УДК 539.17

О ФОРМУЛАХ ПОДОБИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ НА ОСНОВЕ СВОЙСТВА ИНВАРИАНТНОСТИ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Н. Б. Бабичев, А. А. Севастьянов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Получены формулы подобия некоторых квантово-механических процессов.

Ключевые слова: теория подобия, волновая функция, уравнение Шредингера.

Введение

В статьях [1, 2] представлены элементы теории подобия тепловых и волновых процессов, подчиняющихся соответствующим дифференциальным уравнениям математической физики (см., например, [3]).

В. П. Незнамов обратил внимание на возможность разработки теории подобия квантово-механических процессов. Эту задачу предстоит решить в дальнейшем. Ниже приведены формулы подобия, справедливые в стационарных случаях распределения частиц в потенциальных ямах.

1. Случай произвольной зависимости потенциала *U* от координат $\vec{r}$

Примем простое по своему виду уравнение Шредингера (см. [4])

$$\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi(\vec{r})}{\partial\vec{r}^2}+\left[E-U(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})=0, \qquad (1)$$

$\psi(\vec{r})$ – волновая функция, m и E – соответственно масса частицы и ее энергия.

В уравнении (1) осуществим преобразования подобия

$$\vec{r}\to\vec{r}'=\sqrt{\frac{m}{m'}}\vec{r} \qquad (2)$$

и учтем, что

$$\frac{d}{d\vec{r}}=\sqrt{\frac{m}{m'}}\frac{d}{d\vec{r}'}, \qquad (3)$$

$$\frac{d^2}{d^2\vec{r}}=\frac{m}{m'}\frac{d^2}{d^2\vec{r}'}. \qquad (4)$$

Тогда для штрихованной волновой функции вместо (1) имеем

$$\frac{\hbar}{2m'}\frac{\partial^2\psi'(\vec{r}')}{\partial\vec{r}'^2}+\left[E'-U(\vec{r}')\right]\psi'(\vec{r}')=0. \qquad (5)$$

Чтобы уравнения (1) и (5) по своему виду совпали, должно выполняться следующее соотношение подобия

$$\vec{r}'=\sqrt{\frac{m}{m'}}\vec{r}. \qquad (6)$$

Для волновых функций справедлива формула подобия

$$\psi'(\vec{r}')=C\psi\left(\sqrt{\frac{m}{m'}}\vec{r}\right). \qquad (7)$$

Нормировочную константу C примем равной одной условной единице, что возможно из-за линейности уравнения Шредингера.

Массы частиц в подобных системах изменились, а их энергии связаны следующим образом:

$$E'm'=Em. \qquad (8)$$

Выражение (8) является инвариантом преобразования подобия (2).

2. Случай одномерной прямоугольной ямы

Прямоугольная потенциальная яма изображена на рис. 1.

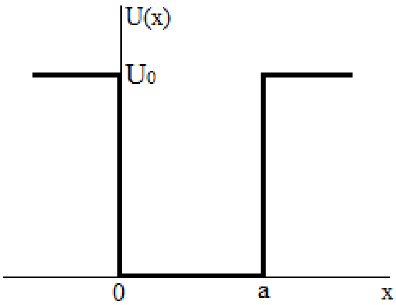

Рис.1. Прямоугольная потенциальная яма

Внутри ямы имеет место следующее уравнения Шредингера:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + k^2 \psi(x) = 0, k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (9)$$

При выполнении инвариантного соотношения

$$x'\sqrt{E' - U_0} = x\sqrt{E - U_0} \quad (10)$$

получается следующая формула подобия для волновых функций частиц с разными энергиями и одинаковыми массами:

$$\psi'(\mathrm{x}') = \psi\left(\sqrt{\frac{E - U_0}{E' - U_0}}x\right). \quad (11)$$

В области за пределами ямы справедливо уравнение

$$\frac{\partial^2 \psi(\mathrm{x})}{\partial x^2} - k^2 \psi(\mathrm{x}) = 0, \mathrm{k} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (12)$$

При $x = 0$ и $x = a$ решения этих уравнений должны сшиваться так, чтобы были непрерывны волновые функции и их первые производные.

Обращающееся на бесконечности в нуль решение уравнения (12) есть

$$\psi(x) = \mathrm{const} \cdot \exp(\mp kx) \quad (13)$$

(знаки минус и плюс относятся соответственно к областям $x > a$ и $x < 0$). Учитывая (13), получаем граничное условие в виде

$$\frac{1}{\psi(x)}\frac{d\psi(x)}{dx} = \mp k. \quad (14)$$

Рассмотрим предельный случай $U_0 \to \infty$. В этом случае требуется найти решение уравнения (9) с граничным условием

$$\psi = 0 \text{ при } x = 0 \text{ и } x = a. \quad (15)$$

Решение будем искать в виде

$$\psi = c\sin(kx + \delta). \quad (16)$$

Условие $\psi = 0$ при $x = 0$ дает $\delta = 0$, а условие на правой границе приводит к равенству $\sin(ka) = 0$, из которого следует $ka = \pi(n+1)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$

Таким образом, в яме рис. 1 частица обладает следующими дискретными уровнями энергии

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n+1)^2. \quad (17)$$

Приведем некоторые результаты, представленные в [4].

В одномерной потенциальной яме любой формы всегда имеется, по крайней мере один уровень энергии, даже если глубина ямы очень мала, но не равна нулю. Это свойство, однако, специфично только для одномерного случая и не имеет места в случае трехмерной потенциальной ямы (см. подраздел 1).

Если глубина $|U_0|$ такой ямы

$$|U_0| << \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad (18)$$

то в ней нет ни одного дискретного уровня энергии. То есть, если яма недостаточно глубока, то в ней нет связанных состояний (частица не может захватиться ямой). Это чисто квантовый эффект. В рамках классической механики частица может совершать финитное движение в любой потенциальной яме.

3. Движение частиц в гауссовской сферически-симметричной потенциальной яме

В случае гауссовской потенциальной ямы

$$U(r) = U_{\max}\frac{\exp\left[-\alpha\left(r - \frac{R}{2}\right)^2\right] - \exp\left(-\frac{\alpha R^2}{4}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\alpha R^2}{4}\right)}, \quad (19)$$

показанной на рис. 2, уравнение Шредингера, справедливое внутри ямы, приобретает следующий вид:

$$\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \psi(r)}{\partial r^2} + \left[E - U_{\max}\frac{\exp\left[-\alpha\left(r - \frac{R}{2}\right)^2\right] - \exp\left(-\frac{\alpha R^2}{4}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\alpha R^2}{4}\right)}\right]\psi(r) = 0. \quad (20)$$

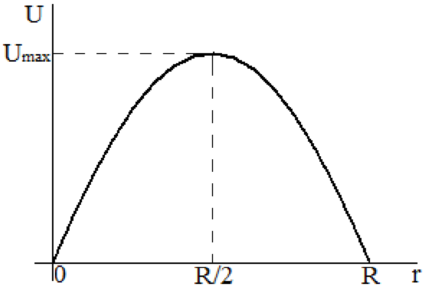

Рис. 2. Гауссова потенциальная яма с радиусом R

Ниже решение уравнения Шредингера за пределами ямы не ищется.

Применив преобразование подобия

$$r \to r' = \sqrt{\frac{\alpha}{\alpha'}} r, \qquad (21)$$

для любой другой частицы с массой m' и энергией $E' = E$ получаем инвариантные условия

$$r' = \sqrt{\frac{\alpha}{\alpha'}} r, \qquad (22)$$

$$R' = \sqrt{\frac{\alpha}{\alpha'}} R, \qquad (23)$$

$$m' = \frac{\alpha'}{\alpha} m, \qquad (24)$$

при выполнении которых волновые функции в подобных системах связаны следующим образом:

$$\psi'(r') = \psi\left(\sqrt{\frac{\alpha}{\alpha'}} r\right). \qquad (25)$$

Заключение

В статье решена поставленная во введении задача о нахождении формул подобия для частиц, захваченных разными потенциальными ямами.

Список литературы

1. Бабичев Н. Б., Севастьянов А. А. Соотношения подобия, вытекающие из уравнения переноса тепла в однородных и профильных системах // ВАНТ. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2014. Вып. 3. С.56–60.

2. Бабичев Н. Б., Севастьянов А. А. Элементы теории подобия волновых процессов // ВАНТ. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2015. Вып. 2. С. 62–64.

3. Арсенин В. Я. Методы математической физики и специальные функции. М.: Наука, 1984.

4. Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М. Краткий курс теоретической физики. Книга 2. Квантовая механика. М.: Наука, 1972.

Статья поступила в редакцию 29.05.2015