

**Глава. Стационарные состояния квантовой частицы в одномерном потенциальном поле.**

Волна де Бройля для свободной частицы введена нами выше

$$\Psi(r,t) = A \exp\left(-i \frac{W}{\hbar} t + i \frac{\mathbf{Pr}}{\hbar}\right) \quad (1)$$

причем выражение (1) является комплексной функцией координат и времени.

Каждое состояние произвольной квантовой системы в данный момент времени также описывается волновой функцией  $\Psi(r,t)$  (может быть комплексной). Волновая функция полностью описывает состояние квантовой системы. В фиксированный момент времени  $|\Psi(r)|^2 d\tau$ , где  $d\tau$  – элемент объема, представляет собой вероятность обнаружения частицы (при измерениях) в окрестности в элементе объема  $d\tau$  в окрестности точки  $r$ . Функция  $\Psi(r,t)$  называется волновой функцией системы, а также амплитудой плотности вероятности, а  $\rho(r,t) = |\Psi(r,t)|^2$  – **плотностью вероятности** обнаружения частицы в момент времени  $t$  в точке  $\mathbf{r}$ . С течением времени волновая функция может изменяться.

При этом **плотность потока вероятности** задается выражением

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (7)$$

Для волны де-Бройля плотность потока вероятности равна скорости движения частицы умноженной на плотность вероятности обнаружения частицы:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \frac{\hbar}{2im} 2i\mathbf{k} |A|^2 = \mathbf{v} |A|^2.$$

Для свободной частицы, волновая функция которой представляет собой волновой пакет, плотность потока вероятности есть скорость распространения максимума волнового пакета, равная скорости перемещения частицы, умноженная на плотность вероятности обнаружения частицы.

Сохранение полной вероятности описывается уравнением сохранения потока (аналог уравнения неразрывности в гидромеханике – закона сохранения массы для движущейся жидкости  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = 0$ ):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \text{div} \mathbf{j} = 0, \quad (8)$$

В классической физике все физические величины могут принимать непрерывный ряд значений. В квантовой физике значения, которые может принимать физическая величина, могут, как изменяться непрерывно, так и пробегать дискретный набор значений. Примером величины, обладающей непрерывным спектром значений, является координата.

В квантовой механике каждой физической величине  $a$ , ставится в соответствие определенный **линейный оператор**  $\hat{a}$  (определенная математическая операция). **Собственные значения**  $a_n$  данной физической величины являются решениями уравнения

$$\hat{a}\Psi(r,t) = a\Psi(r,t).$$

Если функцией  $\Psi(r,t)$  является собственная функция  $\Psi_n(r,t)$ , то действие на собственную функцию  $\Psi_n(r,t)$  оператора  $\hat{a}$  сводится к простому умножению собственного значения  $a_n$  на собственную функцию  $\Psi_n(r,t)$ :

$$\hat{a}\Psi_n(r,t) = a_n\Psi_n(r,t).$$

Физическая величина  $a$  может принимать только значения  $a_n$ .

Оператор полной механической энергии одной частицы, находящейся в поле с потенциальной энергией  $U(x,y,z)$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U \quad (5)$$

называется **оператором Гамильтона**.

Первое слагаемое в (5) – **оператор кинетической энергии**, а  $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$  – **оператор импульса  $\mathbf{P}$**  (в компонентах:  $\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ ,  $\hat{P}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$ ,  $\hat{P}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$ ).

Действие оператора кинетической энергии на волну де Бройля  $\Psi(r, t) = C \exp(i\omega t - ikr)$  сводится к умножению кинетической энергии на волновую функцию де Бройля:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial r^2} [C \exp(i\omega t - ikr)] = \frac{p^2}{2m} \Psi(r, t).$$

Если полученную функцию умножить на  $\Psi^*(r, t)$  и проинтегрировать по всему пространству (sp), то получится кинетическая энергия частицы:

$$\int_{sp} \Psi^*(r, t) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) \right] d\tau = \frac{p^2}{2m} \int_{sp} \Psi(r, t) \Psi^*(r, t) d\tau = \frac{p^2}{2m}.$$

Здесь учтено условие нормировки  $\int_{sp} \Psi(r, t) \Psi^*(r, t) d\tau = 1$ .

Второе слагаемое в (5) – **оператор потенциальной энергии**. Его действие на волновую функцию есть просто умножение потенциальной энергии на волновую функцию:  $U(r)\Psi(r, t)$ . Умножая функцию  $U(r)\Psi(r, t)$  на  $\Psi^*(r, t)$  и интегрируя по всему пространству (sp), получаем потенциальную энергию частицы. Для свободной частицы:

$$\int_{sp} \Psi^*(r, t) U(r) \Psi(r, t) d\tau = U_0 = const.$$

Таким образом, для волны де Бройля в результате интегрирования уравнения  $\hat{H}\Psi(r, t)$  (5), умноженного на  $\Psi^*(r, t)$ , получается значение полной энергии частицы:

$$\frac{p^2}{2m} + U_0 = W.$$

В этой главе будем рассматривать систему (чаще всего одну частицу) в постоянном внешнем поле. В этом случае важнейшими состояниями системы являются **стационарные состояния**, в которых энергия имеет определенное значение. В волновой функции, описывающей стационарное состояние, можно выделить временную зависимость

$$\Psi(r, t) = \exp\left(-i \frac{Wt}{\hbar}\right) \cdot \psi(r),$$

где  $\psi(r)$  – волновая функция стационарного состояния без временной зависимости (обозначается малой буквой  $\psi(r)$ ).

Волновые функции стационарных состояний  $\psi_n(r)$ , являются собственными функциями оператора Гамильтона:

$$\hat{H}\psi_n(r) = W_n \psi_n(r),$$

где  $W_n$  – собственные значения энергии в состояниях  $\psi_n(r)$ .

Стационарное состояние с наименьшим возможным значением энергии  $W_0$  называется **основным** (нормальным) **состоянием** системы.

Спектр собственных значений энергии может быть как непрерывным, так и дискретным. Дискретный спектр имеет система, если ее движение в пространстве ограничено, то есть является **финитным**. Состояние системы при этом называется **связанным** или **локализованным**.

Непрерывным спектром обладает частица, если ее движение не ограничено, и она может уходить на бесконечность. Таким образом, непрерывному спектру соответствует инфинитное движение.

Для определения вида стационарных волновых функций  $\psi(\mathbf{r})$  и энергетического спектра частицы в потенциальном поле  $U(r)$  **Шредингером** было предложено **стационарное** линейное дифференциальное **уравнение** в частных производных

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+U(r)\psi(r)=W\psi(r). \quad (2).$$

Для свободной частицы уравнение Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+W\psi(r)=0$$

имеет решение в виде плоской волны с определенными значениями энергии и импульса  $\psi(\mathbf{r}) = \text{const} \cdot \exp[i(\mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar]$  (волна де Бройля), распространяющейся вдоль направления  $\mathbf{p}$ . Энергетический спектр свободно движущейся частицы непрерывный.

Условия, которым должны удовлетворять решения ( $\psi$ ) уравнения Шредингера (2):

1. волновая функция  $\psi(\mathbf{r})$  должна быть однозначной и непрерывной во всей области пространства (даже если  $U(x,y,z)$  имеет поверхности разрыва);

2. должны быть непрерывны производные волновой функции  $\frac{\partial}{\partial x}\psi$ ,  $\frac{\partial}{\partial y}\psi$  и  $\frac{\partial}{\partial z}\psi$  (кроме поверхностей, где потенциальная энергия  $U \rightarrow \infty$ ). Так как частица не может проникнуть в область, где  $U \rightarrow \infty$ , то во всей этой области (и на ее границе)  $\psi = 0$ .

Рассмотрим несколько задач, в которых потенциальная энергия является функцией одной координаты  $U(x)$ .

**Задача 1** (Свободное движение частицы). Найти волновую функцию свободно движущейся вдоль оси  $Ox$  частицы, обладающей импульсом  $P$ .

**Решение.** Свободное движение частицы соответствует ситуации с  $U(\mathbf{r}) = 0$ .

Тогда уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + W\psi(x) = 0, \quad (11)$$

Решением этого уравнения, когда вторая производная функции пропорциональна самой функции с противоположным знаком, является гармоническая функция. В данном случае это плоская волна де Бройля. Для волны, бегущей в **положительном направлении оси  $Ox$** , здесь и в дальнейшем будем выбирать **знак «плюс»** в показателе экспоненты:

$$\psi = A \exp(iPx/\hbar) \quad (12)$$

Можно записать также полную волновую функцию с временным множителем

$$\Psi(x,t) = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{P^2}{2m}t - Px\right)\right],$$

где учтено, что  $W = \frac{P^2}{2m} > 0$

**Ответ.**  $\Psi(x,t) = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{P^2}{2m}t - Px\right)\right]$

**Задача 2** (Непрерывный спектр. Ступенька). Потенциальная энергия частицы имеет вид «ступеньки» (см. рис.1), имеющей в точке с координатой  $x=0$

высоту  $U_0$ . Найти волновую функцию частицы, считая заданным импульс  $P_1$  частицы, падающей на ступеньку слева и амплитуду  $A_1$  соответствующей волны де Бройля.

**Решение.** При  $x \rightarrow -\infty$  функция  $\psi(x)$  представляет собой бегущую в положительном направлении оси ОХ волну (волну де Бройля).

Рассмотрим теперь отдельно случаи I  $W > U_0$  и II  $W < U_0$ .

**I. Энергия частицы  $W$  больше высоты «ступеньки»  $W > U_0$**

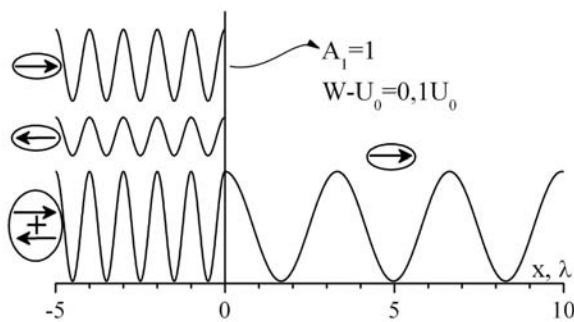
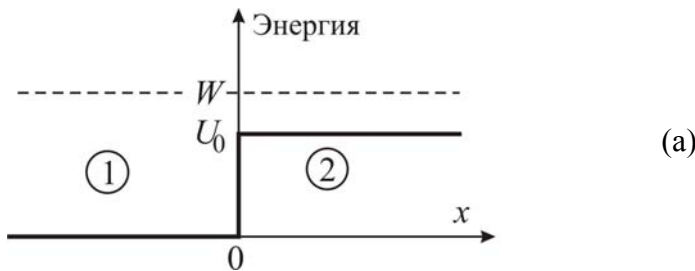


Рис. 1. (а) «Ступенька» потенциальной энергии частицы при  $W > U_0$ ; (б) реальные части волновых функций (13) и (14) в зависимости от координаты  $x$  в единицах длины волны, падающей на барьер

В области 1 уравнению Шредингера (11)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + W\psi(x) = 0$$

удовлетворяют как волна бегущая в положительном направлении, так и в отрицательном направлении оси ОХ. Поэтому в этой области решение запишем в общем виде, как сумму падающей волны с амплитудой  $A_1$  и отраженной волны с амплитудой  $A_3$ :

$$\psi_1 = A_1 e^{i \frac{P_1 x}{\hbar}} + A_3 e^{-i \frac{P_1 x}{\hbar}}, \quad P_1 = \sqrt{2mW}. \quad (13)$$

**Обратим внимание** на то, что амплитуда  $A_3$ , в общем случае, – комплексная величина.

В области 2 уравнение Шредингера  $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + |W - U_0| \psi(x) = 0$  может иметь вид только прошедшей волны с амплитудой  $A_2$

$$\psi_2 = A_2 e^{i \frac{P_2 x}{\hbar}} \quad (14)$$

Импульс частицы в области 2 находится из закона сохранения механической энергии частицы  $W = W_1 + U_0$  :

$$P_2 = \sqrt{2mW_1} = \sqrt{2m(W - U_0)}.$$

На границе областей используем условия непрерывности амплитуды вероятности  $\psi(x)$  (и, следовательно, непрерывности плотности вероятности  $\rho$ ) и ее производной  $\partial\psi / \partial x$  :

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(0) = \frac{\partial}{\partial x} \psi_2(0) \end{cases} \quad (15)$$

Эти условия для краткости можно называть «стыковкой функций  $\psi_1$  и  $\psi_2$ ».

Используя (13) и (14) получаем систему

$$\begin{cases} A_1 + A_3 = A_2 \\ iP_1 A_1 - iP_1 A_3 = iP_2 A_2 \end{cases} \quad (16)$$

решая которую, находим

$$A_2 = \frac{2A_1}{1 + P_2 / P_1}, \quad A_3 = A_1 \frac{P_1 - P_2}{P_1 + P_2}. \quad (17)$$

Зная амплитуды, запишем волновую функцию в области 1

$$\psi_1(x) = A_1 e^{i \frac{P_1 x}{\hbar}} + A_1 \frac{P_1 - P_2}{P_1 + P_2} e^{-i \frac{P_1 x}{\hbar}}$$

и в области 2

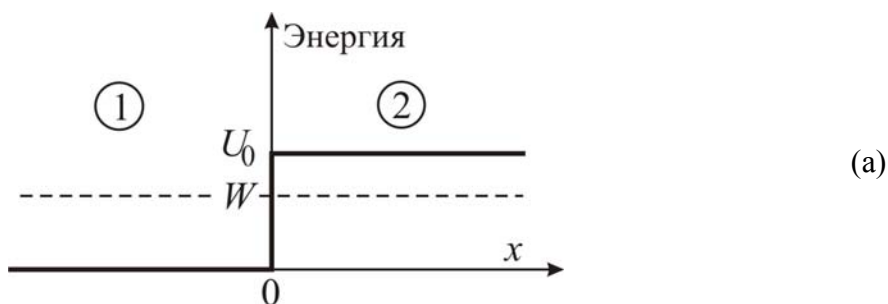
$$\psi_2 = \frac{2A_1}{1 + P_2 / P_1} e^{i \frac{P_2 x}{\hbar}}, \quad \text{где } P_2 = \sqrt{2m(W - U_0)}.$$

Таким образом, падающая волна расщепляется на прошедшую и отраженную волны. Появление в области 1 отраженной волны называется **надбарьерным отражением** и представляет собой чисто квантовое явление.

Приведем один **пример надбарьерного отражения**. Свободный электрон, находящийся в зоне проводимости в неупорядоченном легированном донорами полупроводнике, движется над потенциальными ямами, создаваемыми ионами донорной примеси. От каждой потенциальной ямы образуется отраженная волна. Если отраженные от разных ям волны будут интерферировать, то отраженная волна может стать по интенсивности сравнима с падающей. Это означает, что возникает столь значительное отражение, что электрон локализуется в некоторой области вещества и уже не сможет принимать участие, например, в электропроводности. Донор – это атом вещества на единицу большей валентности, чем атом исходного полупроводника (матрицы), в котором он занимает место атома матрицы.

**Вопрос для самопроверки:** почему длина волны частицы в области 2 меньше, чем в области 1? **Ответ:**

**II. Энергия частицы  $W$  меньше высоты «ступеньки»  $W < U_0$ .**





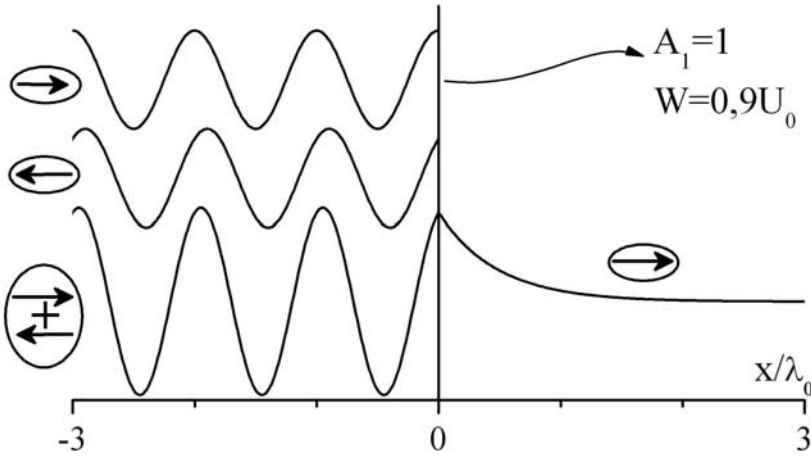


Рис.2. (а) «Ступенька» потенциальной энергии частицы при  $W < U_0$ ; (б) реальные части волновых функций (18) и (19) в зависимости от координаты  $x$  в единицах длины волны, падающей на барьер

Аналогично предыдущему случаю в области 1 решению уравнения Шредингера

$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + W\psi(x) = 0$  соответствует суперпозиция падающей волны с амплитудой  $A_1$  и отраженной волны с амплитудой  $A_3$ :

$$\psi_1 = A_1 e^{i \frac{P_1 x}{\hbar}} + A_3 e^{-i \frac{P_1 x}{\hbar}}, \quad P_1 = \sqrt{2mW}. \quad (18)$$

Уравнение Шредингера  $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) - |W - U_0| \psi(x) = 0$  в области 2, когда вторая производная волновой функции равна самой функции, описывается только экспоненциально убывающей волновой функцией

$$\psi_2 = A_2 e^{-\gamma x}, \quad (19)$$

где  $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)}$ . Решение  $\psi_2 = A_2 e^{+\gamma x}$  не рассматривается, так волновая функция должна быть конечной и при  $x \rightarrow \infty$ .

На границе областей используем условия непрерывности

$$\psi_1 = \psi_2 \text{ и } \frac{\partial}{\partial x} \psi_1 = \frac{\partial}{\partial x} \psi_2, \quad (20)$$

аналогичные (15), которые обеспечивают непрерывность  $\rho$  и  $d\psi/dx$ . Условия (20) записываются в виде системы

$$\begin{cases} A_1 + A_3 = A_2 \\ -A_1 + A_3 = i \frac{\gamma \hbar}{P_1} A_2 \end{cases}, \quad (21)$$

решение которой

$$A_2 = \frac{2A_1}{1 + i\gamma\hbar/P_1}, \quad A_3 = A_1 \frac{P_1 - i\gamma\hbar}{P_1 + i\gamma\hbar}. \quad (22)$$

Преобразуем выражения (22), выделяя фазу:

$$A_2 = \frac{2A_1}{1 + i\gamma\hbar/P_1} = \frac{2A_1}{\sqrt{1 + (\gamma\hbar/P_1)^2}} \exp[i \operatorname{arctg}(-\gamma\hbar/P_1)] = \frac{2A_1}{\sqrt{1 + (\gamma\hbar/P_1)^2}} e^{-i\varphi_1},$$

$$A_3 = A_1 \frac{P_1 - i\gamma\hbar}{P_1 + i\gamma\hbar} = A_1 \exp\left[ i \operatorname{arctg} \frac{-2P_1\gamma\hbar}{P_1^2 - (\gamma\hbar)^2} \right] = A_1 e^{-i\varphi_2},$$

$$\text{где } \operatorname{tg}\varphi_1 = \gamma\hbar/P_1, \quad \operatorname{tg}\varphi_2 = \frac{2P_1\gamma\hbar}{P_1^2 - (\gamma\hbar)^2}.$$

–Обратим внимание, *во-первых*, на то, что  $|A_3| = |A_1|$  и энергия падающей и отраженной волн совпадают. Имеется также **сдвиг фазы**  $\varphi_2$  между падающей и отраженной волнами.

*Во-вторых*, происходит проникновение частицы в область 2, хотя и на небольшую глубину  $\sim \gamma^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - W)}}$ . В этом принципиальное отличие поведения классической частицы, которая не может оказаться в области, где  $U > W$ , так как в этой области ее кинетическая энергия должна стать по закону сохранения энергии отрицательной:  $W_1 = W - U_0 < 0$ . В квантовой механике, благодаря соотношению неопределенностей, при локализации частицы в некоторой точке она перестает характеризоваться определенной кинетической энергией.

Глубина проникновения  $\gamma^{-1}$  тем больше, чем ближе значение  $W$  к  $U_0$ . На больших  $x$  прошедшая волна отсутствует. Таким образом, происходит полное отражение от ступеньки.

Итак, волновая функция в области 1 имеет вид:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{iP_1x/\hbar} + A_1 e^{-i(P_1x/\hbar + \varphi_2)},$$

а в области 2:

$$\psi_2(x) = \frac{2A_1}{\sqrt{1 + (\gamma\hbar/P_1)^2}} e^{-\gamma x - i\varphi_1},$$

где  $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0 - P_1^2}$ ,  $\text{tg}\varphi_1 = \gamma\hbar/P_1$ ,  $\text{tg}\varphi_2 = \frac{2P_1\gamma\hbar}{P_1^2 - (\gamma\hbar)^2}$ .

**Ответ.** В I случае: при  $x < 0$   $\psi_1(x) = A_1 e^{i\frac{P_1x}{\hbar}} + A_1 \frac{P_1 - P_2}{P_1 + P_2} e^{-i\frac{P_1x}{\hbar}}$ , при  $x > 0$

$\psi_2(x) = \frac{2A_1}{1 + P_2/P_1} e^{i\frac{P_2x}{\hbar}}$ , где  $P_2 = \sqrt{P_1^2 - 2mU_0}$ . Во II случае при  $x < 0$

$\psi_1(x) = A_1 e^{iP_1x/\hbar} + A_1 e^{-i(P_1x/\hbar + \varphi_2)}$ , при  $x > 0$   $\psi_2(x) = \frac{2A_1}{\sqrt{1 + (\gamma\hbar/P_1)^2}} e^{-\gamma x - i\varphi_1}$ , где

$\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0 - P_1^2}$ ,  $\text{tg}\varphi_1 = \gamma\hbar/P_1$ ,  $\text{tg}\varphi_2 = \frac{2P_1\gamma\hbar}{P_1^2 - (\gamma\hbar)^2}$

**Задача 3** (Непрерывный спектр. Барьер). Потенциальная энергия частицы изменяется вдоль оси ОХ и имеет вид потенциального барьера, высота которого  $U_0$ , а ширина  $L$  (рис.). Найти волновую функцию частицы, обладающей импульсом  $P_1$  и амплитудой  $A_1$  волны де Бройля слева от барьера (в области 1).

**Решение.** В данной задаче также возможны два случая: I.  $W > U_0$  и II.  $W < U_0$

I.  $W > U_0$

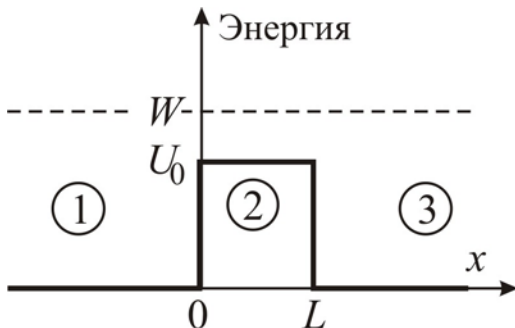


Рис. 3. Потенциальный барьер  $W > U_0$

В области 1 ( $x < 0$ ) уравнение Шредингера и его решение аналогично задаче 2.1 и представляет собой суперпозицию падающей волны с амплитудой  $A_1$  и отраженных волн с амплитудой  $A_2$

$$\psi_1 = A_1 e^{i\frac{P_1 x}{\hbar}} + A_2 e^{-i\frac{P_1 x}{\hbar}}, \quad P_1 = \sqrt{2mW}. \quad (23)$$

В области 2 ( $0 < x < L$ ) уравнение Шредингера  $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + |W - U_0| \psi(x) = 0$  имеет такой же вид как в задаче 2.1, но в решении следует учесть отраженные от скачка потенциала в точке  $x = L$  волны  $A_4 e^{-i\frac{P_2 x}{\hbar}}$  с амплитудой  $A_4$  (еще одно надбарьерное отражение):

$$\psi_2(x) = A_3 e^{i\frac{P_2 x}{\hbar}} + A_4 e^{-i\frac{P_2 x}{\hbar}}, \quad P_2 = \sqrt{2m(W - U_0)}, \quad (24)$$

Наконец в области 3 ( $x > L$ ), как и в случае задачи 2.1 имеется только прошедшая волна вида

$$\psi_3 = A_5 e^{i\frac{P_1}{\hbar}(x-L)} \quad (25)$$

**Обратим внимание** на то, что амплитуды  $A_2$ ,  $A_3$  и  $A_4$  – комплексные величины, каждая из которых учитывает суперпозицию волн, многократно отраженных и/или прошедших границы  $x = 0$  и  $x = L$ . Например, в  $A_2$  входит первично отраженная волна от границы  $x = 0$  плюс та часть прошедшей границу  $x = 0$ , которая отразилась от границы  $x = L$ , а затем прошла через границу  $x = 0$  и т.д.

Таким образом, решается самосогласованная задача: суперпозиция всех волн в каждой из областей должны удовлетворять граничным условиям непрерывности волн и их производных.

Условия непрерывности волновой функции и ее производной в точке  $x = 0$  (аналогичные (21))

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 &= A_3 + A_4; \\ A_1 - A_2 &= \frac{P_2}{P_1}(A_3 - A_4); \end{aligned} \quad (26)$$

Из непрерывности  $\psi$  и  $\frac{\partial}{\partial x}\psi$  при  $x = L$  находим

$$A_3 e^{i\frac{P_2 L}{\hbar}} + A_4 e^{-i\frac{P_2 L}{\hbar}} = A_5. \quad (27)$$

$$A_3 e^{i\frac{P_2 L}{\hbar}} - A_4 e^{-i\frac{P_2 L}{\hbar}} = \frac{P_1}{P_2} A_5. \quad (28)$$

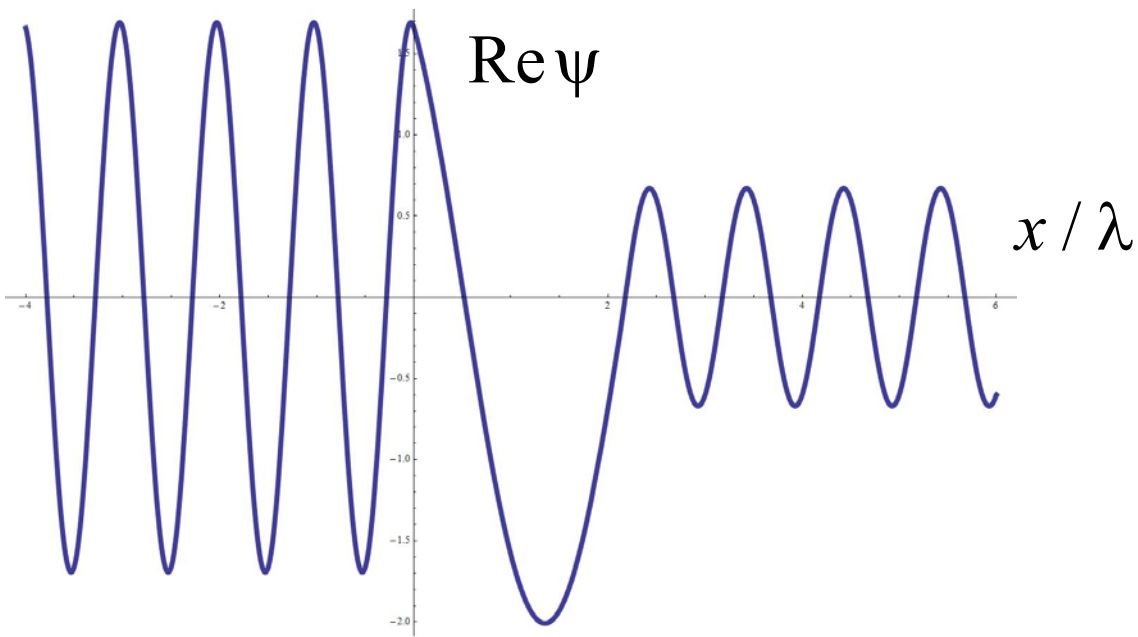
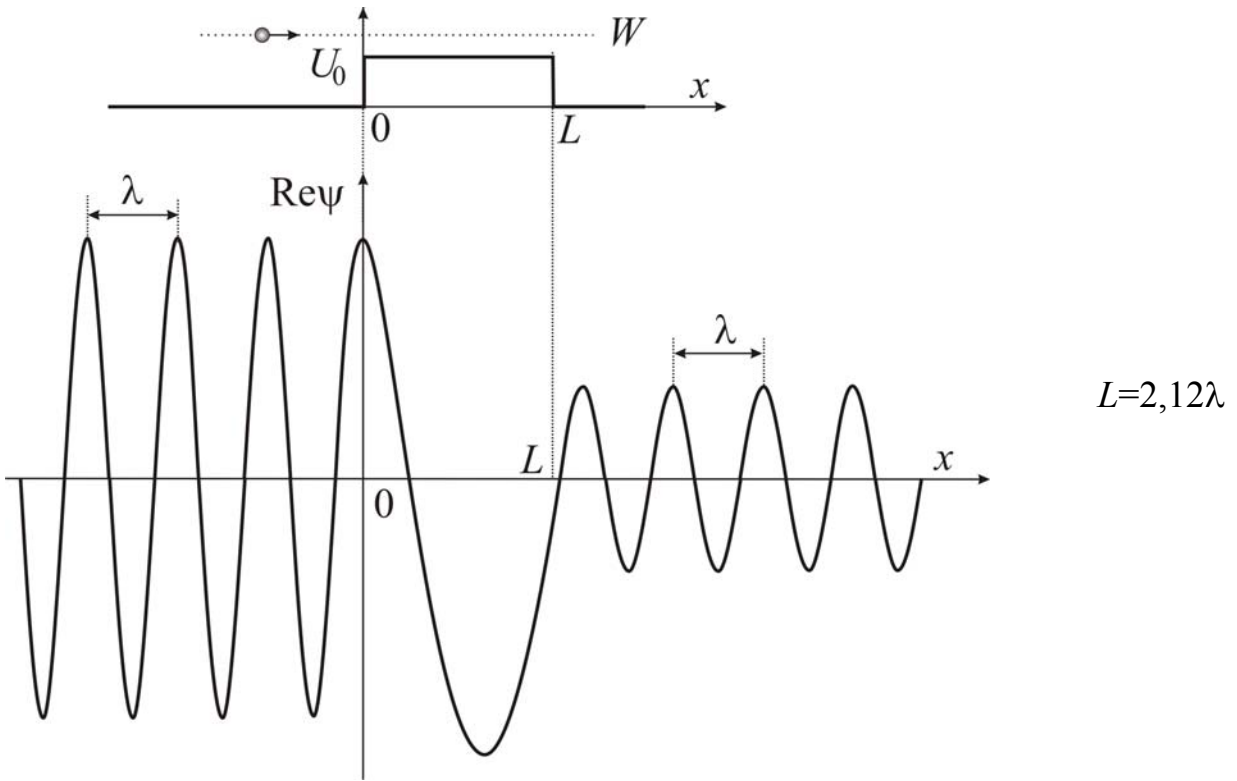
Решая линейную систему уравнений (26)-(28) относительно амплитуд  $A_2, A_3, A_4, A_5$  получаем:

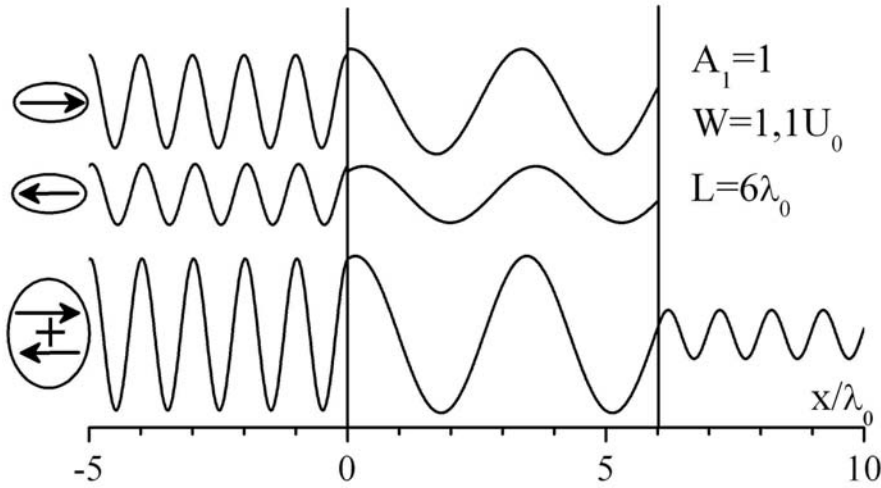
$$A_2 = \frac{A_1 (1 - \exp(2iP_2 L / \hbar))(P_1^2 - P_2^2)}{(P_1 + P_2)^2 - \exp(2iP_2 L / \hbar)(P_1 - P_2)^2}, \quad (28-1)$$

$$A_3 = \frac{A_1 2P_1 (P_1 + P_2)}{(P_1 + P_2)^2 - \exp(2iP_2 L / \hbar)(P_1 - P_2)^2}, \quad (29)$$

$$A_4 = \frac{A_1 2P_1 (P_2 - P_1) \exp(2iP_2 L / \hbar)}{(P_1 + P_2)^2 - \exp(2iP_2 L / \hbar)(P_1 - P_2)^2}, \quad (30)$$

$$A_5 = \frac{4A_1 P_1 P_2 \exp(iP_2 L / \hbar)}{(P_1 + P_2)^2 - \exp(2iP_2 L / \hbar)(P_1 - P_2)^2}; \quad (31)$$





**Рис.3-1.**  $\text{Re}\psi(x)$

Нетрудно, несмотря на громоздкость выражений, дать качественный анализ решения. В данном случае имеет место многократное надбарьерное отражение падающей волны де Бройля.

В качестве количественного компьютерного расчета рассмотрим случай, когда  $A_1 = 1$ ,  $P_1 / \hbar = 1$ ,  $W = 1,1U_0$ , тогда  $P_2 / \hbar = 0,301$  будем также считать, что  $P_2 L / \hbar = 4$ . Тогда из (28-1)-(31) получаем:  $A_2 = 0,679 - 0,324i$ ,  $A_3 = 1,372 + 0,376i$ ,  $A_4 = 0,307 - 0,700i$ ,  $A_5 = -0,283 - 0,594i$ . Реальные части волновых функций частицы в трех областях принимают следующий вид (**рис.3-1**):

$$\text{Re}\psi_1(x) = \text{Re} \left[ A_1 e^{i \frac{P_1 x}{\hbar}} + A_2 e^{-i \frac{P_1 x}{\hbar}} \right] = \cos x + 0,679 \cos x - 0,324 \sin x,$$

$$\text{Re}\psi_2(x) = \text{Re} \left[ A_3 e^{i \frac{P_2 x}{\hbar}} + A_4 e^{-i \frac{P_2 x}{\hbar}} \right] = 1,679 \cos 0,301x - 1,076 \sin 0,301x,$$

$$\text{Re}\psi_3(x) = \text{Re} A_5 e^{i \frac{P_1}{\hbar}(x-L)} = -0,283 \cos(x - 13,289) + 0,594 \sin(x - 13,289).$$

**II.**  $W < U_0$

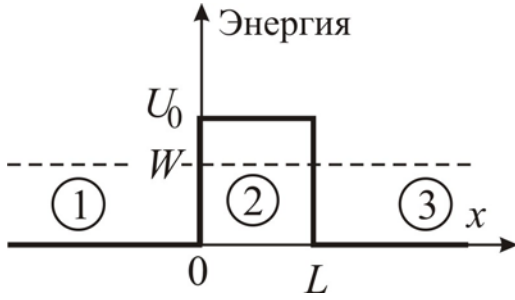


Рис.4. Потенциальный барьер  $W < U_0$

В этом случае принципиально отличается поведение волновой функции в области 2. Уравнение Шредингера в этой области представимо в виде

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) - |W - U_0| \psi(x) = 0 \quad (31-1)$$

В общем случае решение такого уравнения записывается как сумма двух экспонент

$$\psi_2(x) = A_3 e^{\gamma x} + A_4 e^{-\gamma x}, \quad \gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)}. \quad (32)$$

Характер же волновой функции в областях 1 и 3 аналогичен предыдущей задаче.

«Стыковка функций»  $\psi_1$  и  $\psi_2$  при  $x = 0$

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 &= A_3 + A_4; \\ A_1 - A_2 &= \frac{\hbar \gamma}{i P_1} (A_3 - A_4); \end{aligned} \quad (33)$$

А стыковка функций  $\psi_2$  и  $\psi_3$  при  $x = L$

$$A_3 e^{\gamma L} + A_4 e^{-\gamma L} = A_5; \quad (34)$$

$$A_3 e^{\gamma L} - A_4 e^{-\gamma L} = i \frac{P_1}{\gamma \hbar} A_5. \quad (35)$$

Решая линейную неоднородную систему уравнений (33-35) относительно амплитуд  $A_2, A_3, A_4, A_5$ , находим:

$$A_2 = \frac{(\exp(2\gamma L) - 1)(\gamma^2 + P_1^2)}{(-i\gamma + P_1)^2 - (i\gamma + P_1)^2 \exp(2\gamma L)} A_1; \quad (36)$$

$$A_3 = \frac{2P_1(-i\gamma + P_1)}{(-i\gamma + P_1)^2 - (i\gamma + P_1)^2 \exp(2\gamma L)} A_1; \quad (37)$$

$$A_4 = \frac{2P_1(-i\gamma - P_1) \exp(2\gamma L)}{(-i\gamma + P_1)^2 - (i\gamma + P_1)^2 \exp(2\gamma L)} A_1; \quad (37-1)$$



$$A_5 = \frac{-4iP_1\gamma \exp(\gamma L)}{(-i\gamma + P_1)^2 - (i\gamma + P_1)^2 \exp(2\gamma L)} A_1; \quad (38)$$

Заметим, что решения задачи 3 при  $L \rightarrow \infty$  переходят в решения задачи 2.

Рассмотрим в качестве количественного примера случай, когда  $A_1 = 1$ ,  $P_1 / \hbar = 1$ ,  $W = 0,9U_0$ , тогда  $\gamma = 0,333$  будем также считать, что  $L = 5$ . Тогда из (36)-(38) получаем:

$$A_2 = 0,758 - 0,610i$$

$$A_3 = -0,037 + 0,058i$$

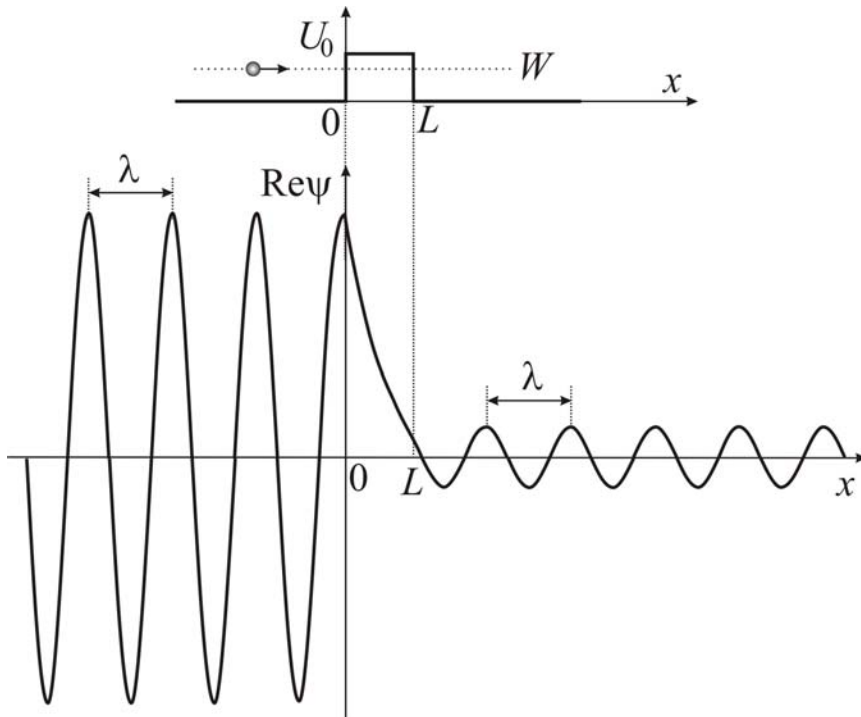
$$A_4 = 1,795 - 0,668i$$

$$A_5 = 0,144 + 0,178i$$

$$\operatorname{Re}\psi_1(x) = \operatorname{Re} \left[ A_1 e^{i\frac{P_1 x}{\hbar}} + A_2 e^{-i\frac{P_1 x}{\hbar}} \right] = 1,758 \cos x - 0,610 \sin x,$$

$$\operatorname{Re}\psi_2(x) = \operatorname{Re} \left[ A_3 e^{\gamma x} + A_4 e^{-\gamma x} \right] = -0,037 e^{0,333x} + 1,795 e^{-0,333x},$$

$$\operatorname{Re}\psi_3(x) = \operatorname{Re} A_5 e^{i\frac{P_1}{\hbar}(x-L)} = 0,144 \cos(x-5) - 0,178 \sin(x-5).$$



$$L = 0,8\lambda_0$$

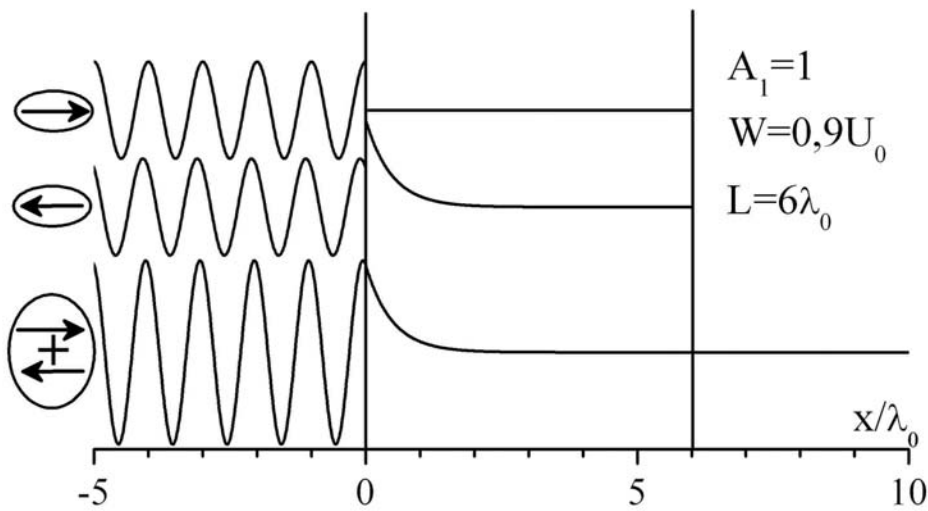
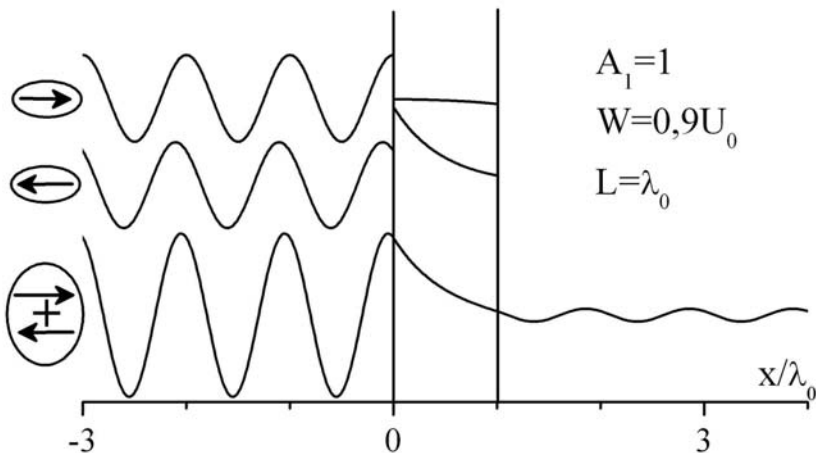
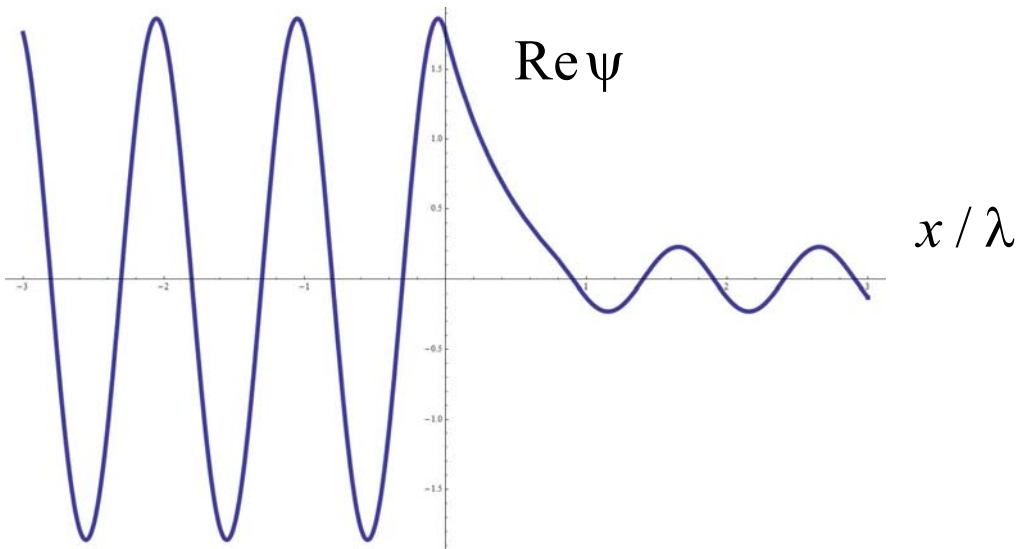


Рис.4-1  $\text{Re}\psi(x)$

**Вопросы для самопроверки (для обоих случаев I и II).**

1. Почему в области 3 длина волны такая же, как в области 1, а амплитуда меньше?

2. Как будет изменяться волновая функция в области 2 при увеличении  $U_0$  ( $U_0 < W$ )?

3. Как будет изменяться  $\text{Re}\psi$  при увеличении  $L$ ?

**Ответы.**

### Дискретный спектр энергий

**Задача 4** (Дискретный спектр. Бесконечно глубокая яма). Часто в квантовой физике используется модель потенциальной энергии частицы в виде прямоугольной ямы конечной глубины. Нахождение собственных значений энергии и волновых функций в этом случае несколько громоздко и вынесено в **приложение 1**. Рассмотрим предельный случай. Потенциальная энергия частицы имеет вид бесконечно глубокой потенциальной ямы, причем потенциальная энергия равна нулю в области  $-a < x < a$  (**рис.**). Найти волновую функцию частицы и возможные значения энергии частицы.

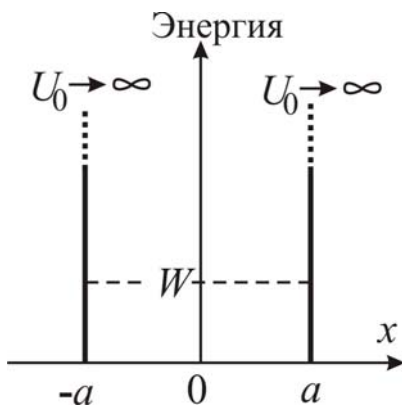


Рис.5. Схема одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямы.

**Решение.** Стационарное уравнение Шредингера  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U(x)\psi(x) = W \cdot \psi(x)$

в области  $-a < x < a$  можно записать в виде

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (40)$$

учитывая, что  $k = \sqrt{2mW / \hbar}$ .

Ограниченное (финитное) движение в данной области характеризуется дискретным энергетическим спектром. Собственные значения энергии и

соответствующие им собственные волновые функции находятся решением уравнения (40).

Уравнение (40) – уравнение гармонических колебаний, и его решение может быть представлено в виде

$$\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx. \quad (41)$$

Мы можем считать, что волна де Бройля на границах (при  $x = \pm a$ ) отражается от барьера как в задаче 2.П, но при дополнительном условии бесконечно большой высоты барьера  $U_0 \rightarrow +\infty$ . Тогда из (19) следует, что  $\gamma \gg P_1$ , а из (21)-(22) – что  $A_1 = A_3$  и  $A_2 \rightarrow 0$ . Таким образом, в предельном случае  $U_0 \rightarrow +\infty$  достаточно просто воспользоваться условием (42), считая  $\psi = 0$  за барьером и не накладывая дополнительного условия на  $\frac{\partial}{\partial x}\psi$  на границах ямы.

Так как частица не может выйти за пределы бесконечной ямы, то условия непрерывности в точках  $x = \pm a$  запишутся в виде

$$\psi(a) = 0. \quad (42)$$

$$\psi(-a) = 0, \quad (42-1)$$

Используя общий вид решения (41), согласно (42) имеем

$$A \cos ka + B \sin ka = 0, \quad (43)$$

а согласно (42-1)

$$A \cos ka - B \sin ka = 0. \quad (44)$$

При решении системы (43) и (42) можно выделить 2 случая:

1.  $A \neq 0, B = 0$  и  $\cos ka = 0$ :

$$k_n a = \frac{\pi}{2}(2n+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (45)$$

то есть на длине ямы  $2a$  укладывается нечетное число  $(2n+1)$  длин полуволн  $\lambda/2$ .

В этом случае волновая функция является **четной**:

$$\psi_{\pm}(x) = A \cos \left[ \frac{\pi(2n+1)}{2a} x \right]. \quad (45-1)$$

Разрешенные значения энергии

$$W_n = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{(\hbar\pi)^2}{8ma^2} (2n+1)^2.$$

2.  $B \neq 0$   $A = 0$  и  $\sin ka = 0$  :

$$k_n a = \frac{\pi}{2} (2n+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (46)$$

то есть на длине ямы  $2a$  укладывается четное число  $2(n+1)$  длин полуволн  $\lambda/2$ . В этом случае волновая функция является **нечетной**:

$$\psi_{i \div}(x) = B \sin \left[ \frac{\pi(n+1)}{a} x \right]. \quad (46-1)$$

Разрешенные значения энергии

$$W_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n+1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (47)$$

Для волновых функций дискретного спектра существует **осцилляционная теорема**, согласно которой функция  $\psi_n(x)$ , соответствующая  $n+1$  собственному значению энергии  $W_n$ , обращается в нуль  $n$  раз. Поэтому волновая функция основного состояния четная, так как она не может иметь узлов (точек обращения в нуль):

$$\psi_0(x) = A \cos \left[ \frac{\pi}{2a} x \right]$$

$$\text{Энергия основного состояния } W_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}.$$

Это минимальное значение энергии совпадает с оценкой, полученной нами ранее из применения соотношения неопределенности Гейзенберга для бесконечно глубокой ямы.

**Ответ.**

### **Приложение 1. Дискретный энергетический спектр частицы в потенциальной яме конечной глубины и ширины**

**Задача 5.** Найти допустимые уровни энергии и волновую функцию частицы в яме конечной глубины  $U_0$ , изображенной на Рис.6, при  $W < 0$ .

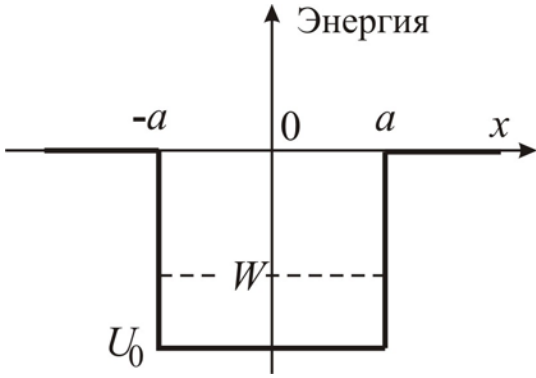


Рис.6. Одномерная потенциальная яма конечной глубины.

**Решение.** Задача о потенциальной яме  $U_0 < 0$  конечной глубины, изображенной на рис.6, имеет пространственно ограниченные решения, соответствующие дискретной части спектра при  $U_0 < W < 0$ . Введем обозначения

$$k = +\sqrt{2m(W - U_0) / \hbar^2}, \quad \gamma = +\sqrt{-2mW / \hbar^2}. \quad (48)$$

Внутри ямы (при  $-a < x < a$ ) стационарное УШ имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (49)$$

и его решение аналогично предыдущей задаче:

$$\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx. \quad (50)$$

–Вне ямы (при  $x < -a$  или при  $x > a$ ) стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \gamma^2\psi = 0, \quad (51)$$

имеет решение при  $x > a$ :

$$\psi = C e^{-\gamma x},$$

и при  $x < a$ :

$$\psi = D e^{\gamma x},$$

Из условия непрерывности в точках  $x = \pm a$  функций  $\psi(x)$  и их производных

$\frac{d\psi(x)}{dx}$  получаем

при  $x = a$

$$A \cos ka + B \sin ka = C e^{-\gamma a} \quad (52)$$

$$-kA \sin ka + kB \cos ka = -\gamma C e^{-\gamma a} \quad (53)$$

при  $x = -a$

$$A \cos ka - B \sin ka = D e^{-\gamma a} \quad (54)$$

$$kA \sin ka + kB \cos ka = \gamma D e^{-\gamma a} \quad (55)$$

Преобразовав попарно уравнения (52), (54) и (53), (55) приходим к следующей системе:

$$2A \cos ka = (C + D) \exp(-\gamma a) \quad (56)$$

$$2kA \sin ka = \gamma(C + D) \exp(-\gamma a) \quad (57)$$

$$2B \sin ka = (C - D) \exp(-\gamma a) \quad (58)$$

$$2kB \cos ka = -\gamma(C - D) \exp(-\gamma a) \quad (59)$$

При решении системы (56)-(59) выделим два случая.

Если  $A \neq 0, B = 0, C = D$ , то имеет место **четное** решение:

$$\psi(x) = A \cos kx, \text{ при } -a < x < a;$$

$$\psi(x) = C e^{\gamma x} \text{ при } x < -a;$$

$$\psi(x) = C e^{-\gamma x} \text{ при } x > a.$$

Если  $A = 0, B \neq 0, C = -D$ , то имеет место **нечетное** решение:

$$\psi(x) = A \sin kx, \text{ при } -a < x < a;$$

$$\psi(x) = -C e^{\gamma x} \text{ при } x < -a;$$

$$\psi(x) = C e^{-\gamma x} \text{ при } x > a.$$

Для определения допустимых значений энергии введем обозначения:  $\xi = ak$  и  $\eta = \gamma a$ , тогда для четного решения получаем систему уравнений

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2}; \\ \eta = \xi \operatorname{tg} \xi; \end{cases} \quad (60)$$

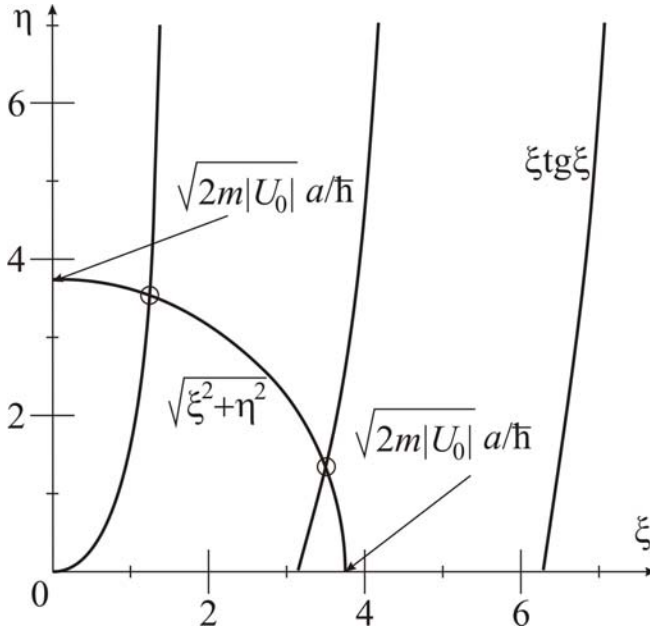


Рис. 6-1. Графический поиск четного  $\psi(x) = A \cos kx$ , при  $-a < x < a$  решения задачи (решения системы уравнений (60))

Система (60) не решается аналитически в явном виде, но наглядно анализируется графически (рис.6-1). Она имеет конечное число корней  $(\xi_n, \eta_n)$ . По известным корням  $(\xi_n, \eta_n)$  системы (60) с помощью соотношений (48) возможно определить собственные значения энергии  $W_n$ .

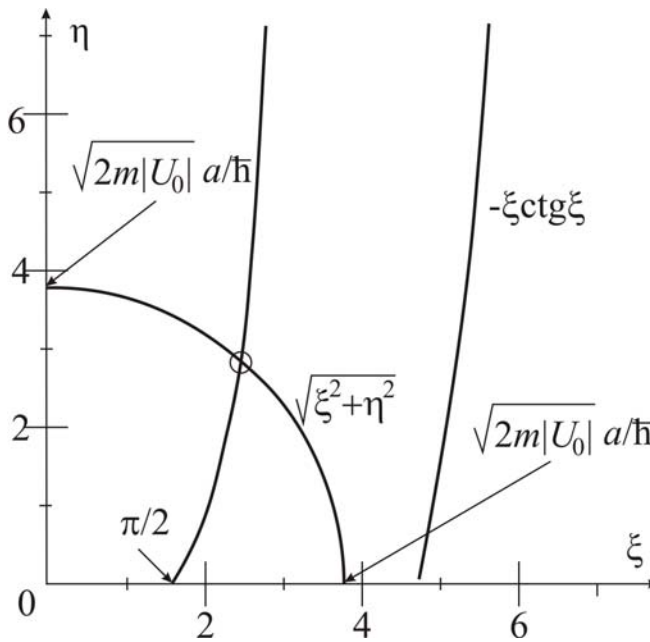


Рис. 6-2. Графический поиск нечетного  $\psi(x) = A \sin kx$  при  $-a < x < a$  решения задачи (решения системы уравнений (61)).

Для нечетного решения получаем другую систему

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2}, \\ \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi, \end{cases} \quad (61)$$



решение которой можно графически проанализировать с помощью **рис.6-2**.

Из анализа **рис. 6-2** следует, что при  $0 < \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2} < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2$ , то есть при

$$0 < |U_0| < \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

нечетного решения не существует, есть только одно четное.

**Ответ.**

**Задача 5-1** (Дискретный спектр. «Полубесконечная» яма). Частица движется в «полубесконечной» яме – при  $x=0$  потенциальная энергия испытывает скачек от  $U=U_0 < 0$  до бесконечности. При  $x=a$  потенциальная энергия скачкообразно изменяется до значения  $U=0$  (см. Рис.7). Определить допустимые значения энергии дискретного спектра ( $W < 0$ ).

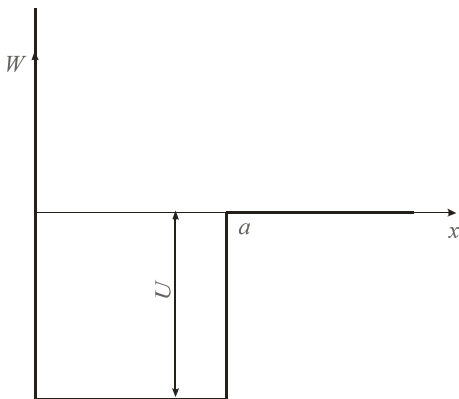


Рис.7. Потенциальная энергия полубесконечной потенциальной ямы.

**Решение.** При  $x=0$  аналогично задаче 4 необходимо  $\psi(0)=0$  (при любой  $\frac{\partial}{\partial x}\psi$ )

Этому требованию удовлетворяют нечетные решения задачи 5 (яма конечной глубины). Внутри ямы

$$\psi(x) = B \sin kx, \tag{62}$$

при  $0 < x < a$  и

$$\psi(x) = C \exp(-\gamma x), \tag{63}$$

при  $x > a$ . Аналогично (48)  $k = +\sqrt{2m(W - U_0) / \hbar^2}$ ,  $\gamma = +\sqrt{-2mW / \hbar^2}$ . Граничное условие при  $x=a$  предполагает непрерывность функции  $\psi(x)$  и ее производной

$\frac{\partial}{\partial x}\psi$ . Аналогично задаче 5, вводя обозначения,  $\xi = ak$  и  $\eta = \gamma a$ , получим собственные значения энергии, отыскивая корни системы (см. Рис.6-2)

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2}; \\ \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi; \end{cases} \quad (64)$$

При  $|U_0| < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$  в яме так же нет ни одного дискретного уровня энергии. Четные решения задачи 5 не удовлетворяют граничным условиям при  $x = 0$

**Ответ.**

### Приложение 2. Гармонический осциллятор.

**Задача.** Найти допустимые уровни энергии и волновые функции частицы в поле

$U(x) = \frac{\kappa x^2}{2}$  – гармонического осциллятора.

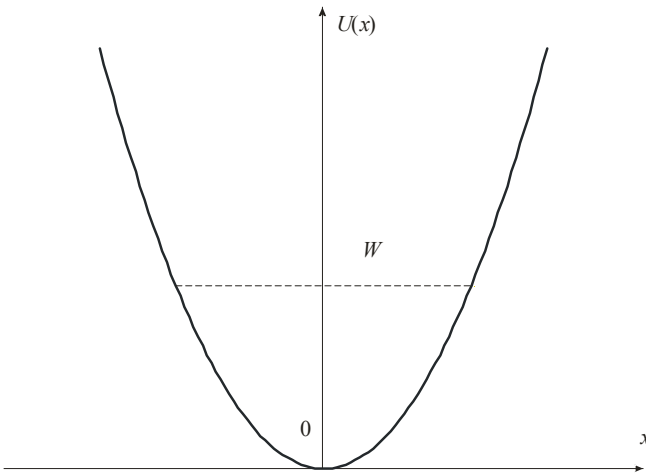


Рис.8. Потенциальная энергия  $U(x)$  гармонического осциллятора

**Решение.** Одномерный гармонический осциллятор – тело массы  $m$ ,двигающееся под действием силы с потенциальной энергией  $U(x) = \frac{\kappa x^2}{2}$ . В квантовом случае оказывается, также как и в классическом случае, удобно ввести циклическую частоту  $\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}$ , тогда  $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ . Энергия

гармонического осциллятора равна  $\frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ , поэтому в квантовом случае мы должны использовать функцию Гамильтона, имеющую вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad (65)$$

а УШ, соответственно:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi \quad (66)$$

Гармонический осциллятор, аналогично задаче о яме с бесконечно высокими стенками, имеет только состояния дискретного спектра. Решение квантовой задачи сводится, таким образом, к отысканию собственных функций оператора  $\hat{H}$ , то есть ненулевых решений уравнения

$$\hat{H}\psi_n(x) = W_n \cdot \psi_n(x), \quad (67)$$

ограниченных при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Собственные значения энергии  $\{W_n\}$  образуют энергетический спектр задачи. Для демонстрации структуры решения введем операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} + \frac{i\hat{P}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (68)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \frac{i\hat{P}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (69)$$

Эти операторы обладают свойством, выражающимся уравнением

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1. \quad (70)$$

Кроме того, оператор Гамильтона представляется в виде:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (71)$$

Функция

$$\psi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (72)$$

обладает свойством  $\hat{a}\psi_0(x) = 0$  и является собственной функцией  $\hat{H}$  с энергией  $\hbar\omega/2$ :

$$\hat{H}\psi_0(x) = \left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right)\psi_0(x), \quad W_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \quad (73)$$

По сути, это – основное состояние осциллятора с минимальной энергией. Дальнейшее уменьшение энергии осциллятора привело бы к нарушению соотношения неопределенности Гейзенберга. Следующие уровни энергии и соответствующие функции  $\psi(x)$  строятся с помощью последовательного применения оператора  $\hat{a}^\dagger$ . Так функция

$$\psi_1(x) = \hat{a}^\dagger\psi_0(x) \quad (74)$$

является собственной функцией с энергией  $W_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ . Действительно:

$$\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}\psi_1 = \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hat{a}^\dagger\psi_0 = \left(\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}\hat{a}^\dagger\right)\psi_0 \quad (75)$$

$$\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}\psi_1 = \frac{3}{2}\hat{a}^\dagger\psi_0 = \frac{3}{2}\psi_1 \quad (76)$$

Функция  $\psi_n(x)$  получается в соответствии с формулой

$$\psi_n(x) = \underbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\dots\hat{a}^\dagger}_n\psi_0(x) \equiv (\hat{a}^\dagger)^n\psi_0(x) \quad (77)$$

Докажем с использованием метода математической индукции, что она является собственной функцией с энергией  $W_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ . Мы уже показали, что при  $n = 0$

$$\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n. \quad (78)$$

Теперь если это верно для некоторого  $n > 0$ , то верно и для  $n + 1$

$$\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}\psi_{n+1} = \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)\psi_{n+1}. \quad (79)$$

Действительно поскольку  $\psi_{n+1} = \hat{a}^\dagger\psi_n$

$$\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H}\hat{a}^\dagger\psi_n = \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hat{a}^\dagger\psi_n, \quad (80)$$

то

$$\left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \hat{a}^\dagger \psi_n = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger\right) \psi_n = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger\right) \psi_n \quad (81)$$

и

$$\left(\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger\right) \psi_n = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{a}^\dagger \hat{H} \psi_n + \hat{a}^\dagger \psi_n = (n+1+1/2) \hat{a}^\dagger \psi_n \quad (82)$$

и окончательно

$$\hat{H} \hat{a}^\dagger \psi_n = \hbar\omega(n+1+1/2) \hat{a}^\dagger \psi_n, \quad (83)$$

что и требовалось доказать. Таким образом, функции

$$\psi_n(x) = A_n \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (84)$$

– собственные функции оператора Гамильтона  $\hat{H}$  гармонического осциллятора с собственными значениями энергии

$$W_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \text{ при } n = 0, 1, 2, \dots \quad (85)$$

Несмотря на структуру квантового спектра гармонического осциллятора – спектра с разными значениями энергии, частоты  $n\omega$  при  $n = 2, 3, \dots$  себя никак не проявляют, поскольку возможны переходы только между состояниями  $n \rightarrow n \pm 1$ .

**Ответ.**

### Задачи для самостоятельного решения

Иродов (3-е издание) №№ 5.123, 5.124, 5.125, 5.127, 5.135 – полубесконечно-глубокая яма, 5.137 – одномерная яма конечной глубины, 5.141 – гармонический осциллятор, 5.154 – ступенька, 5.155 – барьер.