КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

І. О. Ястремський

ЕВОЛЮЦІЯ КВАНТОВИХ СИСТЕМ

У ЧАСІ

ВІДПОВІДІ ТА РОЗВ’ЯЗКИ

Київ-2017

УДК 530.145
ББК 22.31я73

Рецензент
канд. фіз.-мат. наук, доц. Максюта Микола Васильович
канд. фіз.-мат. наук, доц. Нетреба Андрій В'ячеславович

Затверджено вченою радою факультету радіофізики,
електроніки та комп`ютерних систем
(протокол № 5 від 12 лютого 2016 р.)

І. О. Ястремський

ЕВОЛЮЦІЯ КВАНТОВИХ СИСТЕМ У ЧАСІ. ВІДПОВІДІ ТА РОЗВ'ЯКИ: Навчальний посібник для студентів природничих факультетів.–К. 2017.-25 с.

У збірнику наведені задачі по розрахунку часової еволюції станів у квантово-механічних системах. До збірника увійшли як традиційні, так і задачі підвищеного рівня складності. Збірник містить короткі теоретичні відомості, приклади, задачі для самостійної роботи та математичний додаток. Збірник може бути використаний на семінарських заняттях з курсу "Квантова механіка". Збірник може бути рекомендований студентам, аспірантам і викладачам фізико–математичних спеціальностей вищих навчальних закладів.

Зміст

Відповіді та розв'язки

Представлення Шредінгера

1. Скориставшись (III) (див. приклади та задачі), знаходимо (для визначення коефіцієнтів розкладу власних функцій Ψ_0 за власними функціями гамільтоніану зручно скористатися відомими тригонометричними формулами, не застосовуючи (IV)):

1) $$\Psi(x,t) = (A/4)e^{-i\omega t}\left(3\sin(\pi x/a) - e^{-8i\omega t}\sin(3\pi x/a)\right),$$

$\omega = \pi^2\hbar/2ma^2$;

2) $\Psi(\phi,t) = (A/2)\left[1 - \exp\{-2i\hbar t/I\}\cdot\cos 2\phi\right]$. Періоди систем рівні: 1) $ma^2/2\pi\hbar$, 2) $\pi I/\hbar$.

2. $\psi(x,t) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp\left\{i\left(px - p^2 t/2m\right)/\hbar\right\}$.

4. Використовуючи $\Psi(x,t)$ із задачі (П.2), маємо

$$\overline{x(t)} = \int x\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = v_0(t),\ \overline{\left(\Delta x(t)\right)^2} = \frac{a^2}{2}\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right).$$

ХФ в імпульсному представленні

$$c(p,t) = \exp\left\{-ip^2 t/2m\hbar\right\}\int \Psi_0(x)\Psi_p^*(x)dx =$$

$$= \frac{aA}{\sqrt{\hbar}}\exp\left\{-\frac{\left(p-p_0\right)^2 a^2}{2\hbar^2} - ip^2 t/2m\hbar\right\}.$$

Звідси $\overline{p(t)} = \int p\left|c(p,t)\right|^2 dp = p_0$, $\overline{\left(\Delta p(t)\right)^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2}$ (незалежність імпульсних характеристик від часу пов'язана з тим, що для вільної частинки імпульс – інтеграл руху).

Ці результати мають простий сенс: розподіл за координатами – гаусівський пакет, центр якого $\overline{x(t)}$ рухається зі швидкістю v_0 (рівною $v_0 = p_0/m$). При цьому ширина пакету $\sim\sqrt{\overline{\left(\Delta x(t)\right)^2}}$ збільшується. Це пов'язано з тим, що імпульс (швидкість) частинки не має визначеного значення.

5. Ширина пакету збільшується вдвічі за час $t_0 = \sqrt{3}ma^2/\hbar$. 1) Для електрона $m = 10^{-27}\,г$ при $a = 10^{-8}\,см$ (атомні розміри) маємо $t_0 \sim 10^{-16}\,с$. 2) Для малої, але вже макроскопічної частинки з $m = 10^{-6}\,г$ при $a = 10^{-2}\,см$ знаходимо $t_0 \sim 10^{17}\,с \sim 10^{10}$ років. Підкреслимо, що особливо швидке розпливання хвильового пакету з початково "вузькою" локалізацією $\Delta x(0)$ пов'язано із співвідношенням невизначеності $\Delta p \geq \hbar/\Delta x$.

6. Згідно (II), у будь-який момент часу

$$\Psi(x,t) = \int c(E)\exp\left\{-\frac{iEt}{\hbar}\right\}\Psi_E(x)dE .$$

Звідси видно, що через швидкі осциляції підінтегральної функції (її дійсної та уявної частин) відбувається взаємна компенсація вкладів сусідніх областей інтегрування. Затухання $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ означає, що частинка при $t \to \infty$ йде на нескінченно велику відстань. Це відповідає інфінітному характеру руху в класичній механіці. Відмітимо, що одночасно зі зменшенням густини ймовірності збільшується ширина пакету – він розпливається, що й забезпечує збереження нормування хвильової функції.

7. Хвильова функція має вигляд

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2t}{2m}-px\right)\right\}\Phi_0(p)dp\,. \qquad (1)$$

При $t\to\infty$ ($x\to\pm\infty$) фаза у показнику експоненти сильно змінюється вже при невеликих змінах p, що призводить до швидких осциляцій та до взаємної компенсації вкладів від сусідніх областей інтегрування. Найменш скомпенсованим (а тому й домінуючим) є вклад тих областей інтегрування, в яких фаза як функція p має екстремум та змінюється найповільніше. Екстремальна точка $p_0=mx/t$. Виносячи з інтеграла "плавну" функцію $\Phi_0(p_0)$ у цій точці, знаходимо шуканий асимптотичний вигляд власної функції при $t\to\infty$:

$$\Psi(x,t)\approx\frac{\Phi_0(mx/t)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2t}{2m}-px\right)\right\}\Phi_0dp=$$

$$=\sqrt{\frac{m}{it}}\Phi_0\left(\frac{mx}{t}\right)\exp\left\{\frac{imx^2}{2\hbar t}\right\}. \qquad (2)$$

Неважко впевнитьс у збереженні нормування (2):

$$\int\left|\Psi(x,t)\right|^2dx=\frac{m}{t}\int\left|\Phi_0\left(\frac{mx}{t}\right)\right|^2dx=1\,.$$

Відмітимо наглядний сенс результату (2): значення власної функції при $t \to \infty$ у точці $x \to \pm\infty$ (так, що $x / t = \text{const} \equiv v_0 = p_0 / m$) визначається власною функцією $\Phi_0\left(p\right)$ при $p = p_0$, тобто за такого імпульсу, який повинна мати вільна частинка в класичній механіці, щоб за час t зміститися на відстань x. При цьому вираз у показнику експоненти в (2) є $iS\left(x,t\right)/\hbar$, де S – класична дія такої частинки.

9. Для обчислення $\Psi\left(x,t\right)$ скористаємось часовою функцією Гріна $G\left(x,t,x',t'\right)$, яка за змінними x,t задовольняє рівнянню Шредінгера для вільної частинки та граничній умові $G\left(x=0,t;x',t'\right)=0$. Враховуючи результат попередньої задачі, неважко збагнути (по аналогії з методом зображень в електростатиці), що

$$G\left(x=0,t;x',t'\right)=\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\left(t-t'\right)}}\left\{\exp\left[\frac{im\left(x-x'\right)^2}{2\hbar\left(t-t'\right)}\right]-\right.$$

$$\left.-\exp\left[\frac{im\left(x+x'\right)^2}{2\hbar\left(t-t'\right)}\right]\right\}.$$

Підставивши цей вираз та $\Psi_0 = \Psi\left(x,t=0\right)$ із умови задачі в формулу (VI), та обчисливши інтеграл, знаходимо

$$\Psi(x,t)=A\sqrt{\frac{ma^2}{ma^2+i\hbar t}}\left\{\exp\left\{\frac{1}{2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4}\right)a^2}\left(-\left(x+x_0-\frac{p_0t}{m}\right)^2+\right.\right.\right.$$

$$+\frac{i\hbar t\left(x+x_0\right)^2}{ma^2}+\frac{2ip_0a^2\left(x+x_0\right)}{\hbar}-\frac{ip_0^2a^2t}{m\hbar}-$$

$$\left.\left.\left.-\frac{2ip_0x_0\left(a^2+\hbar^2t^2/m^2a^2\right)}{\hbar}\right)\right\}-\exp\left\{\left(x\to -x\right)\right\}\right\},$$

де $\exp\{(x\to -x)\}$ означає вираз, який отримується із першого експоненціального доданку заміною в ньому x на $-x$.

Ця хвильова функція являє собою суперпозицію двох хвильових пакетів, перший із яких описує падаючі на стінку частинки, а другий – відбиті. У початкові моменти часу в (1) найбільш суттєвим є перший доданок, а за $t>mx_0/p_0$ у випадку $p_0>>\hbar/a$, навпаки, домінуючим є другий доданок.

Зміна в часі фізичних величин

10. $\overline{\dfrac{dx}{dt}} = \dfrac{1}{m}\overline{p_x}$, $\overline{\dfrac{dp_x}{dt}} = \dfrac{d}{dx}\left(\overline{p_x}\right) = -\overline{\dfrac{\partial U}{\partial x}} = \overline{F}_x$.

11. 1) Усереднюючи величину $\dot{f}$, знаходимо

$$\overline{\dot{f}} = \int \Psi_n^* \hat{\dot{f}} \Psi_n dV = \frac{i}{\hbar}\int \Psi_n^* \left(\hat{H}\hat{f} - \hat{f}\hat{H}\right)\Psi_n dV = 0 \qquad (1)$$

(тут враховано, що $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$ та під інтегралом $\Psi_n^*\hat{H}... = \left(\hat{H}\Psi_n\right)^* ...$ через ермітовість $\hat{H}$).

2) Враховуючи, що $d\hat{\mathbf{r}}/dt = \hat{\mathbf{p}}/m$ та $d\hat{\mathbf{p}}/dt = -\mathrm{grad}U$, для $U = \alpha r^{\nu}$ маємо

$$\frac{d\left(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}\right)}{dt} = \dot{\hat{\mathbf{p}}}\hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{p}}\dot{\hat{\mathbf{r}}} = 2\hat{T} - \nu\hat{U} . \qquad (2)$$

Усереднюючи (2), та використовуючи (1), отримуємо $\overline{T}_{nn} = \nu\overline{U}_{nn}/2$, що й є квантомеханічним узагальненням теореми віріала класичної механіки (в якій усереднення проводиться за часом).

Відмітимо, що отримане співвідношення справедливе й для системи з довільної кількості частинок, якщо взаємодія їх одна з одною та з зовнішнім полем описується степеневими потенціалами з однаковими показниками ν .

12. Гамільтоніан $\hat{H}_0$ системи за відсутності зовнішнього поля має найбільш високу симетрію: він інваріантний щодо довільного зсуву, повороту та відображення координат. Зовнішнє поле порушує симетрію, так що саме симетрія потенціальної енергії частинок у зовнішньому полі

$$U_{зовн}\left(r_1,...,r_n\right)=\sum\nolimits_n U_n\left(r_n\right)$$

визначає симетрію гамільтоніана системи $\hat{H}=\hat{H}_0+U_{\text{зовн}}$ у цілому.

У свою чергу, симетрія $U_{\text{зовн}}$ однозначно визначається характером симетрії “джерел” зовнішнього поля; для її виявлення слід попіклуватися за вибір системи координат, яка була б адекватною симетрії системи (проявляється у незалежності $U_{\text{зовн}}$ від відповідних координат).

Приймаючи до уваги також явний вигляд операторів проекції імпульсу та моменту імпульсу,

$$\hat{P}_z=-i\hbar\sum_n\frac{\partial}{\partial z_n},$$

$$\hat{L}_z=-i\sum_n\frac{\partial}{\partial \phi_n},$$

збереження енергії системи у випадку $\partial U_{зовн}/\partial t=0$, аналізуємо наявність інтегралів руху в системі.

1) Інтеграли руху: $E,\mathbf{P},\mathbf{L},I$. Так як для замкненої системи рух центру мас і відносний рух незалежні, то $E,\mathbf{L},I$ зберігаються не тільки для системи в цілому, але й для обох вказаних рухів окремо.
2) Система трансляційно інваріантна у будь-якому напрямку, паралельному площині $\left(x,y\right)$, яка створює зовнішнє поле, має азимутальну симетрію щодо осі z, що перпендикулярна

площині (x, y) та дзеркальну симетрію щодо цієї площини; відповідно $U_{\text{зовн}} = \sum_n U_n\left(|z_n|\right)$. Інтеграли руху: E, P_x, P_y, L_z, I .

3) Система має центральну симетрію; інтеграли руху: $E, \mathbf{L}, I$.
4) Система має аксіальну симетрію щодо осі, яка проходить через точки – джерела зовнішнього поля; $U_{\text{зовн}} = \sum_n U_n\left(\rho_n, z_n\right)$ та інтегралами руху є E, L_z . У випадку, коли точки мають однаковий заряд, маємо $U_{\text{зовн}} = U_n\left(\rho_n, |z_n|\right)$, тому зберігається також і парність I .

13. Враховуючи, що $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2 / 2m - \mathbf{F_0 r}$, знаходимо

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{G}} = \frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathbf{G}} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{G}}\right] = -\mathbf{F_0} - \frac{i}{\hbar}\left[\left(\mathbf{F_0}, \mathbf{r}\right), \hat{\mathbf{p}}\right] = 0,$$

так що середнє значення $\bar{\mathbf{G}} = \overline{\mathbf{p}(t)} - \mathbf{F_0}t = \text{const}$.

Це є звичайним квантово-механічним узагальненням результату класичної механіки, згідно з яким при русі в однорідному полі вектор $\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}(t) - \mathbf{F}_0 t$ (так як $\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(0) + \mathbf{F}_0 t / m$) є інтегралом руху і рівний імпульсу частинки при $t = 0$.

Гейзенбергівське представлення

14. Введемо оператор $\hat{f}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}$. Знайдемо похідні

$$d\hat{f}/d\lambda = \hat{A}e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}} - e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\hat{A}e^{-\lambda\hat{A}} = e^{\lambda\hat{A}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]e^{-\lambda\hat{A}},$$

$$d^2\hat{f}/d\lambda^2 = e^{\lambda\hat{A}}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]e^{-\lambda\hat{A}}$$

і т. д. Розкладемо в ряд Тейлора

$$\hat{f}(\lambda=1) = e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{d^n\hat{f}}{d\lambda^n}\right)\Bigg|_{\lambda=0} =$$

$$= \hat{B} + \frac{1}{1!}\left[\hat{A},\hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + ..$$

15. 1) Вигляд гейзенбергівських операторів координати та імпульсу згідно (IX) легко встановити, якщо скористатися результатом попередньої задачі. При визначенні ж вигляду цих операторів другим способом слід врахувати, що у зв’язку з лінійністю системи рівнянь (у даній задачі) її можна розв’язувати так, як і для звичайних, не операторних функцій, так як при цьому не виникає ускладнень, пов’язаних з не комутативністю операторів. Наведемо розв’язок для випадку (а):

а) виберемо вісь Ox уздовж напрямку руху вільної частинки. Тоді

$$x(t)=\hat{x}+\frac{1}{1!}\left[i\frac{\hat{H}t}{\hbar},\hat{x}\right]+\frac{1}{2!}\left[i\frac{\hat{H}t}{\hbar},\left[i\frac{\hat{H}t}{\hbar},\hat{x}\right]\right]+\dots,$$

де $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Знайдемо комутатори:

$$\left[i\frac{\hat{H}t}{\hbar},\hat{x}\right]\Psi=-\frac{it\hbar}{m}\frac{d\psi}{dx}=\frac{t}{m}\hat{p}_x\Psi;$$

так як $\hat{p}_x$ та $\hat{H}$ комутують, то всі інші доданки рівні нулю. Звідси $\hat{x}(t)=\hat{x}+\frac{t}{m}\hat{p}_x$. Аналогічно для імпульсу $\hat{p}(t)=\hat{p}_x$.

б) для частинки в однорідному полі

$$\hat{x}(t)=\hat{x}+\frac{t}{m}\hat{p}+\frac{F_0t^2}{2m},$$

$$\hat{p}(t)=\hat{p}+\frac{F_0t}{m};$$

в) для лінійного осцилятора

$$\hat{x}(t)=\hat{x}\cos\omega t+\frac{\hat{p}}{m\omega}\sin\omega t,$$

$$\hat{p}(t)=\hat{p}\cos\omega t-m\omega\hat{x}\sin\omega t.$$

Тут $\hat{x}, \hat{p}$ – звичайні шредінгерівські оператори, з якими, гейзенбергівські оператори збігаються при $t = 0$.

2) На прикладі осцилятора покажемо, як визначається вигляд гейзенбергівських операторів із рівняння руху. Для осцилятора

$$\hat{H} = \hat{p}^2(t)\big/2m + k\hat{x}^2(t)\big/2.$$

З урахуванням значення комутатора $\left[\hat{p}(t), \hat{x}(t)\right] = -i\hbar$ рівняння руху набувають вигляду

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{x}(t)\right] = \frac{\hat{p}(t)}{m},$$

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{p}(t)\right] = -k\hat{x}(t).$$

Розв’язок цієї системи рівнянь дає

$$\hat{x}(t) = \hat{C}_1 \cos\omega t + \hat{C}_2 \sin\omega t,$$

$$\hat{p}(t) = -m\omega\left[\hat{C}_1 \sin\omega t - \hat{C}_2 \cos\omega t\right],$$

де $\omega = \sqrt{k/m}$. З умови рівності гейзенбергівських та шредінгерівських операторів при $t = 0$ випливає $\hat{C}_1 = \hat{x}$, $\hat{C}_2 = \hat{p}/m\omega$.

16. Часова залежність середніх значень фізичних величин повністю визначається залежністю від часу відповідних гейзенбергівських операторів. Враховуючи значення наступних середніх у даному стані:

$$\overline{\hat{x}} = x_0\,,\ \overline{\hat{x}^2} = x_0^2 + \frac{a^2}{2}\,,$$

$$\overline{\hat{p}} = p_0\,,\ \overline{\hat{p}^2} = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2}\,,$$

$$\overline{\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}} = 2x_0 p_0\,,$$

знаходимо, скориставшись результатами задачі 15:

а) для вільної частинки

$$\overline{x(t)} = \overline{\hat{x}(t)} = x_0 + \frac{p_0 t}{m}\,,$$

$$\overline{p(t)} = p_0\,,$$

$$\overline{\left(\Delta x(t)\right)^2} = \frac{a^2}{2}\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right),$$

$$\overline{\left(\Delta p(t)\right)^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2}\,;$$

б) для частинки в однорідному полі

$$\overline{x(t)} = x_0 + \frac{p_0 t}{m} + \frac{F_0 t^2}{2m}\,,$$

$$\overline{p(t)} = p_0 + \frac{F_0 t}{m}\,,$$

$$\overline{\left(\Delta x(t)\right)^2} = \frac{a^2}{2}\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right),$$

$$\overline{\left(\Delta p(t)\right)^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2};$$

в) для осцилятора

$$\overline{x(t)} = x_0 \cos\omega t + \frac{p_0}{m\omega}\sin\omega t,$$

$$\overline{p(t)} = p_0 \cos\omega t - m\omega x_0 \sin\omega t,$$

$$\overline{\left(\Delta x(t)\right)^2} = \frac{a^2}{2}\left(\cos^2\omega t + \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2 a^4}\sin^2\omega t\right),$$

$$\overline{\left(\Delta p(t)\right)^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2}\left(\cos^2\omega t + \frac{m^2\omega^2 a^4}{\hbar^2}\sin^2\omega t\right).$$

Зауважимо, що обчислення середніх значень в шредінгерівському представленні суттєво більш трудомістке (порівняти із розв’язком задачі 3).

17. $a^2 = \hbar / m\omega$. Такі стани осцилятора називають когерентними.

18. Використовуючи рівняння руху (VIII) для гейзенбергівських операторів, неважко знайти, що

$$d\left[\hat{p}_i(t), \hat{x}_k(t)\right]\Big/dt = 0.$$

Так як при $t=0$ $\left[\hat{p}_i(0),\hat{x}_k(0)\right]=-i\hbar\delta_{ik}$, і значення комутатора не залежить від часу, то

$$\left[\hat{p}_i(t),\hat{x}_k(t)\right]=-i\hbar\delta_{ik}.$$

19. Потенціальна енергія частинки $\hat{U}=-\mathbf{F}(t)\hat{\mathbf{r}}(t)$. Знайдемо зміну імпульсу

$$\frac{d\hat{\mathbf{p}}(t)}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\mathbf{p}}(t)\right]=\mathbf{F}(t).$$

Звідси випливає (аналогічно класичному випадку)

$$\hat{\mathbf{p}}(t)=\hat{\mathbf{p}}(-\infty)+\int_{-\infty}^{t}\mathbf{F}(t')dt'. \tag{1}$$

Так як при $t\to\pm\infty$ гамільтоніан частинки має вигляд $\hat{H}(\pm\infty)=\hat{\mathbf{p}}^2(\pm\infty)/2m$, то використовуючи (1), отримуємо для середньої енергії частинки при $t\to+\infty$

$$\bar{E}(+\infty)=\bar{E}(-\infty)+\frac{1}{m}\bar{\mathbf{p}}(-\infty)\int_{-\infty}^{\infty}\mathbf{F}(t)dt+$$
$$+\frac{1}{2m}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\mathbf{F}(t)dt\right]^2. \tag{2}$$

Це співвідношення, як і (1), за виглядом аналогічно класичному, яке отримується із (2) заміною квантово-механічних величин їх визначеними класичними значеннями; при цьому, очевидно, що $E(-\infty)=\mathbf{p}^2(-\infty)/2m$. Якщо ж розглядати статистичний ансамбль класичних частинок з деяким розподілом за імпульсами, то для середніх значень уже в класичному сенсі можна застосовувати співвідношення (2).

Квазістаціонарні стани

20. Виникнення ширини рівня Γ, який визначає час життя $\tau = \hbar / \Gamma$ стану, пов'язано з можливістю проникнення частинки крізь бар'єр. Для визначення параметрів квазістаціонарного стану потрібно знайти розв'язок рівняння Шредінгера. У просторовій області (I) $(0 < x < a)$ 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 $k^2 = 2\mu E / \hbar^2$. Загальний розв'язок цього рівняння є

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

Аналогічно в області (II) $(x > a)$ отримуємо

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

У розв'язку цього рівняння потрібно залишити лише доданок, який описує рух частинок від початкового хвильового пакету

$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = Ce^{ikx}.$$

Оскільки в точці $x = 0$ значення потенціалу рівне нескінченності, то маємо граничну умову $\psi_{\mathrm{I}}(x = 0) = 0$. Звідси $A = -B$. У точці

$x = a$ необхідно використати умови зшивки хвильових функцій на дельта-бар'єрі

$$\psi_I(a) = \psi_{II}(a),$$

$$\psi_{II}^{/}(a) - \psi_I^{/}(a) = \frac{2m}{\hbar^2}\beta\psi_{II}(a).$$

Підставляючи конкретний вигляд хвильових функцій в умові зшивки, отримуємо систему лінійних однорідних рівнянь для визначення A та C

$$\begin{cases} \left(e^{ika} - e^{-ika}\right)A - e^{ika}C = 0, \\ \left(e^{ika} + e^{-ika}\right)A + e^{ika}\left(1 - 2\dfrac{h}{k}\right)C = 0, \end{cases}$$

де $h = m\beta/\hbar^2$. Умовою існування ненульового розв'язку цієї системи рівнянь є рівність нулю детермінанта. Звідси отримуємо

$$e^{ika}\left(1 - e^{2ika}\right) = ik/h. \tag{1}$$

Розділивши дійсну та уявну частини, маємо

$$\begin{cases} \cos 2ka = 1, \\ \sin 2ka = -\dfrac{k}{h}. \end{cases}$$

Звідси видно, що за дійсних k ця система має розв'язок лише при $h \to \infty$ (непрозорий дельта-бар'єр). У цьому випадку маємо наступний розв'язок для нескінченно глибокої потенціальної ями:

$$k_n = \frac{\pi n}{a}, E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} n^2, n = 1, 2, \ldots$$

Щоб система (1) мала розв'язок при скінченних h, необхідно щоб k було комплексним

$$k = k_1 + ik_2.$$

Підставляючи в (1), маємо систему рівнянь для k_1 та k_2

$$\begin{cases} 1 - e^{-2k_2 a} \cos 2k_1 a = -\dfrac{k_2}{h}, \\ \quad e^{-2k_2 a} \sin 2k_1 a = -\dfrac{k_1}{h}. \end{cases} \tag{2}$$

Система рівнянь (2) є трансцендентною. У випадку малої проникності дельта-бар'єру $\left(k_1/h << 1\right)$ її можна розв'язати методом послідовних наближень. Представимо

$$\begin{cases} k_1 = k_1^{(0)} + k_1^{(1)} + \ldots, \\ k_2 = k_2^{(0)} + k_2^{(1)} + \ldots, \end{cases}$$

де $k_1^{(0)} << k_1^{(1)}$, $k_2^{(0)} << k_2^{(1)}$. У нульовому наближенні $k_1^{(0)} = \frac{\pi n}{a}, k_2^{(0)} = 0$. У першому наближенні

$$k_1^{(1)} = -\frac{k_1^{(0)}}{2ah},$$

$$k_2^{(1)} = -\frac{\left(k_1^{(0)}\right)^2}{4ah^2}.$$

Записуючи далі

$$E = \hbar^2 k^2 \big/ 2m = E_0 + \Delta E - i\mathit{\Gamma}\big/2\,,$$

отримуємо зсув рівня ΔE та його ширину Γ, які виникають за рахунок скінченої прозорості дельта-бар’єру:

$$\Delta E = -\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^3h^2}n^2\,,$$

$$\mathit{\Gamma} = \frac{\pi^3}{2a^2h^2}n^3.$$

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;

Приведена 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$^{-2}$.

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. В. С. Овечко, Д. І. Шека. 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.