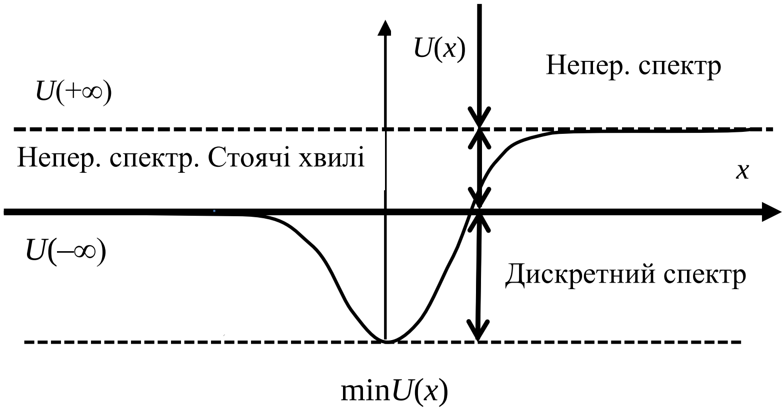

Рис. 1. Області дискретного та неперервного спектрів для представленого потенціалу.

Значення енергії $E > U(+\infty)$ (для яких в класичній механіці можливий інфінітний рух в обох напрямках, як при $x \to -\infty$, так і при $x \to +\infty$) є двократно вироджені.

Наведемо розв'язок рівняння Шредингера для лінійного гармонічного осцилятора

$$U(x) = kx^2 / 2, \ \omega = \sqrt{k/m}.$$

Спектр

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

власні функції

$$\Psi_n^{осц}(x) = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2a^2}\right\} H_n\left(\frac{x}{a}\right), \qquad \text{(II)}$$

де $a = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ та $H_n(z)$ – поліноми Ерміта; так $H_0(z) = 1$, $H_1(z) = 2z$, $H_2(z) = 4z^2 - 2$, $H_3(z) = 8z^3 - 12z$ і т.д.

Умова ортонормування для неперервного спектру на дельта-функцію за параметром γ така:

$$\int \psi^*(\mathbf{r}, \gamma)\psi(\mathbf{r}, \gamma')dV = \delta(\gamma - \gamma').$$

У задачі про розсіяння на потенціалі в якості незалежних розв'язків рівняння Шредингера (I) зазвичай розглядаються такі (частинки рухаються на потенціал зліва):

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + A(E)e^{-ik_1x}, x \to -\infty, & \text{(III (а))} \\ B(E)e^{ik_2x}, x \to +\infty, & \text{(III (б))} \end{cases}$$

де $k_{1,2} = (1/\hbar)\sqrt{2m(E - U(\pm\infty))}$. (III (а)) описує падаючу з амплітудою 1 та відбиту з амплітудою $A(E)$ хвилі; $B(E)$ – амплітуда хвилі, що пройшла. Тоді, коефіцієнти проходження

$$D(E) = \frac{k_1}{k_2}|B|^2$$

та відбиття частинок

$$R(E) = |A|^2.$$

Ці коефіцієнти мають такі властивості:

$$\begin{aligned} &D(E) + R(E) = 1; \\ &D(E) \to 1 \text{ при } E \to \infty; \qquad \text{(IV)} \\ &D(E) \to 0 \text{ при } E \to U(+\infty). \end{aligned}$$

Якщо частинка відбивається від достатньо гладкого потенціала $V(x)$, тобто, виконується умова

$$\left| \frac{m \cdot \hbar}{p(x)^3} \cdot \frac{dV(x)}{dx} \right| \ll 1,$$

де m – маса частинки, $p(x) = \pm\sqrt{2m(E - V(x))}$ – класичний імпульс частинки, то в квазікласичному наближенні для коефіцієнта проходження (прозорості) маємо

$$D = D_0 \exp\left[-2\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_a^b \sqrt{U(x) - E}\, dx \right], \qquad \text{(V)}$$

де D_0 – константа, a та b – точки повороту.

Середнє значення фізичної величини f визначається

$$\langle f \rangle = \int \Psi^* \hat{f} \Psi dx ,$$

де $\hat{f}$ – оператор, що відповідає f. В одновимірному випадку оператор координати має вигляд

$$\hat{x} = x ,$$

оператор імпульсу

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} ,$$

оператор кінетичної енергії

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} .$$

Приклади

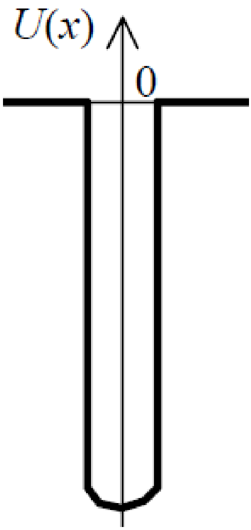

Рис. 2. Схематичне зображення дельта-ями.

П.1. Частинка масою m знаходиться в полі дельта-потенціала

$$V(x) = -\alpha\delta(x),\ \alpha > 0$$

(дельта-потенціал схематично зображений на рис.2). Знайти умови зшивки для хвильової функції.

Розв'язок. Позначимо хвильову функцію в області $x<0$ як $\psi_1(x)$, а в області $x>0$, $\psi_2(x)$. Для формулювання умов зшивання для функцій ψ_1 та ψ_2 у точці $x=0$, інтегруємо стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \alpha\delta(x)\right)\psi$$

на проміжку від $-\delta$ до $+\delta$

$$\psi_2^{/}(+\delta) - \psi_1^{/}(-\delta) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int\limits_{-\delta}^{+\delta}\left\{E + \alpha\delta(x)\right\}\psi_{1,2}dx\,.$$

Спрямувавши інтервал інтегрування до нуля, отримуємо умову зшивки для похідних $\psi_2^{/}(0) - \psi_1^{/}(0) = -\frac{2m}{\hbar^2}\alpha\psi_{1,2}(0)$. Сама хвильова функція залишається неперервною при $x=0$.

Тобто, умови зшивки для хвильової функції у дельта-потенціалі такі:

$$\psi_1(0)=\psi_2(0),$$

$$\psi_2'(0)-\psi_1'(0)=-\frac{2m}{\hbar^2}\alpha\psi_{1,2}(0).$$

П.2. Знайти хвильову функцію та енергію частинки, що знаходиться в полі дельта-потенціала $V(x)=-\alpha\delta(x)$.

Розв'язок. Обмежимось розглядом зв'язаних станів частинки, тобто, $E<0$. Розглянемо області I ($x<0$) та II $(x>0)$. Рівняння Шредінгера в цих областях мають вигляд

$$\frac{d^2\psi_{1,2}}{dx^2}-k^2\psi_{1,2}=0,$$

де введено позначення $k^2=2m|E|/\hbar^2$ і $E=-|E|$ – енергія зв'язаного стану. Розв'язок рівняння Шредінгера $\psi_{1,2}(x)=A_{1,2}e^{kx}+B_{1,2}e^{-kx}$. Так як хвильова функція має бути скінченою при $|x|\to\infty$, то $B_1=A_2=0$. Використовуючи умови зшивки для хвильової функції, знаходимо $B_2=A_1$ і $k=m\alpha/\hbar^2$. Амплітуду хвильової функції знаходимо з умови нормування $A_1=\sqrt{k}$. Отже,

$$\psi(x)=\sqrt{k}e^{-k|x|} \text{ і } E=-m\alpha^2/2\hbar^2, \text{ де } k=m\alpha/\hbar^2.$$

П.3. Частинка знаходиться у зв'язаному стані в потенційному полі дельта-ями $V(x) = -\alpha\delta(x)$, $\alpha > 0$. Знайти середні значення потенціальної $<U>$ та кінетичної енергій $<T>$.

Розв'язок. За означенням середнє значення потенціальної енергії

$$<U> = -\alpha\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\delta(x)\psi dx = -\alpha\psi^*(0)\psi(0).$$

Підставивши хвильову функцію з попереднього прикладу, маємо $<U> = -\alpha k = 2E$. Середнє значення кінетичної енергії

$$<T> = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi dx.$$

Інтегруючи частинами, отримуємо більш зручну для обрахунків формулу

$$<T> = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2 dx.$$

Далі, підставляючи у цю формулу $\psi(x) = \sqrt{k}e^{-k|x|}$, знаходимо

$$<T> = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -E.$$

Зауважимо, що якщо для обрахунку $<T>$ користуватись формулою $<T>=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi dx$, варто правильно порахувати величину $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=-k^{3/2}e^{-k|x|}\frac{\partial|x|}{\partial x}=-k^{3/2}e^{-k|x|}\left[2h(x)-1\right],$$

де $h(x)$ – функція Хевісайда та

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=k^{5/2}e^{-k|x|}-2k^{3/2}e^{-k|x|}\delta(x).$$

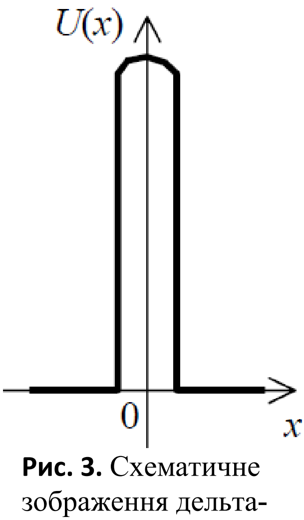

Рис. 3. Схематичне зображення дельта-бар'єру.

П.4. Знайти коефіцієнти проходження і відбиття для дельта – бар'єру

$$V(x)=\alpha\delta(x),\ \alpha>0$$

(дельта – бар'єр схематично зображений на рис.3).

Розв'язок. Розглянемо області I ($x<0$) та II $(x>0)$. Рівняння Шредінгера в цих областях мають вигляд

$$\frac{d^2\psi_{1,2}}{dx^2}+k^2\psi_{1,2}=0,$$

де введено позначення $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Розв'язок шукаємо у вигляді $\psi(x) = e^{\lambda x}$. Підставивши $\psi(x)$ у рівняння Шредінгера, отримуємо характеристичне рівняння $\lambda^2 + k^2 = 0$; звідси $\lambda = \pm ik$ і

$$\psi_{1,2}(x) = A_{1,2}e^{ikx} + B_{1,2}e^{-ikx}.$$

Так як розсіяння – процес лінійний, то зручно вибрати $A_1 = 1$. В області II відбита хвиля відсутня, тому $B_2 = 0$. Підставимо ψ_1 та ψ_2 в умови зшивання для дельта-потенціалу в точці $x = 0$

$$\begin{cases} 1 + B_1 = A_2 \\ ik\left(B_1 - 1 + A_2\right) = \dfrac{2m}{\hbar^2}\alpha A_2. \end{cases}$$

Звідси

$$A_2(k) = \frac{m\alpha}{ik\hbar^2 - m\alpha},$$

$$B_1(k) = \frac{ik\hbar^2}{ik\hbar^2 - m\alpha}.$$

Легко перевірити, що коефіцієнти відбиття $R(E) = |B_1|^2$ і проходження $D(E) = |A_2|^2$ задовольняють співвідношенню

$$R(E) + D(E) = 1.$$

Задачі

Стаціонарні стани дискретного спектру

1. Частинка знаходиться в одновимірній потенціальній ямі розміром $0 \le x \le a$, всередині якої $V = 0$, а зовні $V = \infty$. Знайти розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера.

2. Для попередньої задачі знайти $\langle x \rangle$, $\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle$, $\langle p \rangle$ та $\left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle$.

3. Частинка знаходиться в нескінченно глибокій потенціальній ямі розміром $0 \le x \le a$ у суперпозиційному стані з хвильовою функцією $\Psi(x) = Ax(x-a)$ всередині та $\Psi(x) = 0$ зовні ями. Знайти ймовірності різних значень енергії та середнє значення енергії.

4. Для потенціалу $V(x) = -\alpha\delta(x)$ знайти $\langle x \rangle$, $\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle$, $\langle p \rangle$ та $\left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle$.

5. Розв'язати рівняння Шредінгера для частинки, що знаходиться в одновимірній прямокутній потенціальній ямі скінченої глибини: $V(x) = 0$ якщо $x < -a/2$ (I область), $V(x) = -V_0$ якщо $-a/2 \le x \le a/2$ (II область) та $V(x) = 0$ якщо $x > a/2$ (III область).

6. Знайти хвильові функції та рівні енергії одновимірного гармонічного осцилятора (див. II), який знаходиться в електричному полі напруженістю $\mathbf{E}$, що орієнтоване вздовж осі Ox. Заряд частинки e. Порахувати поляризованість β (визначає середній дипольний момент $\mathbf{d} = \beta\mathbf{E}$, індукований слабким зовнішнім електричним полем) стаціонарних станів осцилятора.

7. Знайти енергетичний спектр у потенціалі вигляду $U(x) = \alpha\delta(x)$ $(\alpha > 0)$, якщо $|x| < a$, та $U = \infty$, якщо $|x| > a$. Показати, що при виконанні умови $m\alpha a / \hbar^2 >> 1$, нижня частина спектру складається із послідовності пар близько розташованих рівнів. Який спектр сильно збуджених станів частинки?

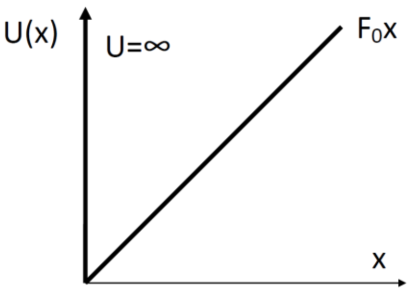

Рис. 4

8. Знайти енергетичний спектр та хвильові функції стаціонарних станів частинки масою m у потенціалі, показаному на рис. 4.

9. Розв'язати рівняння Шредінгера для частинки, яка знаходиться у короткодіючому потенціалі $V(x) = V_0\left(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}\right)$.

10. Те ж, що й у попередній задачі, але для потенціалу

$$U(x) = \frac{U_1}{\left(1 + e^{x/a}\right)^2} - \frac{U_2}{\left(1 + e^{x/a}\right)}; U_{1,2} > 0, a > 0 .$$

11. Дослідити поведінку рівняння Шредінгера при $x \to \pm\infty$ у випадку $E = 0$ для потенціалу, який задовольняє умові $U(x) \to 0$ якщо $x \to \pm\infty$, але при цьому спадає до 0 якщо

$x \to \pm\infty$ швидше, ніж $\propto 1/x^2$. Показати, що не зростаючий при $x \to +\infty$, так і при $x \to -\infty$ розв'язок $\Psi_{E=0}(x)$ рівняння Шредингера існує лише при певних значень параметрів потенціалу, які відповідають умовам появи нових станів дискретного спектру при збільшенні глибини потенціалу.

12. Використовуючи результати попередньої задачі, відповісти, яка кількість дискретних рівнів для частинки, що знаходиться у прямокутній потенціальній ямі глибини U_0 та ширини a ?

13. Те, що і в попередній задачі, але для потенціалу $U = -\alpha\delta(x) - \alpha\delta(x-a)$.

14. Знайти кількість зв'язаних станів $N_{зв}$ у залежності від значень параметрів наступних потенціалів:

$$\text{а) } V = \begin{cases} \infty, & x \le 0; \\ -V_0, & 0 < x < a \,; \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

$$б)\ V = \begin{cases} \infty, & x \le 0; \\ -V_0\delta\left(x - x_0\right), & x > 0. \end{cases}$$

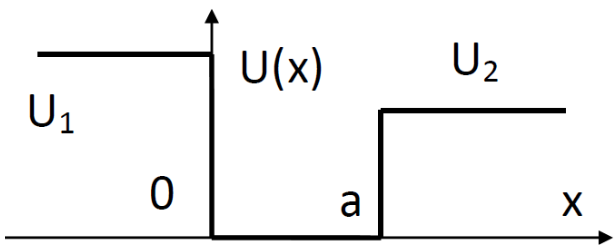

Рис. 5

15. Знайти умову існування зв'язаних станів частинки в потенціальній ямі, зображеній на рис. 5. Розглянути граничні випадки: а) $U_1 = \infty$, б) $U_1 = U_2$.

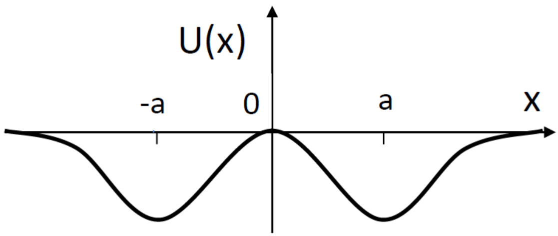

Рис. 6

16. Частинка знаходиться в полі, що має вигляд двох однакових симетричних потенціальних ям (див. рис. 6), розташованих на відстані $2a$ одна від одної; області дій ям не перекриваються, так що $U(0) = 0$. Показати, що середня сила, з якою частинка діє на ями в стаціонарних станах дискретного спектру, призводить до взаємного притягування ям у парних станах та до їх взаємного відштовхування у непарних станах.

17. Знайти хвильову функцію та рівні енергії для частинки маси μ у потенціалі $V(x) = V_0\left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a}\right)^2, x > 0.$

18. Знайти хвильові функції та рівні енергії для частинки маси μ у потенціалі $V(x) = -V_0 \big/ \mathrm{ch}^2(x/a)$.

19. Знайти енергетичні рівні та хвильові функції частинки у потенціалі $V = V_0 \mathrm{ctg}^2\left(\pi x/a\right)$, $(0 < x < a)$. Пронормувати хвильову функцію основного стану.

20. Для одновимірного гармонічного осцилятора, який знаходиться на n-му рівні енергії, знайти $\left\langle x^2 \right\rangle$ та середню потенціальну енергію.

21. Для одновимірного осцилятора, енергія якого рівна $7\hbar\omega/2$, обчислити середню кінетичну енергію.

Стани неперервного спектру

22. Знайти хвильові функції стаціонарних станів вільної частинки у полі $V(x)=0$ якщо $x>0$ і $V(x)=\infty$ якщо $x\le 0$. Пронормувати їх на дельта-функцію за енергією.

23. Поведінка вільної частинки описується хвильовою функцією $\psi(x)=Ae^{-x^2/a^2+ik_0x}$. Знайти коефіцієнти Фур'є і знайти ширину хвильового пакету в k просторі.

24. Частинка, що рухається у додатному напрямку осі Ox, зустрічає потенціальний бар'єр: $V(x)=0$ якщо $x<0$ і $V(x)=V_0$ якщо $x\ge 0$. Розрахувати хвильову функцію при $E>V_0$ і $E<V_0$, порахувати густину струму падаючої і відбитої хвиль, а також хвилі, що пройшла потенціальний бар'єр. Знайти коефіцієнти проходження і відбиття.

25. Порахувати коефіцієнти відбиття й проходження частинок з енергією E при проходженні крізь прямокутний потенціальний бар'єр: $V(x)=0$ якщо $x<0$ або $x>a$ $V(x)=V_0$ якщо $0\le x\le a$.

26. Знайти значення енергій, при яких частинки не відбиваються від потенціального бар'єру вигляду $U=\alpha\left[\delta(x)+\delta(x-a)\right]$.

27. Порахувати коефіцієнт проходження й густину струму, обумовлену виходом електронів з металу, до якого прикладене постійне електричне поле напруженістю E. Границя металу розташована при $x=0$. Вважати, що виконується умова квазікласичності.

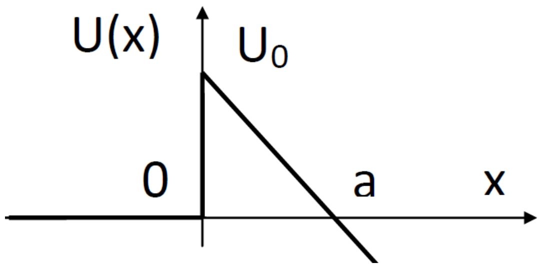

Рис. 7

28. Знайти коефіцієнт проходження частинок крізь потенціальний бар'єр, зображений на рис. 7. Розглянути різні граничні випадки, які допускають наглядне сприйняття отриманого виразу для $D(E)$.

29. Те, що й у попередній задачі, але для бар'єру $U = -F_0|x|$.

30. Постійна α - розпаду λ і коефіцієнт прозорості бар'єру D пов'язані співвідношення $\lambda = nD$, де $n \sim v_i / r_0$ (v_i –швидкість частинки всередині ядра, r_0 – радіус ядра) характеризує кількість ударів частинок об стінку ядра за одиницю часу. Порахувати λ для наступної моделі потенціалу:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, \; r < r_0 \\ 2Ze^2 / r, \; r \geq r_0. \end{cases}$$

Вважати, що виконується нерівність $r_0 \ll 2Ze^2 / E$.

31. Розрахувати значення енергій, які може набувати частинка у такому періодичному полі:

$$V = \begin{cases} 0, \text{при } nl \leq x \leq nl + a\left(n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\right) \\ V_0 \;, \text{при } nl - b \leq x \leq nl. \end{cases}$$

Період потенціалу $l = a + b$.

32. Розглянути попередню задачу для моделі Кроніга-Пенні (Гребінка Дірака) $V(x) = A\delta(x - nl)$, де $A > 0$ і $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. Знайти залежність енергії E від хвильового вектора k поблизу границі дозволених смуг енергії.

33. Знайти значення енергій, які може набувати частинка у напівнескінченному кристалі з періодичним потенціалом в області $x > 0$ (всередині кристала), який визначається так, як і в задачі 32; в області $x < 0$ (зовні кристала) потенціальна енергія $V = W_0$. Обмежитися значеннями $E < W_0$ (поверхневі рівні Тамма).

Системи з декількома ступенями вільності

34. Дві частинки, які зв'язані одна з одною пружною силою $F = k\left(x_1 - x_2\right)$ (одновимірна задача), вільно рухаються вздовж осі Ox. Знайти хвильову функцію та спектр енергії.

35. Дві частинки масою m рухаються лише вздовж осі Ox. Частинки зв'язані одна з одною пружною силою з коефіцієнтом жорсткості k_1. Окрім того, кожна з них зв'язана з точкою $x = 0$ пружною силою, але з коефіцієнтом k. Знайти рівні енергії та хвильові функції системи.

Тестові задачі

Т.1. Частинка масою m знаходиться у першому збудженому стані у нескінченно глибокій потенціальній ямі розміром від 0 до a. Знайти найбільш імовірні положення частинки.

Т.2. Знайти, при якій глибині скінченої симетричної прямокутної ями шириною a у ній буде 2 парних і 1 непарний рівні.

Т.3. Знайти, при якій глибині скінченої симетричної прямокутної ями шириною a у ній буде 3 парних і 2 непарний рівня.

Т.4. Знайти, за якої глибини скінченої симетричної прямокутної ями шириною a третій непарний рівень енергії частинки буде співпадати з вершиною ями.

Т.5. Знайти, за якої глибини скінченої симетричної прямокутної ями шириною a другий парний рівень енергії частинки буде співпадати з вершиною ями.

Т.6. Частинка з масою m знаходиться у потенціальній ямі $V(x) = -\alpha\delta(x)$ якщо $x \le |a|$ та $V(x) = \infty$ якщо $x > |a|$, $(\alpha > 0)$. Знайти енергію і хвильову функцію основного стану.

Т.7. Частинка з масою m знаходиться в основному стані у потенціальній ямі $V(x) = -\alpha\{\delta(x-a) + \delta(x+a)\}$, $(\alpha > 0)$. Знайти енергію і хвильову функцію основного стану.

Т.8. Частинка знаходиться в основному стані лінійного гармонічного осцилятора. Знайти ймовірність її перебування в області, яка заборонена для класичного руху.

Т.9. Лінійний гармонічний осцилятор знаходиться у стані $\psi(x) = (\psi_0 + \psi_1)/\sqrt{2}$. Знайти $\bar{x}$.

Т.10. Знайти хвильову функцію вільної частинки в одновимірному випадку. Пронормувати хвильову функцію на дельта-функцію за імпульсом.

Т.11. Для вільної частинки, рух якої обмежений непроникною стінкою, знайти хвильові функції стаціонарних станів. Пронормувати їх на дельта-функцію за хвильовим вектором.

Т.12. Нехай $\psi_f(q)$ – хвильова функція неперервного спектру, що нормована на дельта-функцію з фізичною величиною f. Знайти хвильову функцію, що нормована на дельта-функцію за деякою іншою фізичною величиною $\varphi(f)$.

Т.13. За яких значень енергії падаючої на бар'єр $V(x) = a[\delta(x - l/2) + \delta(x + l/2)]$ частинки має місце максимальна прозорість бар'єру?

Т.14. Знайти фазовий зсув між падаючою та відбитою хвилею для прямокутного потенціального бар’єру висотою V_0 та шириною a для частинки з енергією E.

Т.15. Знайти зсув фази при проходженні частинки крізь дельта-бар’єр $V(x) = A\delta(x)$.

Т.16. Частинка масою m знаходиться у першому збудженому стані у нескінченно глибокій потенціальній ямі розміром від 0 до a. Знайти ймовірність знаходження частинки в інтервалі від 0 до $a/2$.

Т.17. Частинка масою m знаходиться у нескінченно глибокій потенціальній ямі розміром від 0 до a у стані, з квантовим числом n. Знайти ймовірність знаходження частинки в інтервалі від 0 до a/n.

Значення фундаментальних фізичних сталих

Стала Планка

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

$= 4,1356692 \cdot 10^{-15}$ еВ$\cdot$с;

Зведена стала Планка

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

$= 6,5821220 \cdot 10^{-16}$ еВ$\cdot$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$\cdot$с$^{-1} = 2,99792458 \cdot 10^{8}$ м$\cdot$с$^{-1}$;

Гравітаційна стала

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

Математичний додаток

Дельта функція Дірака

Нехай $f(x)$ неперервна разом зі своїми похідними функція на інтервалі $(-\infty, +\infty)$ $\left(f(x) \to 0, \text{ якщо } x \to \pm\infty\right)$. Тоді δ - функція визначається таким чином:

$$\int \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0).$$

Дельта-функція задовольняє наступним співвідношенням:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1;$$

$$\delta(-x) = \delta(x);$$

$$x\delta(x) = 0;$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x), \; a \neq 0;$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a);$$

$$\delta\left[f(x)\right] = \sum_{i=1}^{n} \frac{\delta(x - x_i)}{\left|\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=x_i}},$$

де x_i - нулі функції $f(x), n$ - кількість нулів на всій осі x.

Пуассонівські інтеграли

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$ – інтеграл Пуассона.

Диференціюючи інтеграл Пуассона за параметром α n разів і користуючись парністю підінтегрального виразу, отримуємо

$$\int_{0}^{+\infty} x^{2n} e^{-x^2} dx = \frac{1\cdot 3\cdot 5\cdot \ldots \cdot (2n-1)}{2^{n/2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \ (n = 0,1,2,\ldots).$$

Для випадку непарних ступенів коефіцієнта перед експонентою можна отримати, що

$$\int_{0}^{+\infty} x^{2m+1} e^{-x^2} dx = \frac{m!}{2}, \ (m = 0,1,2,\ldots).$$

Поліноми Ерміта

Поліноми Ерміта $H_n(x)$ можуть бути визначені на проміжку $-\infty \le x \le \infty$ за допомогою твірної функції

$$F(x,t) = e^{-t^2+2tx} = e^{x^2} e^{-(t-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n . \qquad (1)$$

Звідси безпосередньо отримуємо

$$H_n(x)=\left(\frac{\partial^n F(x,t)}{\partial x^n}\right)_{t=0}=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n\left(e^{-x^2}\right)}{dx^n}=$$

$$=(2x)^n-\frac{n(n-1)}{1!}(2x)^{n-2}+\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2x)^{n-4}-\dots . \quad (2)$$

Звідси

$$\begin{aligned} &H_0(x)=1; \quad H_1(x)=2x; \\ &H_2(x)=4x^2-2; \quad H_3(x)=8x^3-12x. \end{aligned} \quad (3)$$

Поліноми Ерміта задовольняють таким співвідношенням:

$$\frac{dH_n(x)}{dx}=2nH_{n-1}(x); \quad (4)$$

$$H_{n+1}(x)-2xH_n(x)+2nH_{n-1}(x)=0, \ (n\ge 1). \quad (5)$$

Вироджена гіпергеометрична функція

Ця функція для всіх скінченних z та a і при довільному c, не рівному $0,-1,-2,\dots,$ визначається рядом:

$$F(a,c;z)=1+\frac{a}{c}\frac{z}{1!}+\frac{a(a+1)}{c(c+1)}\cdot\frac{z^2}{2!}+\dots . \quad (1)$$

Звідси $F(a,a;z)=e^z$. Вироджена гіпергеометрична функція є частинним розв’язком рівняння:

$$z\frac{d^2\Phi}{dz^2}+\left(c-z\right)\frac{d\Phi}{dz}-a\Phi=0\,. \qquad (2)$$

Якщо c - неціле число, то другим частинним розв'язком (2) є функція:

$$z^{1-c}F\left(a-c+1,2-c;z\right)\,. \qquad (3)$$

Функція $F\left(a,c;z\right)$ задовольняє ряду співвідношень, які слідують із формул (1) та (2):

$$\begin{aligned}
&F\left(a,c;z\right)=e^{z}F\left(c-a,c;z\right);\\
&\left(c-a\right)F\left(a-1,c;z\right)+\left(2a-c+z\right)F\left(a,c;z\right)=aF\left(a+1,c;z\right);\\
&\frac{d}{dz}F\left(a,c;z\right)=\frac{a}{c}F\left(a+1,c+1;z\right); \qquad (4)\\
&\frac{d^n}{dz^n}F\left(a,c;z\right)=\frac{\Gamma\left(c\right)}{\Gamma\left(a\right)}\cdot\frac{\Gamma\left(a+n\right)}{\Gamma\left(c+n\right)}\cdot F\left(a+n,c+n;z\right).
\end{aligned}$$

Якщо a рівне нулю або цілому від’ємному числу, $a=-n$, то $F\left(a,c;z\right)$ зводиться до поліному n-го степеня:

$$F\left(-n,c,z\right)=1-\frac{n}{c}z+\ldots+\left(-1\right)^n\frac{\left(c-1\right)!}{\left(c+n-1\right)!}z^n=$$

$$=\frac{z^{1-c}e^{z}\Gamma\left(c\right)}{\Gamma\left(c+n\right)}\frac{d^n}{dz^n}\left(z^{c+n-1}\cdot e^{-z}\right). \qquad (5)$$

Асимптотики функцій:

$$\operatorname{Re} z \to \infty, \; F(a,c;z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} z^{a-c} e^{z} \left[1 + O\left(|z|^{-1} \right) \right];$$

$$\operatorname{Re} z \to -\infty, \; F(a,c;z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} \left[1 + O\left(|z|^{-1} \right) \right]; \qquad (6)$$

$\operatorname{Re} c \to \infty$, $F(a,c;z) = 1 + O\left(|c|^{-1} \right)$ при скінченних z, a.

Будь-яке рівняння вигляду:

$$\left(a_0 x + b_0\right) \frac{d^2 \phi}{dx^2} + \left(a_1 x + b_1\right) \frac{d\phi}{dx} + \left(a_2 x + b_2\right) \phi = 0 \qquad (7)$$

може бути приведене до (2) наступною заміною $\phi = e^{\nu x} \Phi$, $x = \lambda z + \mu$, де величини ν, λ, μ визначаються із системи рівнянь:

$$a_0 \mu + b_0 = 0; \; a_0 + \lambda\left(2a_0 \nu + a_1\right) = 0; \; a_0 \nu^2 + a_1 \nu + a_2 = 0. \qquad (8)$$

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.