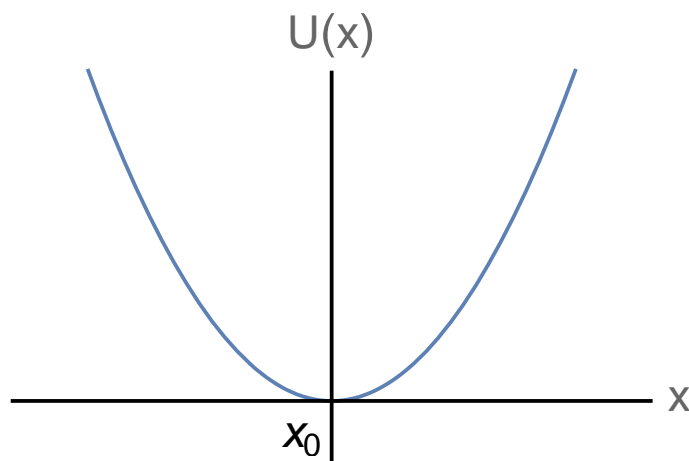


### Квантовий гармонічний осцилятор (лінійний осцилятор)

Малі гармонічні коливання зустрічаються у всіх розділах фізики. Розглянемо наближено рух у полі потенціальної ями поблизу точки стійкої рівноваги за умови, що розкладання  $U(x)$  має вигляд (див. рис.)



$$U(x) \approx U(x_0) + \left( \frac{dU}{dx} \right)_0 (x - x_0) + \frac{1}{2} \left( \frac{d^2U}{dx^2} \right)_0 (x - x_0)^2; \quad \left( \frac{dU}{dx} \right)_0 = 0; \quad \left( \frac{d^2U}{dx^2} \right)_0 = k > 0.$$

Прикладами малих коливань є: коливання атомів у молекулі, тепловий рух у кристалах. Гармонічні коливання, вони ж малі коливання, вони ж лінійні коливання. Це малі коливання поблизу положення стійкої рівноваги в гармонічному наближенні, якщо потенціальна енергія має мінімум у точці  $x=x_0$  і розкладання поблизу точки мінімуму починається із квадратичного по  $x-x_0$  доданка. Вважаємо далі для зручності  $U_0=0, x_0=0$

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}; \quad \omega^2 = \frac{k}{m}.$$

$\omega^2$  – власна частота (відома із класичної механіки):

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0; \quad \omega^2 = \frac{k}{m} \text{ – класичне рівняння малих коливань.}$$

Вирішуємо стаціонарне РШ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = E\psi(x).$$

Ніяких особливостей потенціальна енергія не має, тому до ХФ пред'являється тільки умова згасання при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Зручно перейти до безрозмірних змінних

$$-\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)x^2\psi(x) = \left(\frac{2E}{\hbar\omega}\right)\psi(x).$$

$$z = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x; \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}.$$

$$\psi''(z) + (2\varepsilon - z^2)\psi(z) = 0. \quad (1)$$

Розглядаємо граничний випадок великих по модулю значень  $z$ , щоб знайти асимптотику ХФ. Наближене РШ

$$\psi''(z) - z^2\psi(z) \approx 0$$

вирішуємо наближено, тому відкинемо деякі доданки, як показано нижче. Шукаємо розв'язок у вигляді

$$\psi \approx e^{\alpha z^2}; \quad \psi' \approx 2\alpha z e^{\alpha z^2}; \quad \psi'' \approx [4\alpha^2 z^2 + \cancel{2\alpha}] e^{\alpha z^2};$$

$$(4\alpha^2 - 1)z^2 \approx 0; \quad \alpha = \pm \frac{1}{2};$$

Вибираємо тільки  $\alpha = -\frac{1}{2}$  з урахуванням умови згасання ХФ при  $z \rightarrow \pm\infty$ .

З урахуванням асимптотики  $\psi(z) \sim \exp(-z^2/2)$  розв'язок точного РШ (1) шукаємо у вигляді

$$\psi(z) = e^{-\frac{z^2}{2}} f(z)$$

Обчислюємо другу похідну

$$\psi' = -ze^{-\frac{z^2}{2}} f(z) + e^{-\frac{z^2}{2}} f'(z);$$

$$\psi'' = \left[ (z^2 - 1)f(z) - 2zf'(z) + f''(z) \right] e^{-\frac{z^2}{2}}.$$

Отримаємо рівняння для функції  $f(x)$ :

$$f''(z) - 2zf'(z) + (2\varepsilon - 1)f(z) = 0. \quad (2)$$

Рівняння (2) – це рівняння для поліномів Ерміта. Його розв'язок шукаємо у вигляді полінома по степенях  $z$

$$\begin{aligned}
f(z) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k \Big| \times (2\varepsilon - 1); \\
f'(z) &= \sum_{k=0}^{\infty} k a_k z^{k-1} \Big| \times (-2z); \\
f''(z) &= \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k z^{k-2} = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k z^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1) a_{k+2} z^k \Big| \times 1; \\
&\sum_{k=0}^{\infty} [(k+2)(k+1) a_{k+2} - (2k+1-2\varepsilon) a_k] z^k = 0; \\
a_{k+2} &= \frac{(2k+1-2\varepsilon)}{(k+2)(k+1)} a_k. \tag{3}
\end{aligned}$$

З (3) видно, що зв'язані між собою тільки  $a_k$  з  $k$  однакової парності. Два коефіцієнти  $a_0$  та  $a_1$  – це довільні сталі. Як і повинно бути для лінійного диференціального рівняння другого порядку, їх дві:  $a_0$  та  $a_1$ . Досліджуємо асимптотичну поведінку (3) при  $k \gg 1$ . Наприклад, для парних  $k = 2l$  маємо

$$\begin{aligned}
a_{k+2} &\approx \frac{2}{k} a_k = \frac{2}{2l} a_{2l} = \frac{1}{l} a_{2l} = \frac{1}{l(l-1)} a_{2(l-1)} = \dots = \frac{1}{l!} a_0; \\
f(z) &\approx a_0 \left( 1 + z^2 + \frac{1}{2!} z^4 + \dots + \frac{1}{l!} z^{2l} + \dots \right) = a_0 e^{z^2}.
\end{aligned}$$

ХФ  $\psi(z) \approx a_0 e^{+\frac{z^2}{2}} \rightarrow \infty$ , if  $z \rightarrow \pm\infty$ ! Ряд треба обірвати, щоб задовольнити умові скінченності ХФ при  $z \rightarrow \pm\infty$ .

Нехай при  $k = n$   $a_n \neq 0$ , а  $a_{n+2} = 0$ . З рекурентного співвідношення (3) знаходимо спектр можливих значень енергії

$$2n + 1 - 2\varepsilon = 0; \quad \varepsilon = n + \frac{1}{2};$$

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

Стану з найменшою енергією відповідає  $n = 0$ . Енергія «нульових» коливань

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Поліноми Ерміта та деякі рекурентні співвідношення та інтеграли:

$$H_n''(z) - 2zH_n'(z) + 2nH_n(z) = 0;$$

$$a_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+2)(k+1)} a_k;$$

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z^2}) = (2z)^n - \frac{n(n-1)}{1} (2z)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{1 \cdot 2} (2z)^{n-4} - \dots;$$

$$H_0 = 1; \quad H_1 = 2z; \quad H_2 = 4z^2 - 2; \quad H_3 = 8z^3 - 12z; \quad H_4 = 16z^4 - 48z^2 + 12;$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_m(z) H_n(z) dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}.$$

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x).$$

Нормована на одиницю ХФ:

$$\psi_n(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right). \quad (4)$$

Енергія:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

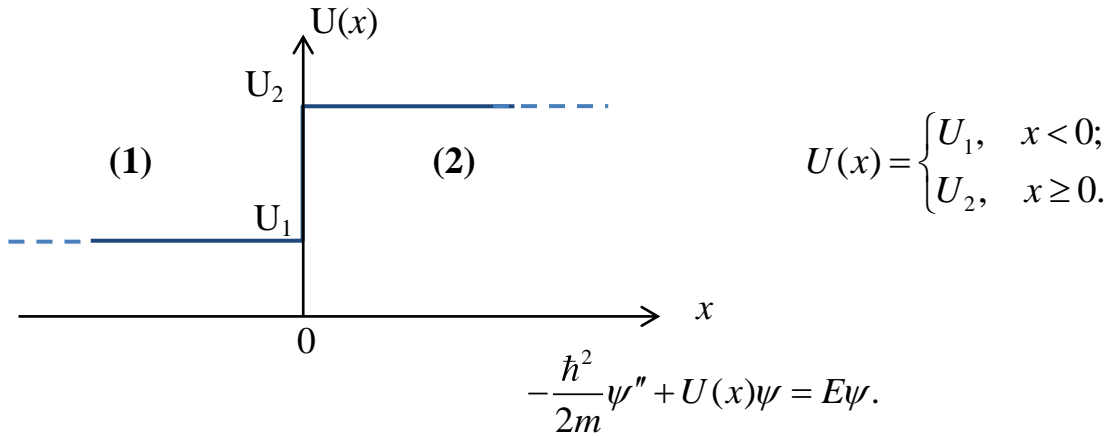
«Нульові коливання» відбуваються при  $n=0$  в основному стані. ХФ не звертається у нуль при  $n=0$  усередині ями жодного разу, при  $n=1$  звертається в нуль один раз, при  $n=2$  – два рази і т.д. Число нулів хвильової функції дорівнює квантовому числу. Це загальна властивість одномірного руху. Це і є **осциляційна теорема: число нулів ХФ усередині ями дорівнює квантовому числу.**

**Дуже важливо, що ХФ відмінна від нуля й у класично недоступній області, у якій кінетична енергія класичної частинки від'ємна.**

## **ВІДБИТТЯ ТА ПРОХОДЖЕННЯ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦІАЛЬНИЙ БАР'ЄР**

### **Прямокутна стінка (Potential Step)**

У класичній механіці частинка рухається тільки в області  $E - U(x) \geq 0$ , тобто безперешкодно проходить над бар'єром зі зменшеною кінетичною енергією, а при  $E - U(x) < 0$  відбивається повністю від стінки.



На рис. вибрали  $0 < U_1 < U_2$  та виділили 2 області, у яких РШ має різний вигляд, тому що в точці  $x=0$  стрибком змінюється потенціальна енергія. У РШ входить друга похідна від ХФ. У точці  $x=0$  вона має кінцевий стрибок. Отже, перша похідна в цій точці змінюється безперервно. ХФ – завжди безперервна. Маємо такі граничні умови в точці стрибка (індексами 1 і 2 відзначили ХФ в областях 1 і 2 відповідно)

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \quad (6)$$

Плюс умови скінченності ХФ при  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Розглядаємо окремо два випадки: а).  $U_1 < E < U_2$  і б) Енергія частинки вище висоти сходинок  $E > U_2$ .

Спочатку вивчимо **тунельний ефект – проникнення квантової частинки в класично недоступну область  $U_1 < E < U_2$ .** (випадок (а))

$$\begin{aligned} (1) \quad \psi'' + k_1^2\psi &= 0; \quad k_1^2 = \frac{2m(E - U_1)}{\hbar^2}; \\ (2) \quad \psi'' - \kappa_2^2\psi &= 0; \quad \kappa_2^2 = \frac{2m(U_2 - E)}{\hbar^2}. \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \\ \psi_2 = \cancel{A_2 e^{\kappa_2 x}} + B_2 e^{-\kappa_2 x}; \quad A_2 = 0! \end{cases}$$

Скінченність ХФ при  $x \rightarrow +\infty$  вимагає, щоб  $A_2 = 0$ . Умова скінченності ХФ при  $x \rightarrow -\infty$  виконана. автоматично Залишається 3 невідомих коефіцієнта та 2 граничних умови:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = B_2; \\ ik_1(A_1 - B_1) = -\kappa_2 B_2; \end{cases} \quad \begin{cases} B_1 - B_2 = -A_1; \\ B_1 + i \frac{\kappa_2}{k_1} B_2 = A_1. \end{cases}$$

$$\psi_1 = A_1 \left( e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2} e^{-ik_1 x} \right) = A_1 \left( e^{ik_1 x} + e^{-ik_1 x + \delta} \right);$$

$$\psi_2 = \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa_2} A_1 e^{-\kappa_2 x}; \quad \left| \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2} \right| = 1; \quad (8)$$

$$e^{i\delta} = \cos \delta + i \sin \delta = \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2}; \quad \operatorname{tg} \delta = \frac{2k_1 \kappa_2}{k_1^2 - \kappa_2^2}.$$

З (3) видно, що частинка проникає в класично недоступну область із імовірністю

$$|\psi_2|^2 \sim \frac{k_1^2}{(k_1^2 + \kappa_2^2)} e^{-2\kappa_2 x},$$

а відбита хвиля має зміщення фази  $\delta$  щодо падаючої хвилі.

Глибина проникнення  $\Delta x \sim 1/\kappa_2$ . Зі співвідношення невизначеності:

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar; \quad \Delta p \gtrsim \hbar \kappa; \quad \Delta E_{kin} \sim \frac{\Delta p^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} > U_2 - E.$$

Невизначеність кінетичної енергії більше, ніж та енергія, якої не вистачає, щоб подолати бар'єр при  $U_1 < E < U_2$ . Частинка проникає «за бар'єр», але потоку частинок немає

$$D = 0, \quad R = 1.$$

У випадку сходинки (бар'єра нескінченної ширини) є повне відбиття хвилі. Амплітуди у падаючої та відбитої хвиль однакові. Спектр енергій безперервний. Рух інфінітний (обмежений тільки з однієї сторони). Виродження рівнів немає.

**Надбар'єрне відбиття  $E > U_2$ .** (випадок (б))

$$(1) \quad \psi'' + k_1^2 \psi = 0; \quad k_1^2 = \frac{2m(E - U_1)}{\hbar^2};$$

$$(2) \quad \psi'' + k_2^2 \psi = 0; \quad k_2^2 = \frac{2m(E - U_2)}{\hbar^2}.$$

Розв'язку в обох областях мають однаковий вигляд, але з різними  $k_{1,2}$

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \\ \psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}; \end{cases}$$

і задовольняють автоматично умові скінченності на плюс-мінус нескінченності. 4 довільних коефіцієнта зв'язано 2 граничними умовами. Це означає, що 2 коефіцієнта залишаються довільними. Даному значенню енергії буде відповідати 2 різні ХФ. Рух є інфінітним в обидві сторони. Рівні енергії в цій області енергій дворазово вироджені. Не обмежуючи загальності, можемо вважати, що  $B_2 = 0$  – немає потоку частинок праворуч від сходинки. Із граничних умов (1) випливає, що

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2; \\ A_1 - B_1 = \frac{k_2}{k_1} A_2; \end{cases} \quad \begin{cases} -B_1 + A_2 = A_1; \\ B_1 + \frac{k_2}{k_1} A_2 = A_1; \end{cases} \quad A_2 = \frac{2}{1 + \frac{k_2}{k_1}}; \quad B_1 = \frac{1 - \frac{k_2}{k_1}}{1 + \frac{k_2}{k_1}}.$$

Визначимо коефіцієнт прозорості, як

$$D = \frac{|\vec{j}_{\text{прош.}}|}{|\vec{j}_{\text{пад.}}|}$$

та коефіцієнт відбиття, як

$$R = \frac{|\vec{j}_{\text{відб.}}|}{|\vec{j}_{\text{пад.}}|}$$

Знаходимо коефіцієнт прозорості та коефіцієнт відбиття

$$D = \frac{k_2 |A_2|^2}{k_1 |A_1|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}; \quad R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

Граничні випадки:  $E \rightarrow U_1 + 0, D \rightarrow 0, R \rightarrow 1; \quad E \rightarrow \infty, D \rightarrow 1, R \rightarrow 0.$

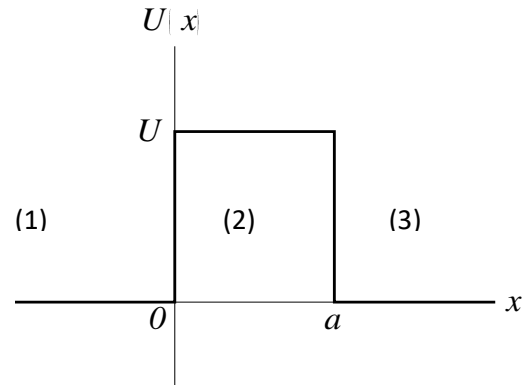
Коефіцієнти прозорості та відбиття не залежать від напрямку потоку частинок (ліворуч праворуч або праворуч ліворуч). Це справедливо завжди, а не тільки для сходинки.

In English: Incidental wave, transmitted wave, reflected wave  
Transmission coefficient, Reflection coefficient

## Прямокутний бар'єр (Rectangular barrier) кінцевої ширини.

Розглянемо прямокутний потенційний бар'єр (див. рис.). Його потенціальна енергія запишеться, як

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x > a \end{cases}$$



Розглянемо спочатку тунелювання через бар'єр при  $0 < E < U$ .

У першій та третій областях маємо РШ для вільної частинки:

$$(1), (3) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \psi'' + k^2\psi = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

і такі його розв'язки:

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ \psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \end{cases}$$

В області (2) маємо рівняння:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = E\psi, \quad \psi'' - \kappa^2\psi = 0, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}.$$

і наступний розв'язок:  $\psi_2(x) = A_2 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x}$ . У ХФ в області (2) можна й потрібно залишити обидва коефіцієнта, тому що це кінцева область  $0 \leq x \leq a$ . 6 коефіцієнтів зв'язані 4 граничними умовами в точках 0 та  $a$ :

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0); \quad \psi_2(a) = \psi_3(a); \quad \psi_2'(a) = \psi_3'(a).$$

На нескінченності умови  $\psi(x \rightarrow \pm\infty)$  – скінченна – виконані автоматично. Як і раніше будемо вважати, що немає потоку частинок справа від бар'єра, і покладемо  $B_3 = 0$ .



$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & x < 0 \\ A_2 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x} & 0 \leq x \leq a \\ A_3 e^{ik(x-a)} & x > a \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2; \\ ik(A_1 - B_1) = \kappa(A_2 - B_2); \end{cases} \quad \begin{cases} A_2 e^{ka} + B_2 e^{-ka} = A_3 e^{ika}; \\ \kappa(A_2 e^{ka} - B_2 e^{-ka}) = ikA_3 e^{ika}. \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_2 + B_2 = A_1 + B_1; \\ A_2 - B_2 = \frac{\kappa}{ik}(A_1 - B_1); \end{cases} \quad \begin{cases} A_2 e^{ka} + B_2 e^{-ka} = A_3; \\ A_2 e^{ka} - B_2 e^{-ka} = \frac{ik}{\kappa} A_3. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) A_1 + \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) B_1 = \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{ka} A_3; \\ \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) A_1 + \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) B_1 = \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{-ka} A_3; \end{cases}$$

$$\frac{2ik}{\kappa} A_1 = \left( \frac{k^2 - \kappa^2}{\kappa^2} \operatorname{sh} \kappa a + \frac{2ik}{\kappa} \operatorname{ch} \kappa a \right) A_3;$$

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k^2}{\kappa^2} \frac{1}{\left(\frac{k^2 - \kappa^2}{\kappa^2}\right)^2 \operatorname{sh}^2 \kappa a + \frac{4k^2}{\kappa^2} \operatorname{ch}^2 \kappa a}; \quad \operatorname{ch}^2 \kappa a = 1 + \operatorname{sh}^2 \kappa a;$$

$$D = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa}\right)^2 \operatorname{sh}^2 \kappa a}. \quad (4)$$

Для слабо прозорого бар'єра  $\kappa a \gg 1$ ,  $\operatorname{sh} \kappa a \approx \frac{1}{2} e^{\kappa a}$ , тому коефіцієнт прозорості

$$D \approx \frac{16k^2 \kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa a}.$$

Нехай  $\kappa \rightarrow 0$  в (4). До якого значення прагне коефіцієнт прозорості?

Відповідь:  $\left( D \rightarrow \frac{1}{1 + \frac{(ka)^2}{4}} \right)$

З тунельним проходженням через бар'єр зв'язаний альфа-розпад, явище спонтанного розпаду ядер, холодна емісія електронів з поверхні металу в сильному електричному полі.

**Надбар'єрне відбиття.** При  $E > U$  в другій області розв'язок має вигляд

$$\psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad \kappa = ik_2.$$

Коефіцієнт прозорості одержимо заміною в (4)  $\kappa \rightarrow ik_2$

$$D = \frac{1}{1 + \left( \frac{k^2 - k_2^2}{2kk_2} \right)^2 \sin^2 k_2 a}. \quad (10)$$

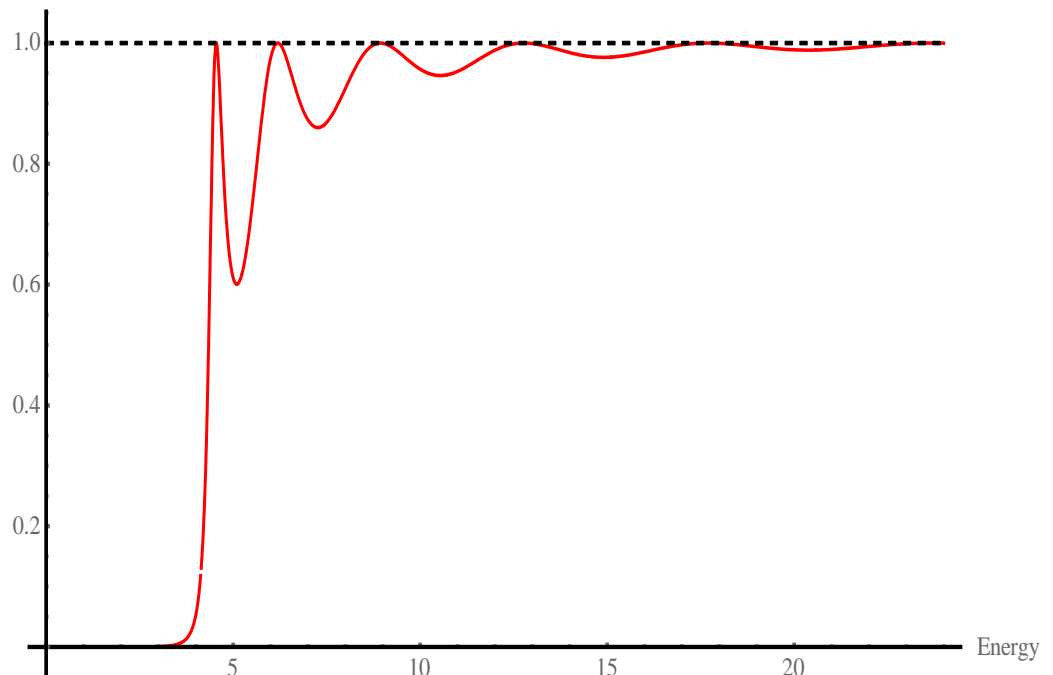
При надбар'єрному відбитті можливо повне (резонансне) проходження за умови, що в (5) знаменник дорівнює 1:

$$\sin k_2 a = 0, \quad k_2 a = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E_n = U + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}; \quad D = 1; \quad R = 0. \quad (11)$$

Віртуальні рівні – повна прозорість прямокутного бар'єра при нескінченному дискретному наборі енергій. На рис. Нижче показаний графік залежності коефіцієнту прозорості прямокутного бар'єра від енергії в довільних одиницях.

Transmission coefficient for rectangular barrier



## Загальні властивості одновимірного руху

При 1D енергетичний спектр може бути як дискретним, так і безперервним.

Якщо спектр **дискретний**, то ХФ квадратично інтегровальна на дійсній осі

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1, \Rightarrow, \psi(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0. \text{ Рух є } \mathbf{фінітним}. \text{ Це випадок}$$

потенціальної ями. Рівні енергії невироджені.

**В разі дискретного спектру виконується осциляційна теорема:** число вузлів (нулів) ХФ = номеру рівня ( $n=0,1,2,\dots$ )

Якщо частинка може рухатися **інфінітно**, то спектр енергій **безперервний**, а ХФ квадратично неінтегровальна. Це випадок тунелювання, а також надбар'єрного відбиття, як від ями, так і від бар'єра (сходинки).

Якщо рух інфінітний в одному напрямку, то рівні енергії невироджені. Якщо рух інфінітний у двох напрямках, то рівні енергії дворазово вироджені.