В. И. Дубовик, А. Д. Кулинич
(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **В. Н. Капшай**, канд. физ.-мат. наук, доцент

ОБЩЕЕ УСЛОВИЕ КВАНТОВАНИЯ ДЛЯ ЧЕТНЫХ И НЕЧЕТНЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В СЛУЧАЕ ЧЕТНОГО ПРЯМОУГОЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Одномерное стационарное уравнение Шредингера [1, 2]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)+U(x)\Psi(x)=E\,\Psi(x) \tag{1}$$

с четным потенциалом ($U(-x) = U(x)$) для случая связанных состояний обычно решают, рассматривая отдельно случай четных волновых функций и случай нечетных волновых функций. Условия квантования энергии E при этом задаются разными формулами. Между тем, часто бывает необходимо знать общее условие квантования для всех дискретных значений энергии E. Покажем, что такое условие возможно получить для четного потенциала

$$U(x)=\begin{cases}0,\ |x|>a\\ -U_0,\ |x|\le a\end{cases}. \tag{2}$$

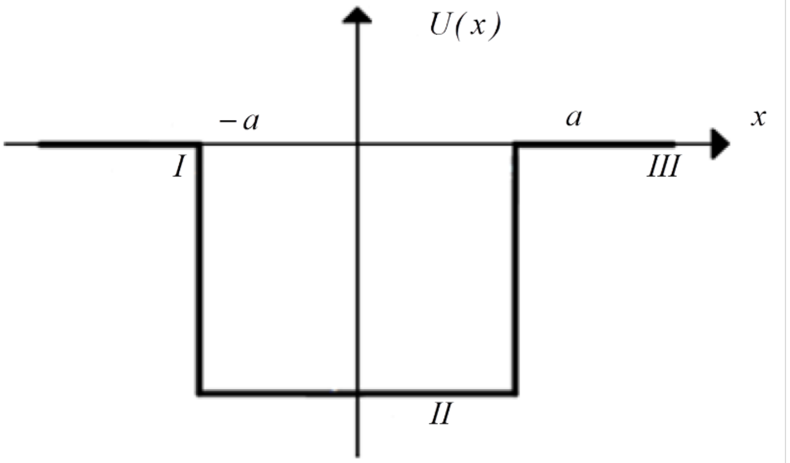

Рисунок 1 – Одномерная прямоугольная потенциальная яма

Рассмотрим случай связанных состояний $E=-\frac{\hbar^2}{2m}\kappa^2<0$. Уравнение Шредингера в областях I – III (рисунок 1) запишется так [3]:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}-\kappa^2\right)\Psi_{I,III}(x)=0, \tag{3}$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\Psi_{II}(x)=0, \tag{4}$$

где $k^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(E + U_0)$. Общие решения этих уравнений, содержащие произвольные константы A_j и B_j, имеют вид [4]:

$$\Psi_I(x) = A_1 e^{-\kappa x} + B_1 e^{\kappa x};$$

$$\Psi_{II}(x) = A_2 e^{-ikx} + B_2 e^{ikx}; \tag{5}$$

$$\Psi_{III}(x) = A_3 e^{-\kappa x} + B_3 e^{\kappa x}.$$

Хорошо известно [5], что волновая функция и ее первая производная должны быть непрерывны в точках $x = -a$ и $x = a$:

$$\begin{cases} \Psi(-a-0) = \Psi(-a+0); \\ \Psi'(-a-0) = \Psi'(-a+0), \end{cases} \tag{6}$$

$$\begin{cases} \Psi(a-0) = \Psi(a+0); \\ \Psi'(a-0) = \Psi'(a+0). \end{cases} \tag{7}$$

Учитывая явный вид решений (5), условия сшивания волновых функций запишем как матричные равенства

$$M(i\kappa, -a)\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = M(k, -a)\begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix},\ M(k, a)\begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = M(i\kappa, a)\begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix}, \tag{8}$$

где использовано обозначение:

$$M(k, x) = \begin{bmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ike^{ikx} & -ike^{-ikx} \end{bmatrix}. \tag{9}$$

Комбинируя условия сшивания в точках -a и a, получим связь для коэффициентов в областях I и III:

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = M^{-1}(i\kappa, -a) M(k, -a) M^{-1}(k, a) M(i\kappa, a)\begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix}. \tag{10}$$

Обозначая элементы произведения четырех матриц M через П, имеем:

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \frac{1}{4\kappa ik}\begin{bmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} \\ \Pi_{21} & \Pi_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{1}{4\kappa ik}\begin{bmatrix} \begin{matrix} 2ie^{-2\kappa a}[2\kappa k\cdot\cos(2ka)+ \\ +(\kappa^2-k^2)\cdot\sin(2ka)] \end{matrix} & -2i(k^2+\kappa^2)\cdot\sin(2ka) \\ 2i(k^2+\kappa^2)\cdot\sin(2ka) & \begin{matrix} -2ie^{2\kappa a}[-2\kappa k\cdot\cos(2ka)+ \\ +(\kappa^2-k^2)\cdot\sin(2ka)] \end{matrix} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix}. \qquad (11)$$

Для того, чтобы волновая функция была нормируемой, необходимо выполнение условий $B_3 = 0$ и $A_1 = 0$. При $B_3 = 0$ константа A_1 может быть равной нулю только при выполнении условия $\Pi_{11} = 0$, что дает:

$$[2\kappa k\cdot\cos(2ka) + (\kappa^2 - k^2)\cdot\sin(2ka)] = 0\,. \qquad (12)$$

Это условия и является общим условием квантования.

Отметим, что это условие упрощается до

$$(\kappa\cdot\cos(ak) - k\cdot\sin(ak))(k\cdot\cos(ak) + \kappa\cdot\sin(ak)) = 0\,. \qquad (13)$$

Таким образом, условие квантования разбивается на два альтернативных варианта:

$$\kappa\cdot\cos(ak) - k\cdot\sin(ak) = 0\,, \qquad (14)$$

$$k\cdot\cos(ak) + \kappa\cdot\sin(ak) = 0\,. \qquad (15)$$

Покажем теперь, что при выполнении условия (14) (условия (15)) волновая функция оказывается четной (нечетной). Для этого запишем выражения для коэффициентов A_2 и B_2 через A_3 и B_3 и выражения коэффициентов A_1 и B_1 через A_2 и B_2:

$$\begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{-2ik}\begin{bmatrix} e^{-ika}e^{-\kappa a}(\kappa - ik) & e^{-ika}e^{\kappa a}(-\kappa - ik) \\ e^{ika}e^{-\kappa a}(-\kappa - ik) & e^{ika}e^{\kappa a}(\kappa - ik) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_3 \\ B_3 \end{bmatrix}, \qquad (16)$$

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \frac{1}{-2\kappa}\begin{bmatrix} e^{-ika}e^{-\kappa a}(-\kappa + ik) & e^{ika}e^{-\kappa a}(-\kappa - ik) \\ e^{-ika}e^{\kappa a}(-\kappa - ik) & e^{ika}e^{\kappa a}(-\kappa + ik) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix}. \qquad (17)$$

Поскольку, как было отмечено выше, $B_3 = 0$, то из (16) имеем:

$$\begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = \frac{A_2 e^{-\kappa a}}{-2ik}\begin{bmatrix} e^{-ika}(\kappa - ik) \\ e^{ika}(-\kappa - ik) \end{bmatrix}. \qquad (18)$$

Заметим, что при учете условия квантования (14), выполняется соотношение:

$$\kappa\cdot\cos(ak) - k\cdot\sin(ak) = e^{-ika}(\kappa - ik) + e^{-ika}(-\kappa - ik)\,. \qquad (19)$$

Это соотношение означает, что $A_2 = B_2$, следовательно, в области II волновая функция $\Psi(x)$ примет вид:

$$\Psi_{II}(x) = -\frac{A_3}{ik} e^{-x(\kappa + ik)} (\kappa - ik)\cos(kx)\,, \tag{20}$$

то есть является четной (при $|x| < a$).

Теперь из условия $A_2 = B_2$ и (17) нетрудно увидеть, что $A_1 = 0$, а $B_1 \equiv A_3$. Это означает, что волновая функция при всех x имеет вид:

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_3 e^{\kappa x}, \;\; x < -a; \\ -\dfrac{A_3}{ik} e^{-x(\kappa + ik)} (\kappa - ik)\cos(kx), \;\; -a \le x \le a; \\ A_3 e^{-\kappa x}, \;\; x > a, \end{cases} \tag{21}$$

то есть является четной.

Также заметим, что при учете условия квантования (15), выполняется соотношение:

$$k \cdot \cos(ak) + \kappa \cdot \sin(ak) = e^{-ika}(-\kappa + ik) + e^{ika}(\kappa + ik)\,. \tag{22}$$

Это соотношение означает, что $B_2 = -A_2$, следовательно, в области II волновая функция $\Psi(x)$ равна:

$$\Psi_{II}(x) = \frac{A_3}{k} e^{-x(\kappa + ik)} (\kappa - ik)\sin(kx)\,, \tag{23}$$

то есть является нечетной (при $|x| < a$).

Теперь из условия $B_2 = -A_2$ и (17) нетрудно увидеть, что $B_1 \equiv -A_3$. Это означает, что волновая функция при всех х имеет вид:

$$\Psi(x) = \begin{cases} -A_3 e^{\kappa x}, \; x < -a; \\ \dfrac{A_3}{k} e^{-x(\kappa + ik)} (\kappa - ik)\sin(kx), \; -a \le x \le a; \\ A_3 e^{-\kappa x}, \; x > a, \end{cases} \tag{24}$$

то есть является нечетной.

Литература

1. Елютин, П. В. Квантовая механика (с задачами) / П. В. Елютин, В. Д. Кривченков. – М. : Наука, 1976. – 332 с.

2. Griffiths, David J. Introduction to Quantum Mechanics / David J. Griffiths, Darrell F. Schroeter. – Cambridge : Cambridge University Press, 2018. – 508 p.

3. Киселев, В. В. Квантовая механика. Курс лекций / В. В. Киселев. – М. : МЦНМО, 2023. – 720 с.

4. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика: квантовая механика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Физматлит, 2004. – 800 с.

5. Давыдов, А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М. : Наука, 1973. – 699 с.