МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНЫХ ЗАДАЧ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

DOI: https://doi.org/10.53885/edinres.2021.43.29.063

Orcid: 0000-0003-1178-6224
Насырова Нигора Каримовна,
старший преподаватель кафедры физики Бухарского государственного университета

Аннотация. Поставлены и решены задачи о стационарных одномерных задачах в квантовой механике. В частности рассмотрены задачи релятивистского уравнения Шрёдингера с постоянным потенциалом и задача линейного гармонического осциллятора. Получено уравнение, основанное на выражении для энергии частицы через импульс. Получено стационарное одномерное релятивистское уравнение Шрёдингера с потенциалом U (x). Описан эффект Штарка для осциллятора в постоянном поле. Проанализированы свойства полученных решений.

Ключевые слова: релятивистская квантовая механика, дифференциальный оператор, потенциальная яма

METHODS FOR SOLVING ONE DIMENSIONAL PROBLEMS IN QUANTUM MECHANICS

Nasirova Nigora Karimovna,
Senior Lecturer, Department of Physics, Bukhara

Abstract: *Problems of stationary one-dimensional problems in quantum mechanics are posed and solved. In particular, the problems of the relativistic Schredinger equation with a constant potential and the problem of a linear harmonic oscillator are considered. An equation is obtained based on the expression for the particle energy in terms of momentum. The stationary one-dimensional relativistic Schredinger equation with the potential U (x) is obtained. The Shtark effect for an oscillator in a constant field is described. The properties of the obtained solutions are analyzed.*

Keywords: relativistic quantum mechanics, differential operator, potential well.

КВАНТ МЕХАНИКАСИДА БИР ЎЛЧАМЛИ МАСАЛАЛАРНИ ЕЧИШ МЕТОДЛАРИ

Nasirova Nigora Karimovna,
Бухоро давлат университети физика кафедраси катта ўқитувчиси

Аннотация. Квант механикасидаги стационар бир ўлчовли масалалар қўйилган ва ечилган. Хусусан, доимий потенциалга эга бўлган релятивистик потенциалга эга бўлган релятивистик Шредингер тенгламаси ва чизиқли гармоник осциллятор масалалари кўрилган. Заррача энергиясини импульс орқали ифодалашга асосланган тенглама *олинган. U (x) потенциалли бир ўлчовли стационар релятивистик Шредингер тенгламаси олтнган. Доимий майдонда осциллятор учун Штарк эффекти ифодаланган. Олинган натижаларнинг хусусиятлари таҳлил қилинган.*

Калит сўзлар: релятивистик квант механикаси, дифференциал оператор, потенциал ўра.

Как известно [1], применение уравнения Клейна-Гордона-Фока к задаче о состояниях частицы в пространстве с глубокой потенциальной ямой связано с существенными трудностями. Эти трудности возникают и в отсутствие потенциальных ям. Действительно, из этого уравнения следует, что энергия свободной частицы может быть отрицательной. Энергетический спектр свободной частицы состоит из двух континуумов, верхнего и нижнего. И ничто не мешает, казалось бы, частице из верхнего континуума «провалиться» в нижний континуум «падать» бесконечно, излучая бесконечную энергию.

Однако, судя по всему, ничего подобного не происходит. Если нигде в пространстве нет потенциальных ям глубиной, вдвое превышающей энергию покоя частицы, состояния нижнего континуума можно игнорировать, но если такие ямы есть, одно и то же значение энергии в одних областях пространства принадлежит нижнему, а в других верхнему континууму. И это должно приводить к рождению частиц из вакуума.

Известны и другие трудности, которыми сопровождается применение уравнения Клейна-Гордона-Фока (комплексные значения энергии водородоподобного атома с большим зарядом ядра [2], парадокс Клейна [3] и другие). В связи с этим появилось убеждение, что релятивистская квантовая теория должна изначально строиться как теория многих частиц или как теория с бесконечным числом степеней свободы, т. е. как квантовая теория поля. Но квантовая теория поля приводит к расхождениям. Можно, однако, понять, что все трудности, к которым приводит уравнения Клейна-Гордона-Фока, связаны с тем, что, в отличие от нерелятивистского уравнения Шрёдингера, это уравнение основано не на выражении энергии частицы через импульс

$$\varepsilon = \sqrt{m^2 + p^2} \quad (1)$$

(используется система единиц, в которой скорость света с и постоянная Планка $\hbar$ равны единице), а на выражении квадрата энергии через импульс

$$\varepsilon^2 = m^2 + p^2 \quad (2)$$

Причина такого выбора состоит в том, что если стандартную замену

$$\varepsilon \to i\,\frac{\partial}{\partial t}\,, p \to\ -i\,\nabla$$

произвести в равенстве (1), то получится не вполне обычное уравнение

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \sqrt{m^2 - \nabla^2}\,\psi \quad (3)$$

Конечно, этот оператор (такие операторы называются псевдо дифференциальными) не локален, поскольку его определение включает интегрирование по координатам. Тем не менее, он используется в ряде работ, где уравнение (3) называют бес спиновым уравнением Солпетера, но, по-видимому, его действительно нельзя считать основой релятивистской квантовой теории. В частности, невозможно использовать это определение к задачам со ступенчатым потенциалом-оно не даёт возможности ставить граничные условия в точках скачков потенциала. Можно, однако, отметить, что любой самосопряжённый оператор не локален: даже самосопряжённый дифференциальный оператор второго порядка не определён на функции, равной нулю на Р ⊂ R3, если она не принадлежит гильбертову пространству.

Уравнение (3) можно называть свободным релятивистским уравнением Шрёдингера. В настоящей работе релятивистское уравнение Шрёдингера используется для решения задачи о состояниях бес спиновой частицы в одномерном пространстве с потенциалами, имеющими вид прямоугольной потенциальной ямы.

Стационарное одномерное релятивистское уравнение Шрёдингера с постоянным потенциалом. Легко обобщить уравнение (3) на случай наличия потенциала (потенциальной энергии) U (r):

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} - U(r)\,\psi(r) = \sqrt{m^2 - \nabla^2}\,\psi(r) \quad (4)$$

Если потенциал U (r) не зависит от y и z, зависимости от всех переменных разделяются.

Используя подстановку

$$\Psi(r) = \psi(\varepsilon, x)\, exp(-i\varepsilon t)$$

получаем стационарное одномерное релятивистское уравнение Шрёдингера с потенциалом U (x):

$$[\varepsilon - U(x)]\,\psi(\varepsilon, x) = \sqrt{m^2 - \nabla_x^2}\,\psi(\varepsilon, x) \quad (5)$$

где

$$\nabla_x \equiv \frac{d}{d_x}$$

Если U (x)= U_0 при всех x ∈ (a, b) ⊂ R, это уравнение принимает вид

$$(\varepsilon - U_0)\psi(\varepsilon, x) = \sqrt{m^2 - \nabla_x^2}\,\psi(\varepsilon, x),\ \forall x\ \in (a, b), \quad (6)$$

Из определения оператора $\sqrt{m^2 - \nabla_x^2}$ -следует, что если ε <U_0, уравнению (6) удовлеворяет лишь функция ψ(ε,x)= 0, ∀x ∈ (a,b). Если 0 < ε – U_0 <m, решение уравнения (5) имеет вид

$$\psi(\varepsilon,x)= A\ exp(\kappa x)+ B\ exp(-\kappa x),\ \forall x \in (a, b),$$

где $A, B \in C$, $\kappa_k \in R$:

$$k = \sqrt{m^2 - (\varepsilon - U_0)^2}$$

Если же ε − U_0 >m,

$$\psi(\varepsilon, x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx),\ \ \forall x\ \in (a, b),$$

где

$$p = \sqrt{(\varepsilon - U_0)^2 - m^2} \in R.$$

Для того чтобы определить коэффициенты *A, B* $\in$ *C,* необходимо поставить граничные условия. Аналогом вронскиана дифференциального уравнения второго порядка в теории уравнения (6) является функция

$$W\left[x,\Psi_{1,}\Psi_2\right] = \Psi_1(x)(V(\nabla_x)\Psi_2)(x) - \Psi_2(x)(V(\nabla_x)\Psi_1)(x) \qquad (7)$$

и что, если поставлены граничные условия, при которых эта функция принимает одинаковые значения в краевых точках, соответствующая краевая задача является самосопряжённой в смысле скалярного произведения:

$$(\Psi_1,\Psi_2)_a^b = \int_a^b [\Psi_1{}^*(x)\Psi_2(x) + m^2(g(\nabla_x)\Psi_1{}^*)(x)g(\nabla_x)\Psi_2)(x) + (V^*(\nabla_x)\Psi_1{}^*)(x)(V(\nabla_x)\Psi_2)(x)]d_x \qquad (8)$$

Соответствующая норма

$$\left||\Psi|\right| = [(\Psi_1,\Psi_2)_a^b]^{\frac{1}{2}}. \qquad (9)$$

Определение локального оператора $\sqrt{m^2 - \nabla_x^2}$ порождает бесконечное множество самосопряжённых граничных задач, каждая из которых имеет свой спектр и свои собственные функции. Каждой из них можно сопоставить самосопряжённый оператор в соответствующем гильбертовом пространстве. Определение Дж. фон Неймана приводит непосредственно к самосопряжённому оператору, но только к такому, который соответствует единственной граничной задаче-при (a=-∞), b=∞. Применение этого определения, например, к задаче на промежутке (0, ∞), вообще невозможно, поскольку наш оператор должен быть функцией оператора -$i\nabla_x$, а последний не может быть определён на функциях на этом промежутке как самосопряжённый.

Линейный гармонический осциллятор. *Линейным гармоническим осциллятором* называется частица, совершающая движение в потенциальной яме $V(x) = \frac{m\omega^2x^2}{2}$ (рис. 1.а),

где m — масса частицы, ω — частота осциллятора. В *классическом* случае частица совершала бы движение по закону $x(t) = x_0\cos(\omega t + \varphi_0)$. Амплитуда x_0 однозначно определяется энергией осциллятора, которая в свою очередь может принимать *непрерывный* ряд значений на интервале от 0 до ∞.

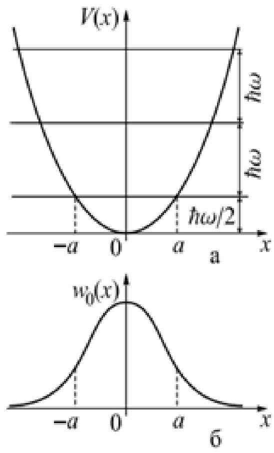

Рис. 1

В микромире стационарная постановка задачи требует решения уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_E(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi_E(x) = E\Psi_E(x) \qquad (10)$$

с граничными условиями $\Psi_E(\pm\infty) = 0$ вследствие финитного движения.

В соответствии с общей теорией энергетический спектр осциллятора будет *дискретным*:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (11)$$

Уровни расположены эквидистантно на расстоянии $\hbar\omega$ друг от друга. В соответствии с общим свойством одномерного финитного движения они *не вырождены,* т.е. каждому соответствует только одно состояние:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}}\left(\frac{x}{x_0}\right), \qquad (12)$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \qquad (13)$$

— «естественная» единица длины для осциллятора, позволяющая существенно упростить все математические выкладки переходом к безразмерным величинам;

$$\Psi_n^{(osc)}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) \mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} \qquad (14)$$

$H_n(\xi)$ -полином Чебышева – Эрмита. (рис.1 б). Функция (12) нормированы на единицу и ортогональным на всей вещественной оси:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n'}(x)\Psi_n(x)dx = \delta_{n'n} \qquad (15)$$

Основное состояние осциллятора имеет ненулевую энергию $\mathrm{E}_0 = {}^{\hbar\omega}/_2$ (отсчитывается от «дна» потенциальной ямы). Это так называемая *энергия нулевых колебаний.* Наличие нулевых колебаний не противоречит *принципу неопределенностей*, не позволяющему частице опуститься на «дно». Основному состоянию соответствует волновая функция

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right). \qquad (16)$$

Поскольку при удалении от положения равновесия потенциальная энергия монотонно возрастает непрерывным образом, волновые функции будут ненулевыми и в классически недоступной области. График плотности вероятности в основном состоянии дается в качестве примера на рис. 1.б. Он представляет собой гауссову кривую.

Эффектами Штарка называются изменения, происходящие со связанной заряженной системой под воздействием внешнего электрического поля. Ниже мы рассмотрим эффект Штарка для заряженного осциллятора в постоянном электрическом поле.

Эффект Штарка для осциллятора в постоянном поле заключается в смещении всех энергетических уровней вниз на одинаковую величину, не исчезающую в классическом пределе.

Если на осциллятор действует постоянное однородное электрическое поле напряженности E, направленное вдоль оси Ox. Можно найти энергии стационарных состояний и соответствующие им волновые функции.

Решение. Уравнение Шредингера для осциллятора в электрическом поле

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_E(x)}{dx^2} + (\frac{1}{2}m\omega^2x^2 - e\mathcal{E}\mathrm{x})\Psi_E(x) = E\Psi_E(x) \qquad (17)$$

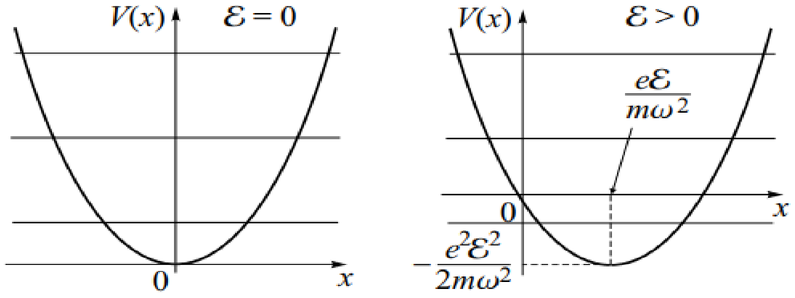

Рис.2

можно упростить, если в потенциальной яме выделить полный квадрат:

$$\frac{1}{2}m\omega^2x^2 - e\mathcal{E}x = \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (18)$$

После замен

$$x \to X = x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}; \quad E \to E' = E + \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}; \quad \Psi_E(x) = \Phi_{E'}(X) \quad (19)$$

мы переходим к уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi_{E'}(X)}{dX^2} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2\Phi_{E'}(X) = E'\Phi_{E'}(X) \quad (20)$$

по своей структуре *полностью совпадающему с уравнением Шредингера* (10) *для такого же осциллятора без поля.* Причину данного феномена легко понять, проанализировав (17): потенциальная кривая осциллятора под действием внешнего электрического поля претерпевает лишь *параллельный перенос* (рис.2); форма кривой, определяющая частоту, остается *неизменной.* Таким образом, у осциллятора смещается положение равновесия и начало отсчета энергии. Это целиком отражается в заменах (18), но не в конечном уравнении (19) и граничных условиях к нему.

Решение (19) легко строится на основании (11), (12) и (18):

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (21)$$

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}}\Psi_n^{(osc)}\left(\frac{x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}}{x_0}\right), \quad n=0,1,2,\ldots\ldots\ldots \quad (22)$$

Эффект Штарка для осциллятора в постоянном поле заключается в смещении всех энергетических уровней вниз на одинаковую величину, не исчезающую в классическом пределе.

Литература

1. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. М., 1981.

2. Ициксон К., Зюбер Ж.-Б. Квантовая теория поля: в 2 т. / пер. с англ. М.: Мир, 1984. Т. 1. 448 с.

3. Klein O. Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativististischen Dynamic von Dirac // Zs. f. Phys. 1929. Bd. 53. S. 157-158.

4. Головин А.В. , В.М.Лагодинский Задача о глубокой потенциальной яме в релятивистской квантовой механике. Вестник СПбГУ. Сер. 4. Т. 3 (61). 2016. Вып. 1.

5. Nasirova N.K. Bound and ground states of a spin-boson model with at most one photon: non-integer lattice case. Journal of Global Research in Mathematical Archives. 2019.

6. Насырова Н.К., Насирова Н.Г., Методика преподавания практических занятий по квантовой механике в высших учебных заведениях. Вестник науки и образования. 2020

7. Насырова Н.К., Кобилов Б.Б., Особенности изучения физики в вузах. Вестник науки и образования. 2020.

8. Насырова Н.К., Некоторые методические аспекты решения задач на практических занятиях по квантовой механике. Педагогик маҳорат., 2020/12.

9. Mukimov K.M., Kenjaev Z.M., Jumaev M.R., Fayziev S.F. Peculiarities of energy spectra of cuprates in Hubbard model. National conference ‘Optical research methods in modern physics’ consecrated to 90th anniversary of the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek; Tashkent (Uzbekistan); 7-8 May 2008.