

Семинар 3. Связанные состояния. Мелкая яма.

Даниил Антоненко

23 сентября 2017 г.

Общие свойства уравнения Шрёдингера

Построение квантомеханического описания движения классической системы сводится к замене в классической функции Гамильтона $H(x, p)$ значения координат и импульса на соответствующие им операторы¹. В этом семинаре мы будем рассматривать задачи об одной квантовой частице, движущейся в потенциале $U(x)$; Гамильтониан такой системы даётся выражением:

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

Мы будем интересоваться **стационарными состояниями** — собственными состояниями оператора энергии $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. В общем случае, спектр Гамильтониана может включать в себя как дискретный спектр связанных состояний, так и непрерывный спектр бегущих волн.

Связанные состояния состояния характеризуются тем, что для них волновая функция на больших расстояниях достаточно быстро спадает, а интеграл $\langle\psi|\psi\rangle = \int dx |\psi(x)|^2$ сходится. **Состояния непрерывного спектра** ненормируемы, и интеграл $\int dx |\psi(x)|^2$, вообще говоря, расходится. Примером волновой функции непрерывного спектра может служить обыкновенная плоская волна $\psi(x) = e^{ikx}$. О способе нормировки волновых функций непрерывного спектра мы поговорим на следующем семинаре; а пока мы будем только работать со связанными состояниями.

Рассмотрим для начала случай локализованных потенциалов. Пусть на бесконечности потенциал достаточно быстро спадает $U(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$. Тогда в уравнении Шрёдингера в координатном представлении можно приближённо выбросить член с потенциальной энергией; получится следующее уравнение и его решение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) \Rightarrow \begin{cases} \psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, & E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0 \\ \psi(x) = C'_1 e^{\kappa x} + C'_2 e^{-\kappa x}, & E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} < 0 \end{cases} \quad (2)$$

Непрерывный спектр в таком виде соответствует положительной энергии, а связанные состояния — отрицательным. Более того, при $x > 0$, константа C'_1 должна тождественно зануляться, а при $x < 0$ должна зануляться константа C'_2 . Эти два условия оказывается возможным выполнить только для дискретного набора энергий, которые и дают спектр связанных состояний.

Отметим также, что для поставленной задачи волновые функции можно искать среди вещественных. Действительно, если $\psi(x)$ — решение, то легко видеть, что и $\psi^*(x)$ удовлетворяет тому же уравнению, а по линейности, и $\text{Re}\psi = (\psi + \psi^*)/2$ и $\text{Im}\psi = (\psi - \psi^*)/(2i)$.

Осцилляторная теорема Решим задачу о частице в потенциале с бесконечными стенками:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{иначе} \end{cases} \quad (3)$$

Поскольку потенциальная энергия, вообще говоря, может быть бесконечно большой, то у этой задачи не имеется непрерывного спектра, а есть только дискретный. Спектр задачи тривиален, он даётся (с точностью до нормировки)

$$\psi_n(x) = \sin(k_n x), \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad k_n L = \pi n \quad (4)$$

Можно обратить внимание, что у волновой функции основного состояния нет узлов; а у n -той волновой функции $\psi_n(x)$ имеется ровно $n - 1$ узел. Это свойство одномерного движения носит самый общий характер, и называется **осцилляторной теоремой**. Для того, чтобы понять, почему она выполняется в общем случае, полезно подумать о том, как меняется поведение решения уравнения Шрёдингера с правильными (затухающими) граничными условиями на $-\infty$ при увеличении параметра E , начиная с больших отрицательных значений (см. рис.).

¹Вообще говоря, если классическая функция Гамильтона содержит члены вида $x \cdot p$, то соответствующий оператор $\hat{x} \cdot \hat{p}$ не является эрмитовым. Рецепт в таком случае сводится к процедуре симметризации; например, комбинация $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$ уже является эрмитовой.

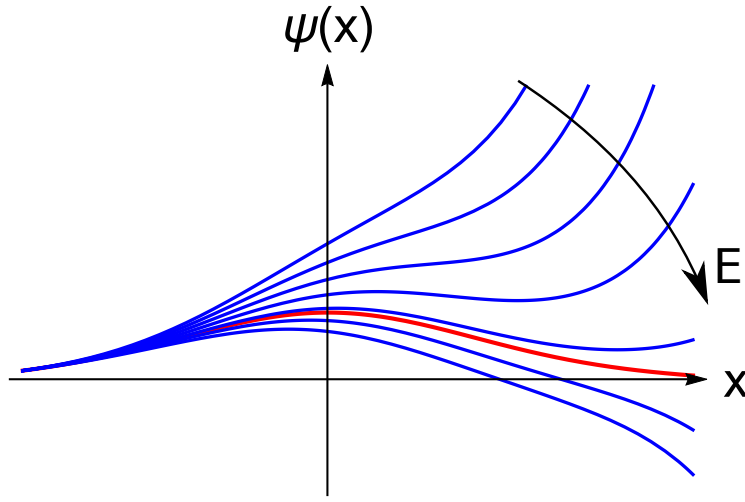


Рис. 1: Поведение волновой функции при различных энергиях

Мелкая яма

Масштабы Рассмотрим произвольный локализованный потенциал $U(x)$, который может быть охарактеризован двумя масштабами: глубиной ямы U_0 и ее шириной² a . Обсудим сперва некоторые общие свойства связанных состояний в такой яме (предполагая, что они имеются). Для конкретности, можно говорить об основном состоянии.

Первое, что приходит в голову — это то, что типичная волновая функция связанного состояния находится большей частью в яме и масштаб её пространственного изменения также равен a (как это было, скажем, в яме с бесконечно высокими стенками). В этом случае из соотношения неопределённостей следует, что типичные импульсы $p \sim \hbar/a$, поэтому кинетическая энергия локализации частицы в яме имеет порядок $\langle \hat{T} \rangle \sim \hbar^2/ma^2$. Это — второй (независимый от U_0) важный энергетический масштаб, характеризующий любую яму.

Особый интерес представляет предел, соответствующий $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$ — называемый **мелкой ямой**³. Если высказанное предположение верно, то полная энергия частицы $E = \langle \hat{U} \rangle + \langle \hat{T} \rangle \sim -U_0 + \hbar^2/ma^2 > 0$ и частица просто «вылетит» из ямы в состояния непрерывного спектра. Единственное разрешение полученного парадокса — это предположить, что типичный масштаб волновой функции связанного состояния в мелкой яме $l \gg a$ (так, чтобы выполнялось во всяком случае нестрогое неравенство $U_0 \gtrsim \hbar^2/ml^2$), и частица большую часть времени проводит *вне* ямы⁴. В таком случае, масштаб l волновой функции определяется уравнением Шрёдингера вне ямы, где, как было сказано выше, волновая функция экспоненциально затухает $\psi(x) \simeq e^{-\kappa|x|}$, и $\kappa = l^{-1}$ непосредственно связан с энергией связанного состояния $|E| = \hbar^2\kappa^2/2m$. Полученное соотношение масштабов волновой функции и ямы в действительности означает, что внутри ямы волновая функция практически не меняется — а значит, связанное состояние (если оно имеется!) нечувствительно к деталям потенциала. Именно это в результате позволяет построить универсальное решение достаточно большого класса задач — задач о мелкой яме.

Стоит обратить отдельное внимание на тот факт, что дельта-яма $U(x) = -u\delta(x)$, не смотря на кажущуюся парадоксальность, является мелкой ямой. Действительно, если промоделировать дельта-функцию прямоугольной ямой глубиной U_0 и шириной a , и начать уменьшать $a \rightarrow 0$, сохраняя постоянным произведение $U_0a = u = \text{const}$ (классическое определение дельта-функции), то критерий малости ямы, $U_0ma^2/\hbar^2 = uma/\hbar \ll 1$, будет выполняться всё лучше и лучше⁵.

²Примером такого потенциала может служить гауссов потенциал $U(x) = -U_0 \exp(-x^2/a^2)$.

³Во избежание недоразумений отметим, что мелкость ямы не означает буквально малость глубины ямы — критерию мелкости можно удовлетворить также уменьшая a . Мелкая яма может быть сколь угодно глубокой, но узкой

⁴В противоположном пределе глубокой ямы $mU_0a^2/\hbar \gg 1$ это предположение, в действительности, тоже не работает — чаще всего основное состояние имеет масштаб $l \ll a$. Для достаточно гладкого потенциала (яма с бесконечными стенками не подходит) основное состояние будет расположено вблизи минимума потенциала, где работает разложение $U(x) = U_{\min} + \frac{1}{2}U''(x_{\min}) \cdot (x - x_{\min})^2 + \dots$. Ограничившись первыми двумя членами, мы свели задачу к гармоническому осциллятору, масштаб связанного состояния в котором равен $l \sim \hbar^{1/2}/(U''m)^{1/4} \sim a \cdot (\hbar^2/U_0ma^2)^{1/4} \ll a$, где сделана размерная оценка $U'' \sim U_0/a^2$. Конечно, такой рецепт не подходит на все случаи жизни — всегда следует контролировать законность приближения минимума гармоническим осциллятором и влияние следующих членов разложения.

⁵Данная аргументация работает лишь для одномерного движения. В двумерии для ямы $U(\mathbf{x}) = -u\delta(\mathbf{x})$ нам придётся сохранять постоянным произведение $U_0\pi a^2 = u = \text{const}$, из-за чего критерий малости будет соответствовать $u \ll \hbar/m$ и в этом смысле улучшаться с уменьшением a не будет. В трёхмерии же ситуация ещё хуже — дельта-яма в действительности бесконечно глубока. Как мы увидим далее, физически это отвечает тому, что в двумерной мелкой яме уровень энергии будет *экспоненциально* мелким (но тем не менее, будет всегда), а в трёхмерной мелкой яме связанных состояний вообще не существует.

Координатное представление и сшивка асимптотик⁶

Для решения задачи в координатном представлении необходимо сделать дополнительное предположение о том, что уровень в мелкой яме сам по себе мелкий, а именно $|E| \ll U_0$. После решения мы увидим (и проверим), что это действительно так.

Выберем промежуточный масштаб b из условия $a \ll b \ll l$. С одной стороны, поскольку $b \gg a$, то потенциальную энергию на этом масштабе уже можно считать нулём; с другой, поскольку $b \ll l$ — то волновая функция ещё не успела значительно измениться. Проинтегрируем уравнение Шрёдингера от $-b$ до b :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(+b) - \psi'(-b)] = - \int_{-b}^b [U(x) - E] \psi(x) dx. \quad (5)$$

Сделанные замечания позволяют нам с одной стороны — вынести волновую функцию за знак интеграла (и приравнять её, скажем к $\psi(0)$), а с другой — распространить пределы интегрирования до бесконечных⁷:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(+b) - \psi'(-b)] = -\psi(0) \int_{-b}^b U(x) dx \approx -\psi(0) \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx, \quad (6)$$

Наконец, мы можем заметить, что поскольку $b \gg a$, то на этом масштабе можно пренебречь потенциалом, в связи с чем мы знаем, как устроено решение — а именно, как $\psi(|x| \gg a) \simeq C e^{-\kappa|x|}$. Подставляя это знание в полученное уравнение (удобно «сшивать» логарифмические производные $\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} \equiv (\ln \psi(x))' = \mp \kappa$), мы получаем уравнение на величину κ , а значит — и на уровень энергии:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} 2\kappa = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx \Rightarrow |E| = \frac{m}{2\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx U(x) \right|^2 \quad (7)$$

Оценка величины этого интеграла позволяет продемонстрировать верность сделанных предположений, ровно как и общих рассуждений, приведённых в начале раздела. А именно, $\int dx U(x) \sim U_0 a$, поэтому $E \sim U_0 \frac{m U_0 a^2}{\hbar^2} \ll U_0$ — уровень действительно мелкий; а кроме того, $l = \kappa^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} \sim \frac{\hbar}{m U_0 a} \equiv a \cdot \frac{\hbar}{m U_0 a^2} \gg a$ — волновая функция действительно широкая. Кроме того, данное рассуждение на физическом уровне строгости доказывает, что в мелкой яме *всегда* имеется одно связанное состояние.

Наконец, ответ также подтверждает и общие рассуждения о том, что результат должен быть нечувствителен к деталям потенциала — он зависит только от полного его интеграла. В частности, понимая физический смысл дельта-функции — как произвольный узкий пик с фиксированной нормировкой и шириной, много меньшей всех релевантных параметров в задаче — можно понять, что любую мелкую яму в одномерье можно заменить на дельта-яму с сохранением нормировки $U(x) \mapsto \delta(x) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx$, и такая замена сохранит основные физические результаты (вид волновой функции, уровень энергии, и т.п.). Это привносит дополнительный смысл в задачу с дельта-ямой — ведь ясно, что в природе дельта-функциональных потенциалов не бывает — но такой потенциал идеально аппроксимирует мелкую яму.

Импульсное представление

Поучительно решить задачу о мелкой яме, используя импульсное представление. Во-первых, оно позволяет обобщить результат на пространство произвольной размерности (и не обязательно на сферически симметричные потенциалы); во-вторых — не требует априори непонятного предположения $|E| \ll U_0$. В этом разделе мы положим $\hbar = 1$.

УШ в импульсном представлении Чтобы записать уравнение Шрёдингера в импульсном представлении, необходимо его спроецировать на бра-вектор $\langle \mathbf{p} |$, то есть рассмотреть $\langle \mathbf{p} | \hat{H} | \psi \rangle = E \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$. Кинетическая энергия в таком случае запишется тривиально — этот оператор *диагонален* в импульсном представлении:

$$\langle \mathbf{p} | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi \rangle = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi(\mathbf{p}) \quad (8)$$

Потенциальная энергия не является диагональным оператором; поэтому нам пригодятся её матричные элементы в этом базисе. Стандартный способ перехода между представлениями — вставление «разложения единиц» по базису, в котором мы знаем как действует оператор, в данном случае — в координатном базисе:

$$\langle \mathbf{p} | U(\hat{x}) | \mathbf{p}' \rangle = \langle \mathbf{p} | U(\hat{x}) \underbrace{\int dx |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|}_{\mathbb{I}} | \mathbf{p}' \rangle = \int dx U(\mathbf{x}) \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle = \int dx U(\mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')x} = U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}, \quad (9)$$

⁶Этот способ изложен в [ЛЛ, глава 6 «Теория возмущений», пар. 45 «Потенциальная энергия как возмущение», задачи 1 и 2]

⁷Это, конечно, требует достаточно быстрого спада потенциала на бесконечности, и, разумеется, сходимости соответствующего интеграла

из чего мы заключаем, что эти матричные элементы тождественно совпадают с преобразованием Фурье от потенциала. В таком случае, потенциальная энергия записывается в импульсном представлении в следующем виде:

$$\langle \mathbf{p} | U(\hat{\mathbf{x}}) | \psi \rangle = \langle \mathbf{p} | U(\hat{\mathbf{x}}) \underbrace{\int (d\mathbf{p}') | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' |}_{\hat{\mathbb{I}}} | \psi \rangle = \int (d\mathbf{p}') U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \psi(\mathbf{p}'), \quad (10)$$

где введено удобное обозначение $(d\mathbf{p}) \equiv d^d \mathbf{p} / (2\pi)^d$. Полученный объект называется свёрткой двух функций⁸. Таким образом, уравнение Шрёдингера в импульсном представлении записывается в следующем виде:

$$\boxed{\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi(\mathbf{p}) + \int (d\mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}') U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} = E \psi(\mathbf{p})} \quad (11)$$

Вместо дифференциального уравнения, которым является уравнение Шрёдингера в координатном представлении, мы получили интегральное уравнение. Тем не менее, это уравнение иногда оказывается решать проще — и мелкая яма является одним из ключевых тому примеров.

Мелкая яма в импульсном представлении Из общих рассуждений мы понимаем, что масштаб волновой функции в координатном представлении — большой масштаб $\kappa^{-1} \gg a$ — что из соотношения неопределённостей означает, что в импульсном представлении, напротив, волновая функция $\psi(\mathbf{p})$ является локализованной вблизи нуля на малом масштабе $\sim \kappa$. С другой стороны, масштаб $U(\mathbf{x})$ — это $a \ll \kappa^{-1}$; в свою очередь, масштаб $U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ — это большой масштаб a^{-1} . Благодаря большой разнице в масштабах, в свёртке $\int (d\mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}') U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ основной вклад в интеграл приходит с $|\mathbf{p}'| \lesssim \kappa$, на котором функция $U_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}$ меняется слабо — поэтому её можно вынести за интеграл как «медленную огибающую», положив в ней $\mathbf{p}'$ нулём. Это приводит нас к следующему приближённому уравнению:

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi(\mathbf{p}) + U_p \int (d\mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}') = E \psi(\mathbf{p}) \Rightarrow \psi(\mathbf{p}) = -\frac{U_p}{-E + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} \int (d\mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}') \quad (12)$$

(отметим, что поскольку мы имеем дело с ямой, то потенциал $U(x) < 0$; и поскольку мы имеем дело со связанным состоянием, то $E = -|E| < 0$). Данное уравнение — алгебраическое, ведь в правой части стоит интеграл от волновой функции, который является константой. Последнее упрощение можно сделать, заметив, что в произведении перед интегралом, опять-таки, U_p является медленной огибающей, а $(|E| + \mathbf{p}^2/2m)^{-1}$ — относительно быстро затухающей функцией, посему можно вообще положить $p = 0$. Наконец, проинтегрировав получившееся уравнения по $(d\mathbf{p})$ и сократив на интеграл от волновой функции, мы получаем следующее *уравнение самосогласования* — которое является уравнением на допустимые уровни энергии:

$$|U_{\mathbf{p}=0}| \int \frac{(d\mathbf{p})}{|E| + \frac{\mathbf{p}^2}{2m}} = 1 \quad (13)$$

Данное уравнение устроено следующим образом. Перед интегралом стоит Фурье-компонента потенциала, которая, в мере мелкости ямы, ожидается в каком-то смысле маленькой⁹. Поэтому единственная возможность удовлетворить этому уравнению — сделать интеграл пропорционально большим; при этом единственный параметр, который мы можем менять — это энергия $|E|$; и по мере уменьшения энергии, интеграл увеличивается. Дальнейший анализ мы будем проводить уже для конкретного случая пространства различной размерности.

Размерность $d = 1$ При буквально нулевой энергии, этот интеграл расходится степенным образом на малых импульсах, и сходится на больших¹⁰ — поэтому ожидается степенная зависимость от энергии. Подбирая достаточно маленькую энергию, можно прийти к тому, что знак равенства будет иметь место. В действительности же, этот интеграл, разумеется, считается точно:

$$|U_{\mathbf{p}=0}| \sqrt{\frac{m}{2|E|}} = 1 \Rightarrow |E| = \frac{m}{2\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx \right|^2 \quad (14)$$

Получающаяся энергия в точности воспроизводит результат, выписанный выше (7).

⁸При преобразовании Фурье произведение функций переходит в свертку Фурье-образов (и наоборот), что мы здесь и наблюдаем.

⁹«В каком-то смысле» — потому что, конечно, размерные величины, коими являются как Фурье от потенциала, так и интеграл, сравнивать нельзя

¹⁰Расходимость на малых импульсах обычно называют *инфракрасной* расходимостью, а на больших — *ультрафиолетовой*.

Размерность $d = 2$ Интеграл расходится логарифмически на малых и на больших импульсах. На больших импульсах очевидным образом интеграл нужно обрезать на масштабах $\sim 1/a$, поскольку это уравнение было выведено именно в таком предположении (это позволило нам заменить $U_{\mathbf{p}}$ на $U_{\mathbf{p}=0}$; и поскольку интеграл логарифмический, то он нечувствителен к этой обрезке — она меняет лишь константу под логарифмом), а на маленьких — масштабом $\sqrt{2mE}$; сингулярность на малых энергиях оказывается слабой, логарифмической. Поэтому чтобы сделать левую часть порядка единицы, уровень энергии *ну очень маленьким*. Приступим теперь к непосредственному вычислению:

$$\int \frac{d^2 \mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{1}{|E| + \frac{p^2}{2m}} = \int \frac{2\pi p dp}{4\pi^2} \frac{1}{|E| + \frac{p^2}{2m}} \approx \frac{m}{\pi} \int_{\sim \sqrt{mE}}^{\sim 1/a} \frac{dp}{p} = \frac{m}{2\pi} \ln \frac{\#}{ma^2|E|} \quad (15)$$

Точность этого выражения следующая: число перед логарифмом определено точно, а в силу неточности при обрезании, число под логарифмом ($\#$) неизвестно. Для его нахождения нужно решать уравнение Шрёдингера точно; это число уже определяется явным видом потенциала. Тем самым, решая уравнение самосогласования, мы получаем (восстанавливая опять $\hbar$ по размерности):

$$|E| = \# \frac{\hbar^2}{ma^2} \exp \left(-\frac{2\pi\hbar^2}{m} \left| \int U(\mathbf{r}) d^2 \mathbf{r} \right|^{-1} \right) \quad (16)$$

Таким образом, мы определили уровень энергии в мелкой двумерной яме с экспоненциальной точностью; и этот уровень оказывается действительно *экспоненциально* мелким. Ведущая асимптотика даётся этой самой экспонентой, которая может быть оценена как $\exp(-\frac{\hbar^2/ma^2}{U_0}) \lll 1$. Число же в предэкспоненте таким способом определить нельзя.

Размерность $d \geq 3$ Исследуемый интеграл вообще не расходится на малых импульсах, поэтому он практически не зависит от энергии. На больших импульсах он может быть обрезан на масштабе $\sim 1/a$; тем самым, весь интеграл оценивается как

$$\int \frac{(d\mathbf{p})}{|E| + \frac{p^2}{2m}} \sim ma^{2-d} \quad (17)$$

С другой стороны, $U_{\mathbf{p}=0} \sim U_0 a^d$; тем самым вся комбинация имеет порядок $\frac{U_0}{\hbar^2/ma^2} \ll 1$. Из-за слабой чувствительности интеграла к изменению энергии, сделать это выражения порядка единицы изменяя энергию, невозможно и уравнение самосогласования не имеет решений. Из чего мы заключаем, что в старших размерностях в мелкой яме нет связанных состояний.

Выводы Во-первых, мы получили, что сколь бы мелкой яма ни была, в размерности $d = 1$ и $d = 2$ в ней всегда имеются связанные состояния, соответствующие дискретному спектру гамильтониана; причём в размерности $d = 2$ уровень экспоненциально мелкий. В размерности $d \geq 3$ в мелкой яме уровней энергии нет.

Список литературы

[ЛЛ] Ландау, Лифшиц, курс теоретической физики, том 3 «Квантовая механика (нерелятивистская теория)», 5-е изд. (2002)