Студентов часто смущают задачи с дельта-потенциалом.
Это может быть вот такая дельта-яма:

$$U(x) = U_0\delta(0)$$

На самом деле  в задачах надельта-потенциал нужно вывести одну неочевидную формулу. Зная её, мы будем щёлкать задачи как орешки.

Вопрос: зачем нам нужно выводить эту формулу?
Ответ: в точке с дельта-функцией непрерывна лишь $\Psi(x)$, но не её производная, которая терпит скачок. Т.е. нам нужно получить условие сшивки, связанное со скачком первой производной.

Возьмём стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

Пусть у нас у потенциала $U(x)$ в точке $x = 0$ какая-то дельта-особенность:

$$U(x) = U_0\delta(0) + u(x)$$

Где$u(x)$ – нормальная, непрерывная функция.

Тогда проинтегрируем тождество $U(x)\Psi(x) = \frac{h^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + E\Psi(x)$ от $-\varepsilon$до ε, где ε – предельно короткий участок длины.
Вопрос: Как до этого додуматься: до того, что нужно проинтегрировать?
Ответ: Интегрирование – это единственный способ борьбы с дельта-функциями. Вспомните, что сами дельта-функции смысла не имеют, имеют смыслы интегралы от них с нормальными функциями:

$$\delta(x) - \text{плохо!} \int_a^b \delta(x)f(x)dx = f(0) - \text{хорошо}$$

Так что рефлекс «вижу дельта-функцию – интегрирую» должен быть развит на уровне собачки Павлова.

Итак, интегрируем обе части.

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} U(x)\Psi(x)\,dx = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} U_0\delta(x)\Psi(x)\,dx = U_0\Psi(0)$$

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{h^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}dx = \frac{h^2}{2m} * \left(\frac{d\Psi(\varepsilon)}{dx} - \frac{d\Psi(-\varepsilon)}{dx}\right)$$

(формула Ньютона-Лейбница)

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\Psi(x)\,dx = 0$$

А тут смысл в том, что мы интегрируем конечную функцию по бесконечно короткому отрезку, поэтому интеграл и зануляется.

Подставляем наши результаты:

$$U_0\Psi(0) = \frac{h^2}{2m} * \left(\frac{d\Psi(\varepsilon)}{dx} - \frac{d\Psi(-\varepsilon)}{dx}\right)$$

$$\frac{d\Psi(\varepsilon)}{dx} - \frac{d\Psi(-\varepsilon)}{dx} = \frac{2mU_0}{h^2}\Psi(0)$$

$$\text{скачок } \frac{d\Psi(x)}{dx} = \frac{2mU_0}{h^2}\Psi(0)$$

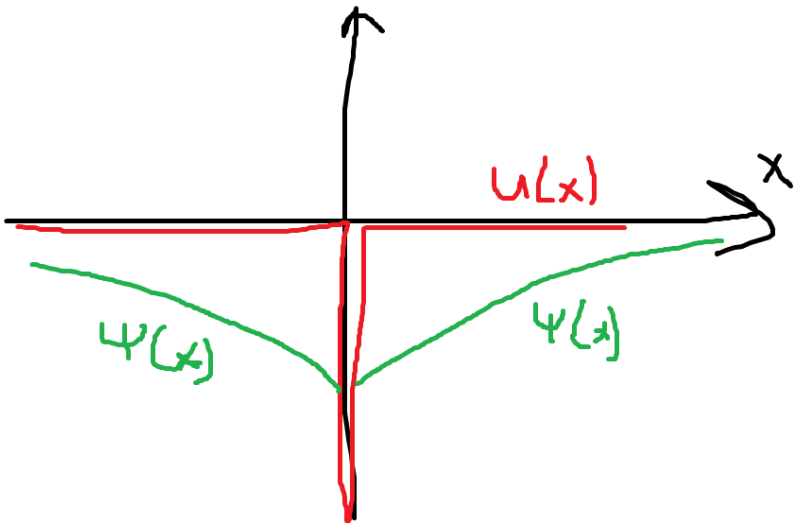
Вот мы и получили искомую формулу! В левой части как раз стоит скачок производной.

Как ею пользоваться?

Пусть у нас

$$U(x) = -U_0\delta(0), U_0 > 0$$

Т.е. бесконечно глубокая яма.




Тогда во всех точках, кроме 0,

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x)$$

Т.к. мы ищем связанные состояния, то E<0. Решение этого дифура:

$$\Psi(x) = Ae^{-æx} + Be^{æx}, æ = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{h}$$

Из физических соображений на обеих бесконечностях $\Psi(x)$ должна стремиться к 0, откуда при $x < 0$ $\Psi(x) = Be^{æx}$, при $x > 0$ $\Psi(x) = Ae^{-æx}$.

Первое условие сшивки на саму Ψ(x):

$$\Psi(-0) = \Psi(+0)$$
$$Be^{æ*0} = Ae^{æ*0}$$
$$A = B$$

откуда при $x < 0$ $\Psi(x) = Ae^{æx}$, при $x > 0$ $\Psi(x) = Ae^{-æx}$.

А вот второе условие уже на скачок производной:

$$\text{скачок } \frac{d\Psi(x)}{dx} = \frac{2m(-U_0)}{h^2}\Psi(0)$$

Обратите внимание на минус в правой части. Он возник, потому что по условию

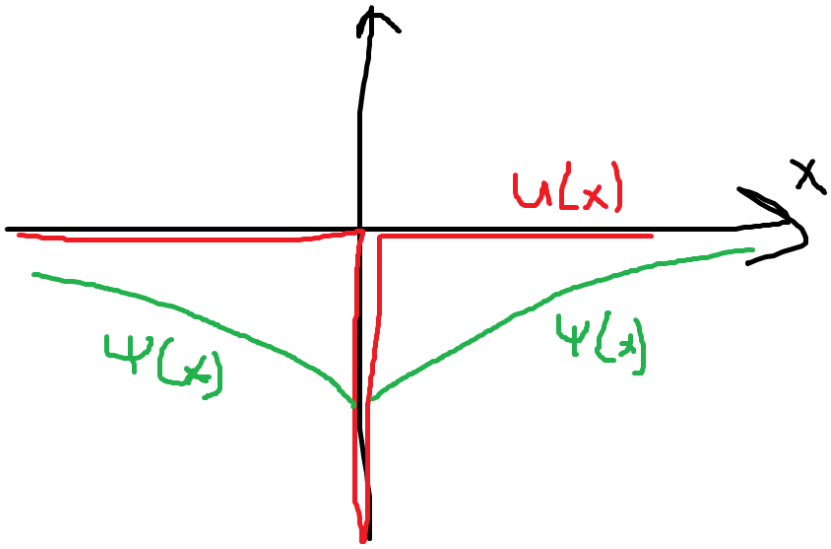
$$U(x) = \text{МИНУС } U_0\delta(0), U_0 > 0$$

И как правило, он будет там возникать, потому нас интересуют дельта-ямы,а не дельта-горы ☺

Справа производная в 0 есть $-Aæe^{-æ*0} = -æA$
Слева производная в 0 есть $Aæe^{æ*0} = æA$
Разность $2æA$.
Подставляем:

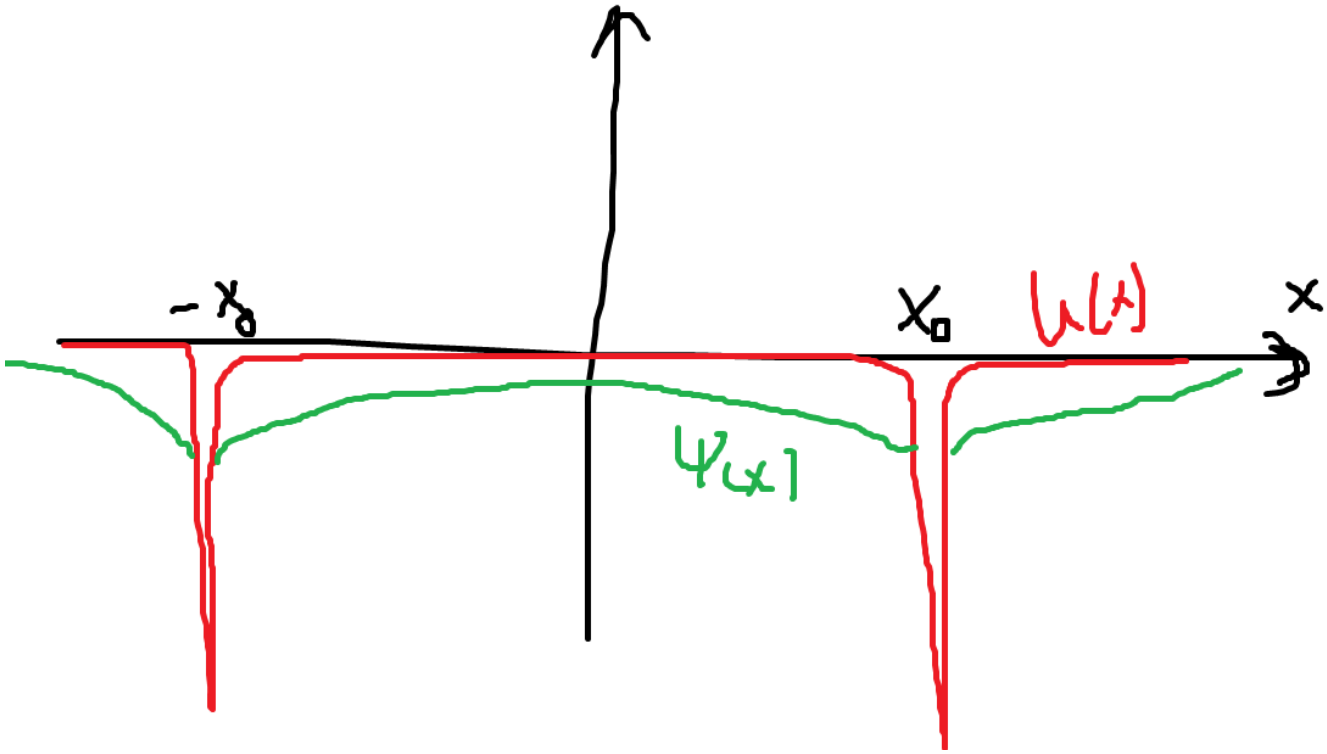
$$2æA = \frac{2mU_0)}{h^2}A$$
$$æ = \frac{mU_0)}{h^2}$$
$$E = -\frac{(æh)^2}{2m} = \frac{mU_0^2}{2h^2}$$

Уровень единственного связанного состояния.
Посмотрите, как выглядит график ВФ:



И мы этот излом, соответствующий скачку производной, явно видим.
В классике бы частица была бы в этой дельта-яме и никуда бы из неё не убежала. Но в квантах, как видно, существует ненулевая плотность поймать частицу и вне ямы.

Аналогично решается задача с двумя одинаковыми дельта-ямами на расстоянии $2x_0$:




Пишем заготовку под ВФ:

$$\begin{cases} x \le -x_0, & \Psi(x) = Ae^{æx} \\ -x_0 \le x \le x_0, & \Psi(x) = Be^{-æx} + Be^{æx} \\ x_0 \le x, & \Psi(x) = Ae^{-æx} \end{cases}$$

(симметрия позволяет сразу заметить равенство неких коэфов)

Подсчитаем два наших условия в точке $x_0$:
Равенство самих Ψ(x): $Be^{-æx_0} + Be^{æx_0} = Ae^{-æx_0} => A = B(1 + e^{2æx_0})$
И на скачок производных:
Производная слева: $\frac{d}{dx}(Be^{-æx} + Be^{æx}) = Bæ(-e^{-æx_0} + e^{æx_0})$
Производная справа: $\frac{d}{dx}(Ae^{-æx}) = -Aæe^{-æx_0}$.
Разность (из правой вычитаем левую!): $-Aæe^{-æx_0} - Bæ(-e^{-æx_0} + e^{æx_0}) = -\frac{2mU_0}{h^2}\Psi(x_0)$. $\Psi(x_0)$ можем взять из любой формулы – например, из правой, где это $Ae^{-æx_0}$.

Получаем систему:

$$\begin{cases} A = B(1+e^{2æx_0}) \\ -Aæe^{-æx_0} - Bæ(-e^{-æx_0} + e^{æx_0}) = -\dfrac{2mU_0}{h^2}Ae^{-æx_0} \end{cases}$$

Которая сводится к

$$-æ(1+e^{2æx_0})e^{-æx_0} - æ(-e^{-æx_0} + e^{æx_0}) = -\frac{2mU_0}{h^2}(1+e^{2æx_0})e^{-æx_0}$$

$$-æ(1+e^{2æx_0}) - æ(-1+e^{2æx_0}) = -\frac{2mU_0}{h^2}(1+e^{2æx_0})$$

$$2æe^{2æx_0} = -\frac{2mU_0}{h^2}(1+e^{2æx_0})$$

$$2æ = -\frac{2mU_0}{h^2}(e^{-2æx_0}+1)$$

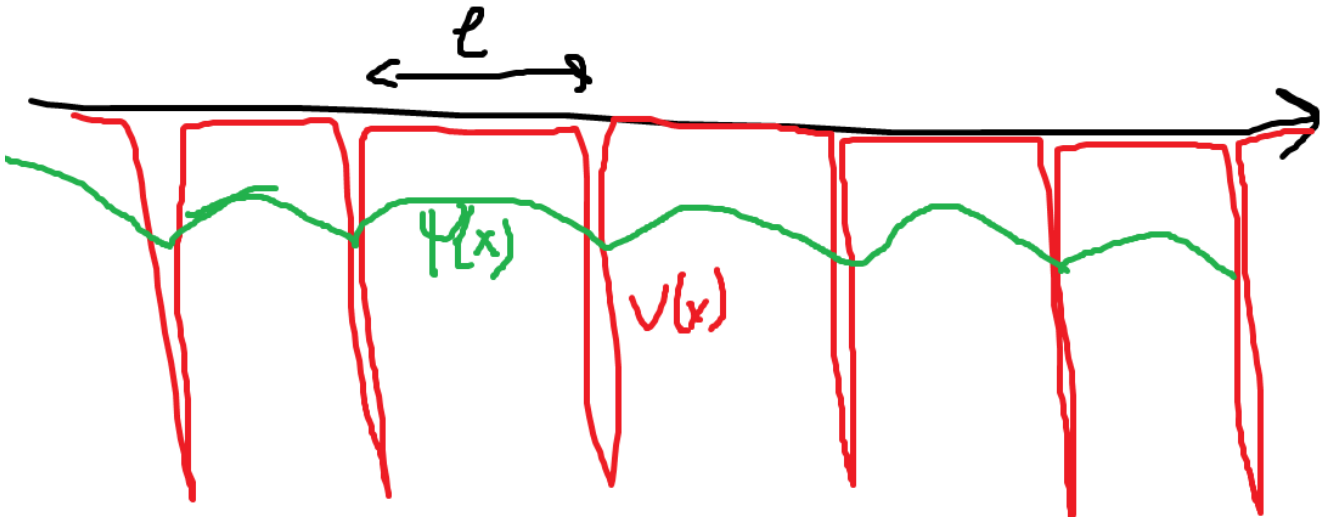
И мы приходим к трансцендентному уравнению на æ.

Вопрос: мы записали условия сшивки только в $x_0$. Нужно ли писать в $-x_0$?
Ответ: в общем случае – да. Общий случай, это когда нет симметрии (ямы разной глубины, например. Тогда

$$\begin{cases} x \le -x_0, & \Psi(x) = Ae^{æx} \\ -x_0 \le x \le x_0, & \Psi(x) = Be^{-æx} + Ce^{æx} \\ x_0 \le x, & \Psi(x) = De^{-æx} \end{cases}$$

И тут надо писать в обеих точках (система получится гораздо круче – ну так и переменных будет больше). Просто в предыдущей задачи мы сразу заметили из симметрии, что C=B, D=A. Тогда в $-x_0$ условие сшивки будет выполнено автоматически.

В заключение гребёнка Дирака: $U(x) = -\sum_{n=-\infty}^{\infty} U_0\delta(x-nl)$




столь любимая на семинарах.

Идея: т.к. потенциал периодичен, то и ВФ периодична с периодом $l$:

$$\Psi(x) = \Psi(x + l)$$

Кстати, это не связанное состояние, т.к. при $x \to \infty$ ВФ не стремится к 0. Тут надо сказать, что квантмех идеально работает для связанных состояний, а вот со свободными не очень. Тут то, что состояние свободное, никак не помешает.

Возьмём произвольный кусок между двумя гребнями. ВФ там можно представить

$$\text{при} -l/2 \le x \le \frac{l}{2} \;\; \Psi(x) = Ae^{-æx} + Be^{æx}$$

Выберем ноль оси абсцисс посередине. Тогда из соображений симметрии A=B, и

$$\text{при} -\frac{l}{2} \le x \le \frac{l}{2} \;\; \Psi(x) = \frac{A}{2}(e^{-æx} + e^{æx}) = Ach(æx)$$

А теперь возьмём кусок справа. Там ВФ будет уже

$$\text{при } \frac{l}{2} \le x \le \frac{3l}{2} \;\; \Psi(x) = Ach(æ(x - l))$$

Для отыскания æ посчитаем разность производных справа слева:

$$Ash\left(æ\left(\frac{l}{2} - l\right)\right) - Ash\left(\frac{æl}{2}\right) = \frac{2m(-U_0)}{h^2} Ach(\frac{æl}{2})$$

$$Ash\left(\frac{æl}{2}\right) = \frac{mU_0}{h^2} Ach(\frac{æl}{2})$$

$$th\left(\frac{æl}{2}\right) = \frac{mU_0}{h^2}$$

$$æ = \frac{2}{l} arcth\left(\frac{mU_0}{h^2}\right)$$