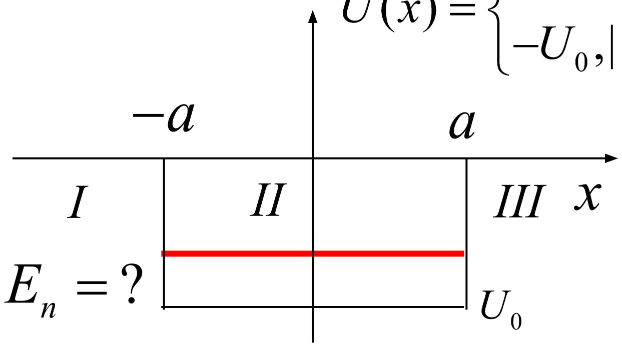
«Мелкая» прямоугольная яма

Рассматриваем случай финитного движения (в классической механике)

$$E = -|E| < 0$$

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



Уравнение Шрёдингера

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)\right]\Psi(x) = -|E|\Psi(x)$$

Уравнение Шрёдингера в разных областях

$$I, III: \ \Psi'' - k^2\Psi = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

$$II: \quad \Psi'' + \kappa^2\Psi = 0, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(U_0 - |E|\right)}$$

В «мелкой» яме существует только одно чётное решение

$$I, III: \quad \Psi = A \cdot \mathrm{e}^{-k|x|}$$

$$II: \quad \Psi = B \cdot \cos \kappa x$$

Условия сшивки

$$\begin{cases} A \cdot \mathrm{e}^{-ka} - B \cdot \cos \kappa a = 0 \\ -kA \cdot \mathrm{e}^{-ka} + \kappa B \cdot \sin \kappa a = 0 \end{cases}$$

Уравнение для энергии

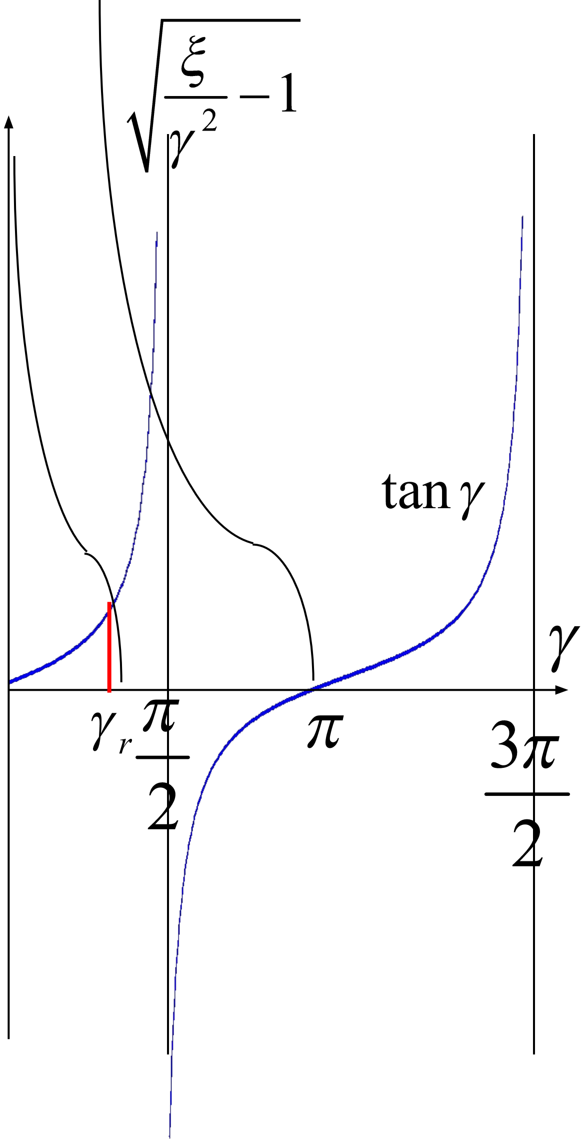
$$\frac{k}{\kappa} = \tan \kappa a$$

Уравнение для энергии и безразмерных переменных

$$\sqrt{\frac{\xi}{\gamma^2} - 1} = \tan \gamma; \quad \gamma = \kappa a, \quad \xi = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}$$

Найти решение в приближении «мелкой» ямы

$$\xi = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} \ll 1$$



«Графические» соображения

Корень мал по сравнению с единицей

$$\gamma_r \ll 1$$

Найти решение характеристического уравнения в первом неисчезающем приближении?

Решение

$$\sqrt{\frac{\xi}{\gamma^2} - 1} = \tan\gamma \quad \Rightarrow \quad \gamma^4 + \gamma^2 - \xi = 0$$

Или

$$\gamma^2 = \frac{1}{2}\left(\sqrt{1+4\xi} - 1\right)$$

Найти энергию в первом неисчезающем приближении при

$$\xi \ll 1$$

Решение с точностью до линейного слагаемого

$$\gamma^2 = \frac{1}{2}\left(\sqrt{1+4\xi} - 1\right) \approx \xi$$

Или, возвращаясь к исходным обозначениям

$$\frac{2ma^2}{\hbar^2}\left(U_0 - |E|\right) = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad |E| = 0$$

Является ли ответ физически значимым?
Указание: подставить полученное значение в условия сшивки.

Условия сшивки при нулевой энергии

$$\begin{cases} A - B \cdot \cos\xi = 0 \\ \xi B \cdot \sin\xi = 0 \end{cases} \Rightarrow \quad A = B = 0 \quad \Rightarrow \quad \Psi(x) = 0$$

Надо искать решение с точностью до квадратичных слагаемых

$$\sim \xi^2$$

Решение с точностью до квадратичных слагаемых

Полезная формула

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8}$$

Поэтому

$$\gamma^2 = \frac{1}{2}\left(\sqrt{1+4\xi} - 1\right) \approx \xi - \xi^2$$

Или

$$\frac{2ma^2}{\hbar^2}\left(U_0 - |E|\right) = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} - \left(\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}\right)^2 \quad \Rightarrow \quad |E| = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}\cdot U_0 = \xi \cdot U_0 \ll U_0$$

Энергия связанного состояния в мелкой яме много меньше глубины ямы!

В том же приближении найти волновую функцию связанного состояния?

Указание. Оценить величины

$$ka \ \square\ ?, \quad \kappa a \ \square\ ?$$

и записать условия сшивки для «мелкой» ямы.

Неравенства для «мелкой» ямы

$$ka = \sqrt{\frac{2m|E|a^2}{\hbar^2}} \ll \sqrt{\xi} \ll 1, \kappa a \approx \sqrt{\xi} \ll 1 \quad \Rightarrow \quad \mathrm{e}^{-ka} \approx \cos \kappa a \approx 1$$

Условия сшивки для «мелкой ямы

$$A \approx B$$

Волновая функция частицы в «мелкой» яме во всём интервале изменения координаты

$$I, II, III: \quad \Psi(x) \approx A \cdot \mathrm{e}^{-k|x|}$$

Вычислить нормировочную константу?

Волновая функция частицы в «мелкой» яме во всём интервале изменения координаты

$$\Psi(x) \approx \sqrt{k} \cdot \mathrm{e}^{-k|x|}, \quad x \in]-\infty, \infty[$$

Задачи.

1. Вычислить средние значения кинетической и потенциальной энергии частицы в мелкой яме.

2. Найти плотность распределения вероятности для импульса частицы в мелкой яме.

1. Вычислить средние значения кинетической и потенциальной энергии частицы в мелкой яме.

Среднее значение кинетической энергии частицы в мелкой яме.

$$\overline{T} = \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\Psi^*(x)\left(\hat{p}^2\Psi(x)\right) = -\frac{\hbar^2 k}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\mathrm{e}^{-k|x|}\left(\frac{d^2\,\mathrm{e}^{-k|x|}}{dx^2}\right)$$

$$\frac{d^2\,\mathrm{e}^{-k|x|}}{dx^2} = ?$$

Из семинара о дельта-функции

$$\frac{d\,\mathrm{e}^{-k|x|}}{dx} = -k\,\mathrm{e}^{-k|x|} \cdot \frac{d\,|\,x\,|}{dx} = -k\,\mathrm{e}^{-k|x|} \cdot \left(\eta(x) - \eta(-x)\right)$$

$$\frac{d^2\,\mathrm{e}^{-k|x|}}{dx^2} = -k\,\frac{d}{dx}\left[\mathrm{e}^{-k|x|} \cdot \left(\eta(x) - \eta(-x)\right)\right] = -k\left(\eta(x) - \eta(-x)\right)\frac{d\,\mathrm{e}^{-k|x|}}{dx} - 2k\,\mathrm{e}^{-|x|} \cdot \delta(x)$$

$$\boxed{\frac{d^2\,\mathrm{e}^{-k|x|}}{dx^2} = k^2 \cdot \mathrm{e}^{-k|x|} - 2k \cdot \delta(x)}$$

Среднее значение кинетической энергии частицы в мелкой яме (продолжение)

$$\bar{T} = \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(x)\left(\hat{p}^2\Psi(x)\right) = -\frac{\hbar^2 k^3}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \mathrm{e}^{-2k|x|} + \frac{\hbar^2 k^2}{m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x)$$

Вычислить интегралы?

Интегралы

$$-\frac{\hbar^2 k^3}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\mathrm{e}^{-2k|x|} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\int_{0}^{\infty} d\xi\,\mathrm{e}^{-\xi} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{m}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\delta(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{m}$$

Среднее значение кинетической энергии частицы в мелкой яме (продолжение)

$$\boxed{\overline{T} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

Среднее значение потенциальной энергии частицы в мелкой яме.

$$\bar{U} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(x)\big(U(x)\Psi(x)\big) = -kU_0 \int\limits_{-a}^{a} dx\, \mathrm{e}^{-2k|x|} \approx -2kaU_0$$

Сравнить величины средних значений кинетической и потенциальной энергий?

Отношение средних значений кинетической и потенциальной энергий

$$\boxed{\left|\frac{\bar{T}}{\bar{U}}\right| = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cdot \frac{1}{2kaU_0}}$$

$$\boxed{ka = \xi, \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = |E| = \xi U_0}$$

$$\boxed{\left|\frac{\bar{T}}{\bar{U}}\right| = \frac{\xi U_0}{2\xi U_0} = \frac{1}{2}}$$

Найти плотность распределения вероятности для импульса частицы в мелкой яме.

Используя принцип суперпозиции, записать в явном виде волновую функцию в импульсном представлении?

Волновая функция в импульсном представлении

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, a_p \Psi_p(x), \quad a_p = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi_p^*(x)\Psi(x)$$

Связанное состояние в «мелкой» яме

$$a_p = \sqrt{\frac{k}{2\pi\hbar}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \mathrm{e}^{-k|x| - ipx/\hbar} = ?$$

Результат

$$a_p=\sqrt{\frac{k}{2\pi\hbar}}\cdot\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\,\mathrm{e}^{-k|x|-ipx/\hbar}=\sqrt{\frac{k}{2\pi\hbar}}\cdot\left\{\int\limits_{0}^{\infty}dx\,\mathrm{e}^{-kx+ipx/\hbar}+\int\limits_{0}^{\infty}dx\,\mathrm{e}^{-kx-ipx/\hbar}\right\}=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\cdot\frac{\left(\hbar k\right)^{3/2}}{p^2+\left(\hbar k\right)^2}$$

Плотность распределения вероятности импульса

$$\rho\left(p\right)=\left(\frac{2}{\pi}\right)\cdot\frac{\left(\hbar k\right)^3}{\left(p^2+\left(\hbar k\right)^2\right)^2}$$

Оценить дисперсию импульса и координаты?