

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Е. Г. Образовский

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-I
для студентов
Китайско-Российского
Института

Учебное пособие

Новосибирск
2018

УДК 530.145

ББК В318

О...

Образовский Е. Г. Квантовая механика-I для студентов
Китайско-Российского Института: Учеб. пособие / Новосиб.
гос. ун-т. ; Новосибирск, 2018. 189 с.

ISBN

В основу издания положены материалы курса лекций, который читается студентам-бакалаврам Китайско-Российского Института в Новосибирском государственном университете. Предназначено для самостоятельной работы студентов. Может быть полезно также преподавателям при подготовке задач для контроля знаний студентов в течение семестра и на экзаменах.

Рецензент

канд. физ.-мат. наук, проф. А. И. Валишев

© Новосибирский государственный
университет, 2018

© Образовский Е. Г. 2018

ISBN

Оглавление

Предисловие	7
I Конспект лекций	8
1. Введение. Происхождение основных квантовых понятий.	8
1.1. Волновые свойства света	8
1.2. Корпускулярные свойства света	10
1.3. Волновые свойства частиц	16
1.4. Дискретность атомных спектров	18
1.5. Излучение черного тела	20
2. Лекция. Принцип неопределенности.	21
2.1. Соотношение неопределенностей Гейзенберга .	21
2.2. Ящик с непроницаемыми стенками	22
2.3. Гармонический осциллятор	22
2.4. Частица в поле тяжести.	22
2.5. Атом водорода	24
3. Лекция. Одномерное уравнение Шредингера.	25
3.1. Ящик с непроницаемыми стенками	26
3.2. δ -потенциал	30
3.3. Доказательство соотношения неопределенностей	31
4. Лекция. Формализм квантовой механики	33
4.1. Основные положения квантовой механики . . .	33
4.2. Теорема вириала	35
4.3. Теорема Паули.	37
5. Лекция. Гармонический осциллятор.	40
5.1. Основное состояние	40

5.2. Операторы рождения и уничтожения	42
6. Лекция. Вариационный метод.	45
6.1. Ящик с непроницаемыми стенками	47
6.2. Частица в поле тяжести	47
7. Лекция. Одномерное рассеяние.	50
7.1. Рассеяние на барьере	50
7.2. Рассеяние на барьере конечной ширины	53
7.3. Рассеяние на δ -потенциале.	55
8. Лекция. Квазиклассическое приближение.	56
8.1. Правила квантования Бора-Зоммерфельда	56
8.2. Проницаемость барьера	60
9. Лекция. Периодический потенциал. Теорема Блоха.	62
9.1. Теорема Блоха	62
9.2. Зонная структура уровней энергии	62
10. Лекция. Момент импульса.	66
10.1. Преобразование волновой функции при поворотах	66
10.2. Коммутационные соотношения для компонент момента импульса	69
11. Лекция. Спин.	72
11.1. Матрицы Паули	73
11.2. Прецессия спина в магнитном поле	78
11.3. Магнитный резонанс	80
12. Лекция. Различные представления уравнений движения.	85
12.1. Представление Шредингера	85

12.2. Представление Гейзенберга	86
12.3. Представление Дирака	89
13. Лекция. Движение в центральном потенциале.	92
13.1. Момент импульса в сферических координатах .	93
13.2. Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции	100
13.3. Приложение: другой вывод вида оператора мо- мента импульса	104
14. Лекция. Атом водорода.	106
14.1. Сферически симметричные решения	107
14.2. Решения с произвольным орбитальным момен- том импульса	110
II Задачи для семинаров	118
15. Происхождение основных квантовых понятий.	118
16. Соотношение неопределенностей.	122
17. Одномерное уравнение Шредингера.	123
18. Формализм квантовой механики	128
19. Гармонический осциллятор.	133
20. Вариационный метод.	138
21. Одномерное рассеяние.	142
22. Квазиклассическое приближение.	145
23. Периодический потенциал. Теорема Блоха.	147

24.Момент импульса.	151
25.Спин.	154
26.Представления Гейзенберга и Дирака	160
27.Атом водорода.	167
28.Движение в центральном потенциале.	172
29.Справочные материалы	179
29.1. Размерность физических величин.	179
29.2. Физические постоянные.	179
29.3. Интегралы.	180
29.4. Дельта-функция Дирака.	180
29.5. Гармонический осциллятор	181
29.6. Спин. Матрицы Паули	181
29.7. Момент импульса.	182
29.8. Атом водорода.	183
30.Словарь терминов	185
31.Список литературы	188

Предисловие

Настоящее пособие написано на основе лекций (и сопровождающих их семинарских занятий), читаемых в течение ряда лет на физическом факультете НГУ для студентов-бакалавров в рамках реализации совместного образовательного процесса в Китайско-Российском институте (КРИ). В предлагаемом учебном пособии представлен материал первой части курса “квантовая механика”, адаптированный для китайских студентов. Достаточно подробно и с привлечением наглядного графического материала представлены основные разделы курса: происхождение основных понятий квантовой механики, уравнение Шредингера для одномерного движения, момент импульса, спин, движение в центральном потенциале, атом водорода. Для каждого раздела приведены примеры подробного решения типовых задач, развивающих навыки обращения с квантовыми понятиями.

Используемые в НГУ пособия по квантовой механике слишком сложны для китайских студентов не только из-за языкового барьера, но и недостаточной подготовки по общей физике и математике, тогда как данное учебное пособие по уровню сложности излагаемого материала и форме его подачи (подробные вычисления и наглядная графика) ориентировано на студентов КРИ.

Часть I

Конспект лекций

1. Введение. Происхождение основных квантовых понятий.

Квантовая механика возникла для описания атомных явлений. Характерные масштабы длин $\sim 10^{-5} - 10^{-8}$ см, энергии ~ 1 эВ $= 1.6 \cdot 10^{-12}$ эрг. Экспериментально обнаружено, что и свет и частицы обладают как волновыми, так и корпускулярными свойствами (в некоторых экспериментах свет как бы состоит из частиц, в некоторых экспериментах частицы ведут себя как волны). Это противоречит классической механике.

1.1. Волновые свойства света

Ньютон считал, что свет состоит из корпускул, основываясь на прямолинейности распространения лучей света и успехе геометрической оптики. Однако эта гипотеза не может объяснить явление интерференции света.

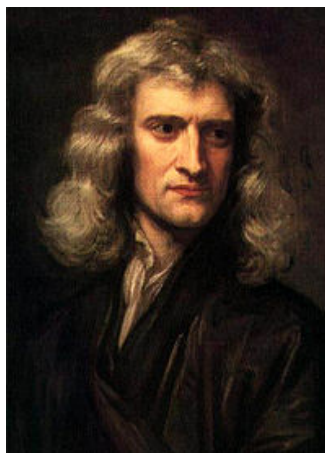


Рис. 1. И. Ньютон

Т. Юнг объяснил интерференцию света на основе волнового представления и ввел принцип суперпозиции волн. Рассмотрим опыт по интерференции света от источника на двух щелях, расстояние между щелями d , рис. 3. Экран расположен на расстоянии $L \gg d$. Амплитуда на расстоянии x от центра экрана есть сумма амплитуд волн, прошедших через первую и вторую щели (принцип суперпозиции)



Рис. 2. Т. Юнг

$$A = A_1 e^{ikl_1} + A_2 e^{ikl_2} = A_1 e^{ikl_1} \left(1 + \frac{A_2}{A_1} e^{ik\Delta l} \right), \quad (1)$$

$\Delta l \approx dx/L$. Интенсивность света

$$I = |A|^2 = |A_1|^2 \left| 1 + \frac{A_2}{A_1} e^{ik\Delta l} \right|^2. \quad (2)$$

Если амплитуды одинаковы для двух щелей, то интенсивность периодически колеблется от нуля до максимального значения. Однако, даже если $A_2 = 0.1 \cdot A_1$ то отношение

$$I_{max}/I_{min} = (1 + 0.1)^2 / (1 - 0.1)^2 \approx 1.5. \quad (3)$$

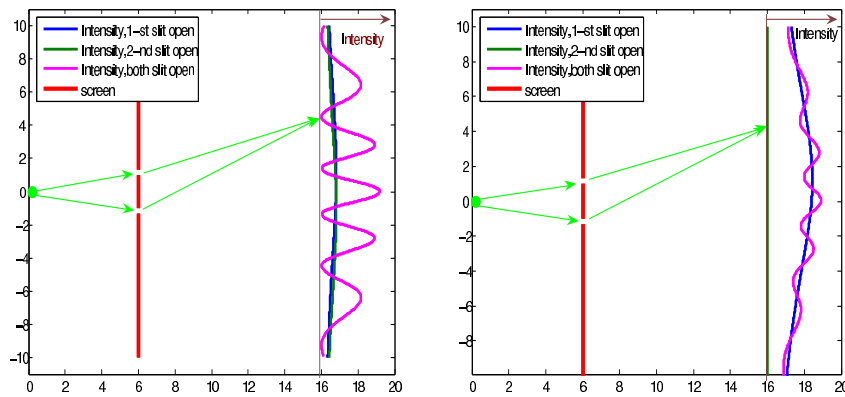


Рис. 3. Интерференция на двух щелях. Амплитуды волн от первой и второй щели одинаковы, (слева), Амплитуды волн от второй щели в десять раз меньше первой, (справа)

1.2. Корпускулярные свойства света

Фотоэффект состоит в испускании электронов при облучении светом поверхности металла, рис. 5. А. Эйнштейн объяснил свойства фотоэффекта (наличие “красной” границы и независимость энергии испускаемых электронов от интенсивности света) используя гипотезу о том, что свет состоит из квантов (фотонов) и один электрон выбивается одним фотоном, имеющим энергию $\hbar\omega$. Тогда из закона сохранения энергии следует, что кинетическая энергия электронов равна

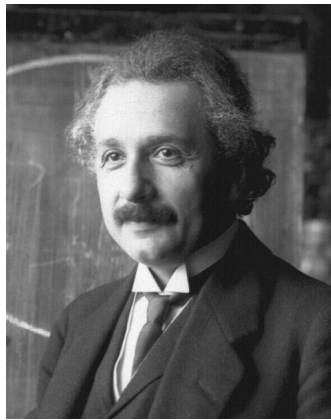


Рис. 4. А. Эйнштейн

$$\frac{mv^2}{2} = \hbar\omega - A, \quad (4)$$

A – работа выхода (минимальная энергия, необходимая для выбивания электрона из металла). Например, для металла калия (К) работа выхода $A = 2.3$ эВ. Найдем скорость электронов, которые вылетают при облучении калия светом с длиной волны $\lambda_1 = 300 \cdot 10^{-9}$ м и $\lambda_2 = 600 \cdot 10^{-9}$ м.

$$\hbar\omega = \frac{\hbar 2\pi c}{\lambda} = \frac{6.62 \cdot 10^{-27} 3 \cdot 10^{10}}{3 \cdot 10^{-5}} = 6.62 \cdot 10^{-12} \text{ эрг},$$

$$v = \sqrt{\frac{2(\hbar\omega - A)}{m}} = \sqrt{\frac{2(6.62 - 2.3 \cdot 1.6)10^{-12}}{0.9 \cdot 10^{-27}}} \approx 8 \cdot 10^7 \frac{\text{см}}{\text{с}} \quad (5)$$

Для $\lambda_2 = 600 \cdot 10^{-9}$ м энергия фотонов $\hbar\omega = 3.3 \cdot 10^{-12}$ эрг меньше работы выхода $A = 3.7 \cdot 10^{-12}$ эрг и фотоэффект не наблюдается.

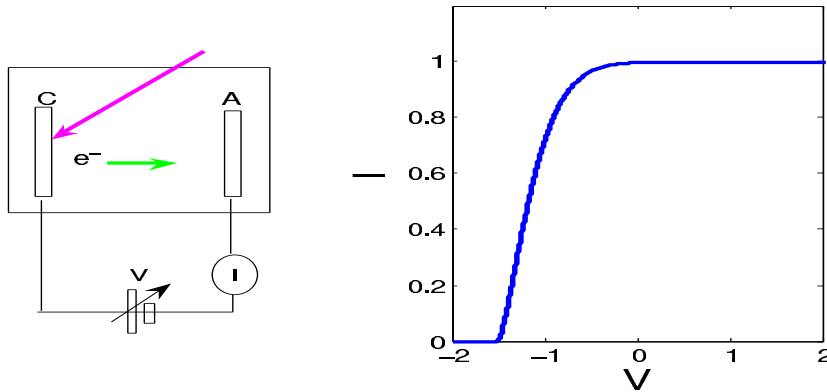


Рис. 5. Схема эксперимента по наблюдению фотоэффекта.

Схема эксперимента по наблюдению фотоэффекта показана на рис. 5. Фотоны ($\longrightarrow$) с определенной частотой падают на катод (С) и выбивают электроны (e^-), которые собираются на аноде (А). Если разность потенциалов анода и катода V

отрицательна и превышает кинетическую энергию электрона (в эВ), то ток I исчезает.

А. Комптон обнаружил изменение длины волны рассеянного излучения в экспериментах по рассеянию рентгеновского излучения веществом

$$\Delta\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos\theta), \quad (6)$$

где m – масса электрона (рентгеновское излучение рассеивается в основном электронами), θ – угол рассеяния рентгеновского излучения. Волновая теория света не может объяснить это явление, тогда как гипотеза о квантах света (используя законы сохранения энергии и импульса) предсказывает именно такой результат. В экспериментах Комптона энергия фотонов $E_\gamma \approx 20 \text{ КэВ} \ll mc^2 = 511 \text{ КэВ}$ – энергии покоя электрона, поэтому можно пользоваться нерелятивистской механикой. Рассмотрим рассеяние фотона с импульсом $\vec{q}$ на покоящемся электроне. При рассеянии фотона на угол θ его импульс станет $\vec{q}_1$, а электрон приобретет импульс $\vec{p}$. Запишем закон сохранения импульса

$$\vec{q} = \vec{q}_1 + \vec{p}. \quad (7)$$

Откуда

$$p^2 = q^2 + q_1^2 - 2qq_1 \cos\theta. \quad (8)$$

Подставляя это выражение в закон сохранения энергии

$$qc = q_1c + \frac{p^2}{2m}, \quad (9)$$



Рис. 6. А. Комптон

получим квадратное уравнение

$$q_1^2 - 2q_1(q \cos \theta - mc) + q^2 - 2mcq = 0. \quad (10)$$

Решение этого уравнения запишем в виде

$$q_1 = q \cos \theta - mc + mc \sqrt{1 + \frac{2q(1 - \cos \theta)}{mc} + \frac{q^2(\cos^2 \theta - 1)}{m^2 c^2}}. \quad (11)$$

Перед корнем взят знак '+', чтобы при $q = 0$ было $q_1 = 0$. Величина $q/mc \ll 1$, и раскладывая подкоренное выражение с точностью до членов $(q/mc)^2$, получим

$$q_1 \approx q - \frac{q^2(1 - \cos \theta)}{mc}. \quad (12)$$

Тогда изменение длины волны

$$\lambda_1 - \lambda = 2\pi\hbar \left(\frac{1}{q_1} - \frac{1}{q} \right) \approx \frac{2\pi\hbar(1 - \cos \theta)}{mc}, \quad (13)$$

что совпадает с формулой Комптона. Максимальное изменение энергии фотонов происходит при рассеянии на угол $\theta = 180^\circ$ и в опытах Комптона составляло

$$qc - q_1c \approx \frac{(qc)^2(1 - \cos \theta)}{mc^2} = \frac{(20 \text{ КэВ})^2 \cdot 2}{511 \text{ КэВ}} \approx 1.6 \text{ КэВ}. \quad (14)$$

Если фотон имеет энергию, сравнимую с энергией покоя электрона, то необходимо использовать релятивистское соотношение между энергией электрона и его импульсом

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (15)$$

Закон сохранения импульса:

$$\vec{q} = \vec{q}_1 + \vec{p}, \quad (16)$$

откуда находим

$$p^2 c^2 = c^2(q^2 + q_1^2 - 2qq_1 \cos \theta). \quad (17)$$

Закон сохранения энергии:

$$qc + mc^2 = q_1c + \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}, \quad (18)$$

откуда

$$p^2c^2 = c^2(q - q_1 + mc)^2 - m^2c^4 = c^2(q^2 + q_1^2 - 2qq_1 + 2mc(q - q_1)). \quad (19)$$

Приравнивая эти два выражения, имеем

$$mc(q - q_1) - qq_1 = -qq_1 \cos \theta, \quad (20)$$

В итоге получаем формулу для энергии фотона, рассеянного под углом θ на покоящемся электроне

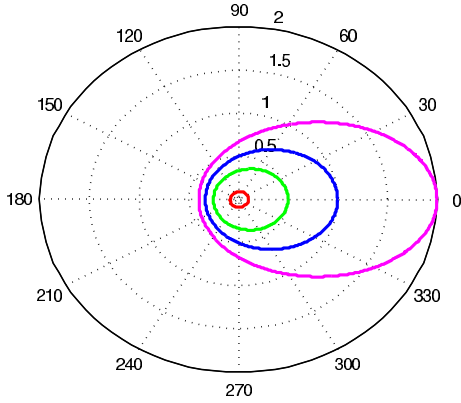
$$q_1c = \frac{qmc^2}{mc^2 + qc(1 - \cos \theta)}. \quad (21)$$

В пределе $qc \ll mc^2$ имеем знакомую формулу

$$qc - q_1c \approx \frac{q^2c^2(1 - \cos \theta)}{mc^2}. \quad (22)$$

Энергия, переданная электрону равна

$$(q - q_1)c = \frac{qc}{1 + mc^2/qc(1 - \cos \theta)}. \quad (23)$$



На рис. 7 показана зависимость энергии рассеянного фотона от угла рассеяния θ в полярных координатах для нескольких значений энергии начального фотона $E/mc^2 = 0.1; 0.5; 1.0; 2.0$.

В качестве примера рассмотрим регистрацию

Рис. 7. Зависимость энергии рассеянного фотона от угла рассеяния θ .

гамма-квантов полупроводниковым детектором. Не все гамма-кванты поглощаются детектором, часть из них рассеивается на электронах и вылетают из детектора. В результате образуется непрерывный спектр, приведенный на рис. 8. Максимально возможную энергию, переданную электрону в детекторе при однократном рассеянии фотона, равна

$$(q - q_1)c = \frac{qc}{1 + mc^2/2qc}. \quad (24)$$

Если вылетевший из детектора фотон рассеялся под углом 60° , то он оставил в детекторе небольшую часть своей энергии (стрелка в спектре на левой части рисунка).

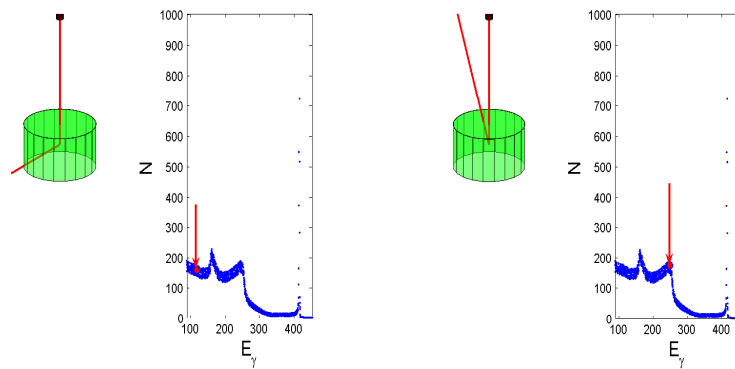


Рис. 8. Рассеяние фотона на угол 60° , (слева), Рассеяние фотона на угол 150° , (справа)

При рассеянии фотона на угол близкий к 180° , в детекторе остается почти максимально возможная при однократном рассеянии часть энергии (стрелка в спектре на правой части рисунка)

1.3. Волновые свойства частиц

Л. де Бройль предположил, что частицы материи, например электроны, обладают волновыми свойствами: частице с импульсом p и энергией E соответствует волна с частотой ω и длиной (волны) λ

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \omega = \frac{E}{\hbar}. \quad (25)$$

Дэвиссон и Джермер подтвердили



Рис. 9. Л. де Бройль

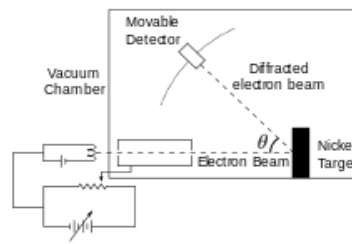


Рис. 10. Дэвиссон и Джермер, (слева), и схема их экспериментальной установки, (справа)

волновые свойства электронов, наблюдая их дифракцию на кристалле никеля, рис. 10.

Рассмотрим дифракцию на кристалле, рис. 11. Углы падения и отражения одинаковы и равны θ . Амплитуда рассеяния от первого атомного слоя

$$A_1 = A_0 e^{2ikl_1}, \quad (26)$$

от второго атомного слоя

$$A_2 = A_0 e^{2ikl_2} = A_0 e^{2ik(l_1 + d \sin \theta)}, \quad (27)$$

от третьего атомного слоя

$$A_3 = A_0 e^{2ikl_3} = A_0 e^{2ik(l_1 + 2d \sin \theta)}, \quad (28)$$

и так далее. Суммарная амплитуда есть

$$A_t = A_0 e^{2ikl_1} (1 + e^{2ikd \sin \theta} + e^{4ikd \sin \theta} + \dots) \quad (29)$$

Условие максимума

$$2kd \sin \theta = 2\pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (30)$$

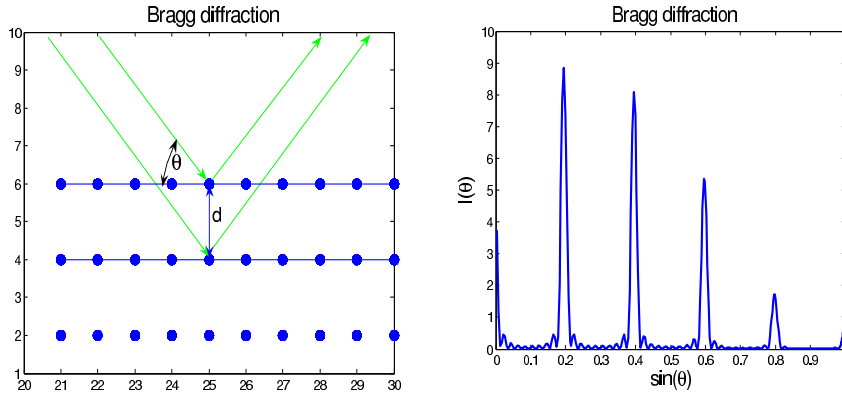


Рис. 11. Дифракция на кристалле, (слева). Зависимость интенсивности от угла падения θ , (справа)

Это условие можно переписать в виде

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (31)$$

Например, если при рассеянии рентгеновского излучения с энергией 10 КэВ первый максимум ($n = 1$) наблюдается

для угла $\theta = 30^\circ$, можно найти расстояние между атомными плоскостями:

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{2\pi\hbar c}{2\hbar\omega \sin \theta} =$$

$$= \frac{6.6 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек} \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ см/сек}}{10 \cdot 10^3 \text{ эВ} \cdot 1.6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эВ}} = 1.3 \cdot 10^{-8} \text{ см.} \quad (32)$$

1.4. Дискретность атомных спектров

Н. Бор объяснил происхождение дискретных атомных спектров на основе постулатов:

– электроны вращаются вокруг ядра только по орбитам, для которых выполняется условие

$$L_n = mv_n r_n = n\hbar, \quad (33)$$

где L_n – орбитальный момент импульса, n – целое (“квантовое”) число;

– атом может излучать только при переходе электрона с одной орбиты на другую

$$\hbar\omega = E_i - E_f. \quad (34)$$

Найдем энергии дискретного спектра атома водорода, скорости движения электрона и радиусы орбит. Кулоновская сила притяжения электрона к протону e^2/r^2 равна центростремительной силе mv^2/r :

$$\frac{e^2}{r_n^2} = \frac{mv_n^2}{r_n}, \rightarrow v_n = \frac{e^2}{mv_n r_n} = \frac{e^2}{n\hbar} = \frac{e^2 c}{\hbar c n} = \frac{\alpha c}{n}, \quad (35)$$



Рис. 12. Н. Бор.

где мы использовали постулат Бора $mv_n r_n = n\hbar$. Безразмерная величина

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (36)$$

называется постоянной тонкой структуры. Радиус орбиты равен

$$r_n = \frac{n\hbar}{mv_n} = \frac{n^2 \hbar^2}{me^2} = n^2 \frac{\hbar}{mc} \frac{\hbar c}{e^2} = n^2 \frac{\lambda_c}{\alpha} = n^2 \cdot 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad (37)$$

где введена комптоновская длина волны электрона

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{mc} \approx 3.9 \cdot 10^{-11} \text{ см}. \quad (38)$$

Энергия электрона есть

$$E_n = \frac{mv_n^2}{2} - \frac{e^2}{r_n} = -\frac{e^2}{2r_n} = -\frac{me^4}{2n^2 \hbar^2} = -\frac{mc^2 \alpha^2}{2n^2} = -\frac{13.6 \text{ эВ}}{n^2}. \quad (39)$$

Н. Бор предложил принцип соответствия: частота фотона, излученного при переходе с одной орбиты с большим квантовым числом n на соседнюю орбиту должна совпадать с классической частотой обращения электрона по этой орбите. Частота испускаемого фотона

$$\omega_{(n) \rightarrow n-1} = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} = -\frac{me^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{(n)^2} - \frac{1}{(n-1)^2} \right) \approx \frac{me^4}{n^3 \hbar^3}. \quad (40)$$

Классическая частота обращения электрона по орбите

$$\omega_e = \frac{2\pi}{T_n} = \frac{v_n}{r_n} = \frac{e^2}{n\hbar} \frac{me^2}{n^2 \hbar^2} = \frac{me^4}{n^3 \hbar^3}. \quad (41)$$

1.5. Излучение черного тела

Впервые гипотеза квантов света появилась при рассмотрении излучения черного тела (тела, полностью поглощающего падающее на него излучение). На основе классической теории Дж. Джинс вывел формулу для спектра излучения черного тела (модель – металлическая полость при температуре T с небольшим отверстием). Плотность энергии излучения на частоте ω есть произведение средней энергии одной степени свободы на число степеней свободы

$$U = T \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}, \quad (42)$$

которая предсказывает расходимость при высоких частотах – “ультрафиолетовая катастрофа”.

М. Планк объяснил спектр излучения черного тела, предположив что стенки полости могут излучать свет только порциями – квантами. Тогда плотность энергии излучения на частоте ω есть

$$U = \frac{\hbar \omega}{\exp(\hbar \omega / T) - 1} \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}, \quad (43)$$

что хорошо согласуется с экспериментом. Подробно мы рассмотрим этот вопрос во второй части курса.



Рис. 13. Дж. Джинс.



Рис. 14. М. Планк.

2. Лекция. Принцип неопределенности.

2.1. Соотношение неопределенностей Гейзенберга

В квантовой механике измерение одних величин (например координаты частицы) приводит к ограничению на возможность одновременного измерения других величин (в данном случае импульса частицы). Это связано с волновыми свойствами. Если мы рассматриваем волну с определенным значением волнового вектора, то она обладает бесконечной протяженностью. Если мы возьмем волновой пакет вида

$$\psi(x) = Ae^{-x^2/2l^2} e^{ik_0 x}, \quad (44)$$

имеющий ширину $\sim l$, то он состоит в основном из набора монохроматических волн с волновыми векторами в пределах от $k_0 - 1/l$ до $k_0 + 1/l$. Таким образом $\Delta x \cdot \Delta k \gtrsim 1$.

Чем уже распределение в координатном пространстве, тем шире в пространстве волновых векторов, и наоборот, рис. 15.

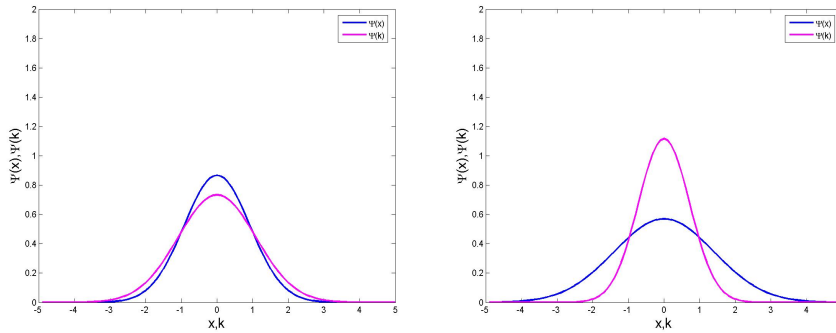


Рис. 15. Чем уже распределение в координатном пространстве, тем шире в пространстве волновых векторов, и наоборот.

Если переписать приведенное выше неравенство в виде

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar, \quad (45)$$

то получится соотношение неопределенностей Гейзенберга. Это соотношение можно использовать для оценок энергий основного состояния частиц в различных потенциалах.



Рис. 16. В. Гейзенберг

2.2. Ящик с непроницаемыми стенками

Расстояние между стенками обозначим L . Неопределенность координаты равна $\Delta x \sim L$, тогда неопределенность импульса $\Delta p \gtrsim \hbar/L$, отсюда находим минимальное значение энергии

$$E_{min} \sim \frac{p^2}{m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{mL^2}. \quad (46)$$

2.3. Гармонический осциллятор

Потенциал гармонического осциллятора равен $U = m\omega^2 x^2/2$. Неопределенность координаты обозначим Δx , тогда неопределенность импульса $\Delta p \gtrsim \hbar/\Delta x$. Отсюда значение энергии равно

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{m\omega^2 (\Delta x)^2}{2} \gtrsim \hbar\omega. \quad (47)$$

Зависимость энергии гармонического осциллятора от Δx , рис. 17. При малых Δx большой вклад от кинетической энергии, при больших Δx от потенциальной, $E_0 \equiv \hbar\omega$, $x_0 \equiv \sqrt{\hbar/m\omega}$.

2.4. Частица в поле тяжести.

Рассмотрим частицу в поле тяжести над непроницаемым полом. Обозначим неопределенность вертикальной координаты

Δz , тогда неопределенность вертикального импульса $\Delta p \gtrsim \hbar/\Delta z$. Значение полной энергии равно

$$E = \frac{p^2}{m} + mgz \gtrsim \frac{\hbar^2}{m(\Delta z)^2} + mg\Delta z. \quad (48)$$

Минимум этого выражения достигается при

$$\Delta z_0 \sim \left(\frac{\hbar^2}{gm^2} \right)^{1/3}, \quad (49)$$

так что

$$E_{min} \sim (g^2 \hbar^2 m)^{1/3}. \quad (50)$$

Зависимость энергии частицы в поле тяжести от Δz , рис. 18, слева. $E_0 \equiv (g^2 \hbar^2 m)^{1/3}$, $z_0 \equiv \left(\frac{\hbar^2}{gm^2} \right)^{1/3}$. При малых Δz боль-

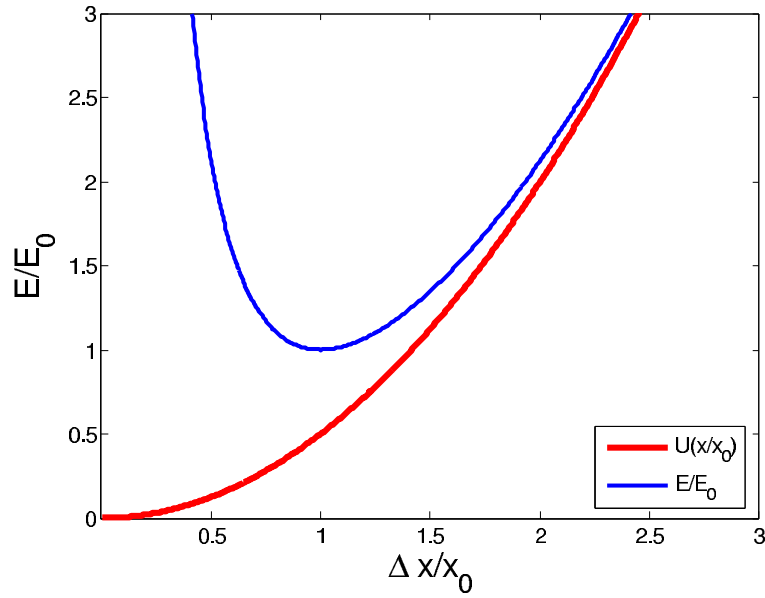


Рис. 17. Зависимость энергии гармонического осциллятора от Δx .

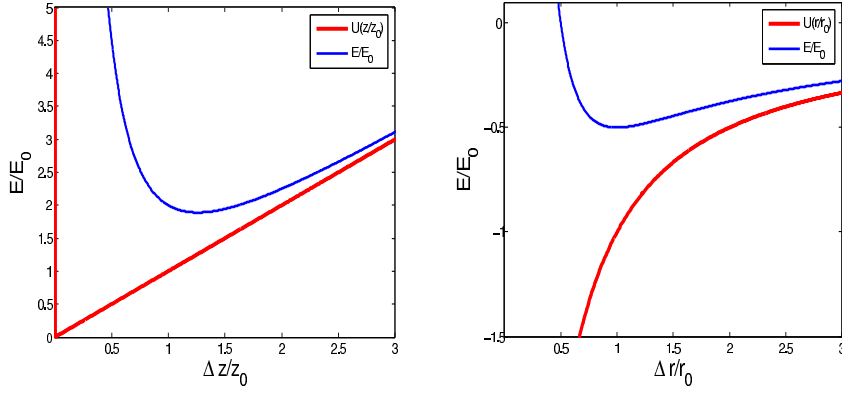


Рис. 18. Зависимость энергии частицы в поле тяжести от Δz , (слева). Зависимость энергии электрона в кулоновском поле от Δr (справа)

шой вклад от кинетической энергии, при больших Δz – от потенциальной.

2.5. Атом водорода

Потенциальная энергия взаимодействия электрона и протона $U(r) = -e^2/r$. Неопределенность координаты обозначим Δr , тогда неопределенность импульса $\Delta p \gtrsim \hbar/\Delta r$. Отсюда значение энергии

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta r)^2} - \frac{e^2}{\Delta r} \quad (51)$$

достигает минимума при

$$\Delta r \sim \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad (52)$$

откуда

$$E_{min} \sim -\frac{me^4}{\hbar^2}. \quad (53)$$

Зависимость энергии электрона в кулоновском поле от Δr , рис. 18, справа. $E_0 \equiv me^4/\hbar^2$, $r_0 \equiv \hbar^2/me^2$.

3. Лекция. Одномерное уравнение Шредингера.

Уравнение Шредингера обобщает гипотезу де Бройля о волновых свойствах свободных частиц на случай когда они движутся во внешнем поле $U(x)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + U(x) \Psi(x, t). \quad (54)$$

Волновая функция $\Psi(x, t)$ не имеет прямого физического смысла, однако квадрат модуля волновой функции, согласно М. Борну, имеет смысл плотности вероятности найти частицу вблизи точки x . Именно $|\Psi(x, t)|^2 \Delta x$ пропорциональна вероятности найти частицу с координатой в интервале $(x, x + \Delta x)$.

Вернемся к эксперименту с двумя щелями. Если интенсивность источника фотонов или электронов мала, то частицы будут проходить по одной. На экране будут регистрироваться одиночные события, а интерференционная картина возникает постепенно.

Если частица имеет определенную энергию, то волно-



Рис. 19. Э. Шредингер



Рис. 20. М. Борн

вая функция записывается в виде $\Psi(x, t) = \exp(-iEt/\hbar)\psi(x)$ и уравнение Шредингера принимает вид

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U(x)\psi(x). \quad (55)$$

Первый член в правой части есть оператор кинетической энергии. В отличие от классической механики, в квантовой механике физической величине, в данном случае импульсу, соответствует оператор. Для импульса оператор имеет вид $\hat{p} = -i\hbar d/dx$. Физическим следствием является то, что не все физические величины могут одновременно иметь определенные значения, например координата и импульс.

Действие оператора координаты на волновую функцию сводится к умножению координаты на волновую функцию

$$\hat{x}\psi(x) = x \cdot \psi(x). \quad (56)$$

Аналогично действует оператор потенциальной энергии

$$\hat{U}(x)\psi(x) = U(x) \cdot \psi(x). \quad (57)$$

Математически решение уравнения Шредингера сводится к задаче нахождения собственных функций $\psi(x)$ оператора Гамильтона

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \quad (58)$$

и собственных значений E :

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x). \quad (59)$$

3.1. Ящик с непроницаемыми стенками

Рассмотрим в качестве первого примера задачу о частице в одномерном ящике с непроницаемыми стенками. Потенциал

имеет вид

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

Граничные условия

$$\psi(0) = \psi(L) = 0, \quad (60)$$

вероятность найти частицу за пределами ящика равна нулю. Решение уравнения Шредингера в области $0 \leq x \leq L$,

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \quad (61)$$

с учетом граничных условий есть

$$\psi_n(x) = A_n \sin(n\pi x/L), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (62)$$

Эти функции – собственные функции оператора Гамильтона. Получаем уровни энергии (дискретный спектр собственных значений)

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (63)$$

Постоянную величину A_n находим из условия нормировки

$$\int_0^L |A_n \sin(n\pi x/L)|^2 dx = \int_0^L |A_n|^2 \frac{1 - \cos(2\pi x/L)}{2} dx = |A_n|^2 \frac{L}{2} = 1. \quad (64)$$

Нормированные волновые функции для этой задачи можно выбрать вещественными

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi x/L), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (65)$$

Показаны три первых уровня энергии и волновые функции, рис. 21

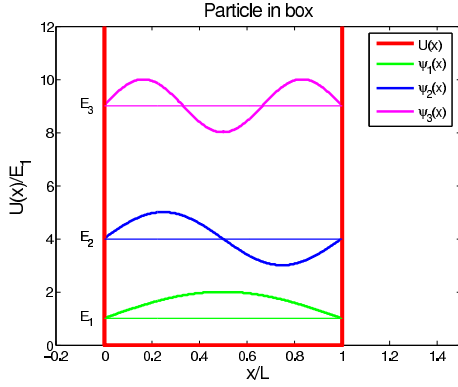


Рис. 21. Уровни энергии и волновые функции.

Волновая функция основного состояния не пересекает ось x внутри интервала, волновая функция первого возбужденного состояния пересекает один раз, второго возбужденного состояния — два раза и так далее. Это частный случай осцилляционной теоремы.

Кроме того, волновые функции состояний с квантовыми числами $n = 1, 3, 5, \dots$ являются четными функциями относительно точки $x = L/2$, волновые функции состояний с квантовыми числами $n = 2, 4, 6, \dots$ являются нечетными функциями. Это связано с четностью потенциала относительно той же точки $x = L/2$.

Волновые функции для разных значений энергии ортогональны:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^L A_m \sin(m\pi x/L) A_n \sin(n\pi x/L) dx = \\
 &= \int_0^L \frac{1}{4} (e^{i\pi(n-m)x/L} + e^{i\pi(m-n)x/L} - e^{i\pi(n+m)x/L} - e^{-i\pi(n+m)x/L}) dx = \\
 &= A_m A_n \frac{L}{2} \delta_{nm} = \delta_{nm}, \quad (66)
 \end{aligned}$$

где символ Кронекера

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m. \end{cases}$$

Физический смысл условия ортогональности: если частица находится в состоянии с определенным значением энергии, то

вероятность найти ее в состоянии с другим значением энергии равна нулю. Приведены графики произведения волновых функций для разных состояний, рис. 22. Видно, что площадь (с учетом знака) равна нулю.

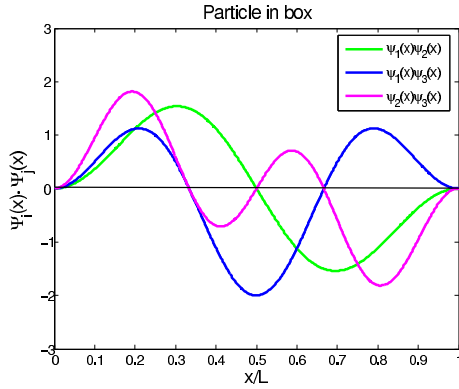
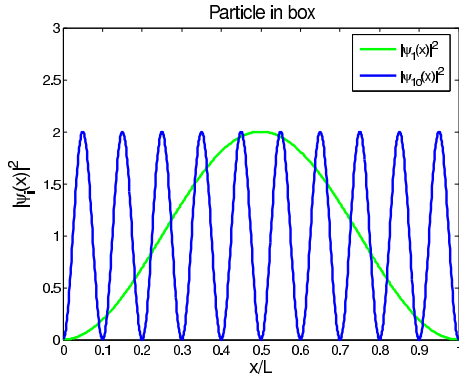


Рис. 22. Ортогональность волновых функций.

Рис. 23. Вероятность найти частицу для $n = 1, n = 10$.

Действительно

$$E_n - E_{n-1} \Big|_{n \gg 1} \approx \hbar \omega_n. \quad (69)$$

Для больших значений квантового числа движение частицы должно быть похоже на классическое. Например, вероятность найти частицу не зависит от координаты. Видно, что в основном состоянии $n = 1$ это не так, а для $n = 10$ уже похоже на классику, рис. 23.

Проверим выполнение принципа соответствия Бора

$$E_n - E_{n-1} \Big|_{n \gg 1} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2 n}{m L^2}. \quad (67)$$

Частота движения классической частицы

$$\omega_n = \frac{2\pi}{T_n} = \frac{2\pi p_n/m}{2L} =$$

$$\frac{\pi \sqrt{2m E_n}}{m L} = \frac{\hbar \pi^2 n}{m L^2}. \quad (68)$$

3.2. δ -потенциал

Найдем теперь энергию и волновую функцию связанного состояния $E < 0$ в потенциале $U(x) = -G\delta(x)$, где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, получающаяся например как предел очень узкой и очень глубокой потенциальной ямы

$$U(x) = \begin{cases} -\frac{G}{2\varepsilon}, & -\varepsilon < x < \varepsilon \\ 0, & |x| \geq \varepsilon, \quad \varepsilon \rightarrow 0. \end{cases}$$

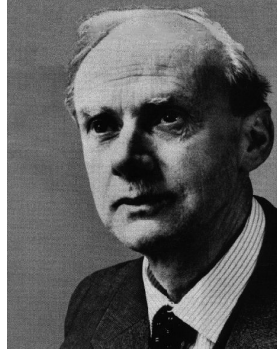


Рис. 24. П. Дирак

Волновая функция непрерывна, однако первая производная имеет скачок в точке $x = 0$, рис. 25:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx - G \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x)\psi(x)dx = E \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi(x)dx, \quad (70)$$

откуда

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} = -\frac{2mG}{\hbar^2} \psi(0). \quad (71)$$

Решение с отрицательной энергией (связанное состояние) уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -|E|\psi, \quad |x| > \varepsilon \quad (72)$$

есть

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \quad (73)$$

Из условия на скачок первой производной получаем

$$-A\kappa e^{-\kappa x} \Big|_{x=+\varepsilon} - A\kappa e^{\kappa x} \Big|_{x=-\varepsilon} = -\frac{2mG}{\hbar^2} A, \quad \rightarrow \quad \kappa = \frac{mG}{\hbar^2}. \quad (74)$$

Нормировка волновой функции дает связь

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 2 \int_0^{+\infty} e^{-2\kappa x} dx = \frac{A^2}{\kappa} = 1, \quad \rightarrow \quad A = \sqrt{\kappa}. \quad (75)$$

Окончательно:

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|}, \quad \kappa = \frac{mG}{\hbar^2}, \quad E = -\frac{mG^2}{2\hbar^2}. \quad (76)$$

3.3. Доказательство соотношения неопределенностей

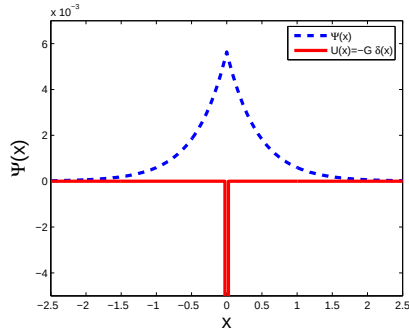


Рис. 25. Вид волновой функции для δ -потенциала.

Рассмотрим неотрицательную величину

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \psi(x)x + \alpha \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx, \quad (77)$$

где α вещественное. Оператор импульса есть $-i\hbar d/dx$. Неопределенности координаты δx и импульса δp связаны с отклонением от средних значений, поэтому для упрощения формул считаем, что

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)x\psi(x)dx = 0, \quad (78)$$

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{d}{dx} \psi(x) dx = 0. \quad (79)$$

Преобразуем интеграл I

$$\begin{aligned}
 I &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\psi(x)x + \alpha \frac{d\psi}{dx} \right) \left(\psi^*(x)x + \alpha \frac{d\psi^*}{dx} \right) dx = \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 x^2 dx + \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{d|\psi|^2}{dx} dx + \alpha^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx. \quad (80)
 \end{aligned}$$

Первый интеграл, среднеквадратичное отклонение координаты, равен $\overline{\delta x^2}$, второй интеграл берем по частям

$$\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{d|\psi|^2}{dx} dx = \alpha \left(|\psi|^2 x \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx \right) = -\alpha. \quad (81)$$

Последний интеграл пропорционален среднеквадратичному отклонению импульса $\overline{\delta p^2}/\hbar^2$. В итоге имеем неравенство

$$\alpha^2 \frac{\overline{\delta p^2}}{\hbar^2} - \alpha + \overline{\delta x^2} \geq 0, \quad (82)$$

которое должно выполняться для произвольных α . Преобразуем к виду, содержащему полный квадрат

$$\begin{aligned}
 &\alpha^2 \frac{\overline{\delta p^2}}{\hbar^2} - \alpha + \frac{\hbar^2}{4\overline{\delta p^2}} - \frac{\hbar^2}{4\overline{\delta p^2}} + \overline{\delta x^2} = \\
 &= \left(\alpha \frac{\sqrt{\overline{\delta p^2}}}{\hbar} - \frac{\hbar}{2\sqrt{\overline{\delta p^2}}} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{4\overline{\delta p^2}} + \overline{\delta x^2} \geq 0. \quad (83)
 \end{aligned}$$

Откуда получаем искомое неравенство $\overline{\delta p^2} \cdot \overline{\delta x^2} \geq \hbar^2/4$.

4. Лекция. Формализм квантовой механики

4.1. Основные положения квантовой механики

Формальная схема квантово-механического описания такова:

1. Состояние квантовой системы полностью описывается волновой функцией $\Psi(x, t)$.

Физический смысл имеет квадрат модуля $|\Psi(x, t)|^2 \Delta x$ – вероятность найти частицу в интервале Δx вблизи координаты x .

2. Физическим величинам сопоставляются эрмитовы операторы. Результатами измерений будут собственные значения операторов.

В квантовой механике физическим величинам ставятся в соответствие *эрмитовы операторы*. Оператор $\hat{A}^\dagger$ называется эрмитово сопряженным оператору $\hat{A}$ если для любых волновых функций ψ_1, ψ_2 выполняется соотношение

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dx = \int (\hat{A}^\dagger \psi_1)^* \psi_2 dx. \quad (84)$$

Операторы физических величин должны быть эрмитовы, $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, поскольку собственные значения эрмитовых операторов вещественны, как и положено физически измеряемой величине. Доказательство. Пусть ψ_a есть собственная функция эрмитова оператора $\hat{A}$ с собственным значением λ , то есть $\hat{A} \psi_a = \lambda \psi_a$. Тогда, с одной стороны

$$\int \psi_a^* \hat{A} \psi_a dx = \lambda \int \psi_a^* \psi_a dx = \lambda. \quad (85)$$

С другой стороны, используя свойство эрмитовости оператора $\hat{A}$

$$\int \psi_a^* \hat{A} \psi_a dx = \int (\hat{A} \psi_a)^* \psi_a dx = \lambda^* \int \psi_a^* \psi_a dx = \lambda^* = \lambda. \quad (86)$$

Докажем, что оператор импульса является эрмитовым оператором. Имеем

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_2 dx &= -i\hbar \psi_1^* \psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} + i\hbar \int \left(\frac{d\psi_1}{dx} \right)^* \psi_2 dx = \\ &= \int \left(-i\hbar \frac{d\psi_1}{dx} \right)^* \psi_2 dx. \end{aligned} \quad (87)$$

Таким образом $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$. Эрмитов также гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) \quad (88)$$

с вещественным потенциалом U .

При эрмитовом сопряжении произведения операторов изменяется порядок их расположения:

$$\left(\hat{A}\hat{B}\dots\hat{Y}\hat{Z} \right)^\dagger = \hat{Z}^\dagger\hat{Y}^\dagger\dots\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \quad (89)$$

Введем краткие и удобные обозначения для волновых функций

$$\psi_1(x) \rightarrow |\psi_1\rangle, \quad \psi_2^*(x) \rightarrow \langle\psi_1|. \quad (90)$$

Тогда запись выражения

$$\int \psi_2^*(x) \hat{A} \psi_1(x) dx, \quad (91)$$

называемого матричным элементом оператора $\hat{A}$ между состояниями 1, 2, в новых обозначениях выглядит так

$$\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle. \quad (92)$$

Еще одно полезное обозначение – *коммутатор* двух операторов

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (93)$$

В квантовой механике эта величина в общем случае не равна нулю. Например вычислим коммутатор операторов координаты (действие оператора координаты сводится к умножению на координату) и импульса. Для этого найдем действие коммутатора на произвольную функцию $\psi(x)$

$$[x, \hat{p}]\psi(x) = -i\hbar \left(x \frac{d\psi(x)}{dx} - \frac{d(x\psi(x))}{dx} \right) = i\hbar\psi(x). \quad (94)$$

Следовательно, в силу произвольности функции $\psi(x)$,

$$[x, \hat{p}] = i\hbar. \quad (95)$$

При вычислении более сложных коммутаторов полезно использовать соотношение

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]. \quad (96)$$

Доказательство:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \\ &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]. \end{aligned} \quad (97)$$

Аналогично

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}. \quad (98)$$

4.2. Теорема вириала

Теорема вириала дает полезное соотношение между средними значениями кинетической и потенциальной энергии для состояний с определенным значением полной энергии. Для этого рассмотрим среднее значение коммутатора

$$\langle \phi_k | [\hat{H}, x\hat{p}] | \phi_k \rangle, \quad (99)$$

где гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x), \quad \hat{H}|\phi_k\rangle = E_k|\phi_k\rangle. \quad (100)$$

Это среднее с одной стороны равно нулю. Действительно для произвольного оператора $\hat{A}$

$$\langle\phi_k|[\hat{H}, \hat{A}]|\phi_k\rangle = \langle\phi_k|\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}|\phi_k\rangle = (E_k - E_k)\langle\phi_k|\hat{A}|\phi_k\rangle = 0. \quad (101)$$

С другой стороны распишем коммутатор

$$[\hat{H}, x\hat{p}] = [\hat{H}, x]\hat{p} + x[\hat{H}, \hat{p}] \quad (102)$$

и вычислим обе части по отдельности. Имеем для первой части

$$[\hat{H}, x] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x), x \right] = \frac{\hat{p}}{2m}[\hat{p}, x] + [\hat{p}, x]\frac{\hat{p}}{2m} = \frac{-i\hbar\hat{p}}{m}. \quad (103)$$

Здесь учтено, что

$$[U(x), x] = 0. \quad (104)$$

Для второй части

$$[\hat{H}, \hat{p}] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x), \hat{p} \right] = [U(x), \hat{p}] = i\hbar \frac{dU}{dx}. \quad (105)$$

Здесь учтено, что

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{p} \right] = 0. \quad (106)$$

В итоге получаем искомое соотношение

$$\langle\phi_k|x\frac{dU}{dx}|\phi_k\rangle = 2\langle\phi_k|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\phi_k\rangle = 2\bar{T}. \quad (107)$$

где $\bar{T}$ – среднее значение кинетической энергии. Если потенциал имеет степенной вид $U(x) = \alpha x^n$, то

$$\langle\phi_k|x\frac{dU}{dx}|\phi_k\rangle = n\bar{U} = 2\bar{T}. \quad (108)$$

Это соотношение обобщается на трехмерный случай

$$\begin{aligned} \langle \phi_k | x \frac{\partial U}{\partial x} + y \frac{\partial U}{\partial y} + z \frac{\partial U}{\partial z} | \phi_k \rangle &= \langle \phi_k | \vec{r} \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} | \phi_k \rangle = \\ &= 2 \langle \phi_k | \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} | \phi_k \rangle = 2\bar{T}. \end{aligned} \quad (109)$$

Если потенциал имеет степенной вид $U(r) = \alpha r^n$, то получается такое же соотношение

$$n\bar{U} = 2\bar{T}. \quad (110)$$

Пример 1: гармонический осциллятор. Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (111)$$

Потенциал квадратичным образом зависит от координаты, $n = 2$, так что

$$\bar{U} = \bar{T} = E/2. \quad (112)$$

Пример 2: атом водорода. Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}. \quad (113)$$

Потенциал обратно пропорционален радиусу, $n = -1$, так что

$$\bar{U} = -2\bar{T} = 2E. \quad (114)$$

4.3. Теорема Паули.

Еще один способ получения соотношений между средними значениями состоит в использовании соотношения

$$\frac{\partial E_k}{\partial \lambda} = \langle \phi_k | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \phi_k \rangle + \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \phi_k | \right) \hat{H} | \phi_k \rangle + \langle \phi_k | \hat{H} \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} | \phi_k \rangle \right), \quad (115)$$

(λ некоторый характерный параметр задачи, например масса, частота, постоянная Планка и т.д.) Из условия нормировки $\langle \phi_k | \phi_k \rangle = 1$ следует, что сумма двух последних членов равна нулю. Действительно

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \phi_k | \right) \hat{H} | \phi_k \rangle + \langle \phi_k | \hat{H} \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} | \phi_k \rangle \right) = \\ & = E_k \left[\left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \phi_k | \right) | \phi_k \rangle + \langle \phi_k | \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} | \phi_k \rangle \right) \right] = E_k \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \phi_k | \phi_k \rangle = 0. \end{aligned} \quad (116)$$

В итоге получаем

$$\frac{\partial E_k}{\partial \lambda} = \langle \phi_k | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \phi_k \rangle. \quad (117)$$

Пример: δ -потенциал. Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - G\delta(x). \quad (118)$$

Мы нашли энергию связанного состояния

$$E = -\frac{mG^2}{2\hbar^2}. \quad (119)$$

Чтобы получить среднее значение потенциальной энергии, выберем в качестве параметра величину G . Тогда

$$\frac{\partial E}{\partial G} = -\frac{mG}{\hbar^2} = \langle \phi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | \phi \rangle = -\langle \phi | \delta(x) | \phi \rangle = \bar{U}/G, \rightarrow \bar{U} = E/2. \quad (120)$$

Чтобы получить среднее значение кинетической энергии, выберем в качестве параметра величину m . Тогда

$$\frac{\partial E}{\partial m} = -\frac{G^2}{2\hbar^2} = \langle \phi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial m} | \phi \rangle = -\langle \phi | \frac{\hat{p}^2}{2m^2} | \phi \rangle = -\bar{T}/m, \rightarrow$$

$$\overline{T} = -E = -\overline{U}. \quad (121)$$

Подведем итог.

1. Состояние квантовой системы полностью описывается волновой функцией $\Psi(x, t)$.

Физический смысл имеет квадрат модуля $|\Psi(x, t)|^2 \Delta x$ – вероятность найти частицу в интервале Δx вблизи координаты x .

2. Физическим величинам сопоставляются эрмитовы операторы. Результатами измерений будут собственные значения операторов.

3. Волновая функция подчиняется уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t), \quad (122)$$

где гамильтониан (оператор, соответствующий полной энергии)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x), \quad (123)$$

если частица находится в поле с потенциалом $U(x)$.

Если частица имеет определенное значение энергии E , то волновая функция имеет вид

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x) \quad (124)$$

и мы имеем стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H} \psi(x) = E \psi(x). \quad (125)$$

Стационарное означает, что вероятность не зависит от времени, поскольку

$$|\Psi(x, t)|^2 = |e^{-iEt/\hbar} \psi(x)|^2 = |\psi(x)|^2. \quad (126)$$

5. Лекция. Гармонический осциллятор.

Гармонический осциллятор приближенно моделирует колебания атомов в молекуле, пригодится позже для квантового описания электромагнитного излучения. Потенциальная энергия отсчитывается от минимального значения, а x – отклонение координаты от равновесного значения. Также как в классической механике записываем потенциал в виде $U(x) = m\omega^2 x^2/2$, где m – масса частицы, ω – частота колебания.

5.1. Основное состояние

Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega x^2}{2} \psi = E\psi \quad (127)$$

решается точно, однако сначала угадаем какой вид должна иметь волновая функция основного состояния и найдем его энергию. Согласно осцилляционной теореме волновая функция основного состояния не имеет нулей, а из симметрии гамильтониана следует, что она должна быть симметричной. Испытаем в качестве пробной функцию

$$\psi_0(x) = A_0 \exp(-\alpha x^2). \quad (128)$$

Подставляя в уравнение Шредингера, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} A_0 e^{-\alpha x^2} (4\alpha^2 x^2 - 2\alpha) + \frac{m\omega x^2}{2} A_0 e^{-\alpha x^2} = E_0 A_0 e^{-\alpha x^2}. \quad (129)$$

Приравнивая члены с одинаковыми степенями x , имеем

$$\frac{2\alpha^2 \hbar^2}{m} = \frac{m\omega}{2}, \quad \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad (130)$$

$$E_0 = \frac{\alpha \hbar^2}{m} = \frac{\hbar \omega}{2}. \quad (131)$$

Волновая функция основного состояния показана на рис.26.

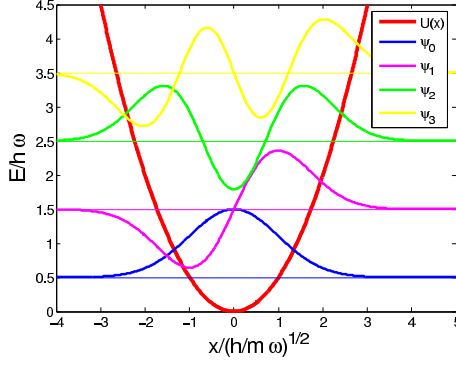


Рис. 26. Уровни энергии и волновые функции.

На рис.27 показаны квадраты модулей волновых функций 4-х нижних уровней, определяющих плотность вероятности найти частицу вблизи точки с координатой x .

Умножим уравнение Шредингера слева на ψ_0 и проинтегрируем по x

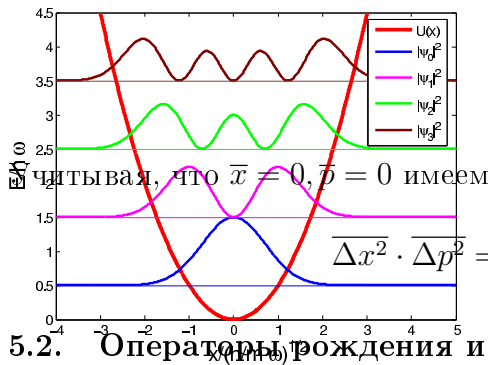
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0 \frac{d^2 \psi_0}{dx^2} dx + \frac{m\omega}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \psi_0^2 dx = E_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^2 dx. \quad (132)$$

Интегрируя по частям в первом члене, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0 \frac{d^2 \psi_0}{dx^2} dx = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\psi_0}{dx} \right)^2 dx = \frac{m\omega}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \psi_0^2 dx. \quad (133)$$

Таким образом средняя кинетическая энергия равна средней потенциальной энергии и значит

$$\frac{m\omega^2}{2} \overline{x^2} = \frac{\hbar\omega}{4}, \quad \rightarrow \overline{x^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}. \quad (134)$$



Аналогично

$$\frac{m}{2} \overline{p^2} = \frac{\hbar\omega}{4}, \rightarrow \overline{p^2} = \frac{\hbar m\omega}{2}. \quad (135)$$

читывая, что $\overline{x} = 0, \overline{p} = 0$ имеем

$$\Delta x^2 \cdot \Delta p^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (136)$$

5.2. Операторы рождения и уничтожения

Получим квадратичную функцию. Гамильтониан для гармонического осциллятора

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega x^2}{2} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega x^2}{2} \quad (137)$$

удобно представить в виде произведения двух операторов вида

$$\hat{a} = Ax + iB\hat{p}, \quad \hat{a}^\dagger = Ax - iB\hat{p}, \quad (138)$$

где A, B – вещественные числовые коэффициенты, с простейшим коммутатором

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (139)$$

Расписывая коммутатор

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = -iAB[x, \hat{p}] + iAB[\hat{p}, x] = 2\hbar AB = 1, \quad (140)$$

получаем одно соотношение $AB = 1/2\hbar$. Выразим гамильтониан через операторы $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$. Имеем

$$x = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{2A}, \quad \hat{p} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{2iB}. \quad (141)$$

Тогда

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega x^2}{2} =$$

$$= (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) \frac{1}{8mB^2} + (\hat{a}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \frac{m\omega^2}{8A^2}. \quad (142)$$

Потребуем, чтобы исчезли члены вида $\hat{a}\hat{a}, \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger$. Тогда

$$\frac{m\omega^2}{8A^2} = \frac{1}{8mB^2}, \rightarrow B = \frac{A}{m\omega}. \quad (143)$$

Учитывая соотношение $2\hbar AB = 1$, получим

$$A = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}, \quad B = \sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \quad (144)$$

$$x = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \hat{p} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}i} \sqrt{\hbar m\omega}. \quad (145)$$

Гамильтониан становится равным

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (146)$$

Посмотрим как действует оператор $\hat{a}$ на состояние $|\psi\rangle$ с определенным значением энергии $\hat{H}|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle$. Имеем

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \hbar\omega [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a}. \quad (147)$$

Тогда

$$\hat{H}\hat{a}|\psi\rangle = \hat{a}(\hat{H} - \hbar\omega)|\psi\rangle = (\varepsilon - \hbar\omega)\hat{a}|\psi\rangle. \quad (148)$$

Значит оператор $\hat{a}$, действуя на состояние с определенной энергией, дает новое состояние с энергией меньшей на величину $\hbar\omega$. Действуя еще раз оператором $\hat{a}$ мы еще уменьшим энергию и так до тех пор, пока не получим основное состояние с минимальной энергией. Для основного состояния $|\psi_0\rangle$ должно выполняться условие (иначе получилось бы состояние с еще меньшей энергией)

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = 0. \quad (149)$$

Тогда

$$\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \right) \psi_0(x) = 0. \quad (150)$$

Нормированное решение этого уравнения

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right). \quad (151)$$

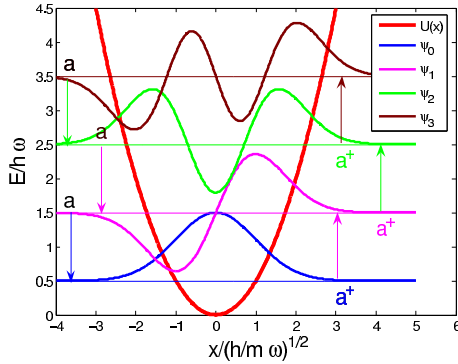
Энергия основного состояния есть $\varepsilon_0 = \hbar\omega/2$. Оператор $\hat{a}^\dagger$ действуя на состояние $|\psi\rangle$ с определенным значением энергии, дает состояние с большей энергией

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{H} + \hbar\omega)|\psi\rangle = (\varepsilon + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger|\psi\rangle. \quad (152)$$

Тогда последовательно действуя оператором $\hat{a}^\dagger$ на основное состояние, можно получить весь набор состояний и их энергии. Например, для первого возбужденного состояния

$$\psi_1(x) \propto \left(-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \right) \psi_0(x) \propto x \exp \left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right). \quad (153)$$

Энергия первого возбужденного состояния равна $\varepsilon_1 = \hbar\omega/2 + \hbar\omega$, энергия n -го возбужденного состояния равна $\varepsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2)$. Действие операторов $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ на состояния с определенной энергией гармонического осциллятора, рис. 28.



Использование операторов $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ заметно упрощает вычисление средних значений. Обозначим основное состояние как $|0\rangle$. n -ое состояние получается как

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad (154)$$

Рис. 28. Действие операторов $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ на состояния с определенной энергией гармонического осциллятора.

а нормировочный множитель находится, используя коммутационные соотношения, $\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$, из

$$\langle n|n\rangle = \frac{1}{n!} \langle 0| (\hat{a})^n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = 1. \quad (155)$$

Тогда

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (156)$$

Вычислим $\overline{\Delta x^2}$ и $\overline{\Delta p^2}$ для n -го состояния. Средние значения координаты и импульса равны нулю

$$\langle n|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|n\rangle = 0, \quad \langle n|\hat{p}|n\rangle = \sqrt{\hbar m\omega} \langle n|\frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}i}|n\rangle = 0. \quad (157)$$

Средние значения квадратов координаты и импульса равны

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1), \quad (158)$$

$$\langle n|\hat{p}^2|n\rangle = -\frac{\hbar m\omega}{2} \langle n|(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1). \quad (159)$$

Соотношение неопределенностей импульса и координаты принимает вид

$$\overline{\Delta x^2} \cdot \overline{\Delta p^2} = \frac{\hbar^2}{4}(2n+1)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (160)$$

6. Лекция. Вариационный метод.

Большинство задач квантовой механики не имеют аналитического решения и приходится использовать приближенные методы. Рассмотрим применение вариационного метода для нахождения уровней энергии. Собственные функции гамильтониана (оператора энергии) $\hat{H}$ обладают свойством полноты: любая функция ϕ может быть представлена в виде

линейной комбинации собственных функций ψ_n гамильтониана, с энергией E_n

$$\phi = \sum_n a_n \psi_n. \quad (161)$$

Квадрат модуля коэффициента $|a_n|^2$ определяет вероятность получить значение энергии E_n , если система находится в состоянии ϕ . Из условия нормировки волновой функции ϕ следует

$$\begin{aligned} \int \phi(x)^* \phi(x) dx &= \sum_{m,n} a_m^* a_n \int \psi(x)_m^* \psi_n(x) dx = \\ &= \sum_{m,n} a_m^* a_n E_n \delta_{n,m} = \sum_n |a_n|^2 = 1. \end{aligned} \quad (162)$$

Среднее значение энергии в состоянии ϕ равно

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \int \phi(x)^* \hat{H} \phi(x) dx = \sum_{m,n} a_m^* a_n \int \psi(x)_m^* \hat{H} \psi_n(x) dx = \\ &= \sum_{m,n} a_m^* a_n E_n \int \psi(x)_m^* \psi_n(x) dx = \sum_{m,n} a_m^* a_n E_n \delta_{n,m} = \\ &= \sum_n |a_n|^2 E_n \geq E_0, \end{aligned} \quad (163)$$

не меньше энергии основного состояния. Подбирая пробные функции, так чтобы средняя энергия была как можно ниже, можно приближенно определить энергию основного состояния. В качестве пробных функции для основного состояния следует брать функции не пересекающие ось x (осцилляционная теорема).

6.1. Ящик с непроницаемыми стенками

Рассмотрим пример: частица в ящике размером L . В качестве пробной функции рассмотрим

$$\phi(x) = Ax(L - x), \quad (164)$$

которая обращается в ноль только на границах интервала и симметрична относительно точки $L/2$. Константа A находится из условия нормировки

$$\int_0^L A^2 x^2 (L - x)^2 dx = A^2 (L^5/3 - 2L^5/4 + L^5/5) = A^2 L^5/30 = 1, \quad (165)$$

откуда $A = \sqrt{30/L^5}$. Сравнение волновых функций точного решения (синяя кривая) и вариационного метода (зеленая кривая) приведено на рис.29.

Находим среднюю энергию

$$\begin{aligned} \bar{E} &= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_0^L x(L - x) \frac{d^2}{dx^2} x(L - x) dx = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 (-2) (L^3/2 - L^3/3) = \frac{5\hbar^2}{mL^2}. \end{aligned} \quad (166)$$

Точное значение энергии основного состояния

$$E_0 = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2) \approx \frac{4.935\hbar^2}{mL^2} \quad (167)$$

ниже нашей оценки всего лишь на $\approx 1\%$.

6.2. Частица в поле тяжести

Пример посложнее: частица в поле тяжести над непроницаемым полом. Волновая функция основного состояния должна

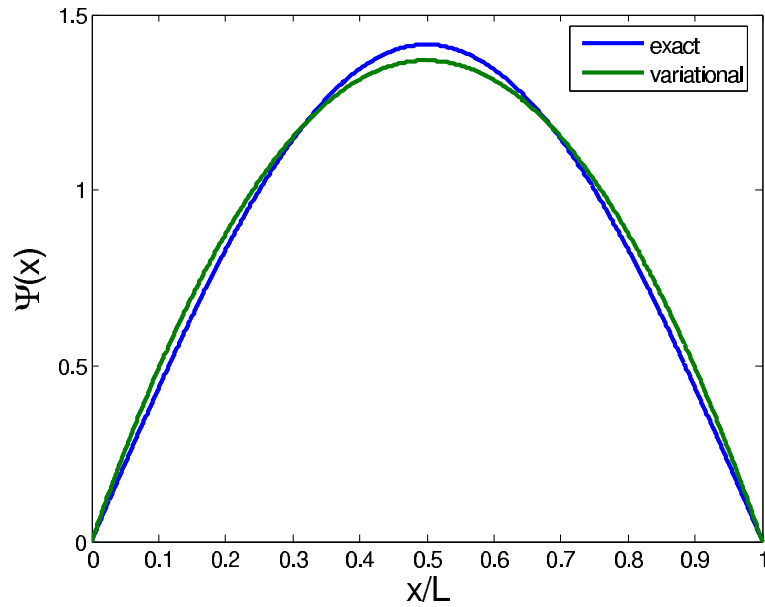


Рис. 29. Сравнение волновых функций точного решения (синяя кривая) и вариационного метода (зеленая кривая).

удовлетворять граничным условиям

$$\psi(z = 0) = 0, \quad \psi(z \rightarrow \infty) \rightarrow 0. \quad (168)$$

В качестве пробной волновой функции выберем

$$\psi(z) = Az \exp(-\alpha z), \quad (169)$$

удовлетворяющую граничным условиям. Вариационный параметр α выберем из условия минимума средней энергии, величина A находится из условия нормировки

$$\int_0^{+\infty} A^2 z^2 \exp(-2\alpha z) dz = \frac{A^2}{4\alpha^3}. \quad (170)$$

Средняя кинетическая энергия равна

$$\begin{aligned}\bar{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_0^{+\infty} z \exp(-\alpha z) \frac{d^2}{dz^2} z \exp(-\alpha z) dz = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_0^{+\infty} (\alpha^2 z^2 - 2\alpha z) \exp(-2\alpha z) dz = \frac{\hbar^2 A^2}{8m\alpha}.\end{aligned}\quad (171)$$

Средняя потенциальная энергия равна

$$\begin{aligned}\bar{U} &= A^2 \int_0^{+\infty} z \exp(-\alpha z) (mgz) z \exp(-\alpha z) dz = \\ &= \frac{A^2 mg}{(2\alpha)^4} \int_0^{+\infty} y^3 \exp(-y) dy = \frac{3mgA^2}{8\alpha^4}.\end{aligned}\quad (172)$$

Полная энергия равна

$$\bar{E} = \bar{T} + \bar{U} = \frac{\hbar^2 A^2}{8m\alpha} + \frac{3mgA^2}{8\alpha^4} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + \frac{3mg}{2\alpha}, \quad (173)$$

где использовали значение нормировочной константы $A^2 = 4\alpha^3$. Минимизируя среднюю энергию по параметру α

$$\frac{d\bar{E}}{d\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{m} - \frac{3mg}{2\alpha^2} = 0 \rightarrow \alpha_o = \left(\frac{3m^2 g}{2\hbar^2} \right)^{1/3}. \quad (174)$$

получаем оценку энергии основного состояния

$$\bar{E}_{min} = (\hbar^2 g^2 m)^{1/3} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)^{2/3} + \frac{3}{2} \left(\frac{2}{3} \right)^{1/3} \right] \approx 1.966 (\hbar^2 g^2 m)^{1/3}. \quad (175)$$

Численное решение уравнения Шредингера дает энергии основного состояния $E_0 = 1.856 (\hbar^2 g^2 m)^{1/3}$. Относительная точность $\Delta E/E_0 \approx 0.06$. Можно улучшить оценку энергии основного состояния, используя другую пробную функцию. Например, функция

$$\psi(z) = Bz \exp(-\alpha z^2) \quad (176)$$

дает оценку энергии основного состояния $1.861 (\hbar^2 g^2 m)^{1/3}$. Относительная точность оценки энергии основного состояния вариационным методом для этой пробной волновой функции составляет

$$\frac{\Delta E}{E_0} \approx 0.0027. \quad (177)$$

7. Лекция. Одномерное рассеяние.

Рассеяние частиц является одним из основных методов изучения свойств молекул, атомов, ядер, элементарных частиц. В одномерном случае на изучаемый объект направляется поток частиц и регистрируются прошедшие и отраженные назад частицы.

Волновая функция налетающих частиц

$$\psi(x) = e^{ikx}, \quad (178)$$

отраженных

$$\psi_r = Ae^{-ikx}, \quad (179)$$

прошедших

$$\psi_d = Be^{ik_1 x}. \quad (180)$$

7.1. Рассеяние на барьере

Рассмотрим рассеяние частиц с импульсом $p = \hbar k$ на потенциальном барьере $U(x) = 0, x < 0, U(x) = U_0, x \geq 0$. Волновая функция налетающих частиц $\psi(x) = e^{ikx}$.

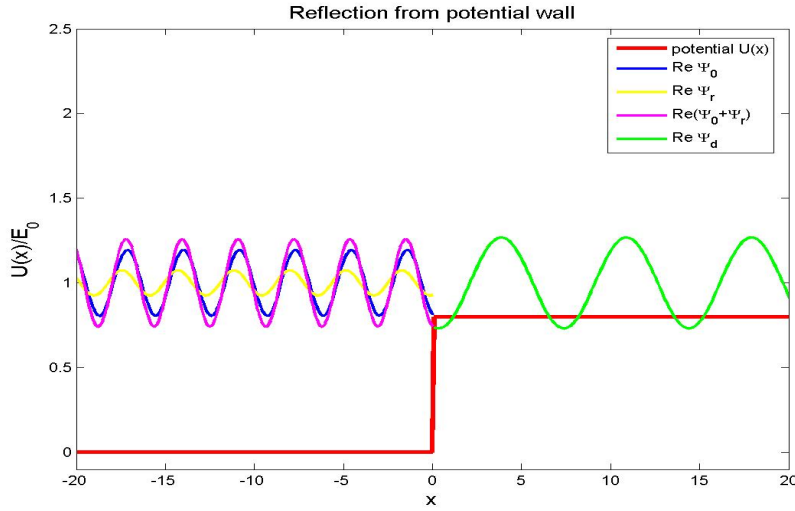


Рис. 30. Волновые функции налетающих, отраженных от барьера и прошедших барьер частиц

Коэффициенты A и B находятся из условия непрерывности волновой функции и ее первой производной при $x = 0$:

$$1 + A = B, \quad ik(1 - A) = ik_1 B, \quad (181)$$

где

$$k = \sqrt{\frac{2m(E)}{\hbar^2}}, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}. \quad (182)$$

Решая эту систему уравнений, получаем

$$A = \frac{k - k_1}{k + k_1}, \quad B = \frac{2k}{k + k_1}. \quad (183)$$

Вероятность найти частицу в интервале Δx есть $|\psi(x, t)|^2 \Delta x$. Если эта вероятность меняется со временем, то частица с

ненулевой вероятностью покидает этот интервал – есть плотность потока вероятности (далее просто “плотность потока”). Найдем выражение для плотности потока из уравнения Шредингера

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} U(x) \psi; \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} U(x) \psi^*. \quad (184)$$

Умножим уравнение для ψ слева на ψ^* и прибавим уравнение для ψ^* умноженное слева на ψ . Получаем

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \equiv \frac{\partial(\psi^* \psi)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right] \equiv -\frac{\partial j}{\partial x}, \quad (185)$$

где

$$j \equiv \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right). \quad (186)$$

Плотность потока для падающей волны

$$j_0 = \frac{i\hbar}{2m} [e^{ikx}(-ik)e^{-ikx} - e^{-ikx}(ik)e^{ikx}] = \hbar k/m, \quad (187)$$

отраженной

$$j_r = -\hbar k|A|^2/m, \quad (188)$$

прошедшей

$$j_t = \hbar k_1|B|^2/m. \quad (189)$$

Коэффициент отражения

$$R = \left| \frac{j_r}{j_0} \right| = \left| \frac{k - k_1}{k + k_1} \right|^2. \quad (190)$$

Коэффициент прохождения находим из условия сохранения числа частиц $T = 1 - R$.

Если высота барьера $U_0 > E$ – энергии падающих частиц, то величина k_1 становится чисто мнимой, поэтому при $x > 0$ волновая функция затухает.

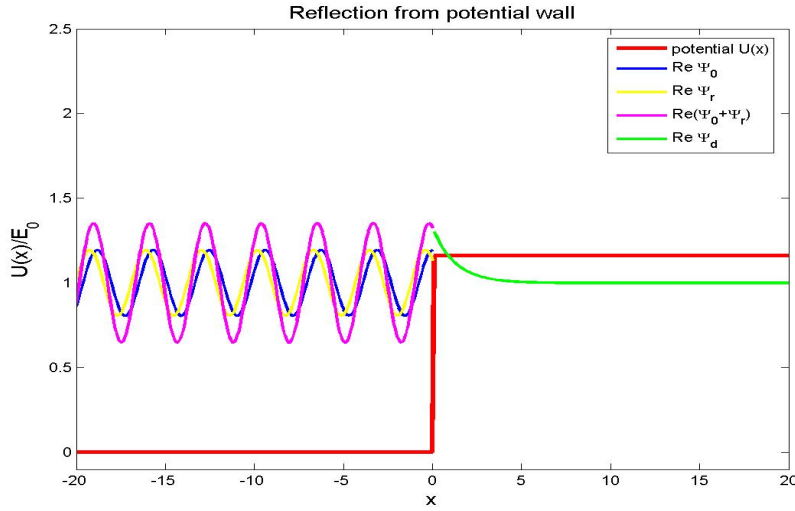


Рис. 31. Волновые функции налетающих, отраженных от барьера и прошедших барьер частиц

Коэффициент отражения

$$R = \left| \frac{k - i|k_1|}{k + i|k_1|} \right|^2 = \frac{k^2 + |k_1|^2}{k^2 + |k_1|^2} = 1. \quad (191)$$

Коэффициент прохождения $T = 1 - R = 0$.

7.2. Рассеяние на барьере конечной ширины

Рассмотрим рассеяние на потенциале $U(x) = U_0$, $0 \leq x \leq a$. Волновая функция в области $x \leq 0$ дается суммой падающей и отраженной волн

$$\psi_1 = e^{ikx} + re^{-ikx}, \quad (192)$$

в области $0 < x < a$

$$\psi_2 = Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x}, \quad (193)$$

в области $x \geq a$ есть прошедшая волна

$$\psi_3 = de^{ikx}. \quad (194)$$

Условия непрерывности волновой функции и ее первой производной на границе $x = 0$ дают два уравнения

$$1 + r = A + B, \quad ik(1 - r) = ik'(A - B) \rightarrow 1 - r = \frac{k'}{k}(A - B). \quad (195)$$

Складывая эти уравнения, получим

$$A = \frac{2k + B(k' - k)}{k' + k}. \quad (196)$$

Условия непрерывности волновой функции и ее первой производной на другой границе $x = a$ дают еще два уравнения

$$Ae^{ik'a} + Be^{-ik'a} = de^{ika}, \quad k' (Ae^{ik'a} - Be^{-ik'a}) = k de^{ika}. \quad (197)$$

Исключая d , получим

$$Ae^{ik'a}(k' - k) = Be^{-ik'a}(k' + k). \quad (198)$$

Подставляя полученное выше выражение для A , находим

$$\begin{aligned} B &= \frac{2k(k' - k)e^{ik'a}}{(k + k')^2 e^{-ik'a} - (k' - k)^2 e^{ik'a}} = \\ &= \frac{k(k' - k)e^{ik'a}}{2kk' \cos(k'a) - i(k'^2 + k^2) \sin(k'a)}. \end{aligned} \quad (199)$$

$$A = \frac{k(k' + k)e^{-ik'a}}{2kk' \cos(k'a) - i(k'^2 + k^2) \sin(k'a)}. \quad (200)$$

Теперь

$$de^{ika} = Ae^{ik'a} + Be^{-ik'a} = \frac{2kk'}{2kk' \cos(k'a) - i(k'^2 + k^2) \sin(k'a)}. \quad (201)$$

Таким образом коэффициент прохождения равен

$$D = \left| de^{ika} \right|^2 = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 \cos^2(k'a) + (k'^2 + k^2)^2 \sin^2(k'a)} =$$

$$= \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 + (k'^2 - k^2)^2 \sin^2(k'a)}. \quad (202)$$

Следует отметить, что если $k'a = n\pi$, то есть на ширине барьера укладывается целое число полувольт, то коэффициент прохождения равен 1, соответственно отраженных волн нет.

7.3. Рассеяние на δ -потенциале.

Если высота барьера U_0 увеличивается, а ширина a уменьшается, так что $U_0 a \equiv G = \text{Const}$, потенциал можно представить в виде $U(x) = G\delta(x)$. Волновая функция в области $x < 0$ дается суммой падающей и отраженной волн

$$\psi_1 = e^{ikx} + re^{-ikx}, \quad (203)$$

в области $x > 0$ есть прошедшая волна

$$\psi_2 = de^{ikx}. \quad (204)$$

Условия непрерывности волновой функции на границе $x = 0$ дает уравнение

$$1 + r = d. \quad (205)$$

Поскольку потенциал обращается в точке $x = 0$ в бесконечность, производная волновой функции испытывает скачок при $x = 0$. Проинтегрировав уравнение Шредингера по области $(-\varepsilon, +\varepsilon)$, $\varepsilon \rightarrow 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx + \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} G\delta(x)\psi(x)dx = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} E\psi(x)dx, \quad (206)$$

получим

$$\left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{\varepsilon} - \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{-\varepsilon} = \frac{2mG}{\hbar^2} \psi(0), \quad (207)$$

что дает второе уравнение

$$ikd - ik(1 - r) = \frac{2mG}{\hbar^2} d. \quad (208)$$

В итоге находим коэффициент прохождения барьера

$$D = |d|^2 = \left| \frac{1}{1 - \frac{imG}{k\hbar^2}} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{m^2 G^2}{k^2 \hbar^4}}. \quad (209)$$

8. Лекция. Квазиклассическое приближение.

8.1. Правила квантования Бора-Зоммерфельда

При больших значениях энергиях можно использовать приближенный метод решения уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi. \quad (210)$$

Перепишем это уравнение

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2(x)\psi(x) = 0, \quad (211)$$

где

$$k(x) \equiv \frac{\sqrt{2m(E - U(x))}}{\hbar}. \quad (212)$$

Если $k^2(x) > 0$ (что соответствует классически разрешенной области движения частицы), то решение будет осциллирующим. С другой стороны, если $k^2(x) < 0$ (что соответствует классически запрещенной области движения частицы), то решение будет затухающим.

Рассмотрим сначала область, в которой $k^2(x) > 0$. Будем искать решение в виде

$$\psi(x) = e^{iS(x)}. \quad (213)$$

Подставляя в уравнение Шредингера, получаем

$$iS'' - (S')^2 + k^2 = 0. \quad (214)$$

Пренебрегая в первом приближении членом S'' , имеем

$$S'(x) = \pm k(x), \rightarrow S(x) = \pm \int k(x) dx. \quad (215)$$

В следующем приближении получаем

$$S'(x) = \pm k(x) + f(x), \rightarrow S''(x) = \pm k'(x) + f'(x), \quad (216)$$

так что получаем

$$\pm ik' + if' - k^2 \pm 2kf - f^2 + k^2 = 0. \quad (217)$$

Пренебрегая малыми членами f', f^2 , находим

$$f = \frac{ik'}{2k}, \quad S' = \pm k + \frac{ik'}{2k}. \quad (218)$$

Откуда

$$S = \pm \int k(x) dx + \frac{i}{2} \ln k. \quad (219)$$

Выбирая волновую функцию в вещественном виде, получаем

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\int k(x) dx + \delta \right). \quad (220)$$

Условие применимости сделанных приближений

$$|f| = \left| \frac{k'}{2k} \right| \ll |k(x)|, \quad (221)$$

что эквивалентно

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad (222)$$

то есть изменение длины волны на расстояниях порядка длины волны должно быть мало. Это условие заведомо нарушается вблизи классических точек поворота, где $k(x) = 0$.

В классически недоступной для частицы области $k^2(x) < 0$ решение будет иметь вид

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \exp \left(- \int |k(x)| dx \right). \quad (223)$$

Непосредственно вблизи классических точек поворота, где $k(x) = 0$, квазиклассическое приближение не работает и более аккуратное рассмотрение дает такие правила сшивки: волновая функция из области $U(x) > E$

$$\psi(x) = \frac{1}{2\sqrt{k(x)}} \exp \left(- \left| \int k(x) dx \right| \right) \quad (224)$$

переходит в волновую функцию из области $U(x) < E$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos \left(\left| \int k(x) dx \right| - \pi/4 \right) \quad (225)$$

При финитном движении с классическими точками поворота a, b из условия однозначности волновой функции получаются правила квантования Бора-Зоммерфельда

$$\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_a^b \sqrt{E - U(x)} dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (226)$$

В качестве примера использования правила квантования Бора-Зоммерфельда рассмотрим определение уровней энергии частицы в потенциале гармонического осциллятора. Имеем

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}} = \frac{m\omega}{\hbar} \sqrt{x_0^2 - x^2}, \quad (227)$$

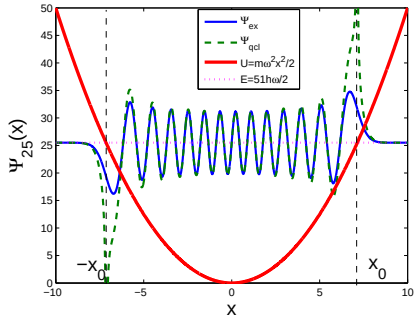


Рис. 32. Сравнение точной волновой функции Ψ_{ex} с квазиклассическим приближением Ψ_{qcl} .

На рис.32 приведено сравнение точной волновой функции Ψ_{ex} с квазиклассическим приближением Ψ_{qcl} в потенциале гармонического осциллятора для уровня $n = 25$, с энергией $E = \hbar\omega(25 + 1/2)$. Вблизи классических точек поворота $\pm x_0$ наблюдается заметное отклонение квазиклассической волновой функции от точного значения. Интеграл

$$\frac{m\omega}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{x_0^2 - x^2} dx = \quad (229)$$

вычисляется с помощью замены

$$x = x_0 \sin u, \quad -\frac{\pi}{2} \leq u \leq \frac{\pi}{2}. \quad (230)$$

Получаем

$$\frac{m\omega x_0^2}{\hbar} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 u du = \frac{\pi m\omega x_0^2}{2\hbar} = \frac{\pi E}{\hbar\omega}, \quad (231)$$

откуда следует результат

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (232)$$

совпадающий с точным решением.

где классические точки поворота $\pm x_0$ определяются энергией

$$E = \frac{m\omega^2 x_0^2}{2}. \quad (228)$$

На рис.32 приведено сравнение точной волновой функции Ψ_{ex} с квазиклассическим приближением Ψ_{qcl} в потенциале гармонического осциллятора для уровня $n = 25$, с энергией $E =$

8.2. Проницаемость барьера

В некоторых задачах проницаемость потенциального барьера очень мала, так что достаточно ограничиться вычислением только с экспоненциальной точностью. Волновая функция при прохождении барьера уменьшается в

$$\exp\left(-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int \sqrt{U(x) - E} dx\right) \quad (233)$$

раз, а коэффициент прохождения барьера тогда равен

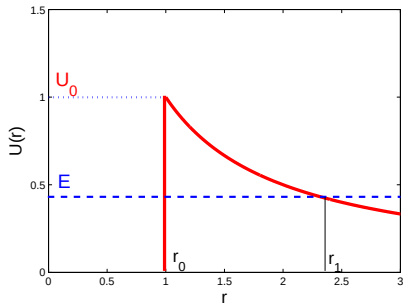
$$D \approx \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{U(x) - E} dx\right), \quad (234)$$

где x_0, x_1 - левая и правая границы классически недоступной области барьера.

Важным примером является α -распад, в котором радиоактивное ядро испускает α -частицу – ядро атома гелия. Чтобы вылететь из ядра с энергией E α -частица должна преодолеть высокий кулоновский барьер

$$U(r) = \frac{2Ze^2}{r}, \quad (235)$$

где Ze – заряд ядра, рис.33.



Левая граница $r_0 \approx 10^{-13} \text{ cm}$ определяется радиусом действия ядерных сил, правая граница r_1 определяется из соотношения

$$E = \frac{2Ze^2}{r_1}. \quad (236)$$

Рис. 33. Туннелирование α -частицы.

Для ядер U, Th и энергии α -частиц $E = 3 - 5$ МэВ выполняется условие $r_0 \ll r_1$. Интеграл

$$\int_{r_0}^{r_1} \sqrt{\frac{2Ze^2}{r} - \frac{2Ze^2}{r_1}} dr \quad (237)$$

вычисляется с помощью замены

$$\frac{r}{r_1} = \sin^2 u, \quad (238)$$

которая для $r_0 \ll r_1$ приводит интеграл к виду

$$\sqrt{2Ze^2 r_1} \int_0^{\pi/2} 2 \cos^2 u du = \frac{\pi}{2} \sqrt{2Ze^2 r_1}. \quad (239)$$

Тогда коэффициент прохождения барьера равен

$$D \approx \exp \left(-\frac{2\pi Ze^2 \sqrt{2m}}{\hbar \sqrt{E}} \right). \quad (240)$$

Период полураспада $T_{1/2}$ радиоактивного ядра обратно пропорционален проницаемости барьера, поэтому

$$\ln T_{1/2} = \frac{A}{\sqrt{E}} + B, \quad (241)$$

где A, B – константы. Полученное соотношение есть экспериментально установленный закон Гейгера-Нетолла.

9. Лекция. Периодический потенциал. Теорема Блоха.

9.1. Теорема Блоха

Рассмотрим одномерную модель кристалла в виде периодически расположенных атомов на расстоянии a друг от друга. Создаваемый ими потенциал удовлетворяет условию

$$U(x+na) = U(x), \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (242)$$

Стационарное решение уравнения Шредингера

$$\hat{H}(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (243)$$

в силу периодичности потенциала должно удовлетворять условию

$$\hat{H}(x+a)\psi(x+a) = E\psi(x+a) = \hat{H}(x)\psi(x+a). \quad (244)$$

Откуда ввиду условия нормировки

$$\psi(x+a) = f(a)\psi(x) = e^{ika}\psi(x). \quad (245)$$

Значит решение уравнения Шредингера имеет вид

$$\psi(x) = e^{ikx}u(x), \quad u(x+a) = u(x). \quad (246)$$

с произвольным вещественным волновым вектором k и периодической функцией $u(x)$. Это утверждение и является теоремой Блоха.



Рис. 34. Ф. Блох

9.2. Зонная структура уровней энергии

Расположение атомов, создающих периодический потенциал и возможный вид волновой функции.

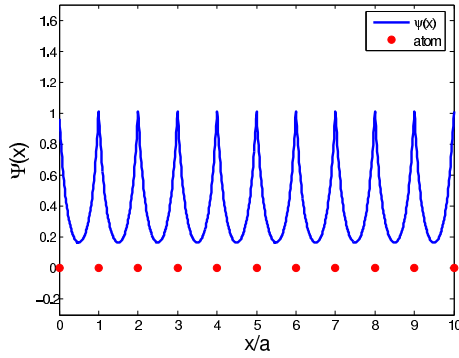


Рис. 35. Расположение атомов, создающих периодический потенциал и возможный вид волновой функции.

Найдем приближенное решение уравнения Шредингера для периодического потенциала

$$U(x) = -G \sum_{n=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \delta(x+na). \quad (247)$$

Для упрощения будем считать, что величина

$$\kappa a = \frac{mGa}{\hbar^2} \gg 1. \quad (248)$$

Это условие означает, что волновая функция очень быстро убывает при удалении от точки расположения одной из дельта-ям и поэтому влияние соседних ям очень мало. В таком случае можно искать приближенное решение уравнения Шредингера в виде

$$\psi(x) = \sum_n A_n \phi_n(x) = \sum_n A_n \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x-na|}. \quad (249)$$

Подставляя это выражение в уравнение Шредингера получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_n A_n \frac{d^2 \phi_n(x)}{dx^2} - G \sum_l \delta(x+la) \sum_n A_n \phi_n(x) = E \sum_n A_n \phi_n(x). \quad (250)$$

Выделим в левой части этого уравнения члены с одинаковыми ϕ_n

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_n A_n \frac{d^2 \phi_n(x)}{dx^2} - G \sum_n \delta(x+na) A_n \phi_n(x) = E_0 \sum_n A_n \phi_n(x), \quad (251)$$

где E_0 – энергия в потенциале одиночной ямы, то есть когда можно полностью пренебречь влиянием других ям. Теперь уравнение становится таким

$$(E - E_0) \sum_n A_n \phi_n(x) = -G \sum_{l \neq n} \delta(x + la) \sum_n A_n \phi_n(x). \quad (252)$$

Умножим это уравнение на $\phi_0(x)$ и проинтегрируем. Имеем

$$\begin{aligned} (E - E_0) \left(A_{-1} \int \phi_{-1}(x) \phi_0(x) dx + A_0 + A_1 \int \phi_1(x) \phi_0(x) dx \right) = \\ -G \left(A_{-1} \int \phi_{-1}(x) \phi_0(x) \delta(x + a) dx + A_1 \int \phi_1(x) \phi_0(x) \delta(x - a) dx \right). \end{aligned} \quad (253)$$

В последней строке не включены члены вида

$$-GA_0 \left(\int \phi_0^2(x) \delta(x + a) dx + \int \phi_0^2(x) \delta(x - a) dx \right), \quad (254)$$

поскольку они малы по сравнению с учтенными. Действительно, вычислим сначала интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1(x) \phi_0(x) \delta(x - a) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \kappa e^{-\kappa|x|} e^{\kappa|x-a|} \delta(x - a) dx = \kappa e^{-\kappa a}. \quad (255)$$

Мы не включили интегралы вида

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_0^2(x) \delta(x - a) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \kappa e^{-2\kappa|x|} \delta(x - a) dx = \kappa e^{-2\kappa a}, \quad (256)$$

поскольку они содержат дополнительные множители $e^{-\kappa a} \ll 1$. Аналогично, можно пренебречь интегралами перекрытия

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_0(x) \phi_1(x - a) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \kappa e^{-\kappa|x|} e^{-\kappa|x-a|} dx. \quad (257)$$

Основной вклад дает область интегрирования $0 < x < a$

$$\int_0^a \kappa e^{-\kappa x} e^{-\kappa(a-x)} dx = \kappa a e^{-\kappa a} \ll 1, \quad (258)$$

тогда как для области $x > a$

$$\int_a^{+\infty} \kappa e^{-\kappa x} e^{-\kappa(x-a)} dx = e^{-\kappa a} / 2 \quad (259)$$

вклад еще меньше. В итоге имеем уравнение

$$(E - E_0)A_0 = -G\kappa e^{-\kappa a} (A_{-1} + A_1). \quad (260)$$

Вспоминая теорему Блоха, подставляем $A_n = e^{iqa}$, получая

$$(E - E_0) = -2G\kappa e^{-\kappa a} \cos(qa). \quad (261)$$

Таким образом частица имеет непрерывный спектр возможных значений энергии в интервале (зоне)

$$E_0 - 2G\kappa e^{-\kappa a} < E < E_0 + 2G\kappa e^{-\kappa a}. \quad (262)$$

При малых значениях волнового вектора $qa \ll 1$ получаем

$$E = E_0 - 2G\kappa e^{-\kappa a} + G\kappa e^{-\kappa a} q^2 a^2 = E_{min} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{eff}}, \quad (263)$$

то есть частица движется в периодическом потенциале как свободная с эффективной массой

$$m_{eff} = \frac{\hbar^2 e^{\kappa a}}{2G\kappa a^2} = \frac{m e^{\kappa a}}{2(\kappa a)^2} \gg m. \quad (264)$$

Энергия частицы в периодическом потенциале как функция волнового вектора q показана на рис. 36. Точное решение – синяя кривая, приближение свободных частиц с эффективной массой – зеленая кривая.

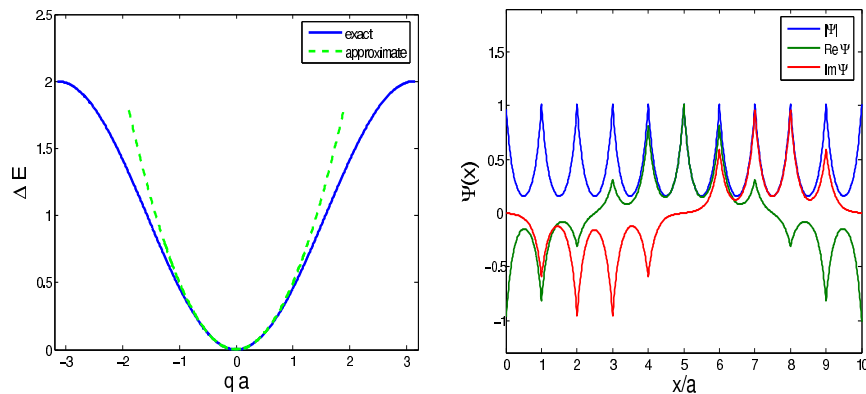


Рис. 36. Энергия частицы в периодическом потенциале как функция волнового вектора q , (слева), Вид волновой функции при $qa = 0.6$, (справа)

10. Лекция. Момент импульса.

Свойства момента импульса в квантовой механике возникают естественным образом из поведения волновой функции при поворотах системы координат.

10.1. Преобразование волновой функции при поворотах

Рассмотрим преобразование волновой функции при повороте системы координат на небольшой угол $\delta\phi$ вокруг оси z . Точка с координатами x, y в повернутой системе будет иметь координаты

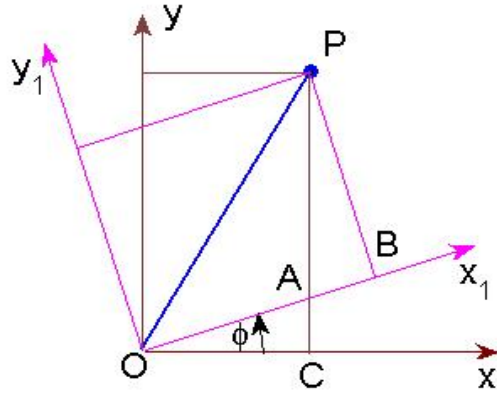
$$x' = x \cos(\delta\phi) + y \sin(\delta\phi) \approx x + \delta\phi \cdot y, \quad (265)$$

$$y' = -x \sin(\delta\phi) + y \cos(\delta\phi) \approx y - \delta\phi \cdot x. \quad (266)$$

Рассмотрим поворот системы координат на угол ϕ , рис. 37.

Из рисунка видно, что

$$x' = OA + AB = \frac{OC}{\cos \phi} + PB \tan \phi = \frac{x}{\cos \phi} + y' \tan \phi \quad (267)$$

Рис. 37. Поворот системы координат на угол ϕ .

$$y = PC = PA + AC = \frac{PB}{\cos \phi} + OC \tan \phi = \frac{y'}{\cos \phi} + x \tan \phi. \quad (268)$$

Из последнего соотношения следует

$$y' = y \cos \phi - x \sin \phi. \quad (269)$$

Подставляя в предыдущее соотношение, получаем

$$x' = x \cos \phi + y \sin \phi. \quad (270)$$

Новая волновая функция с новыми координатами $\psi'(x', y')$ равна старой волновой функции со старыми координатами $\psi(x, y)$ поскольку описывают одну и ту же систему с разных точек зрения. Новая волновая функция со старыми координатами

натами $\psi'(x, y)$ равна старой волновой функции с координатами

$$x'' \approx x - \delta\phi \cdot y, \quad y'' \approx y + \delta\phi \cdot x. \quad (271)$$

Показана точка P_1 для которой $\psi'(x, y) = \psi(x'', y'')$, рис. 38.

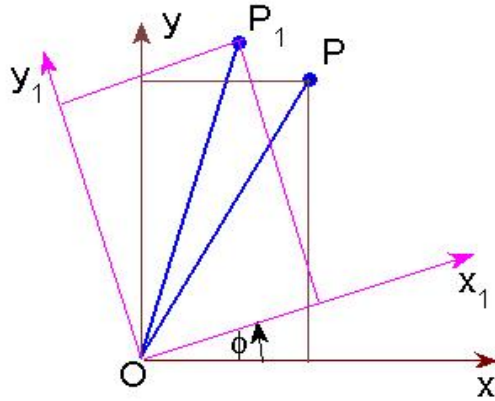


Рис. 38. Показана точка P_1 для которой $\psi'(x, y) = \psi(x'', y'')$.

То есть

$$\begin{aligned} \psi'(x, y, z) &\approx \psi(x - \delta\phi \cdot y, y + \delta\phi \cdot x, z) \approx \\ &\approx \psi(x, y, z) + \delta\phi \left(-y \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = \\ &= \left(1 + \delta\phi \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z \right) \psi(x, y, z) \equiv \hat{T} \psi(x, y, z), \end{aligned} \quad (272)$$

в последнем равенстве введен оператор z -компонента момента импульса

$$\hat{L}_z = [\vec{r} \times \vec{p}]_z = i\hbar \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right). \quad (273)$$

Величина

$$\hat{T} = 1 + \delta\phi \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z \quad (274)$$

называется оператором поворота вокруг оси z .

10.2. Коммутационные соотношения для компонент момента импульса

Поскольку при таком повороте изменяются x и y компоненты координаты и импульса, оператор $\hat{L}_z$ не коммутирует с этими компонентами координаты и импульса

$$[\hat{L}_z, x] = [x\hat{p}_y - y\hat{p}_x, x] = i\hbar y, \quad [\hat{L}_z, y] = [x\hat{p}_y - y\hat{p}_x, y] = -i\hbar x, \quad (275)$$

где мы использовали соотношение

$$[\hat{A} \cdot \hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (276)$$

и значение коммутатора

$$[r_k, \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{kl}. \quad (277)$$

Аналогично для компонент импульса

$$[\hat{L}_z, \hat{p}_x] = [x\hat{p}_y - y\hat{p}_x, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{p}_y, \quad [\hat{L}_z, \hat{p}_y] = [x\hat{p}_y - y\hat{p}_x, \hat{p}_y] = -i\hbar \hat{p}_x, \quad (278)$$

и момента импульса

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = [x\hat{p}_y - y\hat{p}_x, y\hat{p}_z - z\hat{p}_y] = [x\hat{p}_y, y\hat{p}_z] + [y\hat{p}_x, z\hat{p}_y] = i\hbar \hat{L}_y, \quad (279)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_y] = -i\hbar \hat{L}_x. \quad (280)$$

Так как при повороте вокруг оси z для любых векторов их z -компоненты не меняются, то

$$[\hat{L}_z, z] = 0, \quad [\hat{L}_z, \hat{p}_z] = 0, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_z] = 0, \quad (281)$$

что легко проверить прямым вычислением. При поворотах не меняются также скалярные величины. Например,

$$[\hat{L}_z, \vec{r} \cdot \vec{p}] = 0, \quad (282)$$

Вот формальное доказательство. Если повернуть и систему координат и сами векторы, то средние значения не изменятся

$$\langle \psi' | \vec{r}' \cdot \vec{p}' | \psi' \rangle = \langle \psi | \vec{r} \cdot \vec{p} | \psi \rangle. \quad (283)$$

Подставляя закон преобразования векторов состояний

$$|\psi'\rangle = \left(1 + \delta\phi \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z\right) |\psi\rangle, \quad \langle\psi'| = \langle\psi| \left(1 - \delta\phi \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z\right) \quad (284)$$

и учитывая неизменность скалярного произведения векторов, получим

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \vec{r}' \cdot \vec{p}' | \psi' \rangle &= \langle \psi | \left(1 - \delta\phi \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z\right) \vec{r} \cdot \vec{p} \left(1 + \delta\phi \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z\right) | \psi \rangle = \\ &= \langle \psi | \left(\vec{r} \cdot \vec{p} + \delta\phi \frac{i}{\hbar} [\vec{r} \cdot \vec{p}, \hat{L}_z] \right) | \psi \rangle = \langle \psi | \vec{r} \cdot \vec{p} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (285)$$

откуда следует

$$[\hat{L}_z, \vec{r} \cdot \vec{p}] = 0, \quad (286)$$

Точно также доказывается, что

$$[\hat{L}_z, (\vec{L})^2] = 0, \quad (287)$$

где

$$(\vec{L})^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (288)$$

Это соотношение указывает, что собственное состояние оператора квадрата момента импульса является также собственным состоянием оператора одной из проекций момента импульса. Принято выбирать $\hat{L}_z$.

Удобно использовать величины

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y. \quad (289)$$

Полезные коммутационные соотношения

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = \hbar\hat{L}_+, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar\hat{L}_-. \quad (290)$$

Обозначим собственный вектор операторов $\hat{L}^2, \hat{L}_z$ через $|\nu, m\rangle$ с собственным значением $\hbar m$ для оператора $\hat{L}_z$. Тогда, используя приведенные выше коммутационные соотношения получаем

$$\hat{L}_z\hat{L}_+|\nu, m\rangle = (\hat{L}_+\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_+)|\nu, m\rangle = \hbar(m+1)\hat{L}_+|\nu, m\rangle. \quad (291)$$

Таким образом оператор $\hat{L}_+$ действуя на собственный вектор $|\nu, m\rangle$ дает вектор с собственным значением $m+1$ и поэтому называется повышающим оператором. Точно также получаем, что

$$\hat{L}_z\hat{L}_-|\nu, m\rangle = (\hat{L}_-\hat{L}_z - \hbar\hat{L}_-)|\nu, m\rangle = \hbar(m-1)\hat{L}_-|\nu, m\rangle. \quad (292)$$

Поэтому $\hat{L}_-$ называется понижающим оператором.

Так как величина

$$\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \geq 0, \quad (293)$$

то модуль собственного значения проекции момента импульса не превышает собственное значение квадрата момента импульса. Обозначим максимальную величину $m = l$. Действуя

на вектор с максимальным собственным значением $m = l$ оператором $\hat{L}_- \hat{L}_+$ получим

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ |\nu, l\rangle = (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - \hbar \hat{L}_z) |\nu, l\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z) |\nu, l\rangle = 0 \quad (294)$$

Значит

$$\hat{L}^2 |\nu, l\rangle = \hbar^2 l(l+1) |\nu, l\rangle. \quad (295)$$

Действуя последовательно оператором $\hat{L}_-$ на состояние с максимальной проекцией $|\nu, l\rangle$ мы получим все собственные состояния, которые для краткости обозначим $|l, m\rangle$.

Из симметрии следует, что минимальное собственное значение проекции момента импульса будет $m = -l$. Поскольку значения m изменяется на $\Delta m = 1$, всего имеется $2l + 1$ значений проекции момента импульса.

11. Лекция. Спин.

В эксперименте О. Штерна и В. Герлаха было обнаружено квантование проекции момента импульса атомов, проходящих через область неоднородного магнитного поля. Заряженные частицы, обладающие отличным от нуля моментом импульса, имеют магнитный момент.

Магнитные моменты атомов взаимодействуют с неоднородным магнитным полем, что приводит к отклонению пучка частиц в сторону большего или меньшего значения магнитного поля в зависимости от ориентации магнитного момента



Отто Штерн

Рис. 39. О. Штерн

частицы.

Число возможных проекций момента импульса равно $2l + 1$. В эксперименте с атомами серебра было обнаружено расщепление пучка на две составляющие, что было интерпретировано как внутренний момент импульса электрона на внешней оболочке атома серебра. Собственный отличный от нуля момент импульса имеют многие элементарные частицы: электрон, протон, нейтрон и другие. Принято говорить, что электрон обладает спином $1/2$, имея в виду что проекция момента импульса электрона принимает значения $\pm \hbar/2$.



Рис. 40. В. Герлах

11.1. Матрицы Паули

Компоненты спина электрона подчиняются выведенным выше коммутационным соотношениям

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar\hat{S}_z; \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y; \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar\hat{S}_x. \end{aligned} \quad (296)$$

Кроме того

$$[\hat{S}_x, \hat{S}^2] = 0; \quad [\hat{S}_y, \hat{S}^2] = 0; \quad [\hat{S}_z, \hat{S}^2] = 0. \quad (297)$$

Поскольку мы имеем систему с двумя базисными состояниями (проекция момента импульса на выделенное направление принимает два значения $\pm \hbar/2$), удобно представить

операторы проекций спина в виде

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z, \quad (298)$$

где $\hat{\sigma}_i$ – матрицы Паули

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (299)$$

Например вычислим коммутатор

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = \frac{\hbar^2}{4} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \quad (300)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = i\hbar \hat{S}_z. \quad (301)$$

Проверить в качестве упражнения другие коммутационные соотношения: $[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x$, $[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y$.

Собственными векторами оператора $\hat{S}_z$ будут векторы-столбцы

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (302)$$



Рис. 41. В. Паули

Собственные векторы, принадлежащие разным собственным значениям, ортогональны

$$\langle \psi_{+z} | \psi_{-z} \rangle = (1 \ 0) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0. \quad (303)$$

В общем случае

$$\text{если } |\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \text{ то } \langle\psi| = (a^* \ b^*). \quad (304)$$

Условие нормировки

$$\langle\psi|\psi\rangle = (a^* \ b^*) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (305)$$

Собственными векторами оператора $\hat{S}_x$ будут векторы-столбцы

$$|\psi_{+x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\psi_{-x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (306)$$

Действительно

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (307)$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (308)$$

И аналогично для $\hat{S}_y$

$$|\psi_{+y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad |\psi_{-y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (309)$$

Операторы проекций спина на различные оси не коммутируют. Если частица имеет определенное значение проекции на одну ось, то ее проекция на другую ось не имеет определенного значения, т.е. при измерении можно получить либо $\hbar/2$, либо $-\hbar/2$. Например, если частица находится в состоянии

$$|\psi_{+x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (310)$$

то вероятность найти ее в состоянии $|\psi_{+z}\rangle$ равна

$$W_{+x \rightarrow +z} = \left| \langle \psi_{+z} | \psi_{+x} \rangle \right|^2 = \frac{1}{2} \left| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}, \quad (311)$$

а вероятность найти ее в состоянии $|\psi_{-z}\rangle$ равна

$$W_{+x \rightarrow -z} = \left| \langle \psi_{-z} | \psi_{+x} \rangle \right|^2 = \frac{1}{2} \left| \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{2}. \quad (312)$$

Операторы $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$, являются эрмитовыми. В представлении их в виде матриц это означает

$$(S_\alpha)_{ij}^\dagger = (S_\alpha^*)_{ji}, \quad (313)$$

т.е. нужно поменять местами строки и столбцы (транспонировать) и взять комплексное сопряжение для каждого элемента матрицы. Например

$$(\hat{S}_y)^\dagger = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^\dagger = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & (i)^* \\ (-i)^* & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \hat{S}_y. \quad (314)$$

Собственные значения эрмитовых операторов, как мы видели, вещественны. Повышающий и понижающий операторы имеют вид

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (315)$$

Действуя на собственные векторы оператора $\hat{S}_z$, они приводят к следующим результатам

$$\hat{S}_+ |\psi_{-z}\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar |\psi_{+z}\rangle, \quad \hat{S}_+ |\psi_{+z}\rangle = 0, \quad (316)$$

$$\hat{S}_-|\psi_{+z}\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar|\psi_{-z}\rangle, \quad \hat{S}_-|\psi_{-z}\rangle = 0. \quad (317)$$

Собственные вектора любого из операторов $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$, образуют полный набор, т.е. любое спиновое состояние можно представить в виде линейной комбинации собственных векторов. Например, представим состояние $|\psi_{+x}\rangle$ в виде

$$|\psi_{+x}\rangle = C_1|\psi_{+z}\rangle + C_2|\psi_{-z}\rangle. \quad (318)$$

Чтобы найти коэффициент C_1 умножим это равенство на эрмитово сопряженный вектор $\langle\psi_{+z}|$

$$\langle\psi_{+z}|\psi_{+x}\rangle = C_1\langle\psi_{+z}|\psi_{+z}\rangle + C_2\langle\psi_{+z}|\psi_{-z}\rangle = C_1 \quad (319)$$

в силу ортонормированности собственных векторов $|\psi_{\pm z}\rangle$. Аналогично

$$C_2 = \langle\psi_{-z}|\psi_{+x}\rangle. \quad (320)$$

Усовершенствованный прибор Штерна-Герлаха сначала разделяет пучок на два, а затем снова собирается в один, за счет того, что в средней части градиент магнитного поля имеет противоположное направление. В месте максимального разделения можно поставить перегородку, поглощающую часть пучка в состоянии $|\psi_{\pm}\rangle$. Магнитное поле в приборе направлено по оси z и внутри поглощаются частицы в состоянии $|\psi_{-z}\rangle$ т.е. на выходе мы имеем частицы в состоянии $|\psi_{+z}\rangle$.

Рассмотрим опыт с усовершенствованными приборами Штерна-Герлаха. Пусть магнитное поле в первом приборе направлено по оси z и внутри поглощаются частицы в состоянии $|\psi_{-z}\rangle$ т.е. на выходе мы имеем частицы в состоянии $|\psi_{+z}\rangle$. Тогда если пропускать полученный пучок через другой прибор, с магнитным полем вдоль оси z , но внутри поглощаются частицы в состоянии $|\psi_{+z}\rangle$, то на выходе из второго прибора частиц не будет, все поглотятся. Поставим между этими приборами еще один, магнитное поле в котором направлено по

оси x . Если в этом приборе нет поглотителей, то на выходе будет опять поляризация $|\psi_{+z}\rangle$ и тогда в последнем приборе все частицы поглотятся. Однако, если задерживать во втором приборе частицы в состоянии $|\psi_{-x}\rangle$, то на выходе половина частиц окажется в состоянии $|\psi_{+x}\rangle$. Тогда половина из этих частиц пройдет через последний прибор.

11.2. Прецессия спина в магнитном поле

Рассмотрим поведение частицы со спином во внешнем магнитном поле. Гамильтониан частицы со спином в магнитном поле $\vec{B}$ имеет вид

$$\hat{H} = -\mu (\hat{\sigma}_x B_x + \hat{\sigma}_y B_y + \hat{\sigma}_z B_z), \quad (321)$$

где $\hat{\sigma}_i$ матрицы Паули, а μ магнитный момент частицы (для электрона $\mu = e\hbar/2mc$). Направим магнитное поле по оси z , тогда уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle \quad (322)$$

для двухкомпонентного вектора столбца

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (323)$$

примет вид

$$\begin{pmatrix} i\hbar \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ i\hbar \frac{\partial C_2}{\partial t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mu B_0 & 0 \\ 0 & \mu B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}. \quad (324)$$

Если внешнее магнитное поле не зависит от времени, то решением будет

$$C_1(t) = C_1(0)e^{i\mu B_0 t/\hbar}, \quad C_2(t) = C_2(0)e^{-i\mu B_0 t/\hbar}. \quad (325)$$

Пусть при $t = 0$ частица со спином находилась в состоянии с поляризацией вдоль оси x

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (326)$$

тогда

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\mu B_0 t/\hbar} \\ e^{-i\mu B_0 t/\hbar} \end{pmatrix}. \quad (327)$$

Найдем среднее значение x -компоненты спина

$$\begin{aligned} \overline{\hat{S}_x} &= \frac{\hbar}{2} \langle \psi(t) | \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} | \psi(t) \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{4} (e^{-i\mu B_0 t/\hbar} \ e^{i\mu B_0 t/\hbar}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\mu B_0 t/\hbar} \\ e^{-i\mu B_0 t/\hbar} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{4} (e^{i2\mu B_0 t/\hbar} + e^{-i2\mu B_0 t/\hbar}) = \frac{\hbar}{2} \cos(2\mu B_0 t/\hbar). \end{aligned} \quad (328)$$

Среднее значение y -компоненты спина

$$\begin{aligned} \overline{\hat{S}_y} &= \frac{\hbar}{2} \langle \psi(t) | \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} | \psi(t) \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{4} (ie^{i2\mu B_0 t/\hbar} - ie^{-i2\mu B_0 t/\hbar}) = -\frac{\hbar}{2} \sin(2\mu B_0 t/\hbar). \end{aligned} \quad (329)$$

Средние значения можно найти иначе: определим сначала вероятности оказаться частице в состояниях $|\pm x\rangle$:

$$P_{(\psi(t) \rightarrow +)} \equiv |\langle +x | \psi(t) \rangle|^2, \quad P_{(\psi(t) \rightarrow -)} \equiv |\langle -x | \psi(t) \rangle|^2. \quad (330)$$

Имеем

$$\langle +x | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} (1 \ 1) \begin{pmatrix} e^{i\mu B_0 t/\hbar} \\ e^{-i\mu B_0 t/\hbar} \end{pmatrix} = \cos(\mu B_0 t/\hbar) \quad (331)$$

$$\langle -x | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} (1 \ -1) \begin{pmatrix} e^{i\mu B_0 t/\hbar} \\ e^{-i\mu B_0 t/\hbar} \end{pmatrix} = i \sin(\mu B_0 t/\hbar). \quad (332)$$

Тогда

$$\begin{aligned}\overline{\hat{S}_x} &= \frac{\hbar}{2} P_{(\psi(t) \rightarrow +)} - \frac{\hbar}{2} P_{(\psi(t) \rightarrow -)} = \\ &= \frac{\hbar}{2} |\langle +x | \psi(t) \rangle|^2 - \frac{\hbar}{2} |\langle -x | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2} \cos(2\mu B_0 t / \hbar). \quad (333)\end{aligned}$$

Таким образом поведение средних значений позволяет говорить о вращении спина вокруг направления внешнего магнитного поля с угловой частотой

$$\omega_0 = \frac{2\mu B_0}{\hbar} = \frac{eB_0}{mc} \text{ для электрона.} \quad (334)$$

Магнитный момент электрона $\mu = e\hbar/(2mc) \approx 5.8 \cdot 10^{-9}$ эВ/Гс. В магнитном поле $B_0 = 0.3$ Т = $3 \cdot 10^3$ Гс резонансная циклическая частота $f = \omega_0/(2\pi) = 10^{10}$ Гц. Этой частоте электромагнитного поля соответствует длина волны 3 см.

11.3. Магнитный резонанс

Если вначале спин был направлен вдоль магнитного поля, то его ориентация не изменится со временем. Прикладывая небольшое поперечное поле мы заставим вращаться электрон вокруг суммарного магнитного поля, направление которого почти совпадает с осью z и вероятность ориентации спина против направления магнитного поля (переворота спина) очень мала. Однако, если поперечное поле меняется со временем, то при некоторых условиях переворот спина возможен.

Рассмотрим поведение спина в магнитном поле вида

$$\vec{B} = \vec{e}_z B_0 + \vec{e}_x B_1 \cos(\omega t) + \vec{e}_y B_1 \sin(\omega t), \quad (335)$$

где $B_1 \ll B_0$. Уравнение Шредингера имеет вид

$$\begin{pmatrix} i\hbar \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ i\hbar \frac{\partial C_2}{\partial t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mu B_0 & -\mu B_1 e^{-i\omega t} \\ -\mu B_1 e^{i\omega t} & \mu B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}. \quad (336)$$

Введем обозначения

$$\omega_0 = -\frac{\mu B_0}{\hbar}, \quad \omega_1 = -\frac{\mu B_1}{\hbar}, \quad (337)$$

тогда получаем уравнения

$$i\frac{dC_1}{dt} = \omega_0 C_1 + \omega_1 e^{-i\omega t} C_2 \quad (338)$$

$$i\frac{dC_2}{dt} = -\omega_0 C_2 + \omega_1 e^{i\omega t} C_1. \quad (339)$$

Ищем решения в виде

$$C_1(t) = A_1(t)e^{-i\omega_0 t}, \quad C_2(t) = A_2(t)e^{i\omega_0 t}, \quad (340)$$

получая

$$i\frac{dA_1}{dt} = \omega_1 e^{i(2\omega_0 - \omega)t} A_2 \quad (341)$$

$$i\frac{dA_2}{dt} = \omega_1 e^{-i(2\omega_0 - \omega)t} A_1. \quad (342)$$

Из первого уравнения находим

$$A_2 = i\frac{e^{-i\Delta\omega t}}{\omega_1} \frac{dA_1}{dt}, \quad (343)$$

где

$$\Delta\omega \equiv 2\omega_0 - \omega, \quad (344)$$

и подставляем во второе

$$-\frac{d^2 A_1}{dt^2} \frac{e^{-i\Delta\omega t}}{\omega_1} + \frac{i\Delta\omega e^{-i\Delta\omega t}}{\omega_1} \frac{dA_1}{dt} = \omega_1 A_1 e^{-i\Delta\omega t}. \quad (345)$$

Рассмотрим случай резонанса: частота переменного поля совпадает с частотой прецессии (вращения) магнитного момента в постоянном поле, $\Delta\omega = 0$. Решением, удовлетворяющим

начальному условию $A_1(0) = 1$ (вначале спин направлен по магнитному полю), будет

$$A_1(t) = \cos(\omega_1 t), \quad A_2(t) = -i \sin(\omega_1 t). \quad (346)$$

Тогда двухкомпонентный вектор столбец равен

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_0 t} \cos(\omega_1 t) \\ -ie^{i\omega_0 t} \sin(\omega_1 t) \end{pmatrix}. \quad (347)$$

Найдем среднее значение z - компоненты спина

$$\begin{aligned} \overline{\hat{S}_z} &= \frac{\hbar}{2} \langle \psi(t) | \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} | \psi(t) \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2} (C_1^* \ C_2^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{2} (|C_1|^2 - |C_2|^2) = \frac{\hbar}{2} \cos(2\omega_1 t). \end{aligned} \quad (348)$$

Среднее значение x - компоненты спина

$$\begin{aligned} \overline{\hat{S}_x} &= \frac{\hbar}{2} \langle \psi(t) | \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} (C_1^* \ C_2^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{2} (C_1 C_2^* + C_1^* C_2) = \frac{\hbar}{2} \sin(2\omega_1 t) \sin(2\omega_0 t). \end{aligned} \quad (349)$$

Аналогично среднее значение y - компоненты спина

$$\overline{\hat{S}_y} = -\frac{\hbar}{2} \sin(2\omega_1 t) \cos(2\omega_0 t). \quad (350)$$

Таким образом в момент времени $T = \pi/2\omega_1$ спин, сначала направленный по магнитному полю, будет направлен противоположно магнитному полю. Это явление называется магнитным резонансом. Рассмотрим общий случай $\Delta\omega \neq 0$. Удобно получить уравнение для A_2

$$A_1 = i \frac{e^{i\Delta\omega t}}{\omega_1} \frac{dA_2}{dt}, \quad (351)$$

тогда

$$-\frac{d^2 A_2}{dt^2} - i\Delta\omega \frac{dA_2}{dt} = \omega_1^2 A_2. \quad (352)$$

Ищем решение в виде

$$A_2(t) = be^{i\lambda t} : \quad (353)$$

получаем

$$\lambda^2 + \lambda\Delta\omega - \omega_1^2 = 0, \quad (354)$$

откуда общее решение

$$A_2 = e^{-i\Delta\omega t/2} (b_1 e^{i\Omega t} + b_2 e^{-i\Omega t}), \quad (355)$$

где

$$\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \Delta\omega^2/4}. \quad (356)$$

Начальные условия $A_2(0) = 0$, $A_1(0) = 1$, откуда

$$A_2(t) = e^{-i\Delta\omega t/2} b_1 2i \sin(\Omega t), \quad (357)$$

$$A_1(0) = -\frac{\Omega}{\omega_1} 2b_1 = 1 \rightarrow b_1 = -\frac{\omega_1}{2\Omega}. \quad (358)$$

Таким образом, вероятность переворота спина есть

$$|A_2|^2 = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + \Delta\omega^2/4} \sin^2(\Omega t) = \frac{B_1^2}{B_1^2 + B_0^2(1 - \omega/2\omega_0)^2} \sin^2(\Omega t), \quad (359)$$

Вероятность переворота спина быстро уменьшается при $B_1 \ll B_0$ вне резонанса, когда $\Delta\omega \neq 0$. Зависимость компонент среднего значения магнитного момента от времени при наложении поперечного магнитного поля с частотой, равной частоте прецессии магнитного момента в продольном поле (резонанс) показана на рис. 42. Продольная намагниченность M_z колеблется с максимальной амплитудой.

Зависимость компонент среднего значения магнитного момента от времени при наложении поперечного магнитного

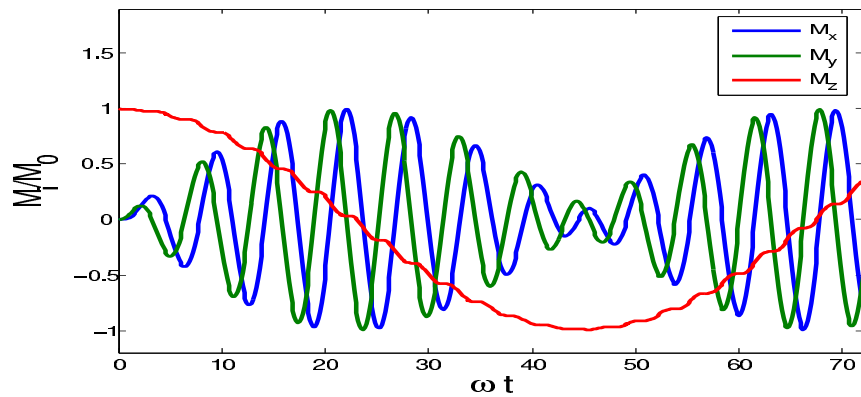


Рис. 42. Зависимость компонент среднего значения магнитного момента от времени при наложении поперечного магнитного поля с частотой, равной частоте прецессии магнитного момента в продольном поле – резонанс. Продольная намагниченность колеблется с максимальной амплитудой.

поля с частотой, отличающейся от частоты прецессии магнитного момента в продольном поле, показана на рис. 43. Изменение продольной намагниченности M_z мало.

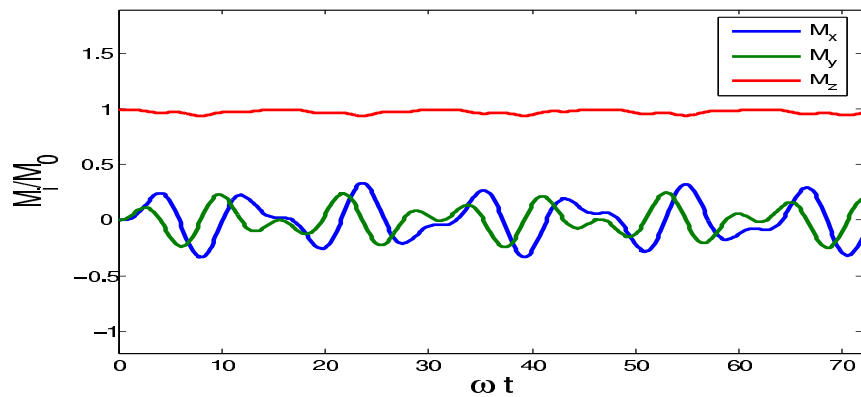


Рис. 43. Зависимость компонент среднего значения магнитного момента от времени при наложении поперечного магнитного поля с частотой, отличающейся от частоты прецессии магнитного момента в продольном поле. Изменение продольной намагниченности мало.

12. Лекция. Различные представления уравнений движения.

12.1. Представление Шредингера

Наиболее часто в квантовой механике используется представление Шредингера, в котором физическим наблюдаемым сопоставляются не зависящие от времени операторы, например оператор импульса

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (360)$$

а зависимость от времени определяется волновой функцией (вектором состояния), которая описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (361)$$

где $\hat{H}$ – оператор Гамильтона системы. Среднее значение некоторого оператора $\hat{A}$ в состоянии $|\Psi\rangle$ равно

$$\bar{A} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle. \quad (362)$$

Если гамильтониан системы $\hat{H}_0$ не зависит явно от времени, то можно написать формальное решение уравнения Шредингера

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\Psi(0)\rangle, \quad (363)$$

где экспоненциальную функцию от оператора $\hat{B}$ следует понимать как разложение в ряд

$$e^{\hat{B}} = 1 + \hat{B} + \frac{1}{2!} \hat{B}^2 + \dots + \frac{1}{n!} \hat{B}^n + \dots \quad (364)$$

12.2. Представление Гейзенберга

Используя формальное решение уравнения Шредингера, можно представить выражение для среднего значения оператора $\hat{A}$ в виде

$$\bar{A}(t) = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \Psi(0) | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} | \Psi(0) \rangle, \quad (365)$$

где использована эрмитовость гамильтониана $\hat{H}_0^\dagger = \hat{H}_0$. В представлении Гейзенберга это выражение интерпретируется как среднее значение зависящего от времени оператора

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (366)$$

по независящему от времени состоянию системы $|\Psi(0)\rangle$

$$\bar{A}(t) = \langle \Psi(0) | \hat{A}(t) | \Psi(0) \rangle. \quad (367)$$

Динамика системы теперь описывается уравнением Гейзенберга для оператора $\hat{A}(t)$

$$\frac{d}{dt} \hat{A}(t) = \frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} - e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{A}(t)]. \quad (368)$$

В качестве примера рассмотрим поведение магнитного момента электрона в постоянном магнитном поле B_0 , направленном по оси z . Операторы магнитного момента в представлении Шредингера имеют вид

$$\hat{M}_x = \mu \hat{\sigma}_x, \quad \hat{M}_y = \mu \hat{\sigma}_y, \quad \hat{M}_z = \mu \hat{\sigma}_z, \quad (369)$$

где собственное значение магнитного момента $\mu = e\hbar/(2mc)$, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$, – матрицы Паули. Гамильтониан, связанный со спиновыми степенями свободы, равен

$$\hat{H} = -\mu \vec{B} \cdot \vec{\sigma} = -\mu B_0 \hat{\sigma}_z. \quad (370)$$

В представлении Гейзенберга операторы магнитного момента имеют вид

$$\begin{aligned}\hat{M}_x(t) &= \mu e^{-i\omega t \hat{\sigma}_z} \hat{\sigma}_x e^{i\omega t \hat{\sigma}_z}, \quad \hat{M}_y(t) = \mu e^{-i\omega t \hat{\sigma}_z} \hat{\sigma}_y e^{i\omega t \hat{\sigma}_z}, \\ \hat{M}_z(t) &= \mu e^{-i\omega t \hat{\sigma}_z} \hat{\sigma}_z e^{i\omega t \hat{\sigma}_z} = \mu \hat{\sigma}_z,\end{aligned}\quad (371)$$

где введено обозначение $\omega = \mu B_0 / \hbar$. В последнем равенстве использована коммутативность оператора $\hat{\sigma}_z$ с любой функцией от этого оператора. Уравнения Гейзенберга для компонент оператора магнитного момента

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \hat{M}_x(t) &= -\frac{i\mu^2 B_0}{\hbar} [\hat{\sigma}_z, e^{-i\omega t \hat{\sigma}_z} \hat{\sigma}_x e^{i\omega t \hat{\sigma}_z}] = \\ &= -\frac{i\mu^2 B_0}{\hbar} e^{-i\omega t \hat{\sigma}_z} [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] e^{i\omega t \hat{\sigma}_z} = 2\omega \hat{M}_y(t),\end{aligned}\quad (372)$$

где использовано соотношение

$$[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y. \quad (373)$$

Аналогично

$$\frac{d}{dt} \hat{M}_y(t) = -2\omega \hat{M}_x(t), \quad (374)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{M}_z(t) = 0. \quad (375)$$

Из последнего уравнения следует, что $\hat{M}_z(t) = \hat{M}_z(0)$. Дифференцируя уравнение для $\hat{M}_x(t)$ по времени, используя уравнение для $\hat{M}_y(t)$, получим

$$\frac{d^2}{dt^2} \hat{M}_x(t) = -4\omega^2 \hat{M}_x(t), \quad (376)$$

решением которого будет

$$\hat{M}_x(t) = \hat{M}_x(0) \cos(2\omega t) + \hat{M}_y(0) \sin(2\omega t). \quad (377)$$

Точно также

$$\hat{M}_y(t) = \hat{M}_y(0) \cos(2\omega t) - \hat{M}_x(0) \sin(2\omega t). \quad (378)$$

Если в начальный момент времени система находилась в состоянии, описываемом собственной функцией оператора $\hat{M}_x(0)$ с собственным значением μ , то для средних значений получим

$$\bar{M}_x(t) = \mu \cos(2\omega t), \quad \bar{M}_y(t) = -\mu \sin(2\omega t), \quad \bar{M}_z(t) = 0. \quad (379)$$

Для данной задачи можно вычислить явно выражения для операторов компонент магнитного момента, используя разложение экспоненты в ряд

$$\begin{aligned} e^{-i\omega t \hat{\sigma}_z} &= I + (-i\omega t \hat{\sigma}_z) + \frac{1}{2!} (-i\omega t \hat{\sigma}_z)^2 + \frac{1}{3!} (-i\omega t \hat{\sigma}_z)^3 + \dots = \\ e^{-i\omega t \hat{\sigma}_z} &= I \left[1 - \frac{(\omega t)^2}{2!} + \dots \right] - i\hat{\sigma}_z \left[\omega t - \frac{(\omega t)^3}{3!} + \dots \right] = \\ &= I \cos(\omega t) - i\hat{\sigma}_z \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (380)$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \hat{M}_x(t) &= \mu e^{-i\omega t \hat{\sigma}_z} \hat{\sigma}_x e^{i\omega t \hat{\sigma}_z} = \\ &= [I \cos(\omega t) - i\hat{\sigma}_z \sin(\omega t)] \mu \hat{\sigma}_x [I \cos(\omega t) + i\hat{\sigma}_z \sin(\omega t)] = \\ &= \mu \hat{\sigma}_x [\cos^2(\omega t) - \sin^2(\omega t)] + \mu \hat{\sigma}_y 2 \sin(\omega t) \cos(\omega t) = \\ &= \hat{M}_x \cos(2\omega t) + \hat{M}_y \sin(2\omega t), \end{aligned} \quad (381)$$

где использованы соотношения

$$\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = -\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z^2 = -\hat{\sigma}_x, \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = i\hat{\sigma}_y. \quad (382)$$

Аналогично

$$\hat{M}_y(t) = \hat{M}_y(0) \cos(2\omega t) - \hat{M}_x(0) \sin(2\omega t). \quad (383)$$

12.3. Представление Дирака

Во многих задачах гамильтониан можно представить в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad (384)$$

где первая часть $\hat{H}_0$ не зависит от времени, а вторая часть $\hat{V}(t)$, зависящая в общем случае от времени, не коммутирует с первой. Тогда удобно использовать представление Дирака, называемое также представлением взаимодействия. Вектор состояния в шредингеровском представлении записывается в виде

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_I(t)\rangle, \quad (385)$$

где введен вектор состояния в представлении взаимодействия $|\psi_I(t)\rangle$. Подставляя это представление вектора состояния в уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle \quad (386)$$

получим

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{(-i\hat{H}_0)}{\hbar} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_I(t)\rangle + i\hbar e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = \\ = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_I(t)\rangle. \end{aligned} \quad (387)$$

Тогда уравнение для вектора состояния в представлении взаимодействия принимает вид

$$i\hbar \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_I(t)\rangle = \hat{V}_I(t) |\psi_I(t)\rangle, \quad (388)$$

где определили оператор в представлении взаимодействия соотношением

$$\hat{V}_I(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \quad (389)$$

Среднее значение любого оператора $\hat{M}$ можно записать в виде

$$\begin{aligned}\bar{M}(t) &= \langle \psi(t) | \hat{M} | \psi(t) \rangle = \langle \psi_I(t) | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{M} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} | \psi_I(t) \rangle = \\ &= \langle \psi_I(t) | \hat{M}_I(t) | \psi_I(t) \rangle.\end{aligned}\quad (390)$$

В качестве примера рассмотрим поведение спина в магнитном поле вида

$$\vec{B} = \vec{e}_z B_0 + \vec{e}_x B_1 \cos(\omega t) + \vec{e}_y B_1 \sin(\omega t), \quad (391)$$

где $B_1 \ll B_0$. Гамильтониан

$$\hat{H} = -\mu B_0 \hat{\sigma}_z - \mu B_1 \cos(\omega t) \hat{\sigma}_x - B_1 \sin(\omega t) \hat{\sigma}_y, \quad (392)$$

запишем в матричной форме

$$\hat{H}_0 = -\mu B_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{V}(t) = -\mu B_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}. \quad (393)$$

Используя разложение экспоненты

$$e^{-i\Omega t \hat{\sigma}_z} = I \cos(\Omega t) - i \hat{\sigma}_z \sin(\Omega t) = \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix}, \quad (394)$$

оператор $\hat{V}$ в представлении взаимодействия равен

$$\begin{aligned}\hat{V}_I(t) &= -\mu B_1 \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{-i\Omega t} \end{pmatrix} = \\ &= -\mu B_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i(\omega+2\Omega)t} \\ e^{i(\omega+2\Omega)t} & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (395)$$

В условиях резонанса, $\omega = -2\Omega$, получим

$$\hat{V}_I(t) = -\mu B_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (396)$$

Уравнение для вектора состояния в представлении взаимодействия

$$|\psi_I\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (397)$$

имеет вид

$$\begin{pmatrix} i\hbar \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ i\hbar \frac{\partial C_2}{\partial t} \end{pmatrix} = -\mu B_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}. \quad (398)$$

Решением, удовлетворяющем начальному условию $C_1(0) = 1$ (вначале спин направлен по магнитному полю B_0), будет

$$|\psi_I\rangle(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t) \\ -i \sin(\omega_1 t) \end{pmatrix}, \quad (399)$$

где $\omega_1 = \mu B_1 / \hbar$. Компоненты оператора магнитного момента в представлении взаимодействия имеют вид

$$\begin{aligned} \hat{M}_{zI}(t) &= \mu \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{-i\Omega t} \end{pmatrix} = \\ &= \mu \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (400)$$

$$\begin{aligned} \hat{M}_{xI}(t) &= \mu \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{-i\Omega t} \end{pmatrix} = \\ &= \mu \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\Omega t} \\ e^{2i\Omega t} & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (401)$$

$$\begin{aligned} \hat{M}_{yI}(t) &= \mu \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{-i\Omega t} \end{pmatrix} = \\ &= \mu \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-2i\Omega t} \\ ie^{2i\Omega t} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (402)$$

Средние значения компонент магнитного момента равны

$$\bar{M}_z(t) = \mu(\cos(\omega_1 t), i \sin(\omega_1 t)) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t) \\ -i \sin(\omega_1 t) \end{pmatrix} =$$

$$= \mu \cos(2\omega_1 t), \quad (403)$$

$$\begin{aligned} \bar{M}_x(t) &= \mu(\cos(\omega_1 t), i \sin(\omega_1 t)) \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\Omega t} \\ e^{2i\Omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t) \\ -i \sin(\omega_1 t) \end{pmatrix} \\ &= \mu \sin(2\omega_1 t) \sin(2\Omega t), \end{aligned} \quad (404)$$

$$\begin{aligned} \bar{M}_y(t) &= \mu(\cos(\omega_1 t), i \sin(\omega_1 t)) \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-2i\Omega t} \\ ie^{2i\Omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t) \\ -i \sin(\omega_1 t) \end{pmatrix} \\ &= -\mu \sin(2\omega_1 t) \cos(2\Omega t). \end{aligned} \quad (405)$$

Таким образом в момент времени $T = \pi/2\omega_1$ спин, сначала направленный по магнитному полю B_0 , будет направлен в противоположном направлении.

13. Лекция. Движение в центральном потенциале.

Во многих случаях потенциальная энергия взаимодействия частиц зависит только от абсолютного расстояния между ними. $U = U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = U(r)$. Тогда с гамильтонианом $\hat{H}$ коммутируют операторы проекции момента импульса $\hat{L}_z$ и квадрата момента импульса $\hat{L}^2$.

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = [\hat{L}_z, \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)] = 0 \quad (406)$$

поскольку и кинетическая энергия и потенциальная для центрального потенциала являются скалярами. Обращение в ноль этих коммутаторов означает, что состояния с определенной энергией будут иметь и определенные значения полного момента импульса и его проекции на ось z .

13.1. Момент импульса в сферических координатах

В случае центрального потенциала удобно перейти от декартовых к сферическим координатам. Найдем сначала вид операторов проекций момента импульса в сферических координатах. Декартовы координаты выражаются через сферические так, рис. 44

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi, & y &= r \sin \theta \sin \phi, \\ z &= r \cos \theta. \end{aligned} \quad (407)$$

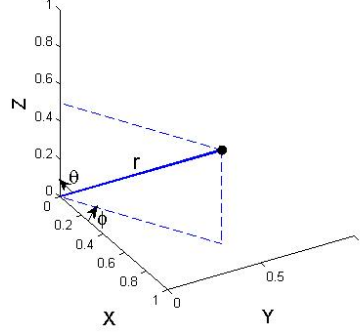


Рис. 44. Сферические координаты.

Рассмотрим сначала поворот системы координат на небольшой угол $\delta\phi$ вокруг оси z . В этом случае изменяется только угол ϕ . Волновая функция при этом меняется с одной стороны как

$$\psi'(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi + \delta\phi) \approx \quad (408)$$

$$\approx \psi(r, \theta, \phi) + \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \delta\phi. \quad (409)$$

С другой стороны, как мы видели

$$\psi(r, \theta, \phi') = \hat{T}_{\delta\phi} \psi(r, \theta, \phi) \approx (1 + \delta\phi \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z) \psi. \quad (410)$$

Таким образом в сферических координатах

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (411)$$

Рассмотрим теперь поворот системы координат на небольшой угол $\delta\xi$ вокруг оси x . В том случае

$$y' \approx y + \delta\xi \cdot z, \quad z' \approx z - \delta\xi \cdot y, \quad x' = x. \quad (412)$$

Новая волновая функция со старыми координатами $\psi'(x, y)$ равна старой волновой функции с координатами

$$y'' \approx y - \delta\xi \cdot z, \quad z'' \approx z + \delta\xi \cdot y, \quad x'' = x. \quad (413)$$

Меняются углы в сферической системе координат, так что

$$x'' = r \sin(\theta + \delta\theta) \cos(\phi + \delta\phi) \approx x + r\delta\theta \cos\theta \cos\phi - r\delta\phi \sin\theta \sin\phi, \quad (414)$$

$$y'' = r \sin(\theta + \delta\theta) \sin(\phi + \delta\phi) \approx y + r\delta\theta \cos\theta \sin\phi + r\delta\phi \sin\theta \cos\phi, \quad (415)$$

$$z'' = z - r\delta\theta \sin\theta. \quad (416)$$

Из первого равенства (с учетом $x'' = x$) получаем

$$\delta\phi \sin\theta \sin\phi = \delta\theta \cos\theta \cos\phi. \quad (417)$$

Из последнего равенства

$$\delta\xi r \sin\theta \sin\phi = -r\delta\theta \sin\theta \rightarrow \delta\theta = -\delta\xi \sin\phi, \quad \delta\phi = -\delta\xi \frac{\cos\theta \cos\phi}{\sin\theta}. \quad (418)$$

С одной стороны

$$\begin{aligned} \psi'(r, \theta, \phi) &= \psi(r, \theta + \delta\theta, \phi + \delta\phi) \approx \psi(r, \theta, \phi) + \frac{\partial\psi}{\partial\theta}\delta\theta + \frac{\partial\psi}{\partial\phi}\delta\phi = \\ &= \psi(r, \theta, \phi) + \left(-\sin\phi \frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta \cos\phi \frac{\partial\psi}{\partial\phi} \right) \delta\xi. \end{aligned} \quad (419)$$

С другой стороны

$$\psi'(r, \theta, \phi) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\xi \hat{L}_x \right) \psi(r, \theta, \phi), \quad (420)$$

откуда

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right). \quad (421)$$

При повороте вокруг оси y на угол $\delta\eta$

$$z'' \approx z - \delta\eta \cdot x, \quad x'' \approx x + \delta\eta \cdot z, \quad y'' = y. \quad (422)$$

Тогда из $y'' = y$

$$\delta\phi \sin \theta \cos \phi = \delta\theta \cos \theta \sin \phi. \quad (423)$$

Сравнивая изменения координат z получаем

$$\delta\eta r \cos \theta = -r\delta\phi \sin \theta \sin \phi + r\delta\theta \cos \theta \cos \phi. \quad (424)$$

В итоге имеем

$$\delta\theta = \delta\eta \cos \phi, \quad \delta\phi = -\delta\eta \frac{\cos \theta \sin \phi}{\sin \theta}. \quad (425)$$

Волновая функция при повороте вокруг оси y с одной стороны равна

$$\begin{aligned} \psi'(r, \theta, \phi) &= \psi(r, \theta + \delta\theta, \phi + \delta\phi) \approx \psi(r, \theta, \phi) + \frac{\partial\psi}{\partial\theta}\delta\theta + \frac{\partial\psi}{\partial\phi}\delta\phi = \\ &= \psi(r, \theta, \phi) + \left(\cos \phi \frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \phi \frac{\partial\psi}{\partial\phi} \right) \delta\eta. \end{aligned} \quad (426)$$

С другой стороны

$$\psi'(r, \theta, \phi) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\eta \hat{L}_y \right) \psi(r, \theta, \phi), \quad (427)$$

откуда

$$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right). \quad (428)$$

Теперь можно найти оператор квадрата момента импульса

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z, \quad (429)$$

где

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad (430)$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right), \quad \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}. \quad (431)$$

Получаем

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin \theta) \frac{\partial}{\partial\theta} \right]. \quad (432)$$

Найдем угловую зависимость волновых функций при движении в центральном потенциале. Собственные функции операторов квадрата момента импульса $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ обозначим Y_{lm}

$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}, \quad \hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}. \quad (433)$$

Имеем

$$\hat{L}_z Y_{lm} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}. \quad (434)$$

Решением будет

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = A(\theta) e^{im\phi}. \quad (435)$$

Для орбитального движения квантовое число $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Действуя повышающим оператором $\hat{L}_+$ на состояние с максимальным значением проекции Y_u получим

$$\hat{L}_+ Y_u = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) A(\theta) e^{il\phi} = 0. \quad (436)$$

Откуда

$$Y_u(\theta, \phi) = C(\sin \theta)^l e^{il\phi}. \quad (437)$$

Функции с другими значениями проекции момента m можно найти, действуя последовательно понижающим оператором $\hat{L}_-$ на функцию Y_u .

Найдем сначала Y_{00} . Зависимости от углов нет. Нормировочная константа находится из

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi |Y_{00}|^2 \sin \theta d\theta = 1, \quad (438)$$

откуда $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$. Вид функции $|Y_{l=0,m=0}|$ показан на рис. 45.

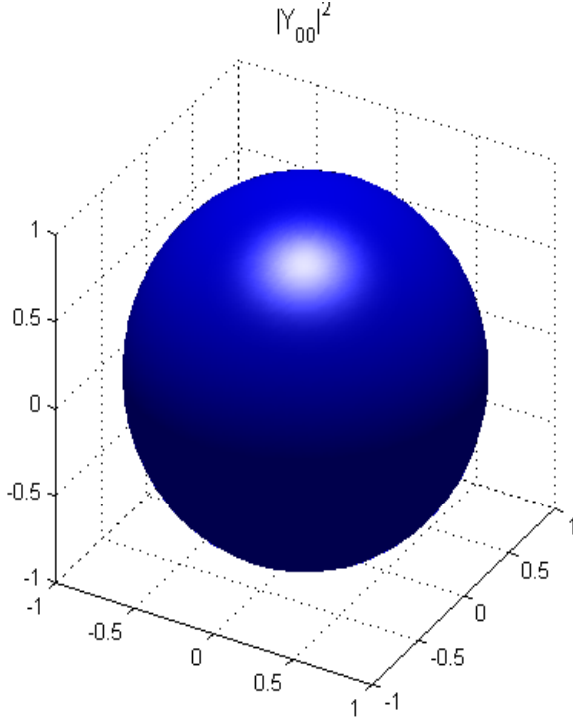


Рис. 45. Наглядное представление угловой части волновой функции $|Y_{l=0,m=0}|$.

Рассмотрим теперь случай $l = 1$. Имеем $Y_{1,1} = C_{1,1}e^{i\phi} \sin \theta$. Действуя оператором $\hat{L}_-$ получим

$$\hat{L}_- Y_{1,1} = -\hbar e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) C_{1,1} e^{i\phi} \sin \theta = -2\hbar C_{1,1} \cos \theta. \quad (439)$$

Значит $Y_{1,0} = C_{1,0} \cos \theta$. Действуя оператором $\hat{L}_-$ теперь на $Y_{1,0}$ получим $Y_{1,-1} = -2\hbar C_{1,-1} e^{-i\phi} \sin \theta$. Находя константы из

условия нормировки и меняя знаки, имеем

$$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta. \quad (440)$$

Вид функции $|Y_{l=1,m=0}|^2$ показан на рис. 46.

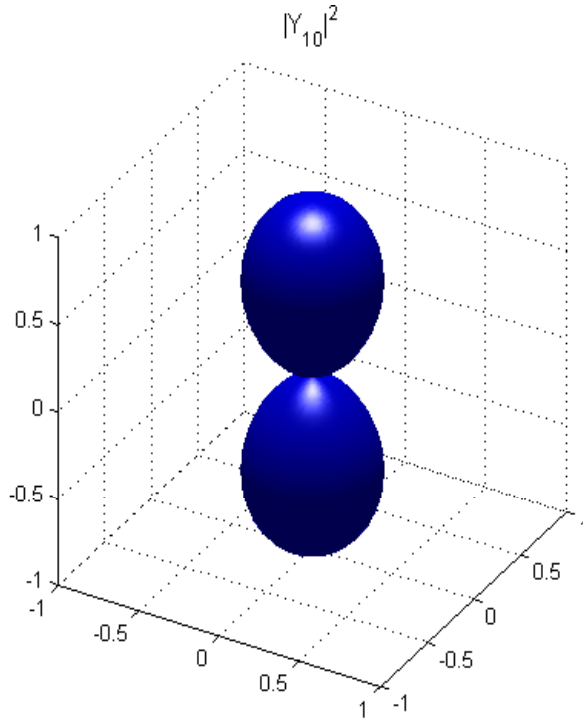


Рис. 46. Наглядное представление угловой части волновой функции $|Y_{l=1,m=0}|$.

Вид функции $|Y_{l=1,m=1}|^2$ показан на рис. 47.

Рассмотрим теперь $l = 2$. Имеем

$$Y_{2,2} = C_{2,2} e^{i2\phi} \sin^2 \theta. \quad (441)$$

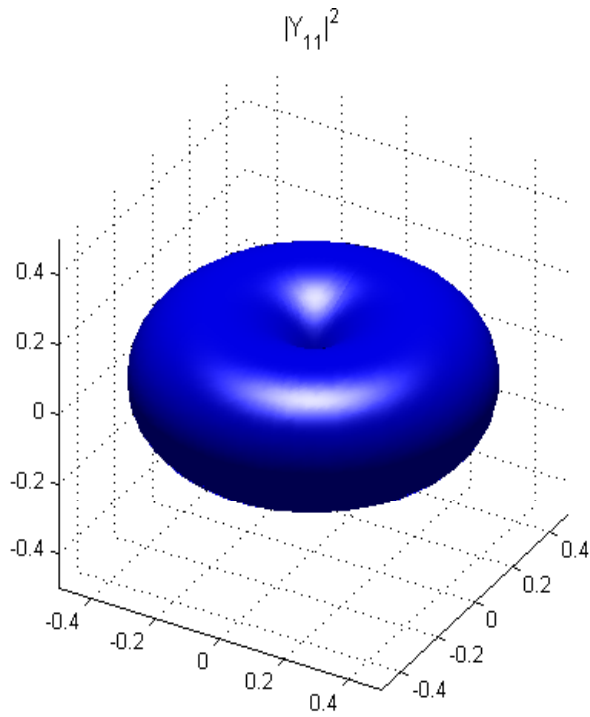


Рис. 47. Наглядное представление угловой части волновой функции $|Y_{l=1,m=1}|$.

Действуя оператором $\hat{L}_-$ получим

$$\begin{aligned}\hat{L}_- Y_{22} &= -\hbar e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) C_{2,2} e^{i2\phi} \sin^2 \theta = \\ &= -4\hbar C_{2,2} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta.\end{aligned}\quad (442)$$

Значит

$$Y_{2,1} = -C_{2,1} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta. \quad (443)$$

Действуя оператором $\hat{L}_-$ теперь на $Y_{2,1}$ получим

$$Y_{2,0} = \hbar C_{2,0}(3 \cos^2 \theta - 1). \quad (444)$$

И аналогично дальше. Находя константы из условия нормировки и меняя знаки, имеем

$$Y_{2,2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta, \quad Y_{2,1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta, \quad (445)$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta), \quad Y_{2,-1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta \cos \theta, \quad (446)$$

$$Y_{2,-2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{-2i\phi} \sin^2 \theta. \quad (447)$$

В общем случае имеет место условие ортонормированности

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l,m}^* Y_{l',m'} = \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (448)$$

Вид функций $|Y_{l=2,m=2}|^2$, $|Y_{l=2,m=1}|^2$, $|Y_{l=2,m=0}|^2$ показан на рис. 48, 49, 50.

13.2. Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции

Стационарное уравнение Шредингера для частицы в центральном потенциале можно записать в виде

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \right) \psi(r, \theta, \phi) + U(r) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi), \quad (449)$$

где радиальная часть лапласиана

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right). \quad (450)$$

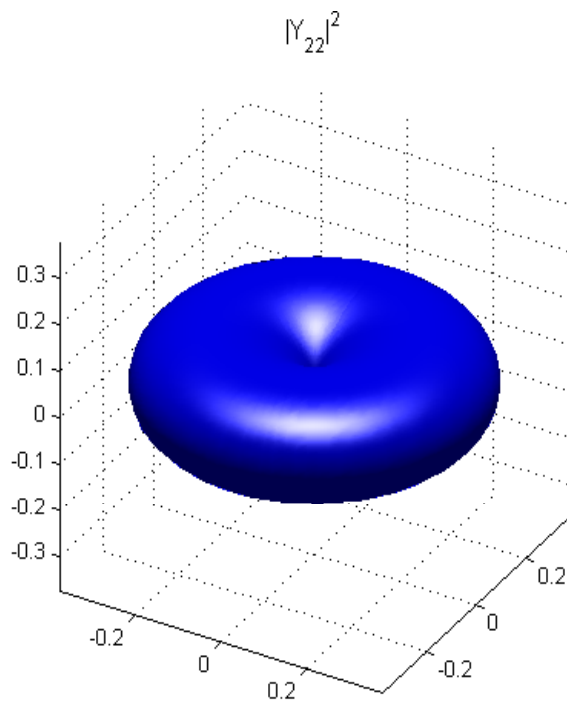


Рис. 48. Наглядное представление угловой части волновой функции $|Y_{l=2,m=2}|$.

Это выражение легко получается с помощью теоремы Гаусса

$$\int \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_r \psi dV = \int \vec{\nabla}_r \psi \cdot \vec{n} dS, \quad (451)$$

где $\vec{n}$ – единичный вектор нормальный к поверхности S , ограничивающей объем V . Выберем в качестве области интегрирования объем, заключенный между двумя сферическими поверхностями с радиусами r и $r + dr$. Тогда объемный ин-

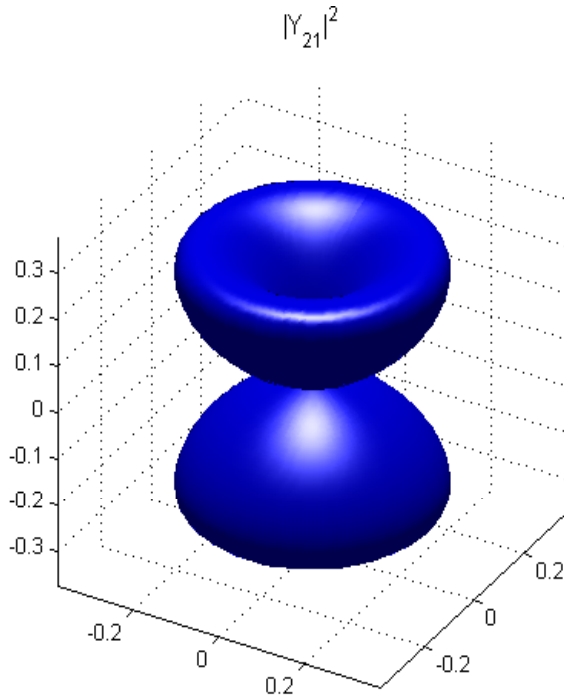


Рис. 49. Наглядное представление угловой части волновой функции $|Y_{l=2,m=1}|$.

теграл приближенно равен

$$\int \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_r \psi dV \approx \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_r \psi 4\pi r^2 dr \quad (452)$$

Поверхностный интеграл приближенно равен

$$\begin{aligned} \int \vec{\nabla}_r \psi \cdot \vec{n} dS &\approx \frac{d\psi}{dr}(r+dr)4\pi(r+dr)^2 - \frac{d\psi}{dr}(r)4\pi(r)^2 \approx \\ &\approx 4\pi \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) dr, \end{aligned} \quad (453)$$

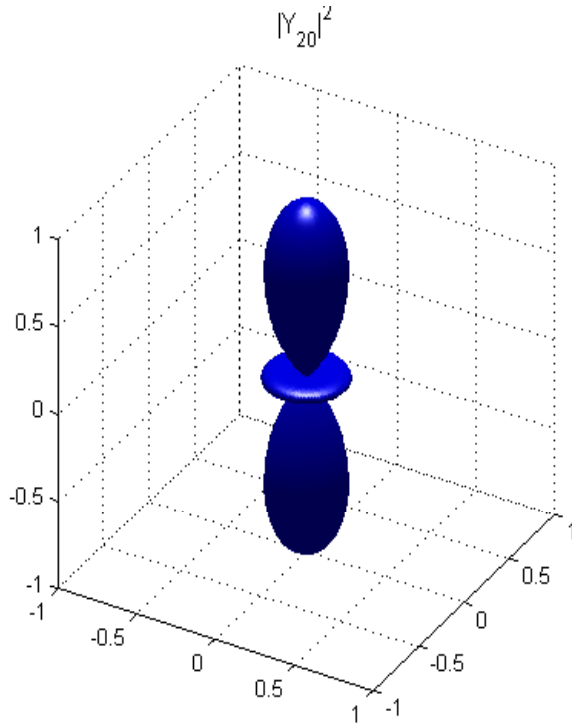


Рис. 50. Наглядное представление угловой части волновой функции $|Y_{l=2,m=0}|$.

где знак минус перед вторым членом возник из-за противоположного направления единичного вектора нормали на внутренней поверхности. Следовательно

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}_r \psi = \Delta_r \psi = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) \quad (454)$$

Волновую функцию можно представить в виде произведения

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi). \quad (455)$$

Угловую часть Y_{lm} волновой функции мы нашли.

Радиальная часть волновой функции $R(r)$ зависит от конкретного вида потенциала $U(r)$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) \right] + U(r)R(r) = ER(r). \quad (456)$$

13.3. Приложение: другой вывод вида оператора момента импульса

Полезно рассмотреть другой вывод вида компонент момента импульса в сферических координатах.

Оператор "набла" в сферических координатах имеет вид

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad (457)$$

где единичные векторы $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$, рис.(51), образуют тройку взаимно ортогональных единичных векторов

$$\vec{e}_r \cdot \vec{e}_\theta = 0, \quad \vec{e}_r \cdot \vec{e}_\phi = 0, \quad \vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_\phi = 0, \quad (458)$$

также как и декартовы единичные векторы

$$\vec{e}_x \cdot \vec{e}_y = 0, \quad \vec{e}_x \cdot \vec{e}_z = 0, \quad \vec{e}_y \cdot \vec{e}_z = 0. \quad (459)$$

Тогда оператор импульса в сферических координатах выглядит так:

$$\hat{p} = -i\hbar \left[\vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \quad (460)$$

Радиус вектор равен

$$\vec{r} = \vec{e}_r r, \quad (461)$$

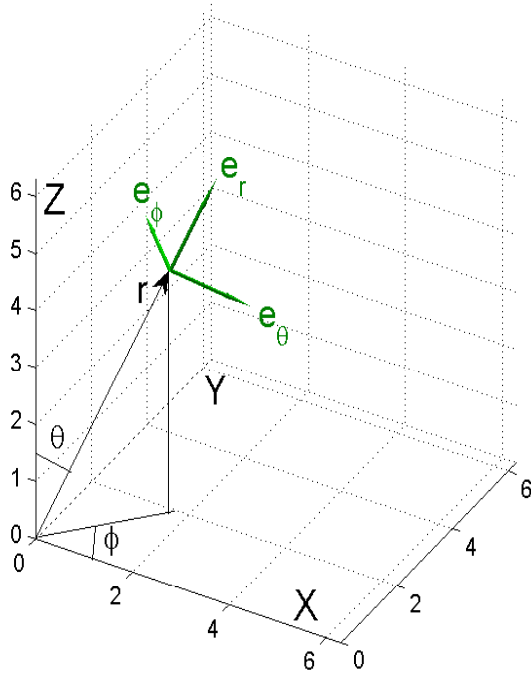


Рис. 51. Сферические координаты.

так что оператор момента импульса в сферических координатах имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{L} = [\vec{r} \times \hat{p}] &= -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{e}_r & \vec{e}_\theta & \vec{e}_\phi \\ r & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{vmatrix} = \\ &= i\hbar \left(\vec{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} - \vec{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right). \end{aligned} \quad (462)$$

Используя соотношения

$$\vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_x = \cos \theta \cos \phi, \quad \vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_y = \cos \theta \sin \phi, \quad \vec{e}_\theta \cdot \vec{e}_z = -\sin \theta, \quad (463)$$

$$\vec{e}_\phi \cdot \vec{e}_x = -\sin \phi, \quad \vec{e}_\phi \cdot \vec{e}_y = \cos \phi, \quad \vec{e}_\phi \cdot \vec{e}_z = 0, \quad (464)$$

получаем

$$\vec{e}_\theta = \vec{e}_x (\vec{e}_x \cdot \vec{e}_\theta) + \vec{e}_y (\vec{e}_y \cdot \vec{e}_\theta) + \vec{e}_z (\vec{e}_z \cdot \vec{e}_\theta) = \quad (465)$$

$$= \vec{e}_x \cos \theta \cos \phi + \vec{e}_y \cos \theta \sin \phi - \vec{e}_z \sin \theta, \quad (466)$$

$$\vec{e}_\phi = \vec{e}_x (\vec{e}_x \cdot \vec{e}_\phi) + \vec{e}_y (\vec{e}_y \cdot \vec{e}_\phi) + \vec{e}_z (\vec{e}_z \cdot \vec{e}_\phi) = \quad (467)$$

$$= -\vec{e}_x \sin \phi + \vec{e}_y \cos \phi. \quad (468)$$

Тогда декартовы компоненты момента импульса, выраженные через сферические координаты, равны

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad (469)$$

$$\hat{L}_x = i\hbar \left[\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right], \quad (470)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left[\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right]. \quad (471)$$

14. Лекция. Атом водорода.

Атом водорода состоит из протона массой $M_p \approx 1.7 \cdot 10^{-24}$ г и электрона массой $m_e \approx 0.9 \cdot 10^{-27}$ г. Потенциальная энергия их взаимодействия $U(r) = -e^2/r$, где e – заряд электрона, r – расстояние между протоном и электроном. Также как в классической механике гамильтониан разделяется на две части, одна из которых описывает движение центра масс, а другая – относительное движение

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r), \quad (472)$$

где $\hat{P}$ – оператор полного импульса, $M = M_p + m_e$ – полная масса, $\hat{p}$ – оператор импульса относительного движения, $m = M_p m_e / (M_p + m_e)$ – приведенная масса. Будем считать, что центр масс покоится. Найдем спектр энергий связанных состояний. Волновую функцию относительного движения можно представить в виде произведения

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi). \quad (473)$$

Угловую часть Y_{lm} волновой функции мы нашли. Радиальная часть волновой функции $R(r)$ подчиняется уравнению

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) \right] - \frac{e^2}{r} R(r) = E R(r). \quad (474)$$

Уравнение упрощается, если искать решение вида $R(r) = f(r)/r$ и перейти к безразмерной переменной $\rho = r/a_B = r m e^2 / \hbar^2$

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \frac{2f}{\rho} - \frac{l(l+1)f}{\rho^2} = \kappa^2 f, \quad (475)$$

где $\kappa^2 = 2|E|\hbar^2/(m e^4)$ (для связанных состояний энергия $E < 0$).

14.1. Сферически симметричные решения

Рассмотрим сначала случай $l = 0$. Уравнение упрощается

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \frac{2f}{\rho} = \kappa^2 f, \quad (476)$$

и при $\rho \rightarrow \infty$ имеет асимптотику $f = \exp(-\kappa\rho)$. Ищем решение в виде ряда

$$f(\rho) = e^{-\kappa\rho} g(\rho); \quad g(\rho) = \sum_{s=1}^{\infty} a_s \rho^s. \quad (477)$$

Вычисляем производные

$$\frac{df}{d\rho} = -\kappa f + e^{-\kappa\rho} \frac{dg}{d\rho}, \quad \frac{d^2f}{d\rho^2} = \kappa^2 f - 2\kappa e^{-\kappa\rho} \frac{dg}{d\rho} + e^{-\kappa\rho} \frac{d^2g}{d\rho^2}. \quad (478)$$

Получаем уравнение для g

$$\frac{d^2g}{d\rho^2} - 2\kappa \frac{dg}{d\rho} + \frac{2g}{\rho} = 0. \quad (479)$$

Производные для g в виде ряда равны

$$\frac{dg}{d\rho} = \sum_{s=1}^{\infty} a_s s \rho^{s-1}, \quad \frac{d^2g}{d\rho^2} = \sum_{s=1}^{\infty} a_s s(s-1) \rho^{s-2} = \sum_{s=1}^{\infty} a_{s+1}(s+1) s \rho^{s-1}. \quad (480)$$

Последнее равенство получено заменой $s \rightarrow s+1$. Имеем уравнение на коэффициенты a_s

$$\sum_{s=1}^{\infty} a_{s+1}(s+1) s \rho^{s-1} - 2\kappa \sum_{s=1}^{\infty} a_s s \rho^{s-1} + 2 \sum_{s=1}^{\infty} a_s s \rho^{s-1} = 0. \quad (481)$$

Приравнивая члены с одинаковыми степенями ρ получаем

$$a_{s+1} = \frac{2(\kappa s - 1)}{s(s+1)} a_s. \quad (482)$$

Для $s \gg 1$ получается

$$a_{s+1} \approx \frac{2\kappa}{s} a_s \rightarrow a_{s+1} \approx \frac{(2\kappa)^s}{s!} a_1 \quad (483)$$

и асимптотика для g имеет вид

$$g = \sum_{s=1}^{\infty} \rho^s \frac{(2\kappa)^s}{s!} a_1 \rightarrow e^{2\kappa\rho}. \quad (484)$$

Это означает, что ряд должен содержать конечное число членов, иначе волновая функция будет расходиться

$$f = e^{-\kappa\rho} g \sim e^{\kappa\rho} \Big|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow \infty. \quad (485)$$

Таким образом для некоторого $s = n = 1/\kappa$ все последующие коэффициенты $a_{n+1} = 0$ и мы получаем дискретный спектр уровней энергии

$$\kappa = \frac{1}{n}, \quad E = -\frac{1}{2n^2} \frac{me^4}{\hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (486)$$

Найдем радиальные части волновых функций для нескольких уровней энергии, начиная с основного. Для $n = 1, l = 0$ получается $\kappa = 1$

$$R_{10} = \frac{f}{\rho} = \frac{e^{-\rho} a_1 \rho}{\rho} = a_1 e^{-\rho}. \quad (487)$$

Коэффициент a_1 находим из условия нормировки

$$\int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr = 1. \quad (488)$$

Имеем

$$\int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr = |a_1|^2 a_B^3 \int_0^\infty e^{-2\rho} \rho^2 d\rho = \frac{|a_1|^2 a_B^3}{4} \rightarrow R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_B^3}} e^{-r/a_B}. \quad (489)$$

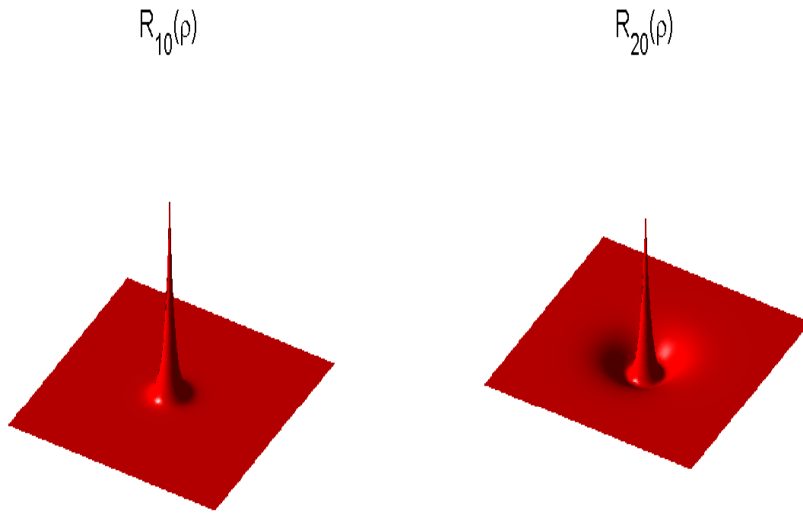
Для $n = 2, l = 0$ имеем $\kappa = 1/2$

$$R_{20} = \frac{e^{-\rho/2} a_1' (\rho - \rho^2/2)}{\rho} = \frac{1}{\sqrt{2a_B^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_B}\right) e^{-r/2a_B}. \quad (490)$$

Аналогично для $n = 3, l = 0$ имеем $\kappa = 1/3$

$$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27a_B^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_B} + \frac{2r^2}{27a_B^2}\right) e^{-r/3a_B}. \quad (491)$$

Боровский радиус $a_B = \hbar^2/me^2 \approx 0.53 \cdot 10^{-8}$ см является атомной единицей длины. Например, вероятность найти электрон внутри сферы радиуса $r = 3a_B$ для основного состояния, описываемого волновой функцией R_{10} , равна 0.58.

Рис. 52. R_{10} , (слева), R_{20} , (справа)

14.2. Решения с произвольным орбитальным моментом импульса

Рассмотрим теперь случай ненулевого орбитального момента $l > 0$. Уравнение на коэффициенты a_s приобретает вид

$$\sum_{s=1}^{\infty} a_{s+1}(s+1)s\rho^{s-1} - 2\kappa \sum_{s=1}^{\infty} a_s s\rho^{s-1} + 2 \sum_{s=1}^{\infty} a_s s\rho^{s-1} -$$

$$-l(l+1) \sum_{s=1}^{\infty} a_{s+1}\rho^{s-1} - \frac{l(l+1)}{\rho} a_1 = 0. \quad (492)$$

Для выполнения равенства при любых ρ необходимо чтобы последний член был равен нулю, то есть $a_1 = 0$. Получаем

$$R_{30}(\rho)$$

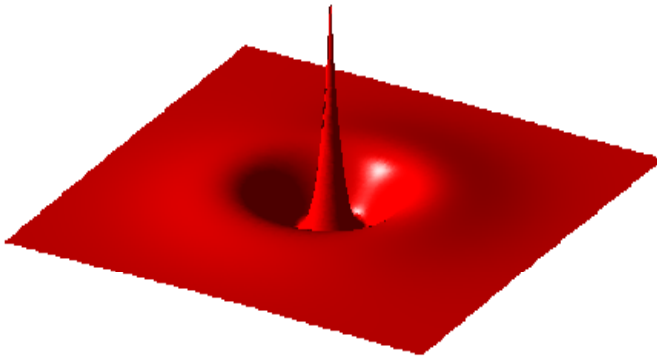
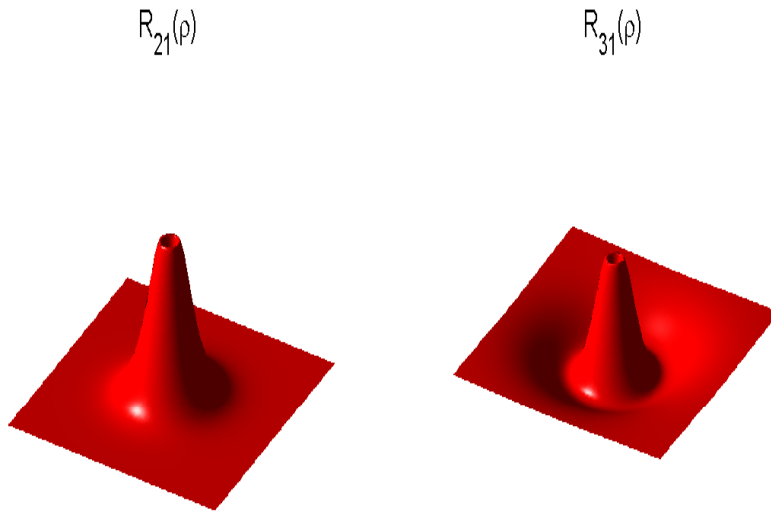


Рис. 53. R_{30}

соотношение на коэффициенты

$$a_{s+1} = \frac{2(\kappa s - 1)}{s(s+1) - l(l+1)} a_s. \quad (493)$$

Чтобы коэффициент не обратился в бесконечность необходимо выполнение неравенства $s > l$, а поскольку $a_1 = 0$, то все $a_s = 0$ для $s \leq l$. Таким образом ряд начинается с a_{l+1} .

Рис. 54. R_{10} , (слева), R_{20} , (справа)

Для $l = 1, n = 2$ имеем $\kappa = 1/2$

$$R_{21} = \frac{e^{-\rho/2} a_2 \rho^2}{\rho} = \frac{1}{\sqrt{24} a_B^3} \frac{r}{a_B} e^{-r/2a_B}. \quad (494)$$

Аналогично для $n = 3, l = 1$ имеем $\kappa = 1/3$

$$R_{31} = \frac{8}{27 \sqrt{6} a_B^3} \left(1 - \frac{r}{6a_B} \right) e^{-r/3a_B}, \quad (495)$$

для $n = 3, l = 2$

$$R_{32} = \frac{4}{81 \sqrt{30} a_B^3} \frac{r^2}{a_B^2} e^{-r/3a_B}. \quad (496)$$

На рис. 56 показаны радиальные части волновых функций R_{nl}

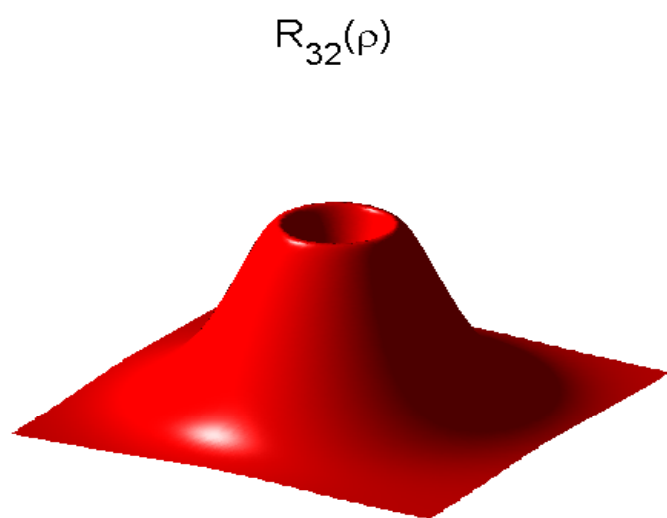


Рис. 55. Наглядное представление радиальной части волновой функции $R_{n=3,l=2}$.

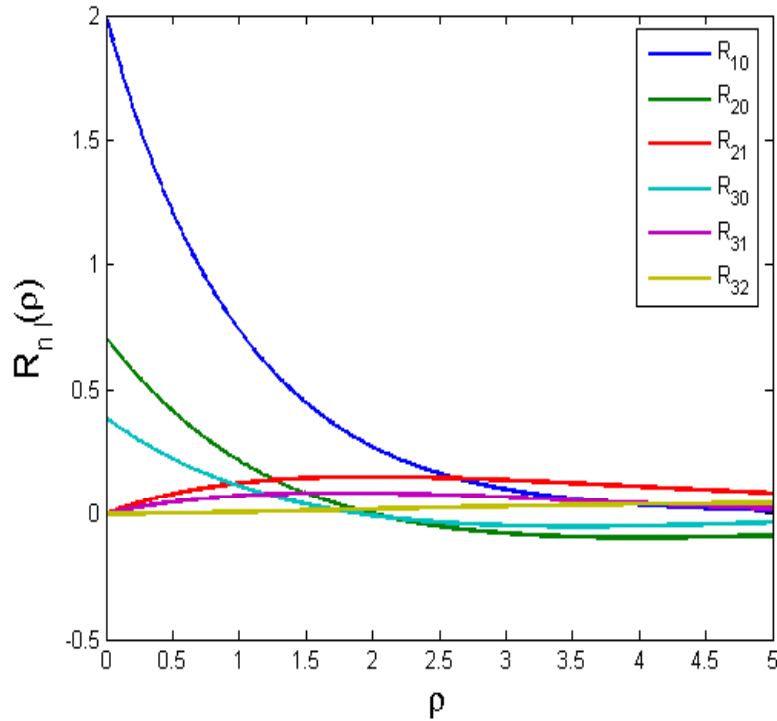


Рис. 56. Наглядное представление радиальных частей волновых функций R_{nl} .

На рис. 57 показаны радиальные части волновых функций в более крупном масштабе R_{nl} .

Итак получили для атома водорода уровни энергии (дискретный спектр)

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{me^4}{\hbar^2} = -\frac{13.6 \text{ эВ}}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (497)$$

Число n — называют главным квантовым числом. Основное состояние описывается волновой функцией $\psi_{n=1,l=0,m=0} = Y_{00}R_{10}$.

Энергия связи электрона в основном состоянии атома во-

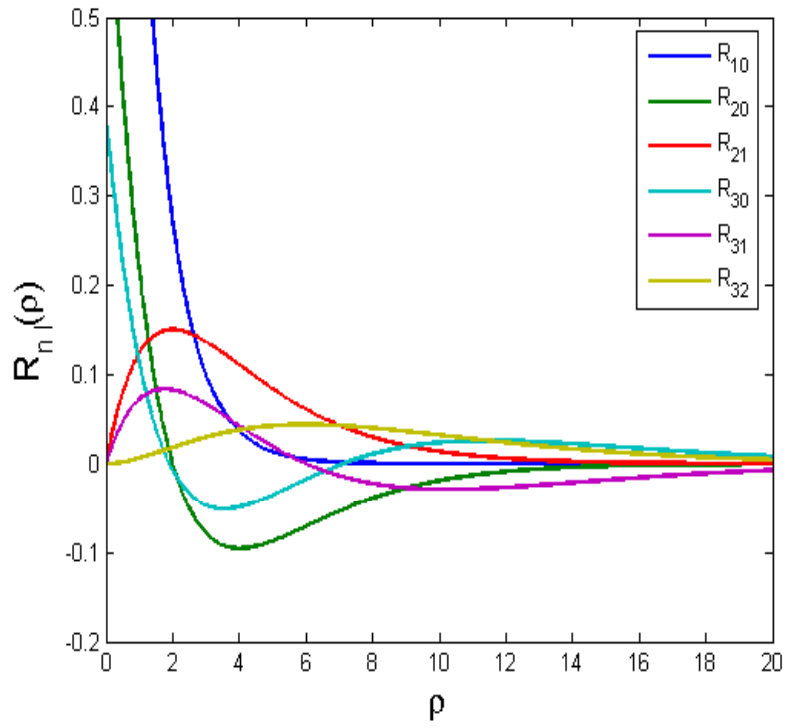


Рис. 57. Наглядное представление радиальной части волновой функции $R_{n=2,l=0}$.

дороды $E_1 = -13.6$ эВ заметно меньше энергии покоя электрона $mc^2 = 0.511 \cdot 10^6$ эВ:

$$|E_1| = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 mc^2, \quad (498)$$

где безразмерная величина (число) $\alpha \equiv e^2/\hbar c \approx 1/137$ называется постоянной тонкой структуры. Следующему значению энергии соответствуют четыре состояния:

- одно состояние $\psi_{n=2,l=0,m=0}$ с нулевым орбитальным моментом
- и три состояния $\psi_{n=2,l=1,m=+1}$, $\psi_{n=2,l=1,m=0}$, $\psi_{n=2,l=1,m=-1}$ с квантовым числом орбитального момента $l = 1$ и тремя значениями проекции момента импульса $m = \pm 1, 0$.

В этом случае говорят, что уровень энергии вырожден. На рис. 58 показаны уровни энергии с главными квантовыми числами $n = 1, 2, 3, 4$ и орбитальными квантовыми числами $l = 0, 1, 2$.

Мы получили также нормированные волновые функции. Например

$$\psi_{n=1,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad \psi_{n=2,l=0,m=0} = \frac{(1 - r/2a)}{\sqrt{8\pi a^3}} e^{-r/2a}, \quad (499)$$

$$\psi_{n=2,l=1,m=+1} = \frac{r/a}{8\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/2a} (-\sin \theta) e^{i\phi}, \quad (500)$$

$$\psi_{n=2,l=1,m=0} = \frac{r/a}{\sqrt{32\pi a^3}} e^{-r/2a} \cos \theta, \quad (501)$$

$$\psi_{n=2,l=1,m=-1} = \frac{r/a}{8\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/2a} \sin \theta e^{-i\phi}. \quad (502)$$

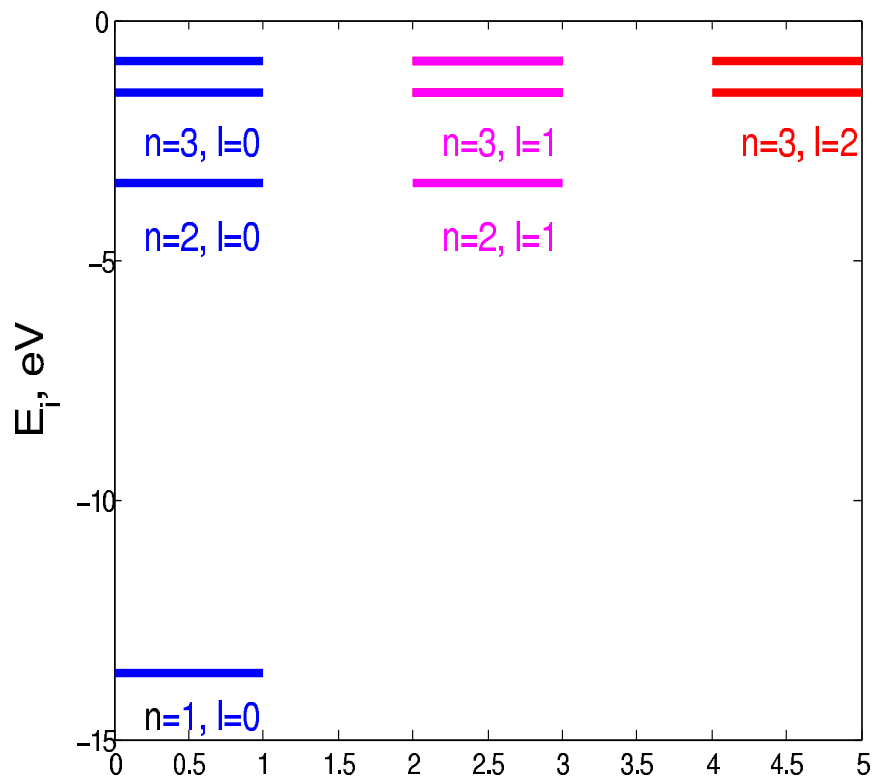


Рис. 58. Нижние уровни энергии атома водорода.

Часть II

Задачи для семинаров

15. Происхождение основных квантовых понятий.

Задача 1. Эффект Комптона.

Энергия фотона до рассеяния на покоящемся электро-
не равна $\hbar\omega = 10 \cdot 10^3 eV$.

Какая энергия будет передана электрону при рассеянии
на угол $\theta = \pi$?

Насколько изменится длина волны фотона ($\Delta\lambda(cm)$) при
рассеянии на угол $\theta = \pi/2$?

Решение

Переданная электрону при рассеянии на угол $\theta = \pi$ равна

$$E_e = \frac{\hbar\omega}{1 + mc^2/(2\hbar\omega)} \approx 0.4 \cdot 10^3 eV. \quad (503)$$

Изменение длины волны фотона ($\Delta\lambda(cm)$) при рассеянии
на угол $\theta = \pi/2$ равно

$$\Delta\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc} \approx 2 \cdot 10^{-10} cm. \quad (504)$$

Задача 2. До рассеяния фотон имел энергию $\varepsilon_0 = 1 eV$ и
двигался навстречу электрону с энергией $E_0 = 10^9 eV$. Найти
энергию фотона после рассеяния на угол $\theta = \pi$.

Решение Используя условие $E_0 \gg m_e c^2$, релятивистское
соотношение между импульсом и энергией для электрона мож-
но представить в виде

$$pc = \sqrt{E^2 - m^2 c^4} \approx E - \frac{m^2 c^4}{2E}. \quad (505)$$

Напомним, что энергия покоя электрона $mc^2 \approx 0.5 \cdot 10^6 \text{ eV}$. Тогда закон сохранения импульса, умножив обе части на скорость света c ,

$$p_0c - q_0c = pc + qc \quad (506)$$

можно переписать в виде

$$E_0 - \frac{m^2c^4}{2E_0} - \varepsilon_0 = E - \frac{m^2c^4}{2E} + \varepsilon, \quad (507)$$

где использовано соотношение между энергией и импульсом фотона $\varepsilon = qc$. Из закона сохранения энергии

$$E_0 + \varepsilon_0 = E + \varepsilon \quad (508)$$

Находим энергию электрона после рассеяния

$$E = E_0 + \varepsilon_0 - \varepsilon \quad (509)$$

и подставляем в закон сохранения импульса

$$E_0 - \frac{m^2c^4}{2E_0} - \varepsilon_0 = E_0 + \varepsilon_0 - \varepsilon - \frac{m^2c^4}{2(E_0 + \varepsilon_0 - \varepsilon)} + \varepsilon. \quad (510)$$

Откуда получаем

$$\frac{1}{E_0 + \varepsilon_0 - \varepsilon} - \frac{1}{E_0} = \frac{4\varepsilon_0}{m^2c^4} \quad (511)$$

и энергия фотона после рассеяния равна

$$\varepsilon = \frac{4\varepsilon_0 E_0^2}{4\varepsilon_0 E_0 + m^2c^4} + \varepsilon_0. \quad (512)$$

Для начальных энергий фотона и электрона находим

$$m^2c^4 \approx 0.25 \cdot 10^{12} \text{ eV}^2 \gg 4\varepsilon_0 E_0 = 4 \cdot 10^9 \text{ eV}^2, \quad (513)$$

так что имеем

$$\varepsilon \approx \frac{4\varepsilon_0 E_0^2}{m^2c^4} \approx 16 \cdot 10^6 \text{ eV} \gg \varepsilon_0 = 1 \text{ eV}. \quad (514)$$

Энергия электрона после рассеяния почти не изменяется.

Задача 3. Фотоэффект.

Найти максимальную длину волны света ($\lambda_{max}(cm)$), при которой возможно наблюдать фотоэффект. Работа выхода равна $A = 2eV$.

Решение Максимальная длина волны света λ_{max} , при которой возможно наблюдать фотоэффект, определяется условием

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{max}} = A, \quad (515)$$

откуда

$$\lambda_{max} = \frac{2\pi\hbar c}{A} \approx 6.6 \cdot 10^{-5} \text{ cm}. \quad (516)$$

Задача 4. Атом Бора.

Найти длину волны света ($\lambda(cm)$), испускаемого атомом водорода при переходе с уровня $n = 3$ на уровень $n = 2$.

Решение

Длина волны света λ , излучаемого при переходе с одного уровня с квантовым числом n_i на другой уровень с квантовым числом n_f , определяется условием

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (517)$$

откуда, с учетом равенства

$$\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13.6 \text{ eV}. \quad (518)$$

получаем

$$\lambda \approx 6 \cdot 10^{-5} \text{ cm}. \quad (519)$$

Задача 5. Соотношение де Бройля.

Найти длину волны нейтрона (масса нейтрона $M_n = 1.7 \cdot 10^{-24} \text{ г}$) с энергией 0.025 эВ .

Найти угол первого дифракционного максимума при рассеянии нейтронов с такой энергией на кристалле. Расстояние между атомными плоскостями кристалла $d = 1.8 \text{ \AA}$

Решение

Длина волны нейтрона λ , связана с его энергией E соотношением

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2M_n E}} \approx 1.8 \cdot 10^{-8} \text{ cm}. \quad (520)$$

Угол θ первого дифракционного максимума связан с длиной волны нейтрона λ и постоянной решетки кристалла d соотношением

$$\lambda = 2d \sin \theta, \quad (521)$$

откуда

$$\sin \theta = \frac{1}{2} \rightarrow \theta = 30^\circ. \quad (522)$$

Задача 6. Показана интерференционная картина, рис.59. Найти длину волны излучения. Масштаб на координатах указан в см.

Решение

Расстояние между основным и первым максимумами x на интерференционной картине определяется условием

$$\lambda = l_2 - l_1 = \sqrt{L^2 + (x + d/2)^2} - \sqrt{L^2 + (x - d/2)^2}, \quad (523)$$

где l_1, l_2 – расстояние от первой и второй щели в диафрагме до первого максимума на экране. Считая, что выполняется условие $L \gg x, d$ (L – расстояние от диафрагмы со щелями до экрана, d – расстояние между щелями в диафрагме), получаем

$$\lambda = l_2 - l_1 \approx \frac{xd}{L} \approx 0.6 \text{ cm}, \quad (524)$$

где из картинки $L = 10 \text{ cm}$, $x = 3 \text{ cm}$, $d = 2 \text{ cm}$.

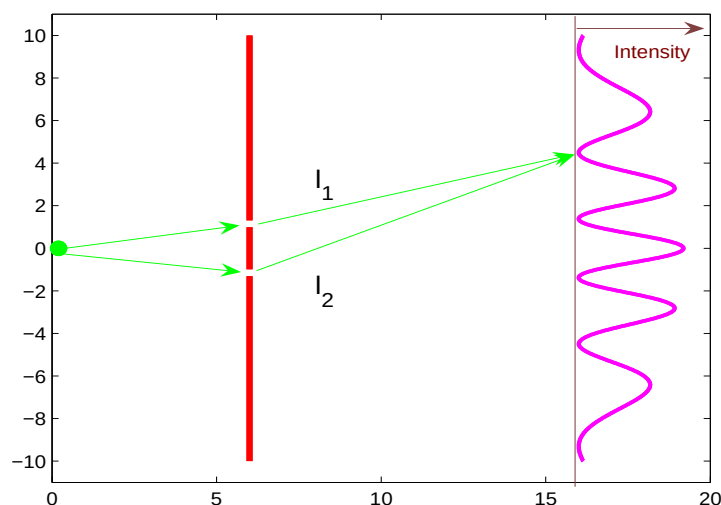


Рис. 59. Интерференция на двух щелях.

16. Соотношение неопределенностей.

Задача 1. С помощью соотношения неопределенности Гейзенберга оценить минимальную энергию частицы массой m в потенциале

$$U(x) = \alpha x^4.$$

Решение

Обозначим неопределенность координаты Δx , тогда неопределенность импульса $\Delta p \gtrsim \hbar/\Delta x$. Значение полной энергии равно

$$E = \frac{p^2}{m} + \alpha x^4 \gtrsim \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + \alpha(\Delta x)^4 \quad (525)$$

Минимум этого выражения достигается при

$$(\Delta x_0)^2 \sim \left(\frac{\alpha m}{\hbar^2} \right)^{1/3}, \quad (526)$$

так что

$$E_{min} \sim \left(\frac{\alpha \hbar^4}{m^2} \right)^{1/3}. \quad (527)$$

Задача 2. С помощью соотношения неопределенности Гейзенберга оценить минимальную энергию частицы массой m в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} -a/x, & x > 0 \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Решение

Обозначим неопределенность координаты Δx , тогда неопределенность импульса $\Delta p \gtrsim \hbar/\Delta x$. Значение полной энергии равно

$$E = \frac{p^2}{m} - \frac{a}{x} \gtrsim \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} - \frac{a}{\Delta x}. \quad (528)$$

Минимум этого выражения достигается при

$$\Delta x_0 \sim \frac{\hbar^2}{ma}, \quad (529)$$

так что

$$E_{min} \sim -\frac{ma^2}{\hbar^2}. \quad (530)$$

17. Одномерное уравнение Шредингера.

Задача 1. Найти энергию связанного состояния в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} -\frac{q^2}{x}, & x > 0 \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Какую из приведенных ниже волновых функций можно использовать в качестве решения:

$$a) \psi(x) = Ae^{-\alpha x}; \quad b) \psi(x) = Axe^{-\alpha x}; \quad c) \psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}?$$

Найти также A и α .

Найти $\bar{x}$, $\bar{p}$, $\delta x^2 \equiv \overline{(x - \bar{x})^2}$, $\delta p^2 \equiv \overline{(p - \bar{p})^2}$.

Выполняется ли соотношение $\delta x^2 \delta p^2 \geq \hbar^2/4$?

Решение

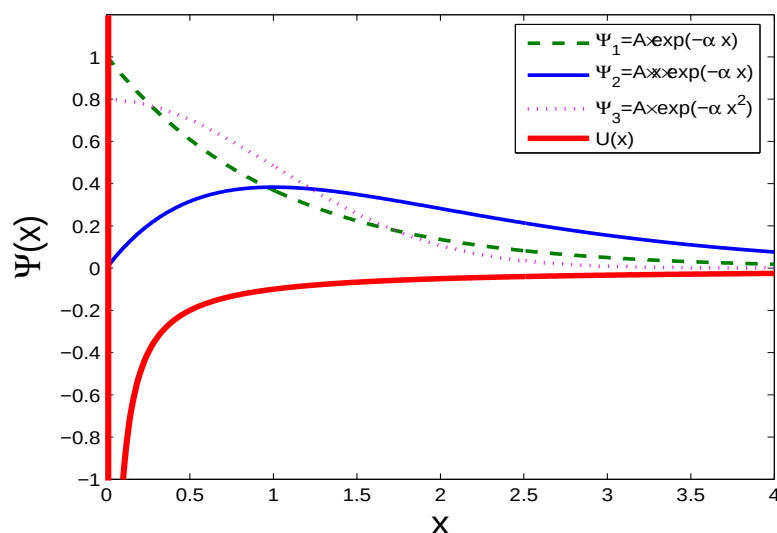


Рис. 60. Волновые функции.

Граничному условию $\psi(0) = 0$ удовлетворяет только одна из предложенных функций: $\psi(x) = A x e^{-\alpha x}$, рис.60. Подставляя эту волновую функцию в уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \frac{q^2}{x} \psi(x) = E \psi(x) \quad (531)$$

получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\alpha^2 x - 2\alpha) - q^2 = E x. \quad (532)$$

Чтобы это уравнение удовлетворялось для всех значений x , должны обращаться в ноль коэффициенты при всех степенях

переменной x . Значит

$$\alpha = \frac{mq^2}{\hbar^2}, \quad E = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} = -\frac{mq^4}{2\hbar^2}. \quad (533)$$

Из условия нормировки

$$\int_0^\infty A^2 x^2 e^{-2\alpha x} dx = 1 \quad (534)$$

имеем, используя значение интеграла

$$\int_0^\infty y^n e^{-y} dy = n!, \quad (535)$$

$A^2 = 4\alpha^3$. Вычисляем средние значения $\bar{x}, \bar{p}$:

$$\bar{x} = \int_0^\infty A^2 x^3 e^{-2\alpha x} dx = \frac{3}{2\alpha}, \quad (536)$$

$$\bar{p} = -i\hbar A^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha x} (x - \alpha x^2) dx = 0. \quad (537)$$

Аналогично

$$\bar{x}^2 = \int_0^\infty A^2 x^4 e^{-2\alpha x} dx = \frac{3}{\alpha^2}, \quad (538)$$

$$\bar{p}^2 = -\hbar^2 A^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha x} (\alpha^2 x^2 - 2\alpha x) dx = \hbar^2 \alpha^2. \quad (539)$$

Находим

$$\delta x^2 \delta p^2 = (\bar{x}^2 - (\bar{x})^2) \cdot (\bar{p}^2 - (\bar{p})^2) = \frac{3}{4}\hbar^2 > \frac{1}{4}\hbar^2. \quad (540)$$

Задача 2. Найти энергию связанного состояния в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} -G\delta(x-a), & x > 0 \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Решение

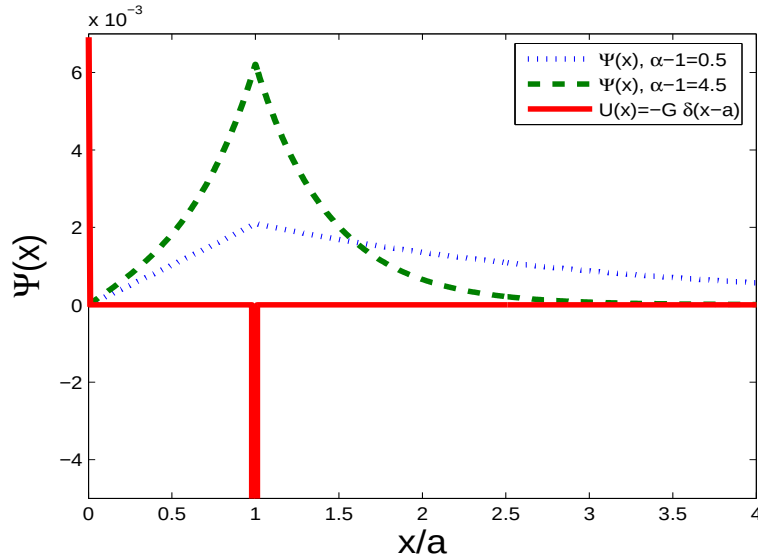


Рис. 61. Вид волновых функций для двух значений силы δ -потенциала, $\alpha = 2mGa/\hbar^2$.

Волновую функцию $\psi(x)$ в области $0 < x < a$ ищем в виде

$$\psi_1(x) = A \operatorname{sh}(kx), \quad (541)$$

а в области $x > a$ в виде

$$\psi_2(x) = B e^{-kx}, \quad (542)$$

чтобы удовлетворить граничным условиям $\psi(0) = 0, \psi(\infty) = 0$, рис. 61. Обе волновые функции удовлетворяют свободному

уравнению Шредингера при $x \neq a$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{1,2}(x)}{dx^2} = E\psi_{1,2}(x), \quad (543)$$

откуда

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (544)$$

Из непрерывности волновой функции при $x = a$ получаем

$$A \operatorname{sh}(ka) = B e^{-ka}. \quad (545)$$

Первая производная волновой функции при $x = a$ испытывает скачок, который находится интегрированием уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx - G \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x-a)\psi(x)dx = E \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \psi(x)dx. \quad (546)$$

Откуда

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left. \frac{d\psi_2(x)}{dx} \right|_{x=a} - \left. \frac{d\psi_1(x)}{dx} \right|_{x=a} \right) = G\psi_2(x=a). \quad (547)$$

Получаем еще одно уравнение

$$B e^{-ka} + A \operatorname{ch}(ka) = \frac{2mG}{k\hbar^2} B e^{-ka}. \quad (548)$$

Подставляя в это уравнение $B e^{-ka} = A \operatorname{sh}(ka)$, получим уравнение

$$\operatorname{th}(ka) = \frac{ka}{(2mGa/\hbar^2) - ka}. \quad (549)$$

Это уравнение имеет решение лишь при условии

$$\frac{2mGa}{\hbar^2} > 1, \quad (550)$$

что является условием образования связанного состояния, рис. 62.

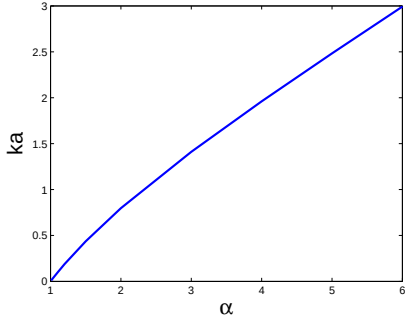


Рис. 62. Зависимость волнового вектора k от силы δ -потенциала, $\alpha = 2mGa/\hbar^2$.

При небольшом превышении этого предела величина $ka \ll 1$. Используя разложение $\text{th } x \approx x$, получаем

$$k \approx \frac{1}{a} \left(\frac{2mGa}{\hbar^2} - 1 \right). \quad (551)$$

В другом предельном случае

$$\frac{2mGa}{\hbar^2} \gg 1, \quad (552)$$

например при $a \rightarrow \infty$, получаем $\text{th } ka \approx 1$, откуда

$$ka = \frac{mGa}{\hbar^2} \rightarrow E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{mG^2}{2\hbar^2} \quad (553)$$

получается результат для одиночной ямы.

18. Формализм квантовой механики

Задача 1. Доказать соотношение

$$(\hat{A}\hat{B}...\hat{Z})^\dagger = \hat{Z}^\dagger...\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \quad (554)$$

Решение

Докажем сначала для двух операторов. По определению эрмитово сопряженного оператора имеем

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle^*. \quad (555)$$

Используя обозначение

$$|\phi\rangle = \hat{B}|\psi_2\rangle \quad (556)$$

и его эрмитово сопряженное выражение

$$\langle \phi | = \langle \psi_2 | \hat{B}^\dagger, \quad (557)$$

получим

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \hat{B} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A} | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle^* = \langle \psi_2 | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle^*. \quad (558)$$

Сравнивая с определением эрмитово сопряженного от произведения $\hat{A} \hat{B}$

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \hat{B} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \left(\hat{A} \hat{B} \right)^\dagger | \psi_1 \rangle^*, \quad (559)$$

имеем

$$\left(\hat{A} \hat{B} \right)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (560)$$

Для большего числа операторов доказательство проводится аналогично, например

$$\left(\hat{A} \hat{B} \hat{C} \right)^\dagger = \hat{C}^\dagger \left(\hat{A} \hat{B} \right)^\dagger = \hat{C}^\dagger \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger. \quad (561)$$

Задача 2. Доказать, что произведение $\hat{D} = \hat{A} \hat{B}$ эрмитовых операторов ($\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, $\hat{B}^\dagger = \hat{B}$) будет эрмитово ($\hat{D}^\dagger = \hat{D}$), только если они коммутируют: $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Решение

По условию задачи

$$\left(\hat{A} \hat{B} \right)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger = \hat{B} \hat{A} = \hat{A} \hat{B} \quad (562)$$

Откуда

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} = 0. \quad (563)$$

Задача 3. Найти собственные значения и собственные функции гамильтониана частицы массы M , движущейся по окружности радиуса R .

Решение

Стационарное уравнение Шредингера в полярных координатах

$$-\frac{\hbar^2}{2MR^2} \frac{d^2\psi_m}{d\phi^2} = E_m\psi_m \quad (564)$$

имеет решения

$$\psi_m(\phi) = Ae^{i\alpha_m\phi}. \quad (565)$$

Из условия периодичности волновой функции

$$\psi_m(\phi + 2\pi m) = \psi_m(\phi), \quad (566)$$

где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, следует условие $\alpha_m = m$. Уровни энергии равны

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2MR^2}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (567)$$

и имеют двукратное вырождение, исключая основное состояние $m = 0$. Из условия нормировки волновых функций

$$\int_0^{2\pi} |\psi_m|^2 d\phi = 1 \quad (568)$$

находим $A = 1/\sqrt{2\pi}$.

Задача 4. Найти собственные значения и собственные функции гамильтониана двухуровневой системы:

$$\hat{H} = V \begin{pmatrix} 2 + \varepsilon & 1 - \varepsilon \\ 1 - \varepsilon & 2 + 2\varepsilon \end{pmatrix}, \quad (569)$$

где $V = \text{Const}$ и $\varepsilon \ll 1$.

Решение Решая систему уравнений

$$\begin{pmatrix} (2 + \varepsilon)V - \lambda & (1 - \varepsilon)V \\ (1 - \varepsilon)V & (2 + 2\varepsilon)V - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (570)$$

находим с точностью до членов 1-го порядка по ε

$$\lambda^2 - V(4 + 3\varepsilon) + V^2(3 + 8\varepsilon) = 0, \quad (571)$$

откуда собственные значения равны

$$\lambda_1 = V \left(3 + \frac{\varepsilon}{2} \right), \quad \lambda_2 = V \left(1 + \frac{5\varepsilon}{2} \right). \quad (572)$$

Для собственного значения λ_1 получаем из первого уравнения системы соотношения между коэффициентами

$$a_2 = a_1 \frac{1 - \varepsilon/2}{1 - \varepsilon} \approx a_1 \left(1 + \frac{\varepsilon}{2} \right). \quad (573)$$

Из условия нормировки собственного вектора

$$a_1^2 + a_2^2 = 1 \quad (574)$$

получаем

$$a_1^2 \left[1 + \left(1 + \frac{\varepsilon}{2} \right)^2 \right] = 1. \quad (575)$$

Тогда

$$a_1 \approx \frac{1}{\sqrt{2 + \varepsilon}} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\varepsilon}{4} \right), \quad a_2 \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\varepsilon}{4} \right). \quad (576)$$

Таким образом собственный вектор для $\lambda_1 = V(3 + \varepsilon/2)$ равен

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 - \varepsilon/4 \\ 1 + \varepsilon/4 \end{pmatrix}. \quad (577)$$

Для собственного значения λ_2 получаем из первого уравнения системы соотношения между коэффициентами

$$a_2 = -a_1 \frac{1 - 3\varepsilon/2}{1 - \varepsilon} \approx -a_1 \left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right). \quad (578)$$

Тогда

$$a_1 \approx \frac{1}{\sqrt{2 - \varepsilon}} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\varepsilon}{4} \right), \quad a_2 \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-1 + \frac{\varepsilon}{4} \right). \quad (579)$$

Таким образом собственный вектор для $\lambda_2 = V(1 + 5\varepsilon/2)$ равен

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon/4 \\ -1 + \varepsilon/4 \end{pmatrix}. \quad (580)$$

Разным собственным значениям соответствуют ортогональные векторы:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \frac{1}{2} (1 - \varepsilon/4, 1 + \varepsilon/4) \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon/4 \\ -1 + \varepsilon/4 \end{pmatrix} \approx 0. \quad (581)$$

Задача 5. Найти волновые функции и уровни энергии частицы массой m , движение которой происходит в прямоугольной области размером $L_x \times L_y$.

Решение

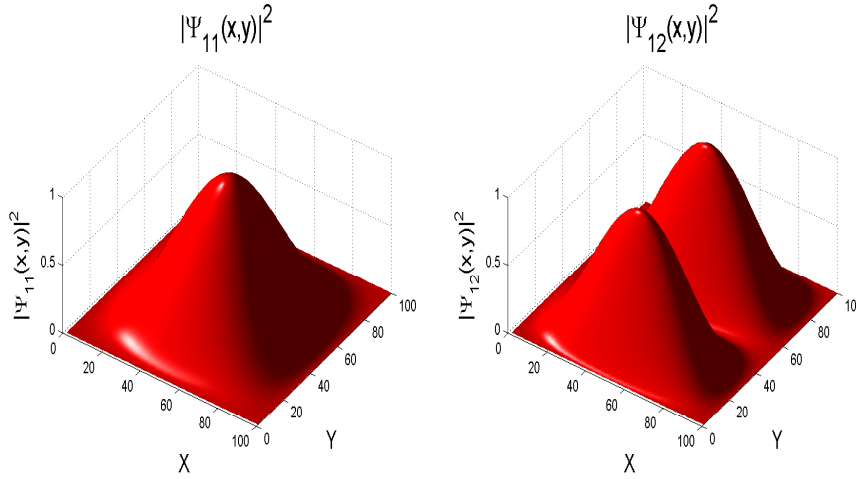


Рис. 63. Вид квадратов модулей волновых функций основного и 1-го возбужденного уровней.

Двумерное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y) \quad (582)$$

имеет решение вида

$$\Psi(x, y) = \psi_1(x)\psi_2(y), \quad (583)$$

где каждая из функций удовлетворяет соответствующему одномерному уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = E_1\psi_1(x), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = E_2\psi_2(y) \quad (584)$$

с граничными условиями

$$\psi_1(x=0, L_x) = 0, \quad \psi_2(y=0, L_y) = 0. \quad (585)$$

Так что решением будут волновые функции

$$\Psi(x, y) = \frac{2}{\sqrt{L_x L_y}} \sin\left(\frac{\pi n_x x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{\pi n_y y}{L_y}\right), \quad n_x, n_y = 1, 2, 3, \dots, \quad (586)$$

а уровни энергии равны

$$E(n_x, n_y) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right), \quad n_x, n_y = 1, 2, 3, \dots, \quad (587)$$

На рис.63 приведены квадраты модулей волновых функций основного и 1-го возбужденного состояний.

19. Гармонический осциллятор.

Задача 1. Найти уровни энергии в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, & x > 0 \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Решение

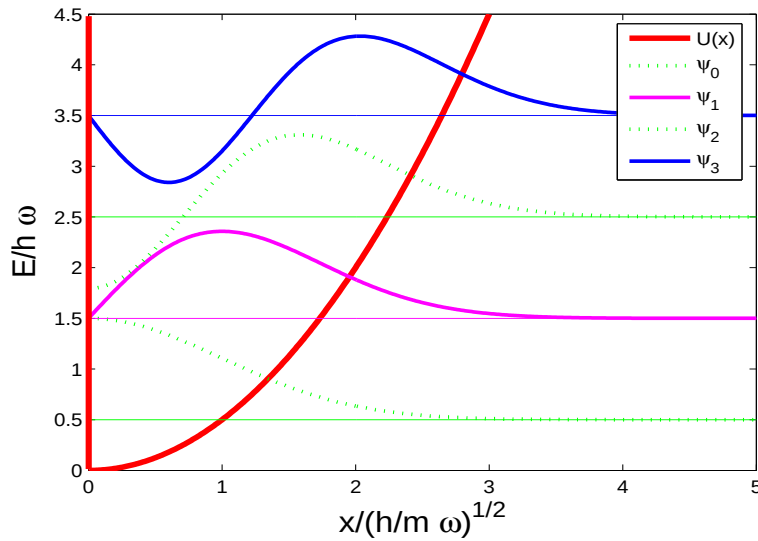


Рис. 64. Вид волновых функций.

Для данного потенциала волновые функции должны удовлетворять граничному условию $\psi(0) = 0$. Значит решением уравнения Шредингера с таким потенциалом будут решения для гармонического потенциала для нечетных значений квантового числа $n = 1, 3, 5, \dots$ и энергией $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, рис. 64.

Задача 2. Найти уровни энергии заряженной частицы в однородном магнитном поле B_0 . Собственный магнитный момент частицы не учитывать. Гамильтониан взаимодействия заряженной частицы с магнитным полем имеет вид

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m},$$

где e —заряд, m —масса частицы, c — скорость света. Указание: векторный потенциал выбрать в виде $\mathbf{A} = (0, xB_0, 0)$, свести

указанный гамильтониан к гамильтониану гармонического осциллятора.

Решение

Перепишем гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{e^2 B_0^2 (x - c\hat{p}_y/(eB_0))^2}{2mc^2} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}. \quad (588)$$

Определим новую переменную $x' = x - c\hat{p}_y/(eB_0)$. Тогда

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x'^2}{2} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}, \quad (589)$$

где $\omega = eB_0/(mc)$. Коммутатор новой координаты x' с x -компонентой импульса

$$[x', \hat{p}_x] = [x - c\hat{p}_y/(eB_0), \hat{p}_x] = i\hbar \quad (590)$$

остается прежней, так что первые два члена имеют вид гамильтониана гармонического осциллятора и уровни энергии заряженной частицы в однородном магнитном поле равны

$$E = \frac{\hbar e B_0}{mc} (n + 1/2) + \frac{p_z^2}{2m}, \quad (591)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$

Задача 3. Найти уровни энергии частицы массой m , близкие к энергии основного состояния, в потенциале Морзе:

$$U(x) = U_0 (e^{-2\beta x} - 2e^{-\beta x}).$$

Сравнить с точным решением:

$$E_n = -U_0 \left[1 - \frac{\beta\hbar}{\sqrt{2mU_0}} (n + 1/2) \right]^2,$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$

Решение

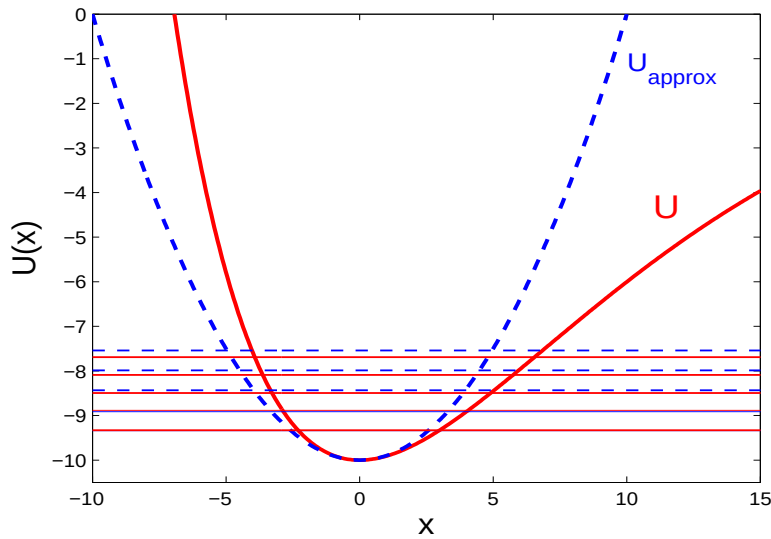


Рис. 65. Нижние уровни энергии в потенциале Морзе U и его квадратичном приближении U_{approx} .

Вблизи минимума, расположенного в точке $x = 0$,

$$\frac{dU}{dx} = U_0 (-2\beta e^{-2\beta x} + 2\beta e^{-\beta x}) = 0 \rightarrow x = 0, \quad (592)$$

потенциал можно разложить до квадратичных членов

$$U(x) \approx U(0) + \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=0} \frac{x^2}{2} = -U_0 + \beta^2 U_0 x^2. \quad (593)$$

Этот потенциал совпадает с потенциалом гармонического осциллятора с частотой

$$\omega = \sqrt{\frac{2\beta^2 U_0}{m}}. \quad (594)$$

Значит уровни энергии в потенциале Морзе вблизи основного

состояния приближенно равны

$$E_n = -U_0 + \hbar\omega(n + 1/2) = -U_0 + \hbar\beta\sqrt{\frac{2U_0}{m}}(n + 1/2), \quad (595)$$

рис. 65. Этот результат согласуется с точным при условии

$$\hbar\beta\sqrt{\frac{U_0}{m}} \gg 1. \quad (596)$$

Задача 4. Найти уровни энергии частицы массой m , близкие к энергии основного состояния, в потенциале:

$$U(x) = -\frac{U_0}{\operatorname{ch}^2(\alpha x)}.$$

Сравнить с точным решением:

$$E_n = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{8m} \left[\sqrt{1 + \frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}} - (2n + 1) \right]^2,$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$

Решение

Вблизи минимума, расположенного в точке $x = 0$,

$$\frac{dU}{dx} = -U_0 \frac{\alpha \operatorname{sh}(2\alpha x)}{\operatorname{ch}^3(\alpha x)} = 0 \rightarrow x = 0, \quad (597)$$

потенциал можно разложить до квадратичных членов

$$U(x) \approx -U(0) \frac{1}{(1 + \alpha^2 x^2/2)^2} \approx -U_0(1 - \alpha^2 x^2). \quad (598)$$

Этот потенциал совпадает с потенциалом гармонического осциллятора с частотой

$$\omega = \sqrt{\frac{2\alpha^2 U_0}{m}}. \quad (599)$$

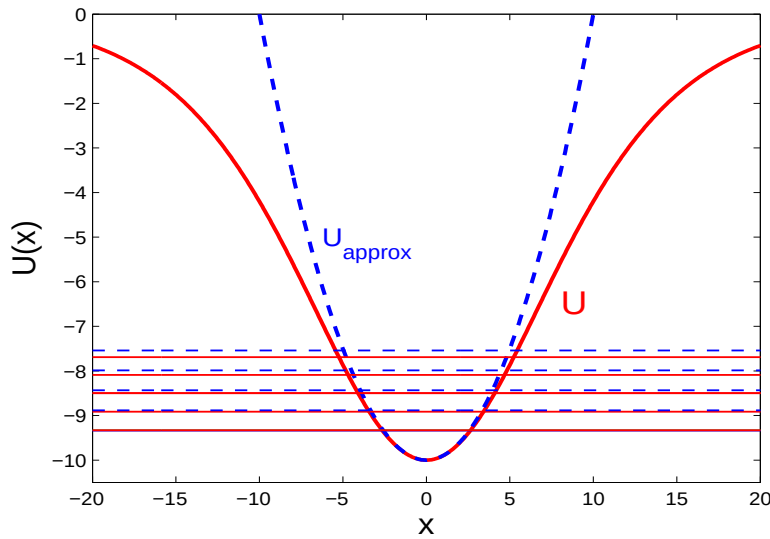


Рис. 66. Нижние уровни энергии в потенциале $U = -U_0/ch^2(\alpha x)$ и его квадратичном приближении U_{approx} .

Значит уровни энергии вблизи основного состояния приближенно равны

$$E_n = -U_0 + \hbar\omega(n + 1/2) = -U_0 + \hbar\alpha\sqrt{\frac{2U_0}{m}}(n + 1/2), \quad (600)$$

рис. 66. Этот результат согласуется с точным при условии

$$\hbar\alpha\sqrt{\frac{U_0}{m}} \gg 1. \quad (601)$$

20. Вариационный метод.

Задача 1. Используя вариационный метод с пробной волно-

вой функцией

$$\psi(x) = Bxe^{-\beta|x|},$$

найти энергию состояния для гармонического осциллятора

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

Сравнить с точным значением (каким?)

Решение

Данная волновая функция обращается в ноль один раз в точке $x = 0$, следовательно соответствует первому возбужденному состоянию. Условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 2B^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\beta x} x^2 dx = 1 \quad (602)$$

дает $B^2 = 2\beta^3$. Средняя кинетическая энергия равна

$$\bar{T} = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{p}\psi|^2 dx = \frac{\hbar^2 B^2}{m} \int_0^{+\infty} e^{-2\beta x} (1 - \beta x)^2 dx = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}. \quad (603)$$

Средняя потенциальная энергия равна

$$\bar{U} = m\omega^2 B^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\beta x} x^4 dx = \frac{3m\omega^2}{2\beta^2}. \quad (604)$$

Минимизируя полную энергию

$$E = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} + \frac{3m\omega^2}{2\beta^2} \quad (605)$$

по подгоночному параметру β , находим

$$E_{min} = \sqrt{3}\hbar\omega \approx 1.7\hbar\omega. \quad (606)$$

Вариационная оценка примерно на 15% превышает точное значение $E = 1.5\hbar\omega$.

Задача 2. Используя вариационный метод с пробной волновой функцией

$$\psi(x) = Be^{-\beta x^2},$$

найти энергию основного состояния для ангармонического осциллятора

$$U(x) = Ax^4.$$

Сравнить с численным значением $0.668A^{1/3}\hbar^{4/3}/m^{2/3}$.

Решение

Условие нормировки волновой функции

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta x^2} x^2 dx = B^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\beta}} = 1 \quad (607)$$

дает $B^2 = \sqrt{2\beta/\pi}$. Средняя кинетическая энергия равна

$$\bar{T} = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{p}\psi|^2 dx = \frac{\hbar^2 B^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta x^2} 4\beta^2 x^2 dx = \frac{\hbar^2 \beta}{2m}. \quad (608)$$

Средняя потенциальная энергия равна

$$\bar{U} = AB^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta x^2} x^4 dx = \frac{3AB^2\sqrt{\pi}}{4(2\beta)^{5/2}} = \frac{3A}{16\beta^2}. \quad (609)$$

Минимизируя полную энергию

$$E = \frac{\hbar^2 \beta}{2m} + \frac{3A}{16\beta^2} \quad (610)$$

по подгоночному параметру β , находим

$$E_{min} = \frac{3(6)^{1/3}}{8} A^{1/3} \hbar^{4/3} / m^{2/3} \approx 0.681 A^{1/3} \hbar^{4/3} / m^{2/3}. \quad (611)$$

Вариационная оценка примерно на 2% превышает численное значение $E = 0.668A^{1/3}\hbar^{4/3}/m^{2/3}$.

Задача 3. Используя вариационный метод с пробной волновой функцией

$$\psi(x) = Axe^{-\alpha x^2/2},$$

найти энергию основного состояния в потенциале

$$U(x) = \begin{cases} mgx, & x > 0 \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Сравнить с численным значением $1.856(mg^2\hbar^2)^{1/3}$.

Решение

Условие нормировки волновой функции

$$\int_0^{+\infty} |\psi|^2 dx = A^2 \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x^2 dx = \frac{A^2}{2} \left(-\frac{d}{d\alpha} \right) \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{A^2 \sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}} = 1 \quad (612)$$

дает $A^2 = 4\alpha^{3/2}/\sqrt{\pi}$. Средняя кинетическая энергия равна

$$\bar{T} = \frac{1}{2m} \int_0^{+\infty} |\hat{p}\psi|^2 dx = \frac{\hbar^2 A^2}{2m} \int_0^{+\infty} (1 - 2\alpha x^2 + \alpha^2 x^4) e^{-\alpha x^2} dx = \frac{3\hbar^2 \alpha}{4m}. \quad (613)$$

Средняя потенциальная энергия равна

$$\bar{U} = mgA^2 \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x^3 dx = \frac{A^2}{2\alpha^2} = \frac{2mg}{\sqrt{\pi\alpha}}. \quad (614)$$

Минимизируя полную энергию

$$E = \frac{3\hbar^2 \alpha}{4m} + \frac{2mg}{\sqrt{\pi\alpha}} \quad (615)$$

по подгоночному параметру α , находим

$$\alpha_0 = \left(\frac{4m^2g}{3\pi\hbar^2} \right)^{2/3} \quad (616)$$

так что

$$E_{min} = 3 \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{2/3} (mg^2\hbar^2)^{1/3} \approx 1.861 (mg^2\hbar^2)^{1/3}. \quad (617)$$

21. Одномерное рассеяние.

Задача 1. Найти с экспоненциальной точностью коэффициент прохождения потенциального барьера

$$U(x) = \begin{cases} U_0(1 - x/a), & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

частицей массы m с энергией $E < U_0$.

Решение

Коэффициент прохождения барьера равен

$$D \approx \exp \left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{U(x) - E} dx \right), \quad (618)$$

где x_0 - правая граница классически недоступной области барьера, рис.67, определяемая соотношением

$$E = U_0(1 - x_0/a). \quad (619)$$

Интеграл

$$\int_0^{x_0} \sqrt{U(x) - E} dx \quad (620)$$

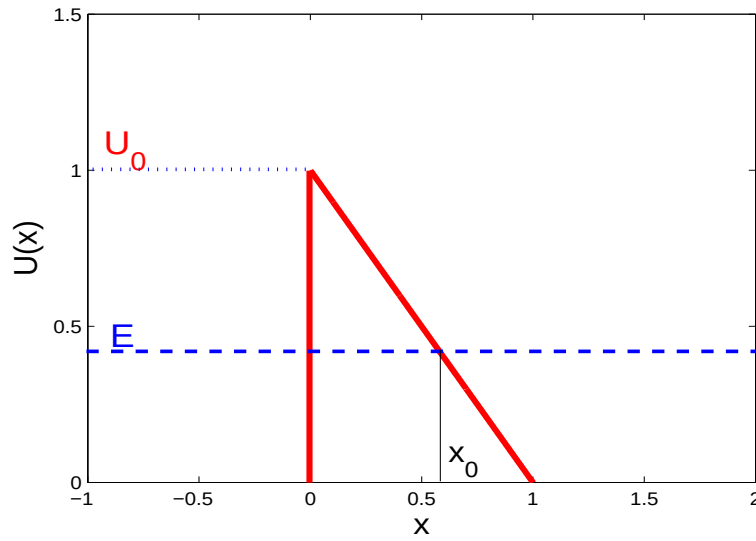


Рис. 67. Туннелирование частицы.

с помощью замены $x = ay$ приводится к виду

$$\sqrt{U_0}a \int_0^{y_0} \sqrt{y_0 - y} dy = \frac{2}{3} \sqrt{U_0}a \left(\frac{U_0 - E}{U_0} \right)^{3/2}. \quad (621)$$

В итоге коэффициент прохождения барьера равен

$$D \approx \exp \left(-\frac{4a\sqrt{2m}}{3\hbar U_0} (U_0 - E)^{3/2} \right), \quad (622)$$

Задача 2. Найти с экспоненциальной точностью коэффициент прохождения потенциального барьера

$$U(x) = \begin{cases} U_0(1 - x^2/R^2), & |x| < R \\ 0, & |x| > R \end{cases}$$

частицей массы m с энергией $E < U_0$.

Решение

Коэффициент прохождения барьера равен

$$D \approx \exp \left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{U(x) - E} dx \right), \quad (623)$$

где $\pm x_0$ - левая и правая границы классически недоступной области барьера, рис.68, определяемая соотношением

$$E = U_0(1 - x_0^2/R^2). \quad (624)$$

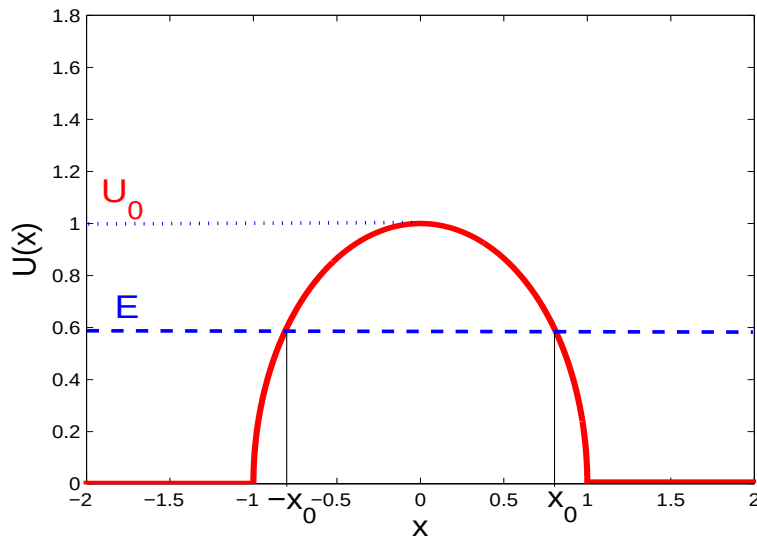


Рис. 68. Туннелирование частицы.

Интеграл

$$\int_0^{x_0} \sqrt{U(x) - E} dx = \sqrt{U_0} \int_0^{x_0} \sqrt{x_0^2 - x^2} dx \quad (625)$$

с помощью замены $x = x_0 \sin u$ приводится к виду

$$\frac{\pi\sqrt{2mU_0}}{\hbar R}x_0^2 \quad (626)$$

В итоге коэффициент прохождения барьера равен

$$D \approx \exp\left(-\frac{\pi\sqrt{2m}R}{\hbar\sqrt{U_0}}(U_0 - E)\right), \quad (627)$$

22. Квазиклассическое приближение.

Задача 1. Найти в квазиклассическом приближении уровни энергии в потенциале $U(x) = F|x|$.

Решение

Волновой вектор определяется выражением

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E - F|x|} = \frac{\sqrt{2mF}}{\hbar} \sqrt{x_0 - x}, \quad (628)$$

где классические точки поворота $\pm x_0$ определяются энергией $E = Fx_0$.

Вычисляя интеграл

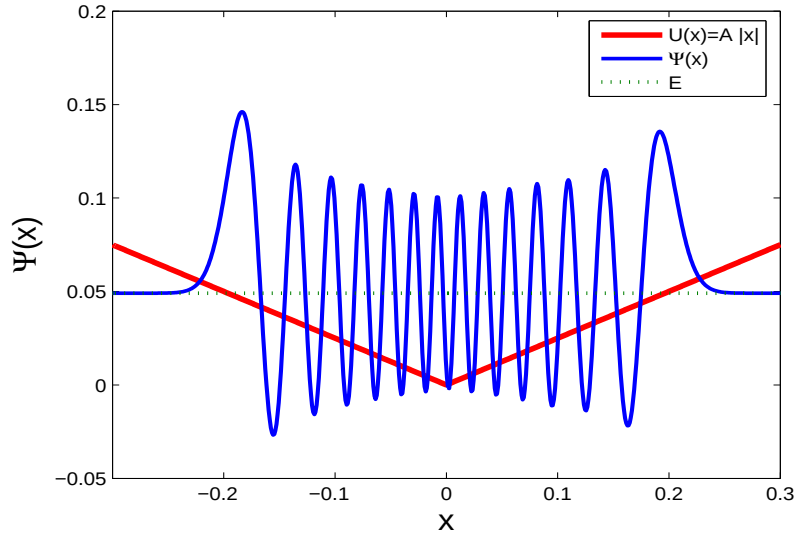
$$\frac{\sqrt{2mF}}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{x_0 - |x|} dx = \frac{4\sqrt{2m}E^{3/2}}{3\hbar F} = \pi \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (629)$$

получаем

$$E = \left[\frac{3\pi\hbar F}{4\sqrt{2m}} \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^{2/3}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (630)$$

Задача 2. Найти в квазиклассическом приближении уровни энергии в потенциале $U(x) = U_0(x/a)^4$.

Решение

Рис. 69. Вид волновой функции для потенциала $U(x) = F|x|$.

Волновой вектор определяется выражением

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{E - U_0(x/a)^4} = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar a^2} \sqrt{x_0^4 - x^4}, \quad (631)$$

где классические точки поворота $\pm x_0$ определяются энергией $E = U_0 x_0^4 / a^4$.

Получаем

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar a^2} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{x_0^4 - x^4} dx = \frac{I_0 \sqrt{2ma} E^{3/4}}{\hbar U_0^{1/4}}, \quad (632)$$

где значение интеграла

$$I_0 = \int_{-1}^1 \sqrt{1 - y^4} dy \approx 1.74802. \quad (633)$$

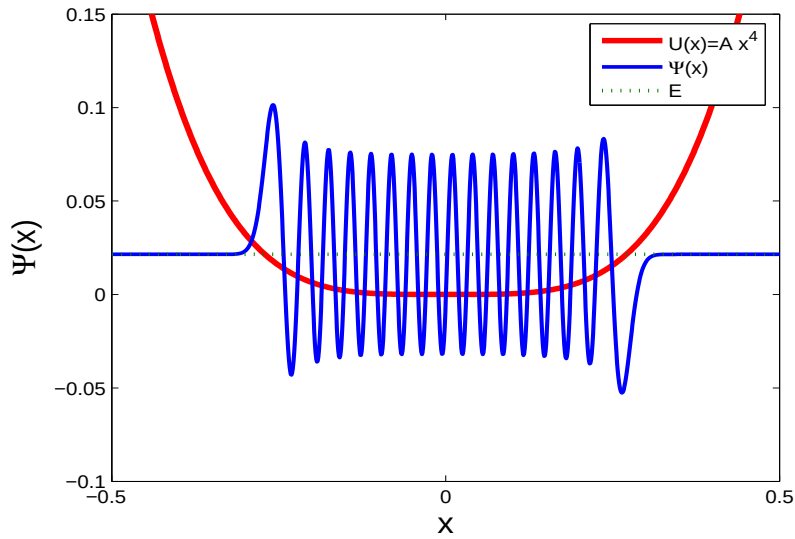


Рис. 70. Вид волновой функции для потенциала $U(x) = U_0(x/a)^4$.

Откуда находим

$$E = \left[\frac{\pi \hbar U_0^{1/4}}{\sqrt{2ma} I_0} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{4/3}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (634)$$

23. Периодический потенциал. Теорема Блоха.

Задача 1. Найти уровни энергии частицы массой m в периодическом потенциале

$$U(x) = \sum_{n=0, \pm 1, \pm 2, \dots} G \delta(x + na) \quad (635)$$

Решение

Волновая функция в области $0 < x < a$ имеет вид

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (636)$$

где волновой вектор k связан с энергией соотношением

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (637)$$

В силу периодичности потенциала волновая функция в соседней области $a < x < 2a$

$$\psi_2(x + a) = e^{iqa}\psi_1(x). \quad (638)$$

Волновая функция $\psi_1(x)$ на правой границе $x = a$ равна волновой функции $\psi_2(x + a)$ на левой границе $x = 0$:

$$\psi_1(x = a) = Ae^{ika} + Be^{-ika} = \psi_2(x = 0) = e^{iqa}(A + B), \quad (639)$$

а первые производные испытывают скачок:

$$\left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0} - \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=a} = \frac{2mG}{\hbar^2} \psi_1(x = a). \quad (640)$$

Получаем систему уравнений:

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = e^{iqa}(A + B) \quad (641)$$

$$ike^{iqa}(A - B) - ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) = \frac{2mG}{\hbar^2}(Ae^{ika} + Be^{-ika}). \quad (642)$$

Откуда

$$A(1 - e^{-iqa}e^{ika}) = B(e^{-iqa}e^{-ika} - 1) \quad (643)$$

$$A(ika e^{iqa} - ika e^{ika} - 2\Delta e^{ika}) = B(ika e^{iqa} - ika e^{-ika} + 2\Delta e^{-ika}), \quad (644)$$

где введено обозначение $\Delta = mGa/\hbar^2$. Исключая коэффициенты A и B , получим уравнение

$$\cos(qa) = \cos(ka) + \Delta \frac{\sin(ka)}{ka}. \quad (645)$$

Это уравнение имеет решение не при всех значениях величины ka (и значит не для всех значений энергии частицы), а только в тех областях (энергетических зонах), где правая часть по модулю не превышает единицу. Правая граница l -ой зоны расположена в точках $ka = l\pi$, ($l = 1, 2, \dots$), а положение левой границы существенно зависит от значения безразмерного параметра Δ .

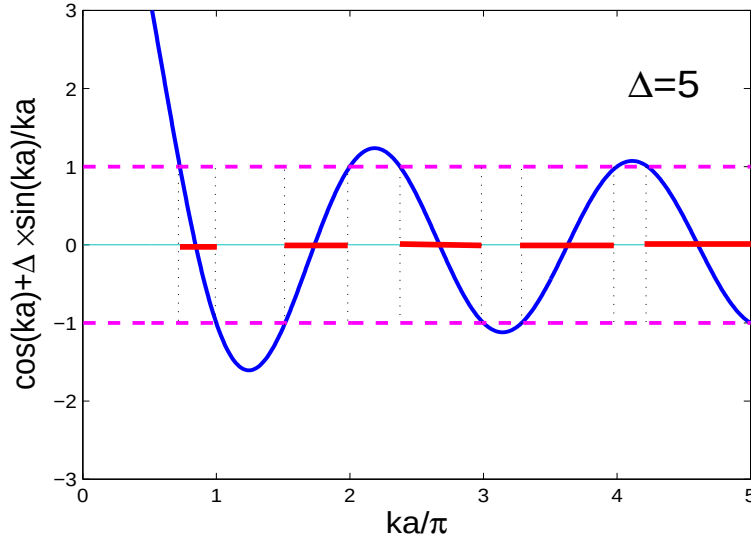


Рис. 71. Разрешенные значения ka (красная линия) для $\Delta = 5$.

Для $\Delta \gg 1$ (высокий барьер, рис. 71) левая граница первой зоны расположена близко от правой. Полагая $ka = \pi - \delta$, где $\delta \ll 1$, получим с точностью до членов первого порядка

по δ :

$$\cos(qa) \approx -1 + \frac{\Delta\delta}{\pi} \rightarrow \delta = \frac{\pi}{\Delta} (1 + \cos(qa)), \quad (646)$$

откуда энергия равна

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} - \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2 \Delta} \cos(qa). \quad (647)$$

Значит ширина 1-ой энергетической зоны равна

$$E_{1max} - E_{1min} \approx \frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2 \Delta}. \quad (648)$$

Вблизи минимума энергии, где $qa \ll 1$, имеем

$$E \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 q^2}{2m\Delta} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{eff}}, \quad (649)$$

где в последнем равенстве введена эффективная масса частицы

$$m_{eff} \equiv \frac{m\Delta}{\pi^2} \gg m. \quad (650)$$

В случае $\Delta \ll 1$ (низкий барьер, рис. 72) левая граница 1-ой энергетической зоны определяется уравнением

$$1 \approx 1 - \frac{(k_0 a)^2}{2} + \Delta \rightarrow k_0 a \approx \sqrt{2\Delta}. \quad (651)$$

Значит вблизи минимума энергии, где $qa \ll 1$, имеем

$$1 - \frac{(qa)^2}{2} \approx 1 - \frac{(k_0 a + \delta)^2}{2} + \Delta \rightarrow k_0 a \delta \approx \frac{(qa)^2}{2}. \quad (652)$$

Энергия равна

$$E \approx \frac{\hbar^2 (k_0 a + \delta)^2}{2ma^2} \approx \frac{\hbar^2 \Delta}{ma^2} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}, \quad (653)$$

то есть эффективная масса в данном случае совпадает с массой частицы.

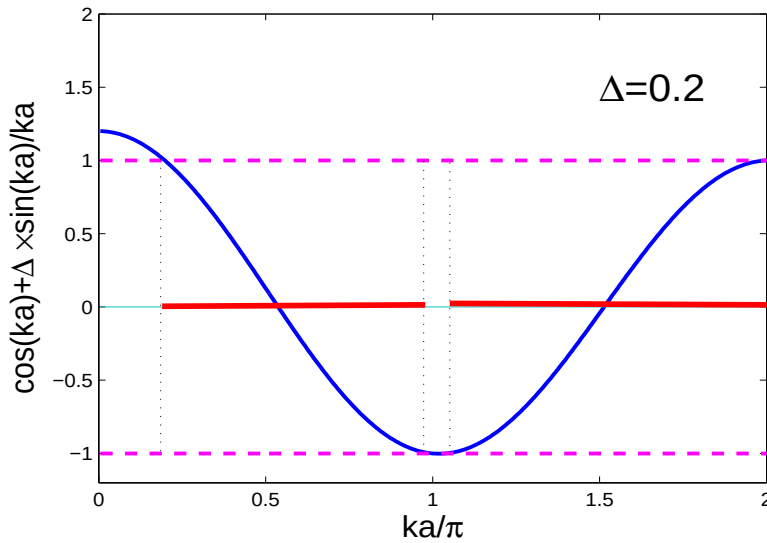


Рис. 72. Разрешенные значения ka (красная линия) для $\Delta = 0.2$.

24. Момент импульса.

Задача 1. Преобразование векторов при поворотах.

При повороте системы координат вокруг оси z компоненты вектора $\vec{A}$ преобразуются как

$$A'_x = A_x \cos \theta + A_y \sin \theta, A'_y = A_y \cos \theta - A_x \sin \theta, A'_z = A_z.$$

Также преобразуются компоненты вектора $\vec{B}$. Найти как преобразуется скалярное произведение векторов $\vec{A}$ и $\vec{B}$: $\vec{A}' \cdot \vec{B}' = ?$.

Решение

Запишем преобразование координат в матричном виде

$$\begin{pmatrix} B'_x \\ B'_y \\ B'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}, \quad (654)$$

$$(A'_x, A'_y, A'_z) = (A_x, A_y, A_z) \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (655)$$

Тогда скалярное произведение преобразованных векторов равно

$$\begin{aligned} (A'_x, A'_y, A'_z) \begin{pmatrix} B'_x \\ B'_y \\ B'_z \end{pmatrix} = \\ (A_x, A_y, A_z) \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (656)$$

Поскольку

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (657)$$

получим

$$\vec{A}' \cdot \vec{B}' = \vec{A} \cdot \vec{B}. \quad (658)$$

Задача 2. Найти коммутатор

$[L_x, (\vec{r} \cdot \vec{p})]$, L_x — x -компонента момента импульса, $\vec{r}$ — координата, $\vec{p}$ — оператор импульса.

Решение Для

$$L_x = yp_z - zp_y \quad (659)$$

получаем

$$\begin{aligned} [L_x, x] &= [L_x, p_x] = 0, \quad [L_x, y] = i\hbar z, \quad [L_x, p_y] = i\hbar p_z, \\ [L_x, z] &= -i\hbar y, \quad [L_x, p_z] = -i\hbar p_y, \end{aligned} \quad (660)$$

где использовано

$$[r_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}. \quad (661)$$

Тогда

$$\begin{aligned} [L_x, xp_x + yp_y + zp_z] &= y[L_x, p_y] + [L_x, y]p_y + z[L_x, p_z] + [L_x, z]p_z = \\ &= yi\hbar p_z + i\hbar zp_y - zi\hbar p_y - i\hbar yp_z = 0. \end{aligned} \quad (662)$$

Задача 3. Найти в состоянии $|\psi\rangle = |l, m\rangle$ с определенными значениями квадрата момента импульса и проекции момента импульса на ось z средние значения $\overline{\hat{L}_x}$, $\overline{\hat{L}_y}$, $\overline{\hat{L}_x^2}$, $\overline{\hat{L}_y^2}$.

Решение

Используя повышающий $L_+ = L_x + iL_y$ и понижающий $L_- = L_x - iL_y$ операторы, которые действуя на состояние с определенным значением проекции момента импульса на ось z , соответственно увеличивают и уменьшают значение проекции

$$L_+|l, m\rangle = C_+|l, m+1\rangle, \quad L_-|l, m\rangle = C_-|l, m-1\rangle, \quad (663)$$

получаем

$$\begin{aligned} \langle l, m | L_x | l, m \rangle &= \frac{1}{2} (\langle l, m | L_+ | l, m \rangle + \langle l, m | L_- | l, m \rangle) = \\ &= \frac{1}{2} (C_+ \langle l, m | l, m+1 \rangle + C_- \langle l, m | l, m-1 \rangle) = 0 \end{aligned} \quad (664)$$

в силу ортогональности векторов состояний с разными значениями m проекции момента импульса на ось z . Аналогично

$$\langle l, m | L_y | l, m \rangle = 0. \quad (665)$$

Из симметрии следует, что

$$\langle l, m | L_x^2 | l, m \rangle = \langle l, m | L_y^2 | l, m \rangle. \quad (666)$$

С другой стороны

$$\langle l, m | L_x^2 + L_y^2 | l, m \rangle = \langle l, m | L^2 - L_z^2 | l, m \rangle = \hbar^2 [l(l+1) - m^2]. \quad (667)$$

Тогда получим

$$\langle l, m | L_x^2 | l, m \rangle = \langle l, m | L_y^2 | l, m \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2]. \quad (668)$$

25. Спин.

Задача 1. Доказать соотношение для матриц Паули

$$\sigma_i \sigma_j = I \delta_{ij} + i e_{ijk} \sigma_k, \quad (669)$$

где I – единичная матрица, δ_{ij} – символ Кронекера, e_{ijk} – антисимметричный тензор Леви-Чивита. По повторяющемуся индексу k подразумевается суммирование.

Решение Используя явный вид матриц Паули получаем

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I, \quad \sigma_x \sigma_y = i \sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_z = i \sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = i \sigma_y. \quad (670)$$

Эти соотношения эквивалентны приведенному в условии задаче.

Задача 2. Найти собственные значения и собственные векторы частицы со спином $1/2$ и магнитным моментом μ в магнитном поле

$$\vec{B} = B_0 (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta).$$

Если магнитный момент частицы направлен вдоль оси z , то какова вероятность обнаружить магнитный момент вдоль магнитного поля.

Решение Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = -\mu\vec{\sigma}\vec{B} = -\mu B_0 \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix}. \quad (671)$$

Собственные значения и собственные векторы находятся из уравнения

$$\begin{pmatrix} -\mu B_0 \cos\theta - \lambda & -\mu B_0 \sin\theta e^{-i\phi} \\ -\mu B_0 \sin\theta e^{i\phi} & \mu B_0 \cos\theta - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (672)$$

Откуда

$$(-\mu B_0 \cos\theta - \lambda)(\mu B_0 \cos\theta - \lambda) - (\mu B_0)^2 \sin^2\theta = 0 \quad (673)$$

и значит $\lambda = \pm\mu B_0$. Из первого уравнения системы получаем для собственного значения $\lambda_1 = -\mu B_0$ соотношение

$$\mu B_0(1 - \cos\theta)a_1 - \mu B_0 \sin\theta e^{-i\phi}a_2 = 0 \quad (674)$$

С учетом нормировки

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1, \quad (675)$$

имеем

$$|\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)e^{-i\phi/2} \\ \sin(\theta/2)e^{i\phi/2} \end{pmatrix}. \quad (676)$$

Для собственного значения $\lambda_2 = \mu B_0$ получаем соотношение

$$-\mu B_0(1 + \cos\theta)a'_1 - \mu B_0 \sin\theta e^{-i\phi}a'_2 = 0 \quad (677)$$

С учетом нормировки

$$|a'_1|^2 + |a'_2|^2 = 1, \quad (678)$$

имеем

$$|\Psi_2\rangle = \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\theta/2)e^{-i\phi/2} \\ -\cos(\theta/2)e^{i\phi/2} \end{pmatrix}. \quad (679)$$

Собственные векторы, принадлежащие разным собственным значениям, ортогональны:

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = (\cos(\theta/2)e^{i\phi/2}, \sin(\theta/2)e^{-i\phi/2}) \cdot \begin{pmatrix} \sin(\theta/2)e^{-i\phi/2} \\ -\cos(\theta/2)e^{i\phi/2} \end{pmatrix} = 0. \quad (680)$$

Вероятность обнаружить магнитный момент вдоль магнитного поля определяется скалярным произведением

$$\langle \Psi_1 | \Psi_0 \rangle = (\cos(\theta/2)e^{i\phi/2}, \sin(\theta/2)e^{-i\phi/2}) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \cos(\theta/2)e^{i\phi/2} \quad (681)$$

и равна

$$P = |\langle \Psi_1 | \Psi_0 \rangle|^2 = \cos^2(\theta/2). \quad (682)$$

Задача 3. Собственные функции и собственные значения операторов момента импульса с квантовым числом $j = 1$.

Операторы компонент момента импульса с квантовым числом $j = 1$ имеют вид

$$\hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \hat{J}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

а) Найти коммутаторы операторов момента импульса $[\hat{J}_x, \hat{J}_y]$; $[\hat{J}_y, \hat{J}_z]$; $[\hat{J}_z, \hat{J}_x]$ и выразить их через компоненты $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$.

б) Найти нормированные собственные функции $|\psi\rangle$ и собственные значения λ операторов момента импульса $\hat{J}_z, \hat{J}_x$.

$$\hat{J}_z |\psi\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1.$$

Проверить ортогональность собственных функций, принадлежащих разным собственным значениям.

с) Найти повышающий оператор $\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$ и понижающий оператор $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$. Как действуют эти операторы на собственные функции оператора $\hat{J}_z$?

Решение

а).

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \frac{i\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \quad (683)$$

$$- \frac{i\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \quad (684)$$

$$= \frac{i\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{i\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = i\hbar J_z \quad (685)$$

Аналогично

$$[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar J_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar J_y. \quad (686)$$

б) Проверим, что

$$\hat{J}_x^3 = \hbar^2 \hat{J}_x, \quad \hat{J}_y^3 = \hbar^2 \hat{J}_y, \quad \hat{J}_z^3 = \hbar^2 \hat{J}_z. \quad (687)$$

$$\hat{J}_x^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad (688)$$

$$\hat{J}_x^3 = \frac{\hbar^3}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^3}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} = \hbar^2 \hat{J}_x. \quad (689)$$

Аналогично проверяются другие. Полученные соотношения означают, что имеет место равенство

$$\lambda^3 = \hbar^2 \lambda, \quad (690)$$

Откуда следует, что собственные значения операторов $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$, $\hat{J}_z$ принимают значения $\lambda = 0, \pm\hbar$.

Решением системы уравнений

$$\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ -c \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \quad (691)$$

будут:

1) $\lambda = \hbar, a = 1, b = 0, c = 0;$

2) $\lambda = 0, a = 0, b = 1, c = 0;$

3) $\lambda = -\hbar, a = 0, b = 0, c = 1$. Собственные векторы оператора J_z имеют вид

$$|1, +1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (692)$$

и являются ортонормированными.

Решением системы уравнений

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} b \\ a+c \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \quad (693)$$

будут:

1) $\lambda = \hbar, a = 1/2, b = 1/\sqrt{2}, c = 1/2;$

2) $\lambda = 0, a = 1/\sqrt{2}, b = 0, c = -1/\sqrt{2};$

3) $\lambda = -\hbar, a = 1/2, b = -1/\sqrt{2}, c = 1/2$. Собственные векторы оператора J_x имеют вид

$$|1, +1\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, |1, -1\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (694)$$

и являются ортонормированными.

c)

$$\hat{J}_+ = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (695)$$

$$\hat{J}_- = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (696)$$

$$\hat{J}_+|1, -1\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar|1, 0\rangle, \quad (697)$$

$$\hat{J}_+|1, 0\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar|1, +1\rangle, \quad (698)$$

$$\hat{J}_+|1, 1\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad (699)$$

$$\hat{J}_-|1, +1\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar|1, 0\rangle, \quad (700)$$

$$\hat{J}_-|1, 0\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\hbar|1, -1\rangle, \quad (701)$$

$$\hat{J}_-|1, 1\rangle = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0. \quad (702)$$

26. Представления Гейзенберга и Дирака

Задача 1. Записать операторы координаты и импульса в представлении Гейзенберга для свободной частицы и вычислить их коммутатор.

Найти зависимость от времени средних значений и среднеквадратичных отклонений для операторов координаты и импульса, если в начальный момент вектор состояния имел вид:

$$|\psi(0)\rangle = Ae^{-x^2/(2a^2)}. \quad (703)$$

Проверить выполнение соотношения неопределенностей.

Решение

Гамильтониан свободной частицы есть

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (704)$$

Операторы координаты и импульса в представлении Гейзенберга равны

$$\hat{x}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} x e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (705)$$

$$\hat{p}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{p}(0) e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{p}(0). \quad (706)$$

Уравнение Гейзенберга для оператора координаты имеет вид

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2(0)}{2m}, x \right] e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \frac{\hat{p}(0)}{m}. \quad (707)$$

Тогда

$$\hat{x}(t) = x + \frac{\hat{p}(0)t}{m}, \quad [\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar. \quad (708)$$

Среднее значения импульса

$$\langle \psi(0) | \hat{p}(t) | \psi(0) \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/(2a^2)} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) e^{-x^2/(2a^2)} dx = 0 \quad (709)$$

в силу нечетности выражения

$$\langle \psi(0) | \hat{p}(t) | \psi(0) \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{-x^2/(2a^2)} = i\hbar \frac{x}{a^2} e^{-x^2/(2a^2)}. \quad (710)$$

Среднеквадратичное значение импульса равно

$$\begin{aligned} \langle \psi(0) | \hat{p}^2(t) | \psi(0) \rangle &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| i\hbar \frac{x}{a^2} e^{-x^2/(2a^2)} \right|^2 dx = \\ &= \frac{A^2 \hbar^2}{a^4} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/a^2} dx = \frac{A^2 \hbar^2 \sqrt{\pi}}{2a} = \frac{\hbar^2}{2a^2}. \end{aligned} \quad (711)$$

В последнем равенстве использовано условие нормировки

$$\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/a^2} dx = A^2 \sqrt{\pi} a = 1. \quad (712)$$

Среднее значение координаты

$$\langle \psi(0) | \hat{x}(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \left(x + \frac{\hat{p}(0)t}{m} \right) | \psi(0) \rangle = 0 \quad (713)$$

из-за нечетности подынтегральных выражений. Среднеквадратичное значение координаты равно

$$\langle \psi(0) | \left(x + \frac{\hat{p}(0)t}{m} \right)^2 | \psi(0) \rangle = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right), \quad (714)$$

где использовано выражение для среднеквадратичного значения импульса и значение интеграла

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/a^2} dx = \frac{A^2 a^3 \sqrt{\pi}}{2} = \frac{a^2}{2}, \quad (715)$$

а также обращение в ноль выражения

$$\langle \psi(0) | x\hat{p} + \hat{p}x | \psi(0) \rangle = 0 \quad (716)$$

для вещественных $|\psi(0)\rangle$ в силу эрмитовости операторов координаты и импульса:

$$\begin{aligned} \langle \psi(0) | x\hat{p} | \psi(0) \rangle &= \langle \psi(0) | \hat{p}^\dagger x^\dagger | \psi(0) \rangle^* = \\ &= \langle \psi(0) | \hat{p}x | \psi(0) \rangle^* = -\langle \psi(0) | \hat{p}x | \psi(0) \rangle. \end{aligned} \quad (717)$$

Произведение среднеквадратичных отклонений координаты и импульса равно

$$\overline{\Delta x^2(t)} \overline{\Delta p^2(t)} = \frac{\hbar^2}{4} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right) \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (718)$$

удовлетворяет соотношению неопределенностей.

Задача 2. Найти операторы координаты и импульса в представлении Гейзенберга для частицы в однородном поле $U(x) = -Fx$ и вычислить их коммутатор.

Найти зависимость от времени средних значений и среднеквадратичных отклонений для операторов координаты и импульса, если в начальный момент вектор состояния имел вид:

$$|\psi(0)\rangle = A e^{-x^2/(2a^2)}. \quad (719)$$

Проверить выполнение соотношения неопределенностей.

Решение

Гамильтониан частицы в однородном поле есть

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - Fx. \quad (720)$$

Уравнение Гейзенберга для оператора импульса имеет вид

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - Fx, \hat{p} \right] e^{-i\hat{H}t/\hbar} = F, \quad (721)$$

так что

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0) + Ft. \quad (722)$$

Уравнение Гейзенберга для оператора координаты имеет вид

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - Fx, x \right] e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \frac{\hat{p}(t)}{m}. \quad (723)$$

Тогда

$$\hat{x}(t) = x + \frac{\hat{p}(0)t}{m} + \frac{Ft^2}{2m}. \quad (724)$$

Коммутатор равен

$$[\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar, \quad (725)$$

то есть такой же как для свободной частицы.

Среднее значения импульса

$$\bar{p}(t) = \langle \psi(0) | \hat{p}(0) + Ft | \psi(0) \rangle = Ft, \quad (726)$$

где использован результат предыдущей задачи

$$\langle \psi(0) | \hat{p}(0) | \psi(0) \rangle = 0. \quad (727)$$

Среднеквадратичное отклонение импульса равно

$$\overline{\Delta \hat{p}^2} = \langle \psi(0) | \hat{p}^2(t) | \psi(0) \rangle - (\bar{p}(t))^2 = \frac{\hbar^2}{2a^2},$$

где использован результат предыдущей задачи

$$\langle \psi(0) | \hat{p}^2(t) | \psi(0) \rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}. \quad (728)$$

Среднее значения координаты

$$\bar{x}(t) = \langle \psi(0) | \left(x + \frac{\hat{p}(0)t}{m} + \frac{Ft^2}{2m} \right) | \psi(0) \rangle = \frac{Ft^2}{2m}. \quad (729)$$

Среднеквадратичное отклонение координаты равно

$$\overline{\Delta x^2} = \langle \psi(0) | \hat{x}^2(t) | \psi(0) \rangle - (\bar{x}(t))^2 = \frac{a^2}{2} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right), \quad (730)$$

где использован результат предыдущей задачи.

Произведение среднеквадратичных отклонений координаты и импульса равно

$$\overline{\Delta x^2(t)} \overline{\Delta p^2(t)} = \frac{\hbar^2}{4} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4} \right) \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (731)$$

удовлетворяет соотношению неопределенностей.

Задача 3. Найти операторы координаты и импульса в представлении Гейзенберга для частицы в поле гармонического осциллятора $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ и вычислить их коммутатор.

Найти зависимость от времени средних значений и среднеквадратичных отклонений для операторов координаты и импульса, если в начальный момент вектор состояния имел вид:

$$|\psi(0)\rangle = Ae^{-x^2/(2a^2)}. \quad (732)$$

Проверить выполнение соотношения неопределенностей.

Решение

Гамильтониан частицы в поле гармонического осциллятора есть

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (733)$$

Уравнение Гейзенберга для оператора импульса имеет вид

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \hat{p} \right] e^{-i\hat{H}t/\hbar} = -m\omega^2 \hat{x}(t). \quad (734)$$

Уравнение Гейзенберга для оператора координаты имеет вид

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} e^{i\hat{H}t/\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}, x \right] e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \frac{\hat{p}(t)}{m}. \quad (735)$$

Тогда дифференцируя это уравнение еще раз по времени и используя уравнение для оператора импульса, получим

$$\frac{d^2 \hat{x}(t)}{dt^2} = -\omega^2 \hat{x}(t). \quad (736)$$

Решение этого уравнения есть

$$\hat{x}(t) = x \cos(\omega t) + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} \sin(\omega t). \quad (737)$$

Для оператора импульса получаем

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0) \cos(\omega t) - m\omega x \sin(\omega t). \quad (738)$$

Коммутатор для одинаковых времен равен

$$[\hat{x}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar, \quad (739)$$

то есть такой же как для свободной частицы. Однако коммутатор для разных времен имеет другое значение

$$[\hat{x}(t'), \hat{p}(t)] = i\hbar \cos[\omega(t - t')]. \quad (740)$$

Среднее значения импульса

$$\bar{p}(t) = \langle \psi(0) | (\hat{p}(0) \cos(\omega t) - m\omega x \sin(\omega t)) | \psi(0) \rangle = 0. \quad (741)$$

Среднеквадратичное отклонение импульса равно

$$\overline{\Delta \hat{p}^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2} \left(\cos^2(\omega t) + \frac{m^2 \omega^2 a^4}{\hbar^2} \sin^2(\omega t) \right), \quad (742)$$

где использован результат предыдущей задачи

$$\langle \psi(0) | \hat{p}^2(0) | \psi(0) \rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}, \quad \langle \psi(0) | \hat{x}^2(0) | \psi(0) \rangle = \frac{a^2}{2}. \quad (743)$$

Среднее значения координаты

$$\bar{x}(t) = \langle \psi(0) | \left(x \cos(\omega t) + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} \sin(\omega t) \right) | \psi(0) \rangle = 0. \quad (744)$$

Среднеквадратичное отклонение координаты равно

$$\overline{\Delta \hat{x}^2} = \frac{a^2}{2} \left(\cos^2(\omega t) + \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2 a^4} \sin^2(\omega t) \right). \quad (745)$$

Если выбрать начальное значение ширины волновой функции

$$a^2 = \frac{\hbar}{m\omega}, \quad (746)$$

что соответствует волновой функции основного состояния гармонического осциллятора, то среднеквадратичные отклонения координаты и импульса не будут зависеть от времени.

Произведение среднеквадратичных отклонений координаты и импульса равно

$$\overline{\Delta x^2(t)} \overline{\Delta p^2(t)} = \frac{\hbar^2}{4} \left(\cos^4(\omega t) + \sin^4(\omega t) + \frac{1 + \alpha^2}{\alpha} \cos^2(\omega t) \sin^2(\omega t) \right), \quad (747)$$

где введено обозначение

$$\alpha \equiv \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2 a^4}. \quad (748)$$

Используя неравенство $\alpha + 1/\alpha \geq 2$, получаем

$$\overline{\Delta x^2(t)} \overline{\Delta p^2(t)} \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (749)$$

Задача 4. Найти операторы уничтожения a и рождения $a^\dagger$ в представлении Гейзенберга для частицы в поле гармонического осциллятора $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ и вычислить их коммутатор.

Решение Гамильтониан частицы в поле гармонического осциллятора, выраженный через операторы уничтожения и рождения, есть

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (750)$$

Уравнение Гейзенберга для оператора уничтожения имеет вид

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = i\omega e^{i\hat{H}t/\hbar} [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] e^{-i\hat{H}t/\hbar} = -i\omega \hat{a}(t), \quad (751)$$

где использовано

$$[\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} = \hat{a}. \quad (752)$$

Аналогично

$$\frac{d\hat{a}^\dagger(t)}{dt} = i\omega e^{i\hat{H}t/\hbar} [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}^\dagger] e^{-i\hat{H}t/\hbar} = i\omega \hat{a}^\dagger(t). \quad (753)$$

Значит

$$\hat{a}^\dagger(t) = e^{i\omega t} \hat{a}^\dagger, \quad \hat{a}(t) = e^{-i\omega t} \hat{a}. \quad (754)$$

Одновременный коммутатор равен

$$[\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)] = 1. \quad (755)$$

27. Атом водорода.

Задача 1. Найти среднюю кинетическую энергию и среднюю потенциальную энергию в основном состоянии атома водорода (ψ_{100}). Проверить выполнение теоремы о вириале.

Решение

Радиальная часть волновой функции основного состояния атома водорода равна

$$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-r/a}, \quad (756)$$

где $a = \hbar^2/(me^2)$. Средняя потенциальная энергия равна

$$\bar{U} = \int_0^\infty R_{10}^2 \left(-\frac{e^2}{r} \right) r^2 dr = -\frac{4e^2}{a^3} \int_0^\infty r e^{-2r/a} dr = -\frac{e^2}{a}. \quad (757)$$

Поскольку орбитальный момент импульса основного состояния равен нулю, то

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} R_{10} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R_{10} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ra} \right) R_{10}. \quad (758)$$

Средняя кинетическая энергия равна

$$\bar{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty R_{10}^2 \left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ra} \right) r^2 dr = \frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{\bar{e}^2}{2a}. \quad (759)$$

Этот результат согласуется с теоремой вириала

$$2\bar{T} = r \frac{\overline{dU}}{dr} = \frac{\overline{e^2}}{r} = -\bar{U}. \quad (760)$$

Задача 2. Найти матричный элемент дипольного момента для состояний атома водорода $\langle \psi_{n=1,l=0,m=0} | e\vec{r} | \psi_{n=2,l=1,m=0} \rangle$.

Решение

Волновая функция начального состояния имеет вид

$$\Psi_{n=2,l=1,m=0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \frac{r}{\sqrt{24a^5}} e^{-r/2a}, \quad (761)$$

конечного состояния –

$$\Psi_{n=1,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad (762)$$

В этом случае отличен от нуля только матричный элемент z - компоненты дипольного момента

$$\begin{aligned} (d_z)_{fi} &= e \int \Psi_{n=1,l=0,m=0} z \Psi_{n=2,l=1,m=0} d^3r = \\ &= \frac{e}{4\pi\sqrt{2}a^4} \int_{-1}^{+1} (\cos\theta)^2 2\pi d \cos\theta \int_0^\infty r^4 e^{-3r/2a} dr = ea \frac{128\sqrt{2}}{243}. \end{aligned} \quad (763)$$

Матричные элементы x, y - компонент дипольного момента

$$\begin{aligned} (d_x)_{fi} &= e \int \Psi_{n=1,l=0,m=0} r \sin\theta \cos\phi \Psi_{n=2,l=1,m=0} d^3r = 0, \\ (d_y)_{fi} &= e \int \Psi_{n=1,l=0,m=0} r \sin\theta \sin\phi \Psi_{n=2,l=1,m=0} d^3r = 0, \end{aligned}$$

поскольку волновые функции начального и конечного состояния не зависят от угла ϕ .

Задача 3. Ядро атома внезапно изменяет заряд от $Z = 1$ до $Z = 2$ (пример: тритий (изотоп водорода) превращается в гелий). Если сначала электрон находился в основном состоянии ψ_{100} в кулоновском поле ядра с $Z = 1$, то какова вероятность найти его в основном состоянии ψ'_{100} в кулоновском поле ядра с $Z = 2$.

Решение

Волновая функция основного состояния атома водорода равна

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad (764)$$

где $a = \hbar^2/(me^2)$, волновая функция основного состояния водородоподобного атома с зарядом ядра $Z = 2|e|$ равна

$$\psi'_{100} = \sqrt{\frac{8}{\pi a^3}} e^{-2r/a}, \quad (765)$$

поскольку теперь $a = \hbar^2/(mZe^2) = a/2$, Вероятность перехода $\psi \rightarrow \psi'$ есть

$$P = \left| \int \psi'^* \psi d^3r \right|^2 = \left| \frac{4\pi\sqrt{8}}{\pi a^3} \int_0^\infty e^{-3r/a} r^2 dr \right|^2 = \frac{2^7}{3^6} \approx 0.70. \quad (766)$$

Задача 4. Найти потенциал $\phi(r)$ электрического поля, создаваемый атомом водорода в основном состоянии ($\psi_{n=1,l=0,m=0}$).

Решение

Потенциал электрического поля атома водорода для основного состояния является сферически симметричным и равен

$$\phi(r) = \frac{|e|}{r} - \frac{|e|}{r} \int_0^r \rho(r') 4\pi r'^2 dr' - |e| \int_r^\infty \frac{1}{r''} \rho(r'') 4\pi r''^2 dr'', \quad (767)$$

где первый член в правой части есть вклад от протона, второй член – вклад от сферически симметричного распределения заряда электрона на расстояниях $r' < r$, третий член – вклад от сферически симметричного распределения заряда электрона на расстояниях $r'' > r$. Плотность вероятности найти электрон на расстоянии r' от ядра есть

$$\rho(r') = |\psi_{100}|^2 = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r'/a}. \quad (768)$$

Первый интеграл

$$I_1 = \int_0^r e^{-2r'/a} r'^2 dr' \quad (769)$$

с помощью замены $x = 2r'/a$ сводится к

$$\frac{a^3}{8} \int_0^b e^{-x} x^2 dx, \quad (770)$$

где $b = 2r/a$, и вычисляется интегрированием по частям

$$I_1 = \frac{a^3}{8} \left[2 - 2e^{-2r/a} - 4\frac{r}{a}e^{-2r/a} - 4\frac{r^2}{a^2}e^{-2r/a} \right], \quad (771)$$

Второй интеграл

$$I_2 = \int_r^\infty e^{-2r''/a} r'' dr'' = \frac{a^2}{4} \int_b^\infty e^{-x} x dx = \frac{ar}{2} e^{-2r/a} + \frac{a^2}{4} e^{-2r/a}. \quad (772)$$

В итоге получаем

$$\phi(r) = |e| \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{a} \right) e^{-2r/a}. \quad (773)$$

При $r \rightarrow 0$ основной вклад в потенциал электрического поля дает протон

$$\phi(r) \rightarrow \frac{|e|}{r}, \quad (774)$$

при $r \gg a$ поле протона почти полностью экранируется электроном

$$\phi(r) \rightarrow \frac{|e|}{a} e^{-2r/a} \ll \frac{|e|}{r}. \quad (775)$$

Задача 5. Радиальная часть волновой функция электрона в атоме водорода имеет вид

$$R_{nl}(r) = Nr^k e^{-r/b}.$$

Найти энергию, квантовое число орбитального момента l и величину b .

Решение

Подставляем в уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R_{nl} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R_{nl} - \frac{e^2}{r} R_{nl} = E R_{nl}. \quad (776)$$

волновую функцию $R_{nl}(r) = Nr^k e^{-r/b}$ получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[k(k+1)r^{k-2} - \frac{2(k+1)}{b}r^{k-1} + \frac{1}{b^2}r^k \right] + \quad (777)$$

$$+ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m} r^{k-2} - e^2 r^{k-1} = E r^k. \quad (778)$$

Приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях r , находим

$$l(l+1) = k(k+1), \rightarrow l = k; \quad (779)$$

$$b = \frac{\hbar^2(l+1)}{me^2}; \quad E = -\frac{\hbar^2}{2mb^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(l+1)^2}. \quad (780)$$

28. Движение в центральном потенциале.

Задача 1. Найти уровни энергии связанных состояний частицы массой m в центральном потенциале

$$U(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}.$$

Решение

Решение уравнения Шредингера в центральном поле

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_r + \Delta_{\theta,\phi})\psi(\vec{r}) + \left(\frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}\right)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (781)$$

ищем в виде произведения угловой и радиальной частей

$$\psi(\vec{r}) = Y_{l,m}(\theta, \phi)R(r) \quad (782)$$

и получаем уравнение для радиальной части

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r R(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(l(l+1) + \frac{2mA}{\hbar^2} \right) R(r) - \frac{B}{r}R(r) = ER(r) \quad (783)$$

по виду совпадающее с уравнением для радиальной части волновой функции атома водорода (лекция 10). Вместо квадрата заряда имеем $e^2 \rightarrow B$, вместо квантового числа орбитального момента имеем $l'(l'+1) \rightarrow l(l+1) + 2mA/\hbar^2$ то есть

$$l' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2mA}{\hbar^2}}. \quad (784)$$

Таким образом уровни энергии равны

$$\begin{aligned} E_{nl} &= -\frac{mB^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(n_r + l' + 1)^2} = \\ &= -\frac{mB^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(n_r + 1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 + 2mA/\hbar^2})^2}, \end{aligned} \quad (785)$$

где для каждого значения радиального квантового числа $n_r = 0, 1, 2, \dots$ возможны значения орбитального квантового числа $l = 0, 1, 2, \dots$

Задача 2. Найти уровни энергии при движении частицы массой m в потенциале сферически симметричного гармонического осциллятора

$$U(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2.$$

Решение

Полезно получить решение в сферических координатах. Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R(r) + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 R(r) = E R(r) \quad (786)$$

перепишем в виде

$$-\frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{m^2 \omega^2 r^2}{\hbar^2} R(r) = \frac{2mE}{\hbar^2} R(r). \quad (787)$$

Сделаем замену переменной $r^2 = a^2 x$, так что

$$\frac{dR}{dr} = \frac{dx}{dr} \frac{dR}{dx} = \frac{2\sqrt{x}}{a} \frac{dR}{dx}, \quad \frac{d^2 R}{dr^2} = \frac{2}{a^2} \frac{dR}{dx} + \frac{4x}{a^2} \frac{d^2 R}{dx^2}. \quad (788)$$

Тогда уравнение Шредингера перепишется в виде

$$-4x \frac{d^2 R}{dx^2} - 6 \frac{dR}{dx} + \frac{l(l+1)}{x} R + \frac{m^2 \omega^2 a^4}{\hbar^2} x R = \frac{2mEa^2}{\hbar^2} R. \quad (789)$$

Выбирая значение параметра

$$a = \frac{\hbar}{m\omega}, \quad (790)$$

получим

$$x \frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{3}{2} \frac{dR}{dx} + \left(\frac{\varepsilon}{2} - \frac{l(l+1)}{4x} - \frac{x}{4} \right) R = 0. \quad (791)$$

Найдем сначала асимптотическое поведение функции R при $x \rightarrow \infty$. В этом случае получаем

$$x \frac{d^2 R}{dx^2} \sim \frac{x}{4} R, \quad (792)$$

откуда

$$R \sim e^{-x/2}. \quad (793)$$

Поэтому ищем решение исходного уравнения в виде $R = f(x)e^{-x/2}$, получая

$$R' = \left(f' - \frac{f}{2}\right) e^{-x/2}, \quad R'' = \left(f'' - f' + \frac{f}{4}\right) e^{-x/2}, \quad (794)$$

так что

$$xf'' + \left(\frac{3}{2} - x\right) f' + \left(\frac{\varepsilon}{2} - \frac{l(l+1)}{4x} - \frac{3}{4}\right) f = 0. \quad (795)$$

Теперь найдем асимптотическое поведение функции f при $x \rightarrow 0$. В этом случае получаем

$$xf'' + \frac{3}{2}f' \sim \frac{l(l+1)}{4x}f, \quad (796)$$

откуда для решения вида

$$f \sim x^\alpha \quad (797)$$

получаем уравнение на показатель степени α

$$\alpha^2 + \frac{\alpha}{2} - \frac{l(l+1)}{4} = 0. \quad (798)$$

Конечное в начале координат решение есть $\alpha = l/2$. Поэтому представим функцию f в виде $f(x) = F(x)x^{l/2}$, получая

$$f' = \left(F' + \frac{lF}{2x}\right) x^{l/2}, \quad f'' = \left[F'' + \frac{lF'}{x} + \frac{l}{2} \left(\frac{l}{2} + 1\right) \frac{F}{x^2}\right] x^{l/2}. \quad (799)$$

Уравнение для функции f переходит в

$$xF'' + \left(\frac{3}{2} + l - x\right) F' + \left(\frac{\varepsilon}{2} - \frac{l}{2} - \frac{3}{4}\right) F = 0. \quad (800)$$

Вводя обозначения

$$c = \frac{3}{2} + l, \quad b = \frac{l}{2} + \frac{3}{4} - \frac{\varepsilon}{2}, \quad (801)$$

получаем уравнение

$$xF'' + (c - x)F' - bF = 0. \quad (802)$$

К этому уравнению сводится много задач и его решение известно как вырожденная гипергеометрическая функция. Ищем решение этого уравнения в виде ряда

$$F = \sum_0^{\infty} a_s x^s. \quad (803)$$

Откуда

$$F' = \sum_0^{\infty} a_s s x^{s-1} = \sum_0^{\infty} a_{s+1} (s+1) x^s, \quad (804)$$

$$F'' = \sum_0^{\infty} a_s s(s-1) x^{s-2} = \sum_0^{\infty} a_{s+1} s(s+1) x^{s-1}. \quad (805)$$

Подставляя эти выражения в уравнение для функции F , имеем

$$\sum_0^{\infty} a_{s+1} s(s+1) x^s + c \sum_0^{\infty} a_{s+1} (s+1) x^s - \sum_0^{\infty} a_s s x^s - b \sum_0^{\infty} a_s x^s = 0. \quad (806)$$

Отсюда получаем рекуррентное соотношение на коэффициенты ряда

$$a_{s+1} = a_s \frac{s+b}{(s+1)(s+c)}. \quad (807)$$

Таким образом функции F представляется в виде ряда

$$F(x) = a_0 \left[1 + \frac{b}{c} \frac{x}{1!} + \frac{b(b+1)}{c(c+1)} \frac{x^2}{2!} + \frac{b(b+1)(b+2)}{c(c+1)(c+2)} \frac{x^3}{3!} + \dots \right]. \quad (808)$$

Если ряд имеет бесконечное число членов, то при $x \rightarrow \infty$ функция $F \sim e^x$. В этом случае функция

$$R(x) = F(x) x^{l/2} e^{-x/2} \quad (809)$$

будет расходиться. Значит физически приемлемое решение уравнения Шредингера получается в том случае, когда ряд для функции F имеет конечное число членов, то есть должно выполняться равенство

$$b = \frac{l}{2} + \frac{3}{4} - \frac{\varepsilon}{2} = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (810)$$

Таким образом получаются возможные значения энергии сферически симметричного гармонического осциллятора

$$E(n_r, l) = \hbar\omega \left(2n_r + l + \frac{3}{2} \right), \quad (811)$$

выраженные через значения радиального n_r и орбитального l квантовых чисел.

Задача 3. Найти уровни энергии при движении частицы массой m в центральном потенциале

$$U(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2.$$

Решение Решение уравнения Шредингера в центральном поле

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_r + \Delta_{\theta, \phi}) \psi(\vec{r}) + \left(\frac{A}{r^2} + Br^2 \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (812)$$

ищем в виде произведения угловой и радиальной частей

$$\psi(\vec{r}) = Y_{l,m}(\theta, \phi) R(r) \quad (813)$$

и получаем уравнение для радиальной части

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r R(r) + \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(l(l+1) + \frac{2mA}{\hbar^2} \right) R(r) + Br^2 R(r) = ER(r) \quad (814)$$

по виду совпадающее с уравнением для радиальной части сферически симметричного гармонического осциллятора из

предыдущей задачи при замене $B = m\omega^2/2$, вместо квантового числа орбитального момента имеем $l'(l' + 1) = l(l + 1) + 2mA/\hbar^2$, то есть

$$l' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2mA}{\hbar^2}}. \quad (815)$$

Таким образом уровни энергии равны

$$\begin{aligned} E(n_r, l) &= \hbar\omega \left(2n_r + l' + \frac{3}{2}\right) = \\ &= \hbar\sqrt{\frac{2B}{m}} \left(2n_r + 1 + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2mA}{\hbar^2}}\right). \end{aligned} \quad (816)$$

29. Справочные материалы

29.1. Размерность физических величин.

Размерность основных величин в системе СГС:

длина $[L]=\text{см}$; время $[T]=\text{с}$; масса $M=\text{г}$.

Размерности всех остальных величин выражаются через размерности основных величин. Например:

скорость $[v] = \left[\frac{L}{T}\right] = \text{см/с}$;

энергия $[E] = \left[\frac{Mv^2}{2}\right] = \text{г см}^2/\text{с}^2 \equiv \text{эрг}$.

В любом уравнении размерности слагаемых должны совпадать!

Внесистемная единица энергии 1 эВ (электрон-Вольт) $\approx 1.60 \cdot 10^{-12}$ эрг.

29.2. Физические постоянные.

Постоянная Планка $\hbar \approx 1,1 \cdot 10^{-27}$ эрг·с;

заряд электрона $e \approx 4,8 \cdot 10^{-10}$ ед.СГС;

скорость света $c \approx 3,0 \cdot 10^{10}$ см/с;

масса электрона $m_e \approx 0,9 \cdot 10^{-27}$ г;

масса протона $m_p \approx 1,7 \cdot 10^{-24}$ г;

энергия покоя электрона $m_e c^2 \approx 0,5 \cdot 10^6$ эв;

энергия покоя протона $m_p c^2 \approx 1 \cdot 10^9$ эв;

комптоновская длина волны электрона

$\lambda_c \equiv \frac{\hbar}{m_e c} \approx 3,9 \cdot 10^{-11}$ см;

постоянная тонкой структуры $\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \approx 1/137$;

боровский радиус $a_B \equiv \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ см;

магнитный момент электрона $\mu_e \approx \frac{e\hbar}{2m_e c} \approx 0,9 \cdot 10^{-20}$ эрг/Гаусс;

29.3. Интегралы.

Гауссов интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+bx+c} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{c+b^2/4a}, \quad (\Re a > 0). \quad (817)$$

Часто встречающийся интеграл

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-x} dx = n!. \quad (818)$$

29.4. Дельта-функция Дирака.

Свойства дельта-функции $\delta(x)$:

$$\delta(-x) = \delta(x), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1, \quad (819)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) f(x) dx = f(a). \quad (820)$$

Если аргумент δ -функции является некоторой функцией $g(x)$, обращающейся в ноль в точках x_i , то

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(g(x)) f(x) dx = \sum_i \frac{1}{|g'(x_i)|} f(x_i), \quad g'(x_i) \neq 0, \quad (821)$$

где $g' = dg/dx$.

29.5. Гармонический осциллятор

Используя операторы $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$, подчиняющиеся коммутационному соотношению $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, заменой

$$x = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \hat{p} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}i} \sqrt{\hbar m\omega}. \quad (822)$$

можно записать гамильтониан гармонического осциллятора в виде

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (823)$$

Собственные функции гамильтониана $|n\rangle$

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle, \quad (824)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (825)$$

29.6. Спин. Матрицы Паули

$\hat{\sigma}$ -матрицы Паули

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (826)$$

подчиняются коммутационным соотношениям

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z, \quad [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x, \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y. \quad (827)$$

Полезное соотношение

$$\sigma_i \sigma_j = I \delta_{ij} + i e_{ijk} \sigma_k, \quad (828)$$

где I – единичная матрица, δ_{ij} – символ Кронекера, e_{ijk} – антисимметричный тензор Леви-Чивита. По повторяющемуся индексу k подразумевается суммирование.

29.7. Момент импульса.

Компоненты оператора момента импульса

$$\hat{L}_i = [\vec{r} \times \vec{p}]_i \quad (829)$$

подчиняются коммутационным соотношениям

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y, \quad (830)$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0. \quad (831)$$

Декартовы компоненты момента импульса, выраженные через сферические координаты, равны

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}, \quad (832)$$

$$\hat{L}_x = i\hbar \left[\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right], \quad (833)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left[\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right]. \quad (834)$$

Повышающий и понижающий операторы

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad (835)$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (836)$$

Угловая зависимость собственных функций операторов момента импульса Y_{lm} :

$$Y_{0,0} = -\sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad (837)$$

$$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta, \quad (838)$$

$$Y_{2,2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\phi} \sin^2 \theta, \quad Y_{2,1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta, \quad (839)$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta), \quad Y_{2,-1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta \cos \theta, \quad (840)$$

$$Y_{2,-2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{-2i\phi} \sin^2 \theta. \quad (841)$$

Условие ортонормированности

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l,m}^* Y_{l',m'} = \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (842)$$

29.8. Атом водорода.

Радиальные части волновых функций: Для квантового числа момента импульса $l = 0$

$$R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_B^3}} e^{-r/a_B}. \quad (843)$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_B^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_B} \right) e^{-r/2a_B}. \quad (844)$$

$$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27a_B^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_B} + \frac{2r^2}{27a_B^2} \right) e^{-r/3a_B}. \quad (845)$$

Боровский радиус $a_B = \hbar^2 / m e^2 \approx 0.53 \cdot 10^{-8}$ см является атомной единицей длины.

Для $l > 0$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24a_B^3}} \frac{r}{a_B} e^{-r/2a_B}. \quad (846)$$

$$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6a_B^3}} \left(1 - \frac{r}{6a_B}\right) e^{-r/3a_B}, \quad (847)$$

$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30a_B^3}} \frac{r^2}{a_B^2} e^{-r/3a_B}. \quad (848)$$

Для атома водорода уровни энергии (дискретный спектр)

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{me^4}{\hbar^2} = -\frac{13.6 \text{ эВ}}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (849)$$

n – главное квантовое число.

Нормированные волновые функции.

$$\psi_{n=1,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad \psi_{n=2,l=0,m=0} = \frac{(1-r/2a)}{\sqrt{8\pi a^3}} e^{-r/2a}, \quad (850)$$

$$\psi_{n=2,l=1,m=+1} = \frac{r/a}{8\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/2a} (-\sin \theta) e^{i\phi}, \quad (851)$$

$$\psi_{n=2,l=1,m=0} = \frac{r/a}{\sqrt{32\pi a^3}} e^{-r/2a} \cos \theta, \quad (852)$$

$$\psi_{n=2,l=1,m=-1} = \frac{r/a}{8\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/2a} \sin \theta e^{-i\phi}. \quad (853)$$

30. Словарь терминов

Уравнение Шредингера -	薛定諤方程
Стационарное состояние -	穩定的状态
Волновая функция -	波函數
Нормировка волновой функции -	波函數 歸一化
Оператор	操作者
Коммутационные соотношения -	減刑关系
Условие эрмитовости -	隱士的条件
Собственная функция	本徵函數
Собственное значение оператора импульса -	自己的動量算符值
Ортонормальные функции -	正交函数
Соотношения ортогональности -	正交关系
Среднее значение -	平均值
Соотношения полноты -	完整性关系
Уравнение непрерывности -	连续性方程
Симметричная волновая функция	对称波函数
Граничные условия -	边界条件

Интерференция - 干扰

Соотношение неопределенностей Гейзенберга - 海森堡测不准原理

Неопределенность импульса - 脉冲不确定性

Неопределенность координаты - 不确定性坐标

Волновой пакет - 波包

Потенциальный барьер - 勢壘

Падающая волна - 入射波

Отраженная волна - 反射波

Прошедшая волна - 發射波

Коэффициент отражения - 反射率

Вариационный принцип - 變分原理

Гармонический осциллятор - 諧振子

Угловой момент импульса - 角動量

Коммутатор для углового момента - 角动量的换向关系

Спин - 紡

Спин электрона - 电子自旋

Спиновые матрицы Паули - 泡利旋转矩阵

Кулоновский потенциал - 库仑潜力

Связанные состояния - 约束态

Дискретный спектр атома водорода - 离子谱的氢原子

Радиальное дифференциальное уравнение - 径向微分方程

Фотон - 光子

Альфа частицы - α 粒子

Нейтрон - 中子

Протон - 质子

Электрон - 电子

31. Список литературы

1. *Сербо В.Г., Хриплович И.Б.* Квантовая механика. Новосибирск: НГУ, 2008.
2. *Зелевинский В. Г.* Квантовая физика. Том 1, 2. Новосибирск: НГУ, 2015.
3. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. Т. 8: Квантовая механика (I). М: Мир, 1967.
4. *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. Т. 9: Квантовая механика (II). М: Мир, 1967.
5. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М: Наука, 1974.
6. *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. М: Наука, 1981.

Учебное издание

Образовский Евгений Гелиевич,

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА. Часть 1.

Учебное пособие

Редактор

Подписано в печать

Формат 60x84 1/16. Офсетная печать

Уч.-изд.л. 12,5. Усл. печ. л. 11,5. Тираж 50 экз.

Заказ №

Редакционно-издательский центр НГУ.
630090, Новосибирск-90, ул. Пирогова, 2.