

```
> restart;
-----+
|      РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
|      (В.М. ГАЛИЦКИЙ, Б.М. КОРНАКОВ, В.И. КОГАН.
|      ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
|      Журавлев В.М.
|      Ульяновский государственный университет, 2020
-----+
```

## ОДНОМЕРНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ЯМЫ

```
> with(plots):
with(plottools):
-----+
|      Формат графиков
-----+
> frm:=axes=boxed,gridlines=true,labelfirections=[horizontal,vertical],labelfont=[TIMES,BOLD,16],titlefont=[TIMES,BOLD,20],font=[TIMES,BOLD,20],symbol=solidcircle,symbolsize=18,legendstyle=[font=[TIMES",BOLD,18],location=bottom],size=[900,600];
frm := axes = boxed, gridlines = true, labelfirections = [ horizontal, vertical ], labelfont = [ TIMES, BOLD, 16 ], titlefont = [ TIMES, BOLD, 20 ], font = [ TIMES, BOLD, 20 ], symbol = solidcircle, symbolsize = 18, legendstyle = [ font = [ "TIMES", BOLD, 18 ], location = bottom ], size = [ 900, 600 ];
(1)
```

### Уравнение Шредингера для одномерной ямы

1. В одномерном случае оператор Гамильтона (оператор полной энергии)  $\hat{H}$  имеет в общем случае вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

Здесь  $U(x)$  - потенциальная энергия системы.

2. Потенциальной ямой называется область значений потенциальной энергии вблизи ее минимального значения. При этом предполагается, что на бесконечности потенциальная энергия либо монотонно растет, либо стремится к некоторым постоянным значениям, но не обязательно.

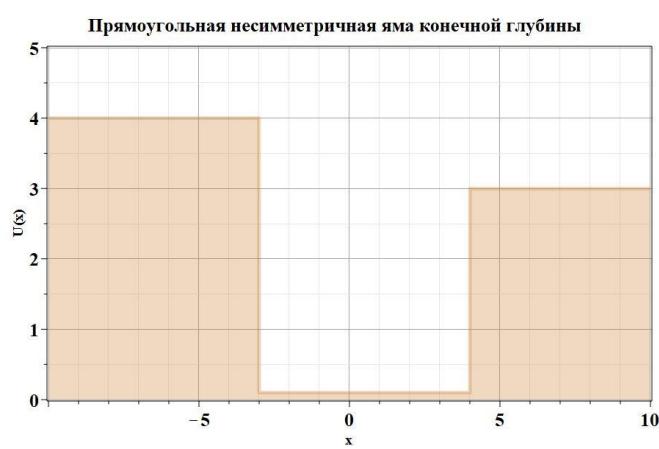
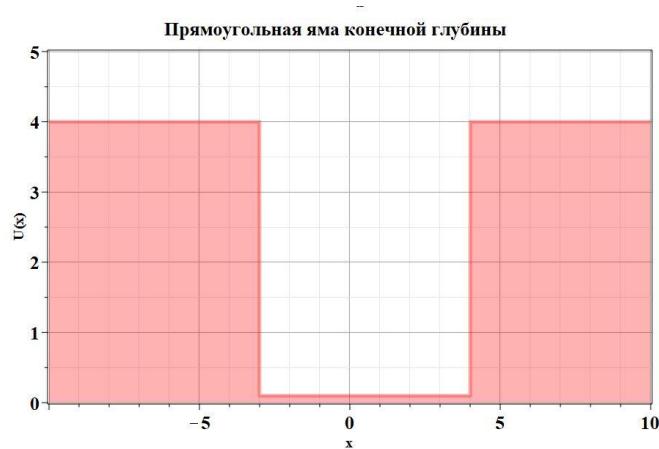
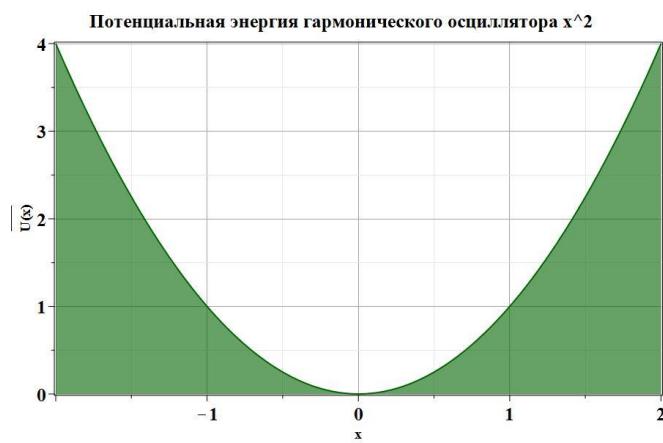
Примеры:

U (2)

### Заготовки функций

```
> U1:=(x)->x^2;
U2:=(x)->2.2-2/cosh(x)^2;
U3:=(x,a,b,U0,U1)->piecewise(x<-a,U0,-a<=x and x<=b, U1,U0);
U4:=(x,a,b,U0,U1,U2)->piecewise(x<-a,U0,-a<=x and x<=b, U1,U2);
UD:=(x,k)->-k/cosh(k*x)^2;
-----+
U1 := x → x2
U2 := x → 2.2 -  $\frac{2}{\cosh(x)^2}$ 
U3 := (x, a, b, U0, U1) → piecewise(x < -a, U0, -a ≤ x and x ≤ b, U1, U0)
U4 := (x, a, b, U0, U1, U2) → piecewise(x < -a, U0, -a ≤ x and x ≤ b, U1, U2)
UD := (x, k) → -  $\frac{k}{\cosh(kx)^2}$ 
(3)

> plot(U1(x),x=-2..2,frm,color="DarkGreen",filled=true,thickness=2,title="Потенциальная
энергия гармонического осциллятора x^2",labels=[["x","U(x)"]);
plot(U2(x),x=-5..5,frm,color=blue,filled=true,thickness=2,transparency=0.7,title=
"Безотражательный потенциал Баргмана",labels=[["x","U(x)"],view=[-5..5,0..2.5]);
plot(U3(x,3,4,4,0.1),x=-10..10,frm,color=red,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,
title="Прямоугольная яма конечной глубины",labels=[["x","U(x)"],view=[-10..10,0..5]);
plot(U4(x,3,4,4,0.1,3),x=-10..10,frm,color=gold,filled=true,thickness=5,transparency=
0.7,title="Прямоугольная несимметрическая яма конечной глубины",labels=[["x","U(x)"],view=
[-10..10,0..5]);
```



3. Стационарное уравнение Шредингера для одномерного движения имеет такой вид:

$$\hat{H} \Psi(x; E) = \left( \frac{1}{2m} (\hat{p})^2 + U(x) \right) \Psi(x; E) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi(x; E) = E \Psi(x; E)$$

Решением уравнения являются волновые функции состояний с фиксированной энергией, т.е. такие состояния, в которых измерение энергии всегда будет давать значение энергии, равное  $E$ .

#### 4. Границные условия для волновых функций в яме имеют такой вид :

4.1. Для частицы, энергия которой лежит ниже верхнего значения потенциальной энергии, волновая функция  $\Psi(x; E)$  в пределе  $x \rightarrow \pm \infty$  стремится к нулю :

$$\lim_{x \rightarrow \pm \infty} \Psi(x; E) = 0.$$

Смысль этого граничного условия состоит в том, что при удалении от ямы вероятность найти частицу стремится к нулю.

В классической механике частица вообще не может выйти за пределы точек поворота.

На рисунке ниже движение классической частицы ограничено интервалом  $[x_1, x_2]$ , где  $x_1$  и  $x_2$  – координаты точек поворота.

В квантовой механике частичку можно обнаружить с некоторой вероятностью за пределами интервала  $[x_1, x_2]$ , но эта вероятность убывает при удалении от ямы и обращается в ноль на бесконечности. Синим пунктиром на рисунке обозначено примерное поведение вероятности для одного из состояний с фиксированной энергией.

Задаем значение полной энергии

> E:=1;

$$E := 1 \quad (4)$$

Рисуем график потенциала и уровень энергии

```
> picU:=plot([U2(x),E],x=-5..5,frm,color=[blue,red],filled=true,thickness=2,transparency=0.7,title="Безотражательный потенциал Баргмана",labels=["x","U(x)"],view=[-5..5,0..2.5],legend=["График потенциальной энергии","Полная энергия"]):
```

Закон сохранения механической энергии в классической механике имеет вид:

$$\frac{mv^2}{2} + U(x) = E$$

Вычисляем точки поворота как решение уравнения равенства полной энергии  $E$  значению потенциальной энергии:  $U(x)=E$ . В этих точках кинетическая энергия  $mv^2/2$  и, следовательно, скорость частицы в классической механике равны нулю:

y=0.

```
> x1:=fsolve(U2(x)=E,x=-5..0); # Используем функцию численного отыскания решения  
x2:=fsolve(U2(x)=E,x=0..5); # алгебраического уравнения U(x)=E в заданном диапазоне  
x1 := -0.7454981545  
x2 := 0.7454981545
```

$$(5)$$

Рисуем точки поворота и сопроводительный текст

```
> ppv1:=point([x1,U2(x1)],color=red,symbol=solidcircle,symbolsize=14):  
ppv2:=point([x2,U2(x2)],color=red,symbol=solidcircle,symbolsize=14):  
txt:=textplot([[x1+.3,U2(x1)+0.25,"v=0"],[x2-.3,U2(x2)+0.25,"v=0"],  
[x1,-0.1,"x1"],[x2,-0.1,"x2"]],frm):  
PicPsi:=plot(0.5/U2(x)-0.24,x=-5..5,frm,color=blue,linestyle=longdash,thickness=2,  
legend="Пример волновой функции"):  
V1:=line([x1,0],[x1,2.5],color=black,thickness=2,linestyle=dash):  
V2:=line([x2,0],[x2,2.5],color=black,thickness=2,linestyle=dash):
```

Выводим график потенциала и точек поворота на экран

```
> display(PicPsi,picU,ppv1,ppv2,txt,V1,V2,view=[-5..5,-3..2.5]);
```



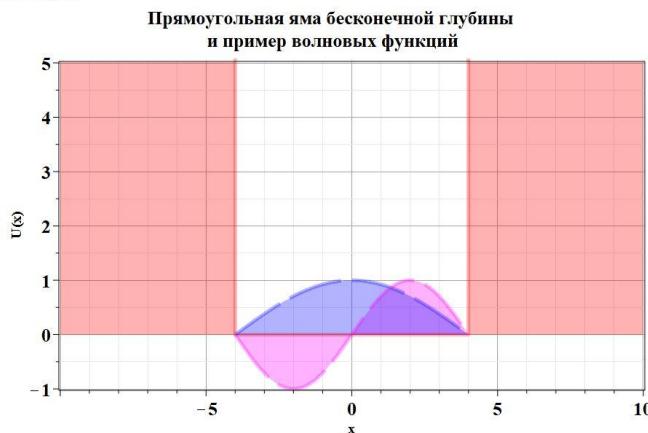
#### 4.2. Бесконечный по высоте барьер

Если потенциальная энергия как функция координаты в точке  $x_0$  имеет бесконечный по энергии разрыв то волновая функция  $\psi(x; E)$  в пределе  $x \rightarrow x_0$  стремится к нулю :

$$\lim_{x \rightarrow 0} \psi(x; E) = 0.$$

На рисунке ниже показан пример волновых функций, обращающихся в ноль на краю бесконечно глубокой ямы.

```
> PicU31:=plot(U3(x,4,4,6,0.0),x=-10..10,frm,color=red,filled=true,thickness=5,
  transparency=0.7,title="Прямоугольная яма бесконечной глубины\n и пример волновых
  функций",labels=[["x","U(x)"],view=[-10..10,0..5]):
pPsi1:=plot([\cos(Pi*x/8),sin(Pi*x/4)],x=-4..4,frm,color=[blue,magenta],filled=true,
  thickness=5,transparency=0.7,linestyle=longdash):
> display(PicU31,pPsi1);
```



#### 4.3. Конечный скачок энергии. Условия сшивки

Если потенциальная энергия как функция координаты в точке  $x_0$  имеет конечный по энергии разрыв то :

a) волновая функция  $\psi(x; E)$  в пределах справа и слева к этой точке :

$x \rightarrow x_0 + 0$  и  $x \rightarrow x_0 - 0$  непрерывна :

$$\lim_{x \rightarrow x_0 + 0} \psi(x; E) = \lim_{x \rightarrow x_0 - 0} \psi(x; E)$$

b) производная волновой функции  $\psi(x; E)$  в пределах справа и слева к этой точке :

$x \rightarrow x_0 + 0$  и  $x \rightarrow x_0 - 0$  непрерывна :

$$\lim_{x \rightarrow x_0 + 0} \frac{d}{dx} \psi(x; E) = \lim_{x \rightarrow x_0 - 0} \frac{d}{dx} \psi(x; E)$$

#### 4.4. Особый случай – $\delta$ – потенциал

Если потенциальная энергия, как функция координаты, представляет собой  $\delta$  – функцию Дирака :

$$U(x) = \alpha\delta(x - x_0),$$

то условия сшивки в точке  $x_0$ , где располагается  $\delta$  – функция, должны иметь такой вид :

a) волновая функция  $\psi(x; E)$  в пределах справа и слева к этой точке :

$x \rightarrow x_0 + 0$  и  $x \rightarrow x_0 - 0$  непрерывна :

$$\lim_{x \rightarrow x_0 + 0} \psi(x; E) = \lim_{x \rightarrow x_0 - 0} \psi(x; E)$$

b) производная волновой функции  $\psi(x; E)$  в пределах справа и слева к этой точке :

$x \rightarrow x_0 + 0$  и  $x \rightarrow x_0 - 0$  непрерывна :

$$\lim_{x \rightarrow x_0 + 0} \frac{d}{dx} \psi(x; E) - \lim_{x \rightarrow x_0 - 0} \frac{d}{dx} \psi(x; E) - \frac{2\alpha m}{\hbar^2} \psi(x; E) = 0$$

#### Вывод условия сшивки для $\delta$ – потенциала

Уравнение Шредингера для  $\delta$ -потенциала имеет такой вид:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \alpha\delta(x - x_0) \right) \psi(x; E) = E\psi(x; E)$$

Это уравнение должно выполняться везде в том числе и в точке  $x_0$ . По определению  $\delta$ -функция Дирака должна удовлетворять двум условиям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0),$$

для любой непрерывной в точке  $x_0$  функции  $f(x)$ :  $f(x_0+0)=f(x_0-0)$ .

Эти свойства означают, что функция  $\delta(x - x_0)$  равна нулю везде, кроме точки  $x_0$ . Поэтому исходные свойства приводят к тому, что выполнены условия:

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^{x_2} \delta(x - x_0) dx &= 1, & \int_{x_1}^{x_2} f(x) \delta(x - x_0) dx &= f(x_0), \text{ если } x_1 < x_0 < x_2, \\ \int_{x_1}^{x_2} \delta(x - x_0) dx &= 0, & \int_{x_1}^{x_2} f(x) \delta(x - x_0) dx &= 0, \text{ если } x_1 > x_0 \text{ или } x > x_2, \end{aligned}$$

#### Вычисление граничного условия сшивки

Проинтегрируем уравнение Шредингера по интервалу  $[x_1, x_2]$ , содержащему точку  $x_0$ . Получаем:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 \psi(x; E)}{\partial x^2} dx + \int_{x_1}^{x_2} \alpha\delta(x - x_0)\psi(x; E) dx &= E \int_{x_1}^{x_2} \psi(x; E) dx \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(x_2; E) - \psi'(x_1; E)) + \psi(x_0; E) &= E \int_{x_1}^{x_2} \psi(x; E) dx \end{aligned}$$

Согласно одному из постулатов квантовой теории, **волновая функция всегда является непрерывной**.

Поэтому при условиях  $x_1 \rightarrow x_0 - 0$  и  $x_2 \rightarrow x_0 + 0$  имеем:

$$\lim_{x_1 \rightarrow x_2} \int_{x_1}^{x_2} \psi(x; E) dx = 0$$

В результате граничное условие принимает такой вид:

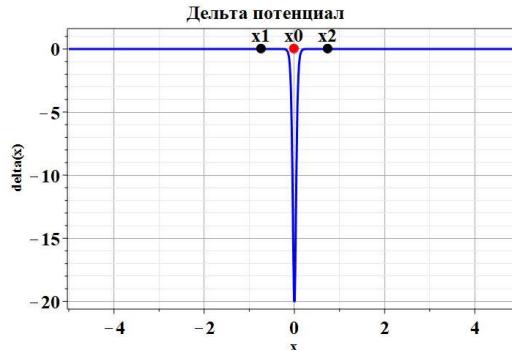
$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'(x_0 + 0; E) - \psi'(x_0 - 0; E)) + \alpha\psi(x_0; E) = 0$$

Отсюда получаем необходимое граничное условие.

**На рисунке ниже показана  $\delta$  -функция**

**Рисуем примерный график  $\delta$ -потенциала.**

```
> picDelta:=plot(UD(x,20),x=-5..5,frm,color=[blue,red],thickness=3,title="Дельта
    потенциал",labels=["x","delta(x)"],view=[-5..5,-20.5..1.5]):
txtD:=textplot([[0,+1.1,"x0"],[x1,+1.1,"x1"],[x2,+1.1,"x2"]],frm):
PD1:=point([x1,0],color=black,symbol=solidcircle,symbolsize=15):
PD2:=point([x2,0],color=black,symbol=solidcircle,symbolsize=15):
PD0:=point([0,0],color=red,symbol=solidcircle,symbolsize=15):
> display(picDelta,PD1,PD2,PD0,txtD);
```



#### 4.5. Смешанный случай — Полубесконечная яма

Если потенциальная энергия, как функция координаты в точке  $x1$  имеет бесконечный по энергии разрыв, а в точке  $x2$  — конечный, то :

a) волновая функция  $\psi(x; E)$  в точке  $x1$  обращается в ноль :

$$\psi(x1; E) = 0$$

b) при  $x \rightarrow x2 + 0$  и  $x \rightarrow x2 - 0$  непрерывна :

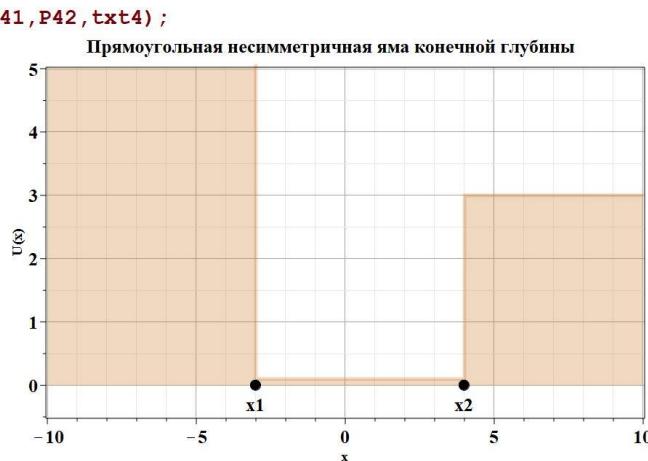
$$\lim_{x \rightarrow x2 + 0} \psi(x; E) = \lim_{x \rightarrow x2 - 0} \psi(x; E)$$

b) производная волновой функции  $\psi(x; E)$  в пределах справа и слева к этой точке :

$x \rightarrow x2 + 0$  и  $x \rightarrow x2 - 0$  непрерывна :

$$\lim_{x \rightarrow x2 + 0} \frac{d}{dx} \psi(x; E) = \lim_{x \rightarrow x2 - 0} \frac{d}{dx} \psi(x; E)$$

```
> x1:=3;x2:=4;
x1 := 3
x2 := 4
> picU41:=plot(U4(x,x1,x2,6,0.1,3),x=-10..10,frm,color=gold,filled=true,thickness=5,
transparency=0.7,title="Прямоугольная несимметричная яма конечной глубины",labels=["x",
"U(x)"],view=[-10..10,-0.5..5]):
txt4:=textplot([[-x1,-0.3,"x1"],[x2,-0.3,"x2"]],frm):
P41:=point([-x1,0],color=black,symbol=solidcircle,symbolsize=15):
P42:=point([x2,0],color=black,symbol=solidcircle,symbolsize=15):
> display(picU41,P41,P42,txt4);
(6)
```



## Решение задач

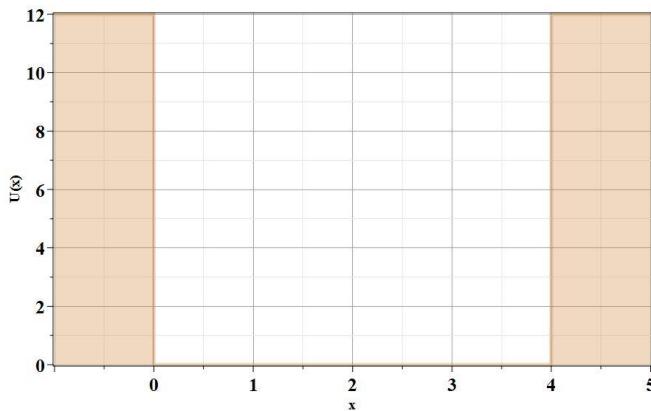
### Задача 2.1 ГКК

2.1. Найти энергетические уровни и нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины  $a$ , т. е.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0, \quad x > a. \end{cases}$$

Выяснить свойства симметрии полученных функций при инверсии координат относительно центра ямы (преобразование вида  $x \rightarrow x' = -x + a$ ).

```
> picU41:=plot(U4(x,0,x2,12,0.0,12),x=-1..5,frm,color=gold,filled=true,thickness=5,transparency=0.7,labels=[["x","U(x)"]];
```



Внутри ямы  $U(x)=0$ . Поэтому уравнение Шредингера внутри ямы имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x; E) = E \psi(x; E).$$

По определению  $E > 0$ . Только в этом случае разрешено движение частиц.

Введем обозначение :

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0.$$

В результате уравнение Шредингера примет такой вид :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x; E) + k^2 \psi(x; E) = 0$$

Тогда общее решение уравнения внутри ямы можно записать так :

$$\psi(x; E) = A \cdot \sin(kx) + B \cdot \cos(kx).$$

Поскольку на обеих границах ямы и при  $x = 0$  и при  $x = a$  имеется бесконечный скачок энергии то на обеих границах следует выбрать граничные условия следующего вида :

$$\psi(0; E) = \psi(a; E) = 0.$$

Отсюда находим при  $x = 0$  :

$$B = 0$$

При  $x = a$  получаем :

$$A \cdot \sin(ka) = 0.$$

Из последнего уравнения находим допустимые значения волнового числа  $k$  :

$$ka = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Или :

$$k_n = \frac{\pi n}{a}$$

Соответствующие значения энергии вычисляются так :

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi n}{a} \right)^2,$$

а соответствующие волновые функции будут иметь такой вид :

$$\psi_n(x; E) = A \cdot \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) = A \cdot \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right).$$

Остается вычислить нормировочный коэффициент  $A$ . Имеем условие нормировки :

$$\int_0^a (\psi_n(x; E))^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n}{a} x\right) dx = 1$$

$$\text{Используем тригонометрическое тождество : } \sin^2\left(\frac{\pi n}{a} x\right) = \frac{1}{2} \left(1 - \cos\left(2 \frac{\pi n}{a} x\right)\right)$$

В этом случае :

$$\int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n}{a} x\right) dx = \frac{1}{2} \int_0^a \left(1 - \cos\left(2 \frac{\pi n}{a} x\right)\right) dx = \frac{a}{2} - \frac{1}{2} \int_0^a \cos\left(2 \frac{\pi n}{a} x\right) dx = \frac{a}{2}.$$

Отсюда :

$$A^2 \frac{a}{2} = 1 \text{ или } A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Окончательно :

$$\psi_n(x; E) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right)$$

Спектр энергии частицы в яме всегда является дискретным, т.е. уровни частицы можно пересчитать, хотя число уровней, например, как в случае **бесконечно глубокой ямы**, может быть бесконечным.

Строим графики нескольких первых собственных функций с фиксированной энергией для бесконечно глубокой ямы

> psin:=(x,n,a)->sqrt(2/a)\*sin(Pi\*n\*x/a);

$$psin := (x, n, a) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right) \quad (7)$$

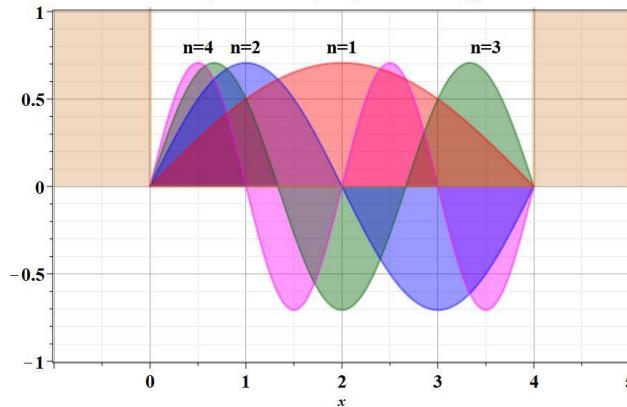
> a:=4;

$$a := 4 \quad (8)$$

> picPsin:=plot([psin(x,1,a),psin(x,2,a),psin(x,3,a),psin(x,4,a)],x=0..a,color=[red,blue,"DarkGreen",magenta],title="Бесконечно глубокая яма (БГЯ). Волновые функции",thickness=3,transparency=0.6,filled=true,view=[-1..5,-1..1]):  
txtBGn:=textplot([[0.5,0.8,"n=4"],[3.5,0.8,"n=3"],[1,0.8,"n=2"],[2,0.8,"n=1"]],frm,  
color=[red,blue,"DarkGreen",magenta]):

> display(picPsin,txtBGn);

Бесконечно глубокая яма (БГЯ). Волновые функции



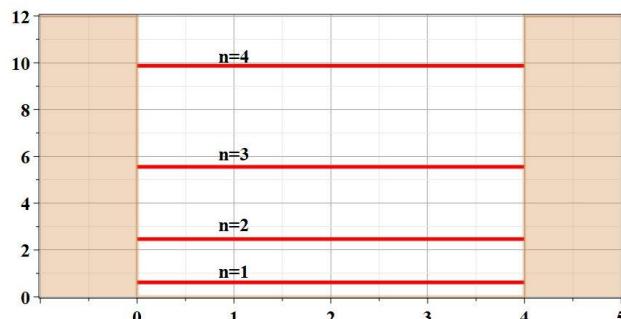
**Строим графики плотности вероятностей найти частицу в точке БГЯ для нескольких первых собственных функций с фиксированной энергией.**

```
> picPn:=plot([psin(x,1,a)^2,psin(x,2,a)^2,psin(x,3,a)^2,psin(x,4,a)^2],x=0..a,color=[red,blue,"DarkGreen",magenta],title="Бесконечно глубокая яма (БГЯ). Плотность вероятности",thickness=3,transparency=0.6,filled=true,view=[-1..5,0..0.7]):  
txtBgn:=textplot([[0.5,0.6,"n=4"],[3.5,0.6,"n=3"],[1,0.6,"n=2"],[2,0.6,"n=1"]],frm,color=[red,blue,"DarkGreen",magenta]):  
>  
> display(picPn,txtBgn);
```



**Строим уровни энергии нескольких первых стационарных состояний с фиксированной энергией.**

```
> E:=(n,a,q)->q*(Pi*n/a)^2;  
> q:=1;  
> pE:=plot([E(1,a,q),E(2,a,q),E(3,a,q),E(4,a,q)],x=0..a,color=red,thickness=5):  
txtBGEN:=textplot([[1,10.3,"n=4"],[1,6.1,"n=3"],[1,3.1,"n=2"],[1,1.1,"n=1"]],frm,color=[red,blue,"DarkGreen",magenta]):  
> display(pE,picU41,txtBGEN);
```



**Постройте самостоятельно графики волновых функций после замены переменных  $x = a - x'$**

### Задача 2.2 ГКК

2.2. В стационарных состояниях частицы из предыдущей задачи найти функцию распределения по координатам и импульсам частицы, средние значения этих величин и их флуктуации.

### Задача 2.3 ГКК

2.3. Найти среднюю кинетическую энергию и ее флуктуацию в стационарных состояниях из 2.1.

## Задача 2.4 ГКК

**2.4.** Состояние частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $a$  ( $0 < x < a$ ) описывается волновой функцией вида:

a)  $\Psi(x) = Ax(x-a)$ ; б)  $\Psi(x) = B \sin^2(\pi x/a)$ .

Найти распределение вероятностей различных значений энергии частицы, среднее значение и среднюю квадратичную флуктуацию энергии.

Согласно принципу суперпозиции любое состояние частицы в системе можно представить в виде линейной суперпозиции по состояниям с фиксированной энергией. Состояния с фиксированной энергией для бесконечно глубокой ямы имеют вид (задача 2.1.):

$$\Psi_n(x; E) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right)$$

Предварительно, состояние  $\Psi(x)$  должно быть нормировано. Вычисляем:

$$\int_0^a (\Psi(x))^* \Psi(x) dx = 1 = A^2 \int_0^a x^2 (a-x)^2 dx = A^2 \left[ a^2 \frac{x^3}{3} - 2a \frac{x^4}{4} + \frac{x^5}{5} \right]_0^a = A^2 \frac{a^5}{30} = 1$$

Отсюда:

$$A = \frac{1}{a^2} \sqrt{\frac{30}{a}}$$

В этом случае имеем:

$$\Psi(x) = \frac{1}{a^2} \sqrt{\frac{30}{a}} x(a-x) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{\pi k}{a} x\right)$$

Коэффициенты  $C_k$  позволяют вычислить вероятность обнаружить систему в состоянии с энергией

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi k}{a} \right)^2$$

Никаких других энергий частица в этой системе иметь не может.

Вероятность энергии  $E_k$  при этом равна  $P\{E = E_k\} = |C_k|^2$ .

Коэффициенты  $C_k$  вычисляются как коэффициенты обратного преобразования Фурье:

$$C_k = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a (\Psi(x))^* \sin\left(\frac{\pi k}{a} x\right) dx = A \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a x(a-x) \sin\left(\frac{\pi k}{a} x\right) dx.$$

Интеграл справа берется по частям. Записываем:

$$\int_0^a x(a-x) \sin\left(\frac{\pi k}{a} x\right) dx = -\frac{a}{\pi k} \int_0^a x(a-x) \frac{d}{dx} \cos\left(\frac{\pi k}{a} x\right) dx =$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{a}{\pi k} x(a-x) \cos\left(\frac{\pi k}{a} x\right) \Big|_0^a + \frac{a}{\pi k} \int_0^a (a-2x) \cos\left(\frac{\pi k}{a} x\right) dx = \\
&= \left(\frac{a}{\pi k}\right)^2 \int_0^a (a-2x) \frac{d}{dx} \sin\left(\frac{\pi k}{a} x\right) dx = \left(\frac{a}{\pi k}\right)^2 (a-2x) \sin\left(\frac{\pi k}{a} x\right) \Big|_0^a + \left(\frac{a}{\pi k}\right)^2 \frac{1}{2} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi k}{a} x\right) dx = \\
&= -2 \left(\frac{a}{\pi k}\right)^3 \cos\left(\frac{\pi k}{a} x\right) \Big|_0^a = -4 \left(\frac{a}{\pi k}\right)^3 ((-1)^k - 1).
\end{aligned}$$

Здесь использовано соотношение :

$$\cos(\pi k) = (-1)^k \quad (\text{полезное соотношение})$$

Отсюда окончательно находим :

$$C_k = -4A \sqrt{\frac{2}{a}} \left(\frac{a}{\pi k}\right)^3 ((-1)^k - 1) = -\frac{4}{a^2} \sqrt{\frac{30}{a}} \sqrt{\frac{2}{a}} \left(\frac{a}{\pi k}\right)^3 ((-1)^k - 1) = 8\sqrt{15} \left(\frac{1}{\pi k}\right)^3 (1 - (-1)^k)$$

Соответствующие вероятности имеют такой вид :

$$P(E=E_k) = (C_k)^2 = 240 \left(\frac{1}{\pi k}\right)^6 (1 - (-1)^k)^2$$

### Проверка:

Проверяем нормировку волновой функции:

> N:=int(x^2\*(a-x)^2, x=0..a);

$$N := \frac{512}{15} \quad (9)$$

> A:=sqrt(1/N);

$$A := \frac{1}{32} \sqrt{30} \quad (10)$$

Проверяем вычисление интеграла в коэффициентах:

> assume(k::integer); # Устанавливаем свойство чисел k быть целыми!  
> Ck:=(k)->simplify(int(x\*(a-x)\*sin(Pi\*k\*x/a), x=0..a));

$$Ck := k \rightarrow \text{simplify}\left(\int_0^a x(a-x) \sin\left(\frac{\pi k x}{a}\right) dx\right) \quad (11)$$

> Ck(k);

$$\frac{128(-1)^{1+k} + 128}{\pi^3 k^3} \quad (12)$$

Вычисляем явно значения вероятностей:

>

> Pk:=evalf([seq([k, 240\*(1/(Pi\*k)^6)\*(1-(-1)^k)^2], k=1..20)]);

$$\begin{aligned}
Pk := & [[1., 0.9985550131], [2., 0.], [3., 0.001369759963], [4., 0.], [5., 0.00006390752084], [6., 0.], [7., \\
& 0.000008487577566], [8., 0.], [9., 0.000001878957425], [10., 0.], [11., 5.636582727 \cdot 10^{-7}], [12., 0.], [13., \\
& 2.068768441 \cdot 10^{-7}], [14., 0.], [15., 8.766463764 \cdot 10^{-8}], [16., 0.], [17., 4.136932816 \cdot 10^{-8}], [18., 0.], [19., \\
& 2.122513155 \cdot 10^{-8}], [20., 0.]] \quad (13)
\end{aligned}$$

Проверяем нормировку вероятностей:

```
> sum(240*(1/(Pi*k)^6)*(1-(-1)^k)^2,k=1..infinity);
```

1

(14)

### Анализ задачи 2.4

1. Заданная волновая функция не является состоянием с фиксированной энергией. Следовательно:
2. Для данной волновой функции в эксперименте по измерению энергии будут случайно получаться энергии

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi k}{a} \right)^2$$

из списка энергетических уровней частицы в бесконечно глубокой яме.

3. Вероятность при измерении получить значение энергии, равное  $E_k$ , равно

$$P(E=E_k) = (C_k)^2 = 240 \left( \frac{1}{\pi k} \right)^6 (1 - (-1)^k)^2$$

Вероятность убывает очень быстро с ростом уровня энергии.

## Задача 2.7 ГКК

2.7. Найти четные и нечетные энергетические уровни дискретного спектра частицы в симметричной потенциальной яме вида (рис. 1)

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

Каково число состояний частицы в дискретном спектре в зависимости от глубины ямы? Каково условие появления новых состояний дискретного спектра при углублении ямы?

Найти энергетические уровни нижней части спектра в случае глубокой потенциальной ямы  $U_0 \gg \hbar^2/m a^2$  и определить смещение этих уровней по сравнению с энергетическими уровнями частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме (см. 2.1).

2.8. Рассмотреть симметричную потенциальную яму (см. предыдущую задачу).

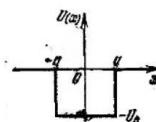
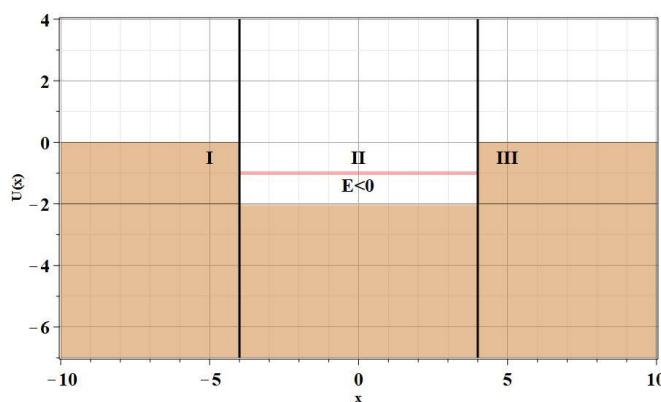


Рис. 1.

Рисуем яму шириной 2a и глубиной U0

```
> a:=4;U0:=-2;XV1:=-10;XV2:=10; XVB:=-5;
> picU42:=plot([U4(x,a,a,0,U0,0),-1],x=-4..4,frm,color=[white,red],thickness=5,
transparency=0.7,labels=["x","U(x)":]);
# Обозначаем контуры ямы прямоугольниками. Так получается более эффективно
R1:=rectangle([XV1,0],[-4,U0],color=gold,thickness=0,transparency=0.5):
R2:=rectangle([XV2,0],[4,U0],color=gold,thickness=0,transparency=0.5):
R3:=rectangle([XV1,U0],[XV2,U0+XVB],color=gold,thickness=0,transparency=0.5):
# Подписи к зонам и уровням энергии
txtZ:=textplot([[[-5,-0.5,"I"],[0,-0.5,"II"],[5,-0.5,"III"]],[0,-1.4,"E<0"]]],frm,color=[red,blue,"DarkGreen",magenta]):
# Вертикальные линии, фиксирующие границы ямы
V1G:=line([-a,XVB+U0],[-a,4],color=black,thickness=3):
V2G:=line([a,XVB+U0],[a,4],color=black,thickness=3):
> P42:=display(picU42,R1,R2,R3,txtZ,V1G,V2G,view=[XV1..XV2,XVB+U0..4]);
```



### Решение задачи

Решение задач с потенциалами, имеющими кусочный вид, удобно проводить с помощью разбиения всей области решения задачи на зоны или области. На рисунке выше эти зоны пронумерованы римскими цифрами. Всего таких зон три. Энергии, которые соответствуют движению внутри потенциальной ямы, отрицательные, т.е.  $E < 0$  (как в классической механике!). В каждой из этих зон можно ввести свое волновое число. В зонах I и III потенциал равен нулю, следовательно, уравнение Шредингера будет иметь такой вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x; E) = E\psi(x; E).$$

В зоне II имеется отрицательная потенциальная энергия, равная  $U_0$ . В этой зоне уравнение Шредингера будет иметь такой вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x; E) + U_0 \psi(x; E) = E\psi(x; E).$$

В зонах I и III введем волновое число, полагая:

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0 \text{ (E - отрицательно!)}$$

В зоне II введем волновое число так:

$$k_1^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} > 0 \text{ (Полная энергия больше потенциальной!)}$$

Границные условия, в соответствии с общей схемой, имеют такой вид:

$$\begin{aligned} \psi(x; E) &\rightarrow 0, \text{ при } x \rightarrow \pm\infty; \\ \psi(-a+0; E) &= \psi(-a-0; E); \quad \psi'(-a+0; E) = \psi'(-a-0; E); \\ \psi(a+0; E) &= \psi(a-0; E); \quad \psi'(a+0; E) = \psi'(a-0; E). \end{aligned}$$

Уравнения, которые необходимо решать, имеют такой вид:

$$\begin{array}{lll} \text{I} & \text{II} & \text{III} \\ \psi_I'' - k^2 \psi_I = 0 & \psi_{II}'' + k_1^2 \psi_{II} = 0 & \psi_{III}'' - k^2 \psi_{III} = 0 \end{array}$$

Соответствующие решения будут такими :

$$\psi_I(x) = A e^{kx} + A_1 e^{-kx} \quad \psi_{II}(x) = B \cdot \cos(k_1 x) + C \cdot \sin(k_1 x) \quad \psi_{III}(x) = D e^{-kx} + D_1 e^{kx}$$

Границные условия теперь можно записать так :

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &\rightarrow 0, \text{ при } x \rightarrow -\infty; \quad \psi_{III}(x) \rightarrow 0, \text{ при } x \rightarrow \infty \\ \psi_I(-a) &= \psi_{II}(-a), \quad \psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a), \\ \psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a), \quad \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \end{aligned}$$

Всего имеем шесть граничных условий для решения трех дифференциальных уравнений второго порядка.

Применяя граничные условия к решениям, получаем следующие алгебраические условия :

$$A_1 = 0, \quad D_1 = 0.$$

$$A e^{-ka} = B \cdot \cos(k_1 a) - C \cdot \sin(k_1 a), \quad -kA e^{-ka} = k_1 B \cdot \sin(k_1 a) + k_1 C \cdot \cos(k_1 a);$$

$$D e^{-ka} = B \cdot \cos(k_1 a) + C \cdot \sin(k_1 a), \quad kD e^{-ka} = -k_1 B \cdot \sin(k_1 a) + k_1 C \cdot \cos(k_1 a).$$

Решать эту систему непосредственно громоздко.

Поэтому удобнее воспользоваться дополнительными сведениями о характере потенциальной энергии как функции координаты  $x$ . Это важное замечание для решения всех задач с симметричным потенциалом!

Именно, для симметричного потенциала имеет место соотношение :  $U(x) = U(-x)$ ,

т.е. функция  $U(x)$  является четной. В этом случае не трудно проверить,

что оператор Гамильтона такой задачи коммутирует с оператором инверсии  $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$  :

$$[\hat{I}, \hat{H}] = 0. \text{ Проверьте самостоятельно этот факт!}$$

В этом случае собственные функции оператора Гамильтона, т.е. искомые нами волновые функции с фиксированной энергией, являются также собственными функциями оператора инверсии.

Собственные функции оператора инверсии являются либо четными, либо нечетными функциями.

Поэтому решения нашей задачи сразу можно искать отдельно среди четных функций и отдельно среди нечетных функций.

### Четные функции.

Решения в виде четных функций можно записать так :

$$\Psi_I^+(x) = Ae^{kx} \quad \Psi_{II}^+(x) = B \cdot \cos(k_1 x) \quad \Psi_{III}^+(x) = Ae^{-kx}.$$

В этом случае граничные условия приводят к следующим уравнениям :

$$Ae^{-ka} = B \cdot \cos(k_1 a), \quad kAe^{-ka} = k_1 B \cdot \sin(k_1 a);$$

Отсюда находим :  $A = B \cdot \cos(k_1 a) e^{ka}$  и получаем уравнения для волнового числа  $k$  :

$$k = k_1 \operatorname{tg}(k_1 a).$$

### Нечетные функции

Решения в виде нечетных функций можно записать так :

$$\Psi_I^-(x) = -De^{kx} \quad \Psi_{II}^-(x) = C \cdot \sin(k_1 x) \quad \Psi_{III}^-(x) = De^{-kx}.$$

В этом случае граничные условия приводят к следующим уравнениям :

$$De^{-ka} = C \cdot \sin(k_1 a), \quad -kDe^{-ka} = k_1 C \cdot \cos(k_1 a);$$

Отсюда находим :  $D = C \cdot \sin(k_1 a) e^{ka}$  и получаем уравнения для волнового числа  $k$  :

$$k = -k_1 \operatorname{ctg}(k_1 a).$$

Решения на собственные волновые числа  $k$  найдем сначала качественно с помощью графического метода.

Для этого представим число  $k_1$  в таком виде :

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{k_0^2 - k^2} > 0, \quad k_0 = \sqrt{-\frac{2mU_0}{\hbar^2}} > 0$$

Напомним, что  $U_0 < 0$ .

### Графики для четных функций

Введем переменную  $\xi = k_1 a$ . Тогда уравнение для  $\xi$  примет такой вид :

$$\frac{1}{\xi} \sqrt{\xi_0^2 - \xi^2} = -\operatorname{tg}(\xi)$$

Здесь

$$\xi_0 = a \cdot k_0 = a \sqrt{-\frac{2mU_0}{\hbar^2}}.$$

Это безразмерное число будем называть параметром ямы конечной глубины  $U_0$  и ширины  $a$ .

Определяем функции для графического решения задачи

> g1:=(xi, xi0)->evalf(sqrt(-xi^2+xi0^2)/xi);

$$g1 := (\xi, \xi_0) \rightarrow \operatorname{evalf}\left(\frac{\sqrt{-\xi^2 + \xi_0^2}}{\xi}\right) \quad (16)$$

> Eq:=(xi, xi0)->evalf(sqrt(-xi^2+xi0^2)-xi\*tan(xi));

$$Eq := (\xi, \xi_0) \rightarrow \operatorname{evalf}\left(\sqrt{-\xi^2 + \xi_0^2} - \xi \tan(\xi)\right) \quad (17)$$

>

## **Начальная точка из списка решений уравнения для четных состояний**

В качестве начальной точки взята точка начала координат (для создания начала списка)

```
> A11PX:=point([0,0],color=red,  
                 symbol=solidcircle,symbolsize=14):
```

Задаем число диапазонов значений параметров ямы, для которых ищутся решения:

> M:=5; # Число можно самостоятельно менять, но не следует задавать слишком большие числа  
M:= 5 (18)

#### Вычисление всех решений для набора значений глубины ямы

Значения  $\xi_0$  выбраны из первых пяти диапазонов:  $\pi \cdot (k-1) < a \cdot k_1 < \pi \cdot k$ ,  $k=1,..,M$

и равны  $\xi_0 = \pi \cdot (j-1) + \pi/3$ ,  $j=1, \dots, M$

Решения уравнений ищутся в диапазонах  $[\pi \cdot (k-1).. \pi \cdot k]$ ,  $k=1,..,M$

```

> for j from 1 to M do # Цикл по значениям глубины ямы
  xi0:=Pi*(j-1)+Pi/3; # Задаем параметр глубины ямы
  # Точка пересечения с нулевым уровнем
  X0[j]:=evalf(fsolve(g1(x,xi0),x=Pi*(j-1)..Pi*j));
  if type(X0[j], 'numeric') then PX0[j]:=point([X0[j],g1(X0[j],xi0)], color=black,symbol=solidcircle,symbolsize=14);
  end if;
for k from 1 to M do # Цикл по диапазонам
  # Цикл по значениям глубины ямы
  # Вычисление решений уравнения для волновых чисел
  X[k,j]:=evalf(fsolve(Beq(x,xi0),x=Pi*(k-1)..Pi*k));
  # Проверка существования решения в численном виде в данном диапазоне
  if type(X[k,j], 'numeric') then
    print("k=",k,"j=",j,X[k,j]);# Печатаем вычисленные значения k1*a
    # Создание точки пересечения графиков, если она существует
    PX[k,j]:=point([X[k,j],tan(X[k,j])],color=red,
                    symbol=solidcircle,symbolsize=14);
    A[k,j]:=cos(X[k,j])*exp(sqrt(xi0^2-X[k,j]^2));
    # Создание списка изображений точек пересечения
    AllPX:=AllPX,PX[k,j];
  end if;
end do;
AllPX:=AllPX,PX0[j];
end do:

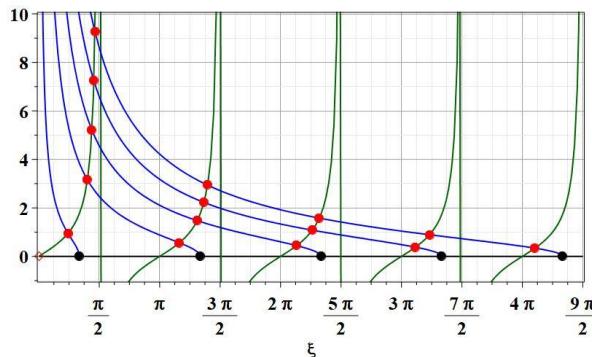
```

(19)

### Вывод графиков и точек на экран

```
> PGsolP:=plot([0,tan(xi),g1(xi,Pi/3),g1(xi,Pi+Pi/3),g1(xi,2*Pi+Pi/3),g1(xi,3*Pi+Pi/3),g1(xi,4*Pi+Pi/3)],xi=0..4*Pi+Pi/2,frm,color=[black,"DarkGreen",blue,blue,blue,blue],thickness=2,title="Графическое решение задачи для четных состояний \n",view=[0..4*Pi+Pi/2,-1..10]):  
>  
> display(PGsolP,AllPX);
```

Графическое решение задачи для четных состояний

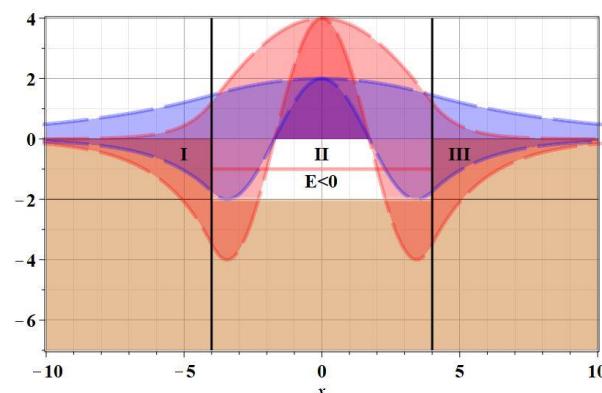


```
> PsiP:=proc(x,a,k,j,B0,A,X)
#-----#
# Процедура построения графиков четных волновых функций
#-----#
# x - координата, в которой вычисляется значение функции
# a - полуширина ямы
# k - номер волновой функции (главное квантовое число)
# j - номер диапазона глубины ямы (Для номера ямы j: k=1,...,j)
# B0 - нормировочный коэффициент
# A[k,j] - массив коэффициентов волновой функции во внешней области
# X[k,j] - значение числа k1*a для заданного уровня k в j-том диапазоне глубины ямы
#-----#
local K,xi0;
xi0:=Pi*(j-1)+Pi/3; # Значение параметра ширины ямы
K:=sqrt(xi0^2-X[k,j]^2); # Волновое число вне ямы
# Вычисление волновой функции с помощью кусочно-заданной функции по зонам
piecewise(x<-a,B0*A[k,j]*exp(K*x/a),-a<=x and x<=a,B0*cos(X[k,j]*x/a),B0*A[k,j]*exp(-K*x/a));
end proc:
```

### Построение четных волновых функций

по заданным значениям параметра ямы и номера уровня

```
> pPsi1:=plot([PsiP(x,4,1,1,2,A,X),PsiP(x,4,2,2,4,A,X),PsiP(x,4,1,2,4,A,X),PsiP(x,4,2,2,2,A,X)],x=-20..20,frm,color=[blue,red,red],filled=true,thickness=5,transparency=0.7,linestyle=longdash):  
> display(pPsi1,P42);
```



## Графики для нечетных функций

Графики для нечетных функций

(20)

Введем переменную  $\xi = k_1 a$ . Тогда уравнение для  $\xi$  примет такой вид:

$$\frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 - \xi_0^2}} = -\operatorname{tg}(\xi)$$

```
> g2:=(xi,xi0)->evalf(-sqrt(-xi^2+xi0^2)/xi);
g2 := ( $\xi$ ,  $\xi_0$ ) → evalf  $\left( -\frac{\sqrt{-\xi^2 + \xi_0^2}}{\xi} \right)$ 
```

```
> Eq1:=(xi,xi0)->evalf(-xi/sqrt(-xi^2+xi0^2)-tan(xi));
Eq1 := ( $\xi$ ,  $\xi_0$ ) → evalf  $\left( -\frac{\xi}{\sqrt{-\xi^2 + \xi_0^2}} - \tan(\xi) \right)$ 
```

```
> M:=5;
```

$M := 5$

(21)

(22)

(23)

**Начальная точка из списка решений уравнения для четных состояний**

В качестве начальной точки взята точка начала координат

```
> AllPX1:=point([0,0],color=red,
symbol=solidcircle,symbolsize=14);
```

Вычисление всех решений для набора значений глубины ямы

Значения  $\xi_0$  выбраны из первых пяти диапазонов:  $\pi \cdot (k-1) < a \cdot k_1 < \pi \cdot k$ ,  $k=1,..,M$

и равны  $\xi_0 = \pi \cdot (j-1) + \pi/3$ .

Решения уравнений ищутся в диапазонах  $[\pi \cdot (k-1).. \pi \cdot k]$

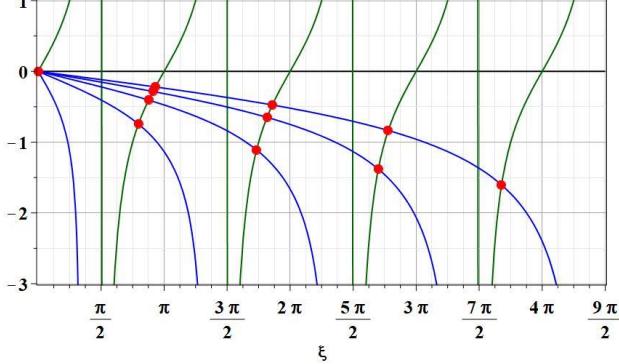
```
> for k from 1 to M do # Цикл по диапазонам
    for j from 1 to M do # Цикл по значениям глубины ямы
        xi0:=Pi*(j-1)+Pi/3;
        # Цикл по значениям глубины ямы
        # Вычисление решений уравнения для волновых чисел
        X1[k,j]:=evalf(fsolve(Eq1(x,xi0),x=Pi*(k-1)..Pi*k));
        # Проверка существования решения в численном виде в данном диапазоне
        if type(X1[k,j],'numeric') then
            print("k=",k,"j=",j,X1[k,j]);
            # Создание точки пересечения графиков. если она существует
            PX1[k,j]:=point([X1[k,j],tan(X1[k,j])],color=red,
                            symbol=solidcircle,symbolsize=14);
            A1[k,j]:=-sin(X1[k,j])*exp(sqrt(xi0^2-X1[k,j]^2));
            # Создание списка изображений точек пересечения
            AllPX1:=AllPX1,PX1[k,j];
        end if;
    end do;
end do:
"k=", 1, "j=", 1, 0.7594460320
"k=", 1, "j=", 2, 1.264208326
"k=", 1, "j=", 3, 1.381236842
"k=", 1, "j=", 4, 1.433478106
"k=", 1, "j=", 5, 1.463113676
"k=", 2, "j=", 3, 4.116165855
"k=", 2, "j=", 4, 4.290273718
"k=", 2, "j=", 5, 4.384477261
"k=", 3, "j=", 4, 7.107914530
"k=", 3, "j=", 5, 7.288976679
"k=", 4, "j=", 5, 10.15375591
```

(24)

### Вывод графиков и точек на экран

```
> PGsolP1:=plot([0,tan(xi),1/g2(xi,Pi/3),1/g2(xi,Pi+Pi/3),1/g2(xi,2*Pi+Pi/3),1/g2(xi,3*Pi+Pi/3),1/g2(xi,4*Pi+Pi/3)],xi=0..4*Pi+Pi/2,frm,color=[black,"DarkGreen",blue,blue,blue,blue,blue],thickness=2,title="Графическое решение задачи для нечетных состояний\n",view=[0..4*Pi+Pi/2,-3..1]):  
> display(PGsolP1,AllPX1);
```

Графическое решение задачи для нечетных состояний



```
> PsiNP:=proc(x,a,k,j,B0,A,X)
```

```
#  
# Процедура построения графиков нечетных волновых функций  
#  
# x - координата, в которой вычисляется значение функции  
# a - полуширина ямы  
# k - номер волновой функции (главное квантовое число)  
# j - номер диапазона глубины ямы  
# B0 - нормировочный коэффициент  
# A[k,j] - массив коэффициентов волновой функции во внешней области  
# X[k,j] - значение числа k1*a для заданного уровня k в j-том диапазоне глубины ямы
```

```
local K,xi0;  
xi0:=Pi*(j-1)+Pi/3; # Параметр ямы  
K:=sqrt(xi0^2-X[k,j]^2); # Волновое число вне ямы  
# Построение волновой функции с помощью кусочно-заданной функции  
piecewise(x<-a,B0*A[k,j]*exp(K*x/a),-a<=x and x<=a,B0*sin(X[k,j]*x/a),-B0*A[k,j]*exp(-K*x/a));
```

```
end proc:
```

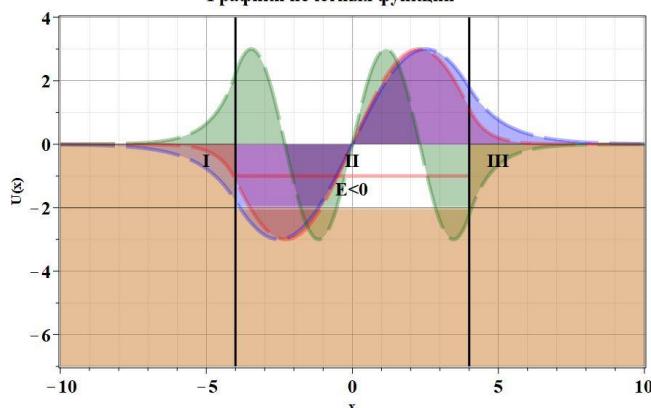
```
> B0:=3; # Масштабный (нормировочный) коэффициент волновой функции
```

$B0 := 3$

(25)

```
> pPsiNP:=plot([PsiNP(x,4,1,2,B0,A1,X1),PsiNP(x,4,1,3,B0,A1,X1),PsiNP(x,4,2,3,B0,A1,X1)],  
x=-10..10,frm,color=[blue,red,"DarkGreen"],title="Графики нечетных функций",filled=  
true,thickness=5,transparency=0.7,linestyle=longdash):  
> display(P42,pPsiNP);
```

Графики нечетных функций

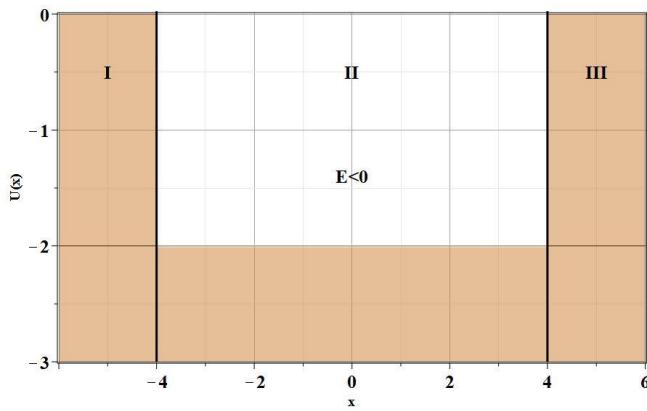


### Численное вычисление уровней энергии в яме

```
> XV1:=-6; XV2:=6; XVB:=-1;
      XV1 := -6
      XV2 := 6
      XVB := -1
(26)
```

### Еще раз строим изображение ямы

```
> picU42a:=plot([U4(x,a,a,0,U0,0)],x=-4..4,frm,color=[white,red],thickness=5,
transparency=0.7,labels=["x","U(x)"]):
# Обозначаем контуры ямы прямоугольниками. Так получается более эффективно
R1:=rectangle([XV1,0],[-4,U0],color=gold,thickness=0,transparency=0.5):
R2:=rectangle([XV2,0],[4,U0],color=gold,thickness=0,transparency=0.5):
R3:=rectangle([XV1,U0],[XV2,U0+XVB],color=gold,thickness=0,transparency=0.5):
# Подписи к зонам и уровням энергии
txtZ:=textplot([[-5,-0.5,"I"],[0,-0.5,"II"],[5,-0.5,"III"],[0,-1.4,"E<0"]],frm,color=[red,blue,"DarkGreen",magenta]):
# Вертикальные линии, фиксирующие границы ямы
V1G:=line([-a,XVB+U0],[-a,4],color=black,thickness=3):
V2G:=line([a,XVB+U0],[a,4],color=black,thickness=3):
> P42:=display(picU42a,R1,R2,R3,txtZ,V1G,V2G,view=[XV1..XV2,XVB+U0..0]);
```



### Вычисляем энергию уровней

Энергия уровней вычисляется по формуле:

$$E_n = \frac{(\hbar)^2}{2m} k^2$$

Волновое число  $k$  вычисляется по формуле:

$$k = \frac{1}{a} \sqrt{\xi_0^2 - \xi^2}$$

В соответствии с этим вычисляем уровни энергии:

```
> En:=(a,xi,xi0)->-sqrt(xi0^2-xi^2)/a;
      En := (a, ξ, ξ₀) → - √(ξ₀² - ξ²)
(27)
```

### Четные и нечетные уровни энергии

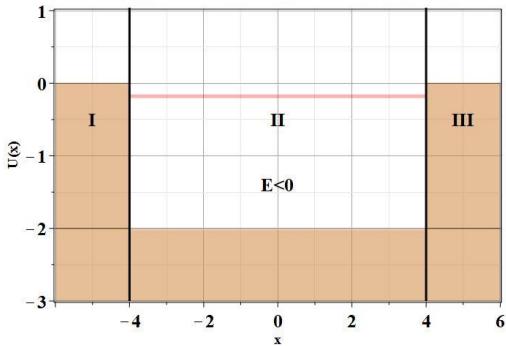
```
> LEnP:=(j)->seq(En(a,X[k,j],Pi*(j-1)+Pi/3),k=1..j);
LEnN:=(j)->seq(En(a,X1[k,j],Pi*(j-1)+Pi/3),k=1..j-1);
LEnP := j → seq(En(a, Xk,j, π (j - 1) + 1/3 π), k = 1 .. j)
LEnN := j → seq(En(a, X1k,j, π (j - 1) + 1/3 π), k = 1 .. j - 1)
(28)
```

```

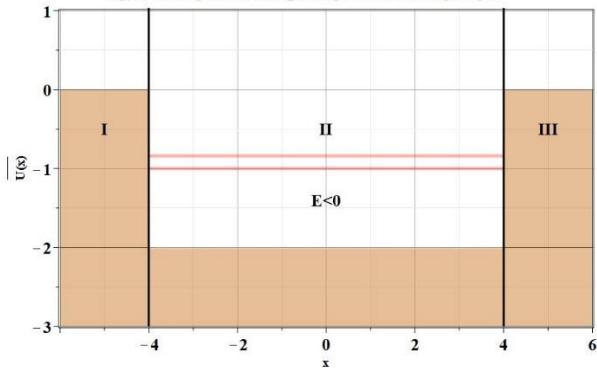
> LEnP(2);
LEnN(2);
> picU42J:=(j)->plot([U4(x,a,a,0,U0,0),LEnP(j),LEnN(j)],x=-4..4,frm,color=[white,red],
thickness=5,transparency=0.7,labels=["x","U(x")"],
title=sprintf("Уровни энергии для параметра ямы с номером j=%d",j));
> P42J1:=display(picU42J(1),R1,R2,R3,txtZ,V1G,V2G,view=[XV1..XV2,XVB+U0..1]);
P42J2:=display(picU42J(2),R1,R2,R3,txtZ,V1G,V2G,view=[XV1..XV2,XVB+U0..1]);
P42J3:=display(picU42J(3),R1,R2,R3,txtZ,V1G,V2G,view=[XV1..XV2,XVB+U0..1]);

```

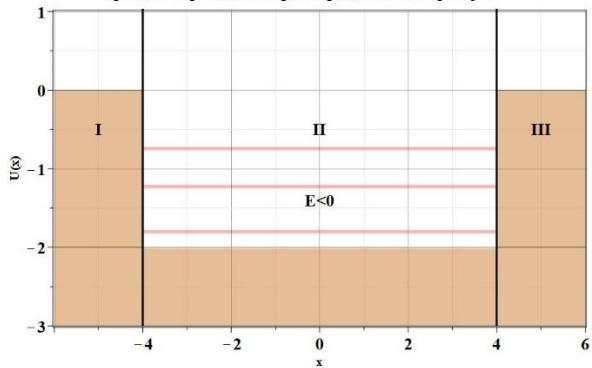
Уровни энергии для параметра ямы с номером j=1



Уровни энергии для параметра ямы с номером j=2



Уровни энергии для параметра ямы с номером j=3



### Анализ задачи 2.7

1. Состояния частицы в рассматриваемой яме распадаются на четные и нечетные состояния.

Это является следствием симметричности потенциала ямы.

2. Число энергетических уровней в яме конечно и число уровней определяется параметром ямы

$$\xi_0 = a \sqrt{-\frac{2mU_0}{\hbar}}$$

3. Для параметра ямы, лежащем в диапазоне  $0 < \xi_0 < \frac{\pi}{2}$  существует только один четный уровень!

4. Число  $n_+$  четных уровней определяется условием:  $\pi(n_+ - 1) < \xi_0 < \frac{\pi}{2} + \pi(n_+ - 1)$

Число  $n_-$  четных уровней определяется условием:  $\pi(n_- - 1) + \frac{\pi}{2} < \xi_0 < \pi(n_- - 1)$

В сумме число четных и нечетных уровней (состояний) равно  $n = n_+ + n_-$

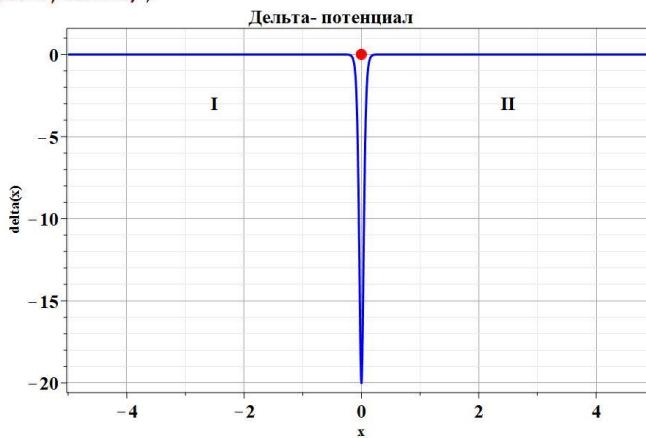
5. Самостоятельно вычислите нормировку либо с помощью прямого вычисления интегралов по трем зонам, либо с помощью интегрирования в Maple.

### Задача 2.9 ГКК

2.11. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции состояний дискретного спектра частицы в поле  $U(x) = -\alpha\delta(x)$ ,  $\alpha > 0$  (рис. 2). Найти средние значения кинетической и потенциальной энергии в этих состояниях. Сравнить с результатом задачи 2.8.

Строим примерный график  $\delta$ -потенциала

```
> picDelta:=plot(UD(x,20),x=-5..5,frm,color=[blue,red],thickness=3,title="Дельта-потенциал",labels=[["x","delta(x)"],view=[-5..5,-20.5..1.5]]:  
txtD1:=textplot([[-2.5,-3,"I"],[2.5,-3,"II"]],frm):  
PD1:=point([x1,0],color=black,symbol=solidcircle,symbolsize=15):  
PD2:=point([x2,0],color=black,symbol=solidcircle,symbolsize=15):  
PD0:=point([0,0],color=red,symbol=solidcircle,symbolsize=15):  
display(picDelta,PD0,txtD1);
```



Уровни энергии должны быть отрицательными, поскольку вне потенциальной ямы потенциальная энергия равна нулю! Все пространство разбито на две зоны, в которых потенциал постоянен. В точке  $x=0$  должны выполняться условия спшивки для  $\delta$ -потенциала. Это условие непрерывности в точке  $x=0$ :

$$\psi(0+0; E) = \psi(0-0; E),$$

и условие для производных:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(x_0 + 0; E) - \psi'(x_0 - 0; E)) - \alpha\psi(x_0; E) = 0$$

Напомним, что последнее условие отличается от условия для производных в случае конечных скачков энергии на границе зон. На бесконечности для состояний в яме должны выполняться условия убывания вероятностей на бесконечности:

$$\psi(x; E) \rightarrow 0, \text{ при } x \rightarrow \pm \infty.$$

Вводим одинаковое волновое число для обеих зон:

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \text{ и } k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

В результате уравнения будут такими:

$$\begin{array}{ll} \text{I} & \text{II} \\ \Psi_I'' - k^2 \Psi_I = 0 & \Psi_{II}'' - k^2 \Psi_{II} = 0 \end{array}$$

Соответствующие решения будут иметь такой вид :

$$\Psi_I(x) = Ae^{kx} + A_1 e^{-kx} \quad \Psi_{II}(x) = De^{-kx} + D_1 e^{kx}$$

Границные условия теперь можно записать в таком виде :

$$\Psi_I(x) \rightarrow 0, \text{ при } x \rightarrow -\infty; \quad \Psi_{II}(x) \rightarrow 0, \text{ при } x \rightarrow \infty$$

$$\Psi_I(0) = \Psi_{II}(0), \quad \Psi_I'(0) = \Psi_{II}'(0),$$

Всего имеем шесть граничных условий для решений трех дифференциальных условий второго порядка.

Применяя граничные условия к решениям, получаем следующие алгебраические условия :

$$A_1 = 0, \quad D_1 = 0.$$

$$A = D;$$

$$k(A + D) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} A$$

Решая эту систему, находим, что имеется только одно решение для  $k$  :

$$k_0 = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

Соответствующая волновая функция будет иметь такой вид :

$$\psi(x; E_0) = Ae^{-k_0|x|}.$$

Вычислим нормировку волновой функции :

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\psi(x; E))^* \psi(x; E) dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2k_0|x|} dx = 1$$

Вычисляем интеграл :

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-k_0|x|} dx = 2 \int_0^{\infty} e^{-k_0 x} dx = \frac{2}{2k_0} = \frac{1}{k_0}$$

Отсюда условие нормировки будет иметь такой вид :

$$A = \sqrt{k_0}$$

Окончательно, волновая функция имеет такой вид :

$$\psi(x; E_0) = \sqrt{k_0} e^{-k_0|x|}.$$

Энергия этого состояния равна :

$$E_0 = \frac{(\hbar)^2}{2m} k_0^2 = \frac{(\hbar)^2}{2m} \left( \frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

Модель  $\delta$  – потенциала используется в задачах о так называемых квантовых точках.

Вычисляем волновую функцию

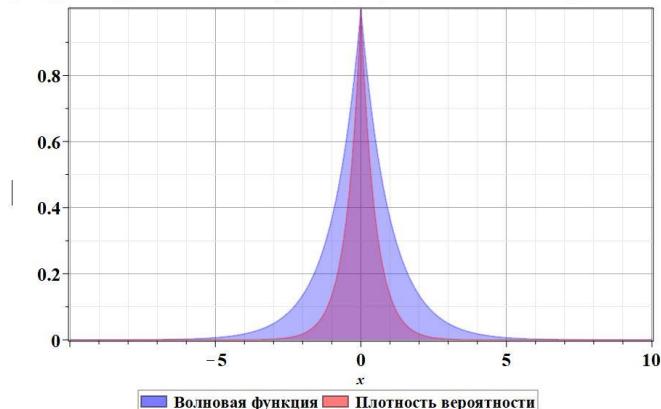
$$> \text{psiD0}:=(x, k) \rightarrow \exp(-k \cdot \text{abs}(x)) * \text{sqrt}(k); \\ \text{psiD0} := (x, k) \rightarrow e^{-k|x|} \sqrt{k} \quad (29)$$

Проверяем нормировку

$$> \text{int}(\text{psiD0}(x, k)^2, x=-\infty..infinity); \quad 1 \quad (30)$$

Строим график функции

$$> \text{plot}([\text{psiD0}(x, 1), \text{psiD0}(x, 1)^2], x=-10..10, \text{frm}=[\text{blue}, \text{red}], \text{thickness}=2, \text{filled=true}, \text{transparency}=0.7, \text{legend}=[\text{"Волновая функция"}, \text{"Плотность вероятности"}]);$$



### Анализ задачи 2.9

1. Потенциальная  $\delta$ -образная яма является бесконечно высокой и бесконечно узкой. В ней содержится только один энергетический уровень.
2. Изменение условия спивки связано с тем, что  $\delta$ -потенциал по сути является двумя слившимися воедино бесконечными скачками энергии.

## ЗАДАЧИ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

### Задача 2.17 ГКК

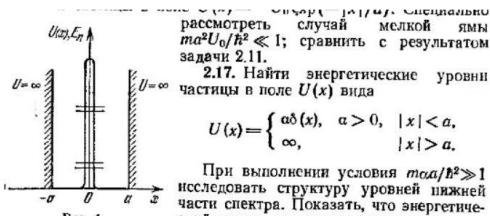


Рис. 4.

2.17. Найти энергетические уровни частицы в поле  $U(x)$  вида

$$U(x) = \begin{cases} a\delta(x), & |x| < a, \\ \infty, & |x| > a. \end{cases}$$

При выполнении условия  $m\omega a^2/\hbar^2 \gg 1$  исследовать структуру уровней нижней части спектра. Показать, что энергетический спектр состоит из последовательности пар близко расположенных уровней, и найти расстояние между этими близко расположенными уровнями (рис. 4).

Каков спектр сильно возбужденных состояний частицы?

Какова картина энергетических уровней при  $a < 0$ ?

### Задача 2.19 ГКК

2.19. Для частицы в поле  $U(x)$  вида (рис. 5)

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ -ab(x-a), & x > 0, \end{cases}$$

найти зависимость числа состояний дискретного спектра от па-  
раметра  $\xi = mca/\hbar^2$ .

### Задача 2.20 ГКК

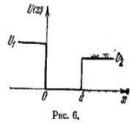


Рис. 6.

2.20. Для частицы в поле  $U(x)$  вида (рис. 6)

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ U_2, & x > a, \end{cases}$$

найти условие существования состояний дискретного спектра.  
Рассмотреть предельные случаи: а)  $U_1 = \infty$ ; б)  $U_1 = U_2$ .

### Задача 2.21 ГКК

2.21. Показать, что среднее значение силы, действующей на  
частицу в стационарном состоянии дискретного спектра, равно  
нулю.