Министерство образования Российской Федерации

Физический факультет

Кафедра теоретической физики

Задачи по квантовой механике

Часть 1

Методическое пособие к практическим занятиям по курсу «Квантовая механика» для студентов физического факультета спец. 200200, 010400 и 071500 дневного и вечернего отделений

Авторы:
А.Н. Алмалиев, И.В. Копытин, А.С. Корнев, Т.А. Чуракова

Воронеж 2002

Содержание

Предисловие

Настоящее пособие предназначено для студентов-физиков всех специальностей. Оно составлено в соответствии с программой Минвуза РФ по курсу «Квантовая механика». Пособие включает шесть разделов, содержащих основные теоретические положения вводной части курса, а также методические указания к решению задач.

Каждый раздел начинается с краткого теоретического введения, в котором приведены основные положения темы, далее подробно разбираются несколько типовых задач, приводится большое количество задач различной степени сложности для самостоятельного решения.

Основные физические константы, необходимые при решении задач:

постоянная Планка	$\hbar = 1{,}054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
масса электрона	$m = 9{,}11 \cdot 10^{-31}$ кг
боровский радиус	$a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0{,}529 \cdot 10^{-10}$ м
заряд электрона	$e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Кл

1 эВ $= 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Дж

1. Волновая функция. Операторы

Состояние системы (частицы) в квантовой механике определяется волновой функцией $\psi(\vec{r}, t)$, являющейся функцией координат и времени. Физический смысл при этом имеет не сама волновая функция, а величина $|\psi(\vec{r}, t)|^2$, представляющая вероятность найти частицу в элементе объема dV в окрестности точки $\vec{r}$ в момент времени t, т.е.

$$dW(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2\, dV. \qquad (1)$$

Интегрирование (1) по всему пространству на основании теоремы сложения вероятностей должно дать вероятность достоверного события, т.е. 1:

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2\, dV = 1. \qquad (2)$$

Это условие называется нормировкой, а функция $\psi(\vec{r}, t)$, удовлетворяющая ему, — нормированной.

Волновая функция должна удовлетворять так называемым "стандартным" условиям, т.е. быть однозначной, непрерывной и конечной во всех точках пространства.

Для того чтобы устранить противоречие между корпускулярным и волновым описанием явлений, оказалось необходимым ввести специальный постулат, так называемый принцип суперпозиции: если квантовая система (частица) может находиться в состояниях, описываемых волновыми функциями $\psi_1,\ \psi_2,\ \ldots\ \psi_n$, то их линейная комбинация (суперпозиция)

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n$$

также является волновой функцией, описывающей возможное состояние системы. Здесь a_n — произвольные постоянные.

Принцип суперпозиции вскрывает математическую природу квантового состояния, он указывает на то, что состояние системы должно описываться некоторым вектором — вектором состояния, являющимся элементом линейного пространства.

При этом можно рассматривать операцию перехода от одного вектора состояния (волновой функции) к другому вектору состояния. Символически эту операцию можно представить как результат действия на ψ некоторого оператора:

$$\hat{L}\psi = \psi'.$$

Оператором называется совокупность математических действий, позволяющих получить из данной функции другую функцию.

Алгебра операторов

1. Оператор $\hat{C}$ называется суммой операторов $\hat{C}$ и $\hat{B}$ ($\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$), если для произвольной функции ψ выполняется соотношение:

$$\hat{C}\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi .$$

2. Оператор $\hat{C}$ называется произведением двух операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ ($\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$), если выполняется равенство:

$$\hat{C}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) ,$$

где ψ — произвольная функция. Сначала действует оператор, стоящий ближе к функции ψ, а затем на этот результат действует оператор $\hat{A}$.

В общем случае $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, т.е. $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0$. Если выполняется равенство $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, то операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называют коммутирующими, в противном случае — некоммутирующими. Оператор $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}]$ называется коммутатором операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Очевидно, что выполняется равенство $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$.

3. Оператор $\hat{A}$ называется единичным ($\hat{A} = 1$), если при его действии на произвольную функцию ψ выполняется соотношение:

$$\hat{A}\psi = \psi .$$

4. Два оператора называются равными ($\hat{A} = \hat{B}$), если для произвольной функции ψ имеет место соотношение:

$$\hat{A}\psi = \hat{B}\psi .$$

5. Оператор $\hat{A}$ называется нулевым ($\hat{A} = 0$), если результат его действия на произвольную функцию ψ есть 0:

$$\hat{A}\psi = 0 .$$

6. Действительная целая положительная степень n оператора $\hat{A}$ определяется соотношением:

$$\hat{A}^n \psi = \underbrace{\hat{A} \cdot \hat{A} \ldots \hat{A}}_{\text{n раз}} \psi .$$

В квантовой механике каждой физической (наблюдаемой) величине ставится в соответствие некоторый оператор $\hat{F}$. При этом знание нормированной волновой функции $\psi(\vec{r}, t)$ некоторого состояния позволяет вычислить среднее значение координаты, импульса и других физических величин в этом состоянии:

$$\langle F \rangle = \int \psi^*(\vec{r}, t)\, \hat{F} \psi(\vec{r}, t)\, dV . \qquad (3)$$

Операторы физических величин должны быть линейными (чтобы выполнялся принцип суперпозиции) и самосопряженными (эрмитовыми). Эрмитовость необходима для того, чтобы средние значения физических величин, соответствующие этим операторам, были действительными. Условие самосопряженности (эрмитовости) имеет вид:

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 dV = \int \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* dV .$$

Функции ψ_1 и ψ_2 должны удовлетворять стандартным условиям.

Приведем вид операторов основных физических величин.

1. Оператор координаты: $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$. Он совпадает со значением координаты, его действие на функцию сводится к обычному умножению этой функции на координату.

2. Оператор импульса: $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} = -i\hbar(\vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z})$ — векторный оператор, имеющий проекции:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x; \quad \hat{p}_y = -i\hbar\partial/\partial y; \quad \hat{p}_z = -i\hbar\partial/\partial z, \text{ и } \hat{\vec{p}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 .$$

3. Оператор момента количества движения $\hat{\vec{L}} = [\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}]$ — векторный оператор, проекции которого могут быть получены из определителя:

$$\hat{\vec{L}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix};$$

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y; \quad \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z; \quad \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x; \quad \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2;$$

в сферической или цилиндрической системах координат $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$.

4. Оператор кинетической энергии $\hat{T} = \hat{\vec{p}}^2/2m$ или

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}).$$

5. Оператор потенциальной энергии $U(\vec{r})$ — скалярный оператор, совпадающий со своим значением.

6. Оператор полной энергии $\hat{H}$ (гамильтониан) $\hat{H} = \hat{T} + U(\vec{r})$.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}).$$

Приведем коммутационные соотношения между операторами основных физических величин (индексы i, j, k принимают значения 1, 2, 3 и соответствуют проекциям x, y, z в декартовой системе координат):

$$[r_i, r_j] = 0\ ; \qquad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0\ ; \qquad [\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0\ ; \qquad [r_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}\ ;$$

$$[r_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} r_k\ ; \qquad [\hat{p}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\ ; \qquad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\,.$$

Здесь ε_{ijk} — единичный антисимметричный тензор 3 ранга;

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 0, \text{если совпадают 2 или все 3 индекса i,j,k ;} \\ 1, \text{ если индексы i, j, k при четной перестановке приходят к} \\ \quad \text{последовательности 1,2,3;} \\ -1, \text{ если индексы i, j, k при нечетной перестановке приходят к} \\ \quad \text{последовательности 1,2,3 .} \end{cases}$$

Рассмотрим примеры.

<u>Пример 1.</u> Вычислить коммутатор операторов координаты x и кинетической энергии $\hat{T}$.

Решение.

$$[x, \hat{T}] = [\,x,\ \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}] = \frac{1}{2m}[x, (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)] = \frac{1}{2m}([x, \hat{p}_x^2] + [x, \hat{p}_y^2] + [x, \hat{p}_z^2]) =$$

$$= \frac{1}{2m}[\,x, \hat{p}_x^2], \text{ так как } [x, \hat{p}_y^2] = [x, \hat{p}_z^2] = 0.$$

Подействуем оператором $[x, \hat{p}_x^2]$ на произвольную функцию $\varphi(x)$:

$$[x, \hat{p}_x^2]\ \varphi(x) = x\,\hat{p}_x^2\,\varphi(x) - \hat{p}_x^2 x\,\varphi(x) = -\hbar^2[\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) - \frac{d^2}{dx^2}(x\,\varphi(x))] =$$

$$= -\hbar^2[\,\varphi'' - \frac{d}{dx}(\,\varphi + x\varphi'\,)\,] = -\hbar^2(\varphi'' - 2\varphi' - \varphi'') = 2\hbar^2\frac{d}{dx}\varphi;$$

таким образом, $[x, \hat{T}] = \frac{\hbar^2}{m}\frac{d}{dx} = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$.

<u>Пример 2.</u> Доказать эрмитовость оператора $\hat{p}_x$.

Решение. Необходимо доказать равенство следующих интегралов:

$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{p}_x \psi_2\ dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \hat{p}_x^* \psi_1\, dx$, причем функции ψ_1 и ψ_2 удовлетворяют стандартным условиям. Интегрирование по частям интеграла, стоящего слева, дает:

$$-i\hbar\int\psi_1^*\frac{\partial}{\partial x}\psi_2\,dx=-i\hbar\,[\psi_1^*\psi_2\Big|_{-\infty}^{+\infty}-\int\psi_2\frac{\partial}{\partial x}\psi_1^*\,dx]=\int\psi_2\,i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_1^*\,dx=$$

$=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi_2\hat{p}_x^*\,\psi_1^*\,dx$; здесь мы использовали равенство нулю функций ψ_1,ψ_2 на бесконечности. Таким образом, оператор $\hat{p}_x$ эрмитов.

Задачи для самостоятельного решения

1. Проверить линейность оператора комплексного сопряжения.
2. Проверить самосопряженность оператора Лапласа.
3. Показать, что сумма произвольного оператора $\hat{A}$ и его сопряженного оператора есть самосопряженный оператор.
4. Найти оператор, эрмитово сопряженный произведению двух операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ ($\hat{B}^+\hat{A}^+$) .
5. Найти оператор, эрмитово сопряженный оператору $\dfrac{\partial^n}{\partial x^n}$ $\left((-1)^n\dfrac{\partial^n}{\partial x^n}\right)$.
6. Доказать, что если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ эрмитовы, то операторы $\hat{A}+\hat{B}$ и $\hat{A}\hat{B}$ + $\hat{B}\hat{A}$ также эрмитовы.
7. Показать, что $[\hat{A},\ \hat{B}^2\ ]=2\hat{B}$, если $[\hat{A},\hat{B}]=1$.
8. Показать, что произвольный оператор можно представить в виде: $\hat{F}=\hat{A}+i\hat{B}$, где $\hat{A}$ и $\hat{B}$ — эрмитовы операторы.
9. Оператор $\hat{F}$ неэрмитов. В таком случае оператор $\hat{F}^2$ будет эрмитовым? (эрмитова и антиэрмитова части $\hat{F}$ коммутируют).
10. Найти коммутатор оператора x и оператора Лапласа. ($2\partial/\partial x$).
11. Вычислить коммутаторы для гамильтониана $\hat{H}=\hat{p}^2/2m+U(x)$:

    а) $[\hat{H},\ x]$; б) $[\hat{H},\ \hat{p}_x\,]$; в) $[\hat{H},\ \hat{p}_x^2\ ]$.

    ($i\hbar\hat{p}_x/m$; $i\hbar\,dU/dx$; $2i\hbar\,\hat{p}_x\,dU/dx+\hbar^2\,d^2U/dx^2$) .
12. Выразить оператор параллельного переноса $\hat{T}_{\vec{a}}\,\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r}+\vec{a})$ через функцию оператора импульса. $\left(\exp(i\,\vec{a}\,\hat{\vec{p}}/\hbar)\right)$.
13. Найти результат действия оператора $\exp(\,kx\dfrac{d}{dx})$ на функцию $\psi(x)$. ($\psi\,[\,(\,k+1\,)\,x\,]$) .

14. Найти оператор бесконечно малого поворота вокруг направления $\vec{n}$ и выразить его через оператор момента импульса $\hat{\vec{L}}$. $(1+i\vec{n}\hat{\vec{L}}d\varphi/\hbar)$.

2. Собственные функции и собственные значения операторов

Собственные функции и собственные значения операторов определяются из уравнения:

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n, \tag{4}$$

где A_n — константа, не зависящая от координаты.

Это уравнение в зависимости от вида оператора может представлять собой дифференциальное, трансцендентное уравнение или систему линейных алгебраических уравнений. Задача на собственные функции и собственные значения формулируется таким образом, чтобы собственные функции ψ_n удовлетворяли стандартным условиям (конечность, однозначность, непрерывность). Это может привести к ограничению на собственные значения A_n, т.е. решения уравнения (4) будут существовать не при всех значениях A, а лишь при некоторых избранных: $A_1, A_2, \ldots A_n \ldots$ Соответствующие решения (4) $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n$ называются собственными функциями оператора $\hat{A}$, а значения $A_1, A_2, \ldots A_n$ — собственными значениями.

Совокупность всех собственных значений оператора называется его спектром. Спектр может быть дискретным, когда возможны лишь отдельные значения $A_1, A_2, \ldots A_n \ldots$ (величина A квантуется), либо непрерывным, когда возможны все значения A в некотором интервале. При этом эрмитов оператор всегда имеет действительный спектр ($A_n = A_n^*$) в случае дискретного спектра и $A = A^*$ в случае непрерывного спектра).

В квантовой механике постулируется, что эти собственные значения и являются теми возможными значениями физической величины, которые можно наблюдать экспериментально.

В том случае, когда одному собственному значению соответствуют несколько линейно независимых собственных функций, спектр оператора называется вырожденным. Число этих функций называется кратностью вырождения.

В зависимости от характера спектра (дискретный или непрерывный) собственные функции обладают следующими свойствами:

а) <u>случай дискретного спектра</u>.

1. Ортонормированность:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(\xi)\psi_n(\xi)d\xi = \delta_{mn}\,; \quad \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n\,. \\ 0, & m \neq n\,. \end{cases} \tag{5}$$

Интеграл берется по всей области изменения переменных ξ, от которых зависят собственные функции.

2. Система собственных функций любого эрмитова оператора является полной, т.е. любая функция $\psi(\xi)$, определенная в той же области переменных и подчиняющаяся тем же граничным условиям, что и собственные функции $\psi_1,\ \psi_2,\ldots\psi_n,\ldots$, может быть представлена в виде

$$\psi(\xi)=\sum_n c_n\psi_n(\xi)\ , \tag{6}$$

где $c_n=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(\xi)\,\psi(\xi)\,d\xi.$ (7)

Условие полноты можно записать иначе:

$$\sum_n \psi_n(\xi)\,\psi_n^*(\xi)=\delta(\xi-\xi')\ . \tag{8}$$

$\delta(\xi-\xi')$ — дельта-функция Дирака.

б) <u>случай непрерывного спектра</u>.

1. Собственные функции, принадлежащие разным собственным значениям F и F', ортогональны и нормированы на δ-функцию:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi_F^*(\xi)\,\psi_{F'}(\xi)\,d\xi=\delta(F-F'). \tag{9}$$

2. Свойство полноты имеет вид:

$$\psi(\xi)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}c(F)\,\psi_F(\xi)\,dF\ , \tag{10}$$

где

$$c(F)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi_F^*(\xi)\,\psi(\xi)\,d\xi \tag{11}$$

или, аналогично (8):

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\psi_F^*(\xi')\,\psi_F(\xi)\,dF=\delta(\xi-\xi'). \tag{12}$$

Приведем свойства Дирака $\delta(x)$.

Дельта-функция определяется соотношениями:

$$\delta(x)=\begin{cases}0, & x\neq 0\\ \infty, & x=0\end{cases}\ ;$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}f(x)\,\delta(x-a)\,dx=f(a)\ ;\qquad \int\limits_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\,dx=1.$$

Видно, что она имеет размерность обратную размерности аргумента. δ-функция определена заданием правил интегрирования ее произведений с непрерывными функциями.

δ-функцию Дирака можно представить в виде пределов:

1) $\delta(x) = \lim\limits_{L\to\infty} \frac{\sin(Lx)}{\pi x}$;

2) $\delta(x) = \lim\limits_{\alpha\to 0} \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{\alpha^2 + x^2}$.

Полезным является равенство (разложение δ-функции в интеграл Фурье):

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\, dk = 2\pi\delta(x).$$

$\delta(x)$ является четной функцией: $\delta(x) = \delta(-x)$.

Приведенные ниже равенства справедливы, если их применять в качестве множителей под знаком интеграла:

$\delta(x)\, x = 0$;

$\delta(ax) = \delta(x)/|a|$;

$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$.

Вычисление интегралов, содержащих производную дельта – функции, производится интегрированием по частям с учетом перечисленных ниже свойств. Поэтому

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta'(x) F(x)\, dx = -F'(0).$$

Производная $\delta'(x)$ удовлетворяет соотношению:

$x\delta'(x) = -\delta(x)$.

Трехмерная δ-функция $\delta(\vec{r})$ определяется равенством:

$$\delta(\vec{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) = (2\pi)^{-3} \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3k .$$

Рассмотрим примеры.

Пример 1. Решить задачу на собственные функции и собственные значения оператора проекции момента количества движения на ось z $(\hat{L}_z)$.

Решение. В декартовых координатах $\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$, однако наиболее простой вид этот оператор имеет в сферических координатах: $\hat{L}_z = -i\hbar\,\partial/\partial\varphi$, где полярный угол φ меняется в пределах от 0 до 2π. Таким образом, задача на собственные функции и собственные значения сводится к решению уравнения:

$$-i\hbar \frac{\partial\psi(\varphi)}{\partial\varphi} = L_z\psi(\varphi).$$

Общее решение этого уравнения имеет вид:

$$\psi(\varphi) = C\exp(iL_z\varphi/\hbar),$$

при этом нам необходимы только те функции, которые удовлетворяют стандартным условиям (конечность, непрерывность, однозначность). Видно, что

при любых L_z функция $\psi(\varphi)$ будет ограниченной и непрерывной. Требование однозначности $\psi(\varphi)=\psi(\varphi+2\pi)$ дает:

$$\exp(iL_z\varphi/\hbar)=\exp[iL_z(\varphi+2\pi)/\hbar], \text{ или } \exp(i2\pi L_z/\hbar)=1.$$

Отсюда следует, что $L_z=\hbar m$, где $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$, т.е. величина проекции углового момента квантуется и, следовательно, $\psi_m(\varphi)=C\exp(im\varphi/\hbar)$.

Нормировочная константа определяется из условия:

$$\int_0^{2\pi}\psi_m^*(\varphi)\psi_m(\varphi)d\varphi=C^2\int_0^{2\pi}d\varphi=1, \quad \text{т.е.} \quad C=(2\pi)^{-1/2}.$$

Окончательно получаем набор собственных функций

$$\psi_m(\varphi)=(2\pi)^{-1/2}e^{im\varphi}$$

и спектр собственных значений:

$$L_z=\hbar m, \text{ где } m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$$

Поскольку каждому собственному значению соответствует только одна собственная функция, спектр оператора L_z невырожден. Набор собственных функций является полным. Действительно:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}\psi_m^*(\varphi)\,\psi_m(\varphi')=\frac{1}{2\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{-im\varphi}e^{im\varphi'}=\delta(\varphi-\varphi').$$

<u>Пример 2.</u> Найти собственные функции и собственные значения оператора координаты $\hat{\vec r}$.

Решение. Для их нахождения необходимо решить следующее уравнение:

$$\hat{\vec r}\,\psi_{\vec r'}(\vec r)=\vec r\,'\psi_{\vec r'}(\vec r)$$

Здесь $\psi_{\vec r'}(\vec r)$ есть собственная функция оператора координаты, соответствующая собственному значению $\vec r\,'$. Очевидно, что этому уравнению удовлетворяет единственное решение: $\delta(\vec r-\vec r\,')$. Спектр собственных значений непрерывен, набор собственных функций обладает свойствами ортонормированности и полноты:

$$\int\psi^*_{\vec r'}(\vec r)\psi_{\vec r''}(\vec r)d^3r=\int\delta(\vec r-\vec r\,')\,\delta(\vec r-\vec r\,'')d^3r=\delta(\vec r\,'-\vec r\,'');$$

$$\int\psi^*_{\vec r}(\vec r_1)\psi_{\vec r}(\vec r_2)\,d^3r=\delta(\vec r_1-\vec r_2).$$

<u>Пример 3.</u> Решить задачу на собственные функции и собственные значения оператора проекции импульса $\hat p_x$.

Решение. Составим уравнение на собственные функции и собственные значения для оператора $\hat p_x$:

$$-i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}=p_x\psi(x).$$

Общее решение есть:

$$\psi_{p_x}(x) = C\, e^{i p_x x/\hbar}.$$

Стандартные условия не накладывают никаких ограничений на область собственных значений. Таким образом, спектр оператора $\hat p_x$ непрерывный. Определим нормировочную постоянную:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\,\psi_p(x)\,dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\,x\,(p-p')/\hbar}\,dx = C^2\, 2\pi\,\delta\!\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) = \delta(p-p').$$

С учетом известных свойств δ-функции $C = (2\pi\hbar)^{-1/2}$.
Окончательно, собственные функции:

$$\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}\ .$$

Спектр оператора — все действительные числа. Собственные функции удовлетворяют свойству полноты:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\,\psi_p(x)\,dp = \delta(x-x').$$

Следует отметить, что для формально похожих по виду операторов ($\hat p_x$ и $\hat L_z$) получились различные результаты, что обусловлено отличием в областях определения этих операторов.

Задачи для самостоятельного решения

1. Найти собственные функции и собственные значения операторов:

   а) $x + d/dx$; б) $\sin\dfrac{d}{d\varphi}$; в) $\exp\left(i a \dfrac{d}{d\varphi}\right)$; г) $\dfrac{d^2}{dx^2} + \dfrac{2}{x}\dfrac{d}{dx}$;

   ($\psi = C\exp\left(\lambda x - x^2/2\right)$; спектр непрерывный ;
   $\psi = e^{im\varphi}$, $\lambda = \sin(im)$; $\psi = e^{im\varphi}$, $\lambda = a^{-nm}$; $\psi(x) = C\sin(\beta x)/x$,
   β — любое вещественное число).

2. Эрмитов оператор $\hat F$ удовлетворяет соотношению $\hat F^2 = c\hat F$, где c — вещественное число. Каковы собственные значения этого оператора?
3. Доказать, что собственная функция $\psi(x) = c\exp\left(-x^2/2\right)$ является собственной функцией оператора $\hat L = -d^2/dx^2 + x^2$ и найти соответствующее собственное значение.
4. Найти собственные функции и собственные значения оператора $\hat L = \hat p_x + x$ ($\psi = C\exp\left(\left[-i\,(x-f)/(2\hbar)\right]\right.$, f — произвольное вещественное число).

5. Показать, что собственные значения оператора квадрата любой физической величины неотрицательны.

3. Измеримость физических величин

В результате измерения физической величины F в любом произвольном состоянии системы ψ должно получаться одно из собственных значений оператора $\hat{F}$, соответствующего этой физической величине.

В разложении нормированной волновой функции ψ по ортонормирванной системе собственных функций ψ_n оператора $\hat{F}$ физической величины F

$$\psi = \sum_n a_n \psi_n$$

значения $|a_n|^2$ равны вероятности обнаружить систему в состоянии ψ_n, т.е. вероятности того, что при измерении F ее значение окажется равным F_n. При этом

$$\sum_n |a_n|^2 = 1 \; .$$

В случае, когда величина F имеет непрерывный спектр, а собственные функции оператора $\hat{F}$ нормированы на δ-функцию, выражение $|a_F|^2$ представляет собой плотность вероятности $dW_{F,\, F+dF}$ обнаружить величину F в интервале собственных значений [F, F+dF]:

$$dW_{F,\, F+dF} = |a_F|^2 \, dF \, .$$

Среднее значение физической величины F в данном состоянии системы можно представить в виде:

$$< F > = \sum_n |a_n|^2 \, F_n \, ,$$

используя определение среднего значения (3), разложение $\psi = \sum_n a_n \psi_n$ и условие $\hat{F}\psi_n = F_n \psi_n$.

В том случае, когда система находится в состоянии с волновой функцией ψ, совпадающей с одной из собственных функций ψ_n оператора $\hat{F}$, среднее значение физической величины F совпадает с соответствующим собственным значением F_n.

В общем случае существует разброс возможных значений измеряемой величины от среднего значения, характеризуемый дисперсией (средним квадратичным отклонением):

$$< (\Delta F)^2 > = \int \psi^* \, (< \hat{F} - F >)^2 \psi d\xi = < F^2 > - < F >^2 \, .$$

Рассмотрим примеры.

<u>Пример 1.</u> Система находится в состоянии, которое описывается волновой функцией $\psi(\varphi) = A e^{3i\varphi} \cos(2\varphi)$. Определить, какие значения L_z и с какой вероятностью будут появляться при измерении. Определить также $< L_z >$, $(< L_z >)^2$ и $< L^2_z >$.

Решение. При нахождении возможных значений L_z, а также вероятности их появления на эксперименте, можно воспользоваться общим рецептом, рассчитав интегралы:

$$a_m = \int_0^{2\pi} \psi(\varphi)\, \psi_m^*(\varphi)\, d\varphi,$$

где $\psi_m(\varphi) = (2\pi)^{-1/2} e^{im\varphi}$ — собственные функции оператора $\hat{L}_z$. Тогда величины $|a_m|^2$ дадут искомые вероятности.

Однако в данном случае можно воспользоваться более простым способом. Представим функцию $\psi(\varphi)$ в виде ряда:

$$\psi(\varphi) = \sum_m a_m \psi_m(\varphi),$$

что всегда можно сделать, учитывая свойство полноты набора собственных функций оператора $\hat{L}_z$. Для $\cos(2\varphi)$ воспользуемся формулой Эйлера в виде $(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi})/2$. Тогда

$$\psi(\varphi) = \frac{A(2\pi)^{1/2}}{2} \left[\frac{e^{5i\varphi}}{(2\pi)^{1/2}} + \frac{e^{i\varphi}}{(2\pi)^{1/2}} \right].$$

Видно, что в разложении присутствуют только два ненулевых коэффициента a_m: $a_1 = a_5 = A(2\pi)^{1/2}/2$. Следовательно, в эксперименте будут появляться значения $L_z = \hbar$ и $5\hbar$ с равными вероятностями $A^2 \pi/2$.

Для определения нормировочной константы A существуют две возможности. Первая — вычислить по общим правилам интеграл:

$$\int_0^{2\pi} \psi^*(\varphi)\, \psi(\varphi)\, d\varphi = 1,$$

вторая — воспользоваться условием $\sum_m |a_m|^2 = 1$, что в данном случае проще. Получаем $\pi A^2 = 1$, $A = \pi^{-1/2}$ и, следовательно, $a_1 = a_5 = 1/\sqrt{2}$.

При вычислении $< L_z >$ воспользуемся формулой:

$$< L_z > = \sum_m |a_m|^2 (m\hbar) = \frac{1}{2} 5\hbar + \frac{1}{2}\hbar = 3\hbar,$$

тогда $< L_z >^2 = 9\hbar^2$.

Аналогично для $< L_z^2 >$:

$$\sum_m |a_m|^2 (m\hbar)^2 = \frac{1}{2}(25\hbar^2) + \frac{1}{2}\hbar^2 = 13\hbar^2.$$

Обратим внимание на неравенство $\langle L_z \rangle^2 \neq \langle L_z^2 \rangle$.

<u>Пример 2.</u> Частица находится в состоянии, определяемом функцией $\psi(\vec{r})$. Определить плотность вероятности того, что частица находится в точке $\vec{r}$.

Решение. Из свойства полноты набора собственных функций оператора $\vec{r}$ ($\psi_{\vec{r}'}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$) следует, что $\psi(\vec{r})$ можно представить в виде:

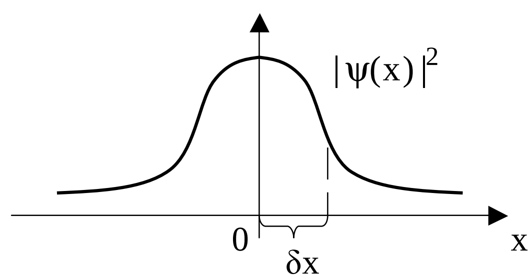
$$\psi(\vec{r}) = \int \delta(\vec{r} - \vec{r}')\, a_{\vec{r}'}\, d^3r' .$$

Тогда квадрат модуля коэффициента разложения $a_{\vec{r}}$ как раз дает нужную плотность вероятности. Коэффициент $a_{\vec{r}}$ определяется выражением:

$$a_{\vec{r}'} = \int \delta(\vec{r} - \vec{r}')\, \psi(\vec{r})\, d^3r = \psi(\vec{r}') .$$

Таким образом, вероятность обнаружения частицы в окрестности точки $\vec{r}$ равна $W(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$, что согласуется с физическим смыслом квадрата модуля волновой функции.

<u>Пример 3.</u> Система находится в состоянии $\psi(x) = A\exp(-x^2/2a^2 + ik_0x)$. Определить $\langle x \rangle$, $\langle p_x \rangle$. Найти область локализации частицы и вероятность обнаружить у нее импульс p_x.



Решение. Определим область локализации частицы. Известно, что величина $|\psi(x)|^2$ определяет плотность вероятности обнаружить частицу в точке x. В данном случае $|\psi(x)|^2 = A^2\exp(-x^2/a^2)$, т.е. плотность вероятности дается распределением Гаусса.

Полуширина этого распределения (расстояние по оси абсцисс от точки максимума функции $x = 0$ до точки, в которой функция спадает в e раз) $\delta x = a$, т.е. параметр a указывает на степень локализации частицы вблизи нуля.

Нормировка A определяется условием:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2} dx = A^2 (a^2\pi)^{1/2} = 1.$$

Отсюда $A^2 = (a^2\pi)^{-1/2}$. (Мы воспользовались значением интеграла Пуассона: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\dfrac{\pi}{\alpha}}$).

Для $<x>$ по определению получаем:

$$<x> = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2} x dx = 0\ .$$

Аналогично для $<p_x>$:

$$<p_x> = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2 - ik_0 x}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) e^{-x^2/2a^2 + ik_0 x}\, dx =$$

$$= i\hbar A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2 - ik_0 x} e^{-x^2/2a^2 + ik_0 x} \left(\frac{2x}{a^2} - ik_0\right) dx = \hbar k_0 .$$

Для нахождения распределения по импульсам представим $\psi(x)$ в виде разложения по собственным функциям оператора $\hat{p}_x$:

$$\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{ip}{\hbar}x}; \quad (p_x \equiv p)\ .$$

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p)\, \psi_p^*(x)\, dp\ ,$$

где искомые коэффициенты c(p) имеют вид:

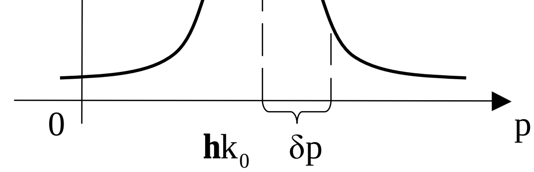
$$c(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} A \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2 + i(k_0 - k)x}\, dx\ ; \quad (k = p/\hbar)\ .$$

Дополняя выражение в показателе экспоненты до полного квадрата, получим:

$$c(p) = A\,(2\pi\hbar)^{-1/2} e^{-a^2(k_0-k)^2/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-[x - i(k_0-k)a^2]^2/2a^2} dx = A\, a \hbar^{-1/2} e^{-a^2(k_0-k)^2/2}.$$

(заметим, что несмотря на конечный сдвиг в мнимую область, интеграл представляет собой интеграл Пуассона).

Величина $|c(p)|^2\, dp = \dfrac{A^2}{2\pi\hbar} e^{-a^2(k_0 - p/\hbar)^2} dp$ есть вероятность обнаружить у частицы импульс в интервале [p, p+dp]. $|c(p)|^2$ графически также может быть представлена в виде распределения Гаусса с центром в точке $p = \hbar k_0$. Полуширина этого распределения $\delta p = 1/a$, т.е. обратная δx, что непосредственно связано с соотношением неопре-



деленностей (см. следующий раздел). Чем точнее известно местоположение частицы, тем больше неопределенность в величине ее импульса, и наоборот. Легко проверить, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} |c(p)|^2 dp = 1 .$$

Задачи для самостоятельного решения

1. Частица, движущаяся в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, находится в основном состоянии с волновой функцией $\psi(x) = (2/l)^{1/2} \sin(\pi x/l)$. Найти вероятность нахождения частицы в области $l/3 < x < 2l/3$. (W = 0,61).
2. Найти наиболее вероятное значение координаты x для системы, которая описывается волновой функцией $\psi(x) = A x \exp(-\alpha^2 x^2/2)$.
   ($x_{н.в.} = 1/\alpha$).
3. Частица находится в состоянии с волновой функцией
   $\psi(x) = A \exp(-\alpha x^2/2)$. Определить плотность вероятности того, что при измерении у частицы будет обнаружен импульс p.
   ($|c(p)|^2 = (\alpha\pi\mathbf{h}^2)^{-1/2} \exp(p^2/[2\alpha\mathbf{h}^2])$).
4. Вычислить средние значения $(\Delta x)^2$ и $(\Delta p)^2$ для частицы, находящейся в состояниях:
   а) $\psi(x) = (2/l)^{1/2} \sin(\pi x/l)$; б) $\psi(x) = A \exp(\alpha^2 x^2)$.
   ($<(\Delta x)^2> = (1 - 6/\pi^2) l^2/12$, $<(\Delta p)^2> = (\pi\mathbf{h}/l)^2$;
   $<(\Delta x)^2> = 1/4\alpha^2$, $<(\Delta p)^2> = \alpha^2\mathbf{h}^2$).
5. Определить возможные собственные значения величина L_z и их вероятности для системы, находящейся в состоянии:
   а) $\psi(\varphi) = A \sin^2\varphi$; б) $\psi(\varphi) = A(1 + \sin\varphi)$.
   ($L_z = 0,\ 2\mathbf{h}$; $W_0 = 2/3$, $W_{+2} = W_{-2} = 1/6$.
   $L_z = 0,\ \mathbf{h}$; $W_0 = 2/3$, $W_{+1} = W_{-1} = 1/6$).

4. Соотношение неопределенностей физических величин

Если операторы $\hat{F}$ и $\hat{G}$ двух физических величин F и G не коммутируют, то эти величины не могут быть точно измерены одновременно (в одном и том же состоянии). В любом состоянии системы между дисперсиями этих величин существует соотношение неопределенностей:

$$<(\Delta F)^2><(\Delta G)^2> \geq \frac{1}{4} <\left| [\hat{F}, \hat{G}] \right|>^2, \tag{13}$$

где $[\hat{F},\hat{G}]=\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}$ — коммутатор операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$.

Известно, что коммутатор операторов физических величин в классическом пределе должен обращаться в нуль, а потому величина его должна быть пропорциональна $\hbar$. Поэтому правая часть (13) пропорциональна $\hbar^2$. В частности, для оператора компоненты импульса и соответствующей координаты, например, p_x и x,

$$[\hat{p}_x, x]=-i\hbar$$

и соотношение неопределенностей для этих величин имеет вид (в этом частном случае оно называется соотношением неопределенностей Гейзенберга):

$$<(\Delta p_x)^2><(\Delta x)^2>\geq \hbar^2/4. \qquad (14)$$

Оно означает, что для состояния, в котором частица локализована в области пространства Δx, возможный разброс значений ее импульса (около среднего значения) заключен в области Δp_x, определяемой соотношением:

$$\Delta p_x \geq \hbar/\Delta x.$$

Соответственно монохроматическая волна с определенным значением импульса ($\Delta p_x \to 0$) должна заполнять все пространство ($\Delta x \to \infty$).

Соотношение неопределенностей можно использовать для оценки среднего значения кинетической энергии частицы, движущейся в ограниченной области пространства. В этом случае можно положить $<x>=<p>=0$, тогда $(\Delta x)^2 = x^2$ и $(\Delta p)^2 = p^2$. Если a — линейный размер объема, в котором локализована частица, то с учетом (14) получаем:

$$<E_{min}>=\frac{<p^2>}{2m}=\frac{\hbar^2}{8ma^2}.$$

При использовании соотношения неопределенностей (13) важно помнить, что самосопряженные операторы $\hat{F}$ и $\hat{G}$ должны быть определены на одном и том же множестве функций.

Рассмотрим примеры.

Пример 1. Для частицы, состояние которой задается функцией $\psi(x)=A e^{-x^2/2a^2+ik_0x}$, проверить соотношение неопределенностей для величин x и p_x.

Решение. Запишем соотношение неопределенностей для координаты и импульса: $<(\Delta x)^2><(\Delta p_x)^2>\geq \hbar^2/4$.

При этом $<(\Delta x)^2>=<(x-<x>)^2>=<x^2>$ и

$<(\Delta p)^2> \, = <(\hat{p} - <p>)^2> = <\hat{p}_x^2 - 2\hat{p}_x <p_x> + <p_x>^2> =$
$<p_x^2> - <p_x>^2 = <p_x^2> - \left(\hbar k_0\right)^2$, так как $<x> = 0$ и $<p_x>^2 = \hbar k_0$ (см. Пример 3 раздела 3). Следовательно, необходимо рассчитать $<x^2>$ и $<p_x^2>$. По определению,

$$<x^2> = A^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2} x^2 dx .$$

Вычислим этот интеграл методом дифференцирования по параметру α интеграла Пуассона $\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = (\pi/\alpha)^{1/2}$:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} x^2 dx = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial\alpha} e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial\alpha} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = -\frac{\partial}{\partial\alpha} (\pi/\alpha)^{1/2} = \frac{\pi^{1/2}\alpha^{-3/2}}{2} .$$

В результате, подставив нормировку $A = \left(a^2\pi\right)^{-1/4}$, найденную в указанном примере для этой функции, получим $<x^2> = a^2/2$.

Рассчитаем теперь величину $<p^2>$:

$$<p^2> = A^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2a^2 - ik_0 x} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) e^{-x^2/2a^2 + ik_0 x} dx =$$

$$= A^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2} \left[\left(-\frac{x}{a^2} + i\,k_0 \right)^2 - \frac{1}{a^2} \right] dx = \frac{\hbar^2}{2a^2} + \hbar^2 k_0^2 .$$

Окончательно получаем:

$$<(\Delta x)^2><(\Delta p)^2> = \frac{a^2}{2}\frac{\hbar^2}{2a^2} = \hbar^2/4 ,$$

что позволяет непосредственно убедиться в справедливости соотношения неопределенностей.

Задачи для самостоятельного решения

1. Оценить неопределенность скорости электрона в атоме водорода, полагая размер атома порядка 0,1 нм. Сравнить полученное значение со скоростью электрона на первой боровской орбите. ($\Delta v \cong 10^5$ м/с).
2. Оценить с помощью соотношения неопределенностей энергию связи электрона в основном состоянии атома водорода и соответствующее расстояние электрона от ядра. ($E_{CB} \cong 13{,}6$ эВ; $r \cong 0{,}510^{-8}$ см).

3. Микрочастица массы m находится в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками шириной L. Оцените минимально возможную энергию частицы, если $\Delta x\, \Delta p_x \geq \pi\mathbf{h}$. ($\pi^2\mathbf{h}^2 / (2mL^2)$).

5. Дифференцирование операторов по времени. Интегралы движения в квантовой механике

Среднее значение физической величины является в общем случае функцией времени. Производная среднего значения $<F>$ по времени является средним значением некоторого оператора, который по определению называется производной физической величины по времени:

$$\frac{d<F>}{dt} = <\frac{dF}{dt}>,$$

где

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{1}{i\mathbf{h}}[\hat{F}, \hat{H}]. \qquad (15)$$

Оператор $(\hat{F}\hat{H} - \hat{H}\hat{F}) / i\mathbf{h}$ называется квантовой скобкой Пуассона.

Если оператор $\hat{F}$ физической величины F не зависит явно от времени и коммутирует с гамильтонианом, то согласно (15) ее среднее значение не меняется со временем, т.е. F является интегралом движения.

Существование интегралов движения тесно связано с симметрией гамильтониана. Действительно, если гамильтониан инвариантен относительно некоторого преобразования, осуществляемого оператором $\hat{F}$, то при условии $\partial\hat{F}/\partial t = 0$ физическая величина F будет интегралом движения.

Из (15) следует сохранение энергии для замкнутых систем (так как в этом случае $\partial\hat{H}/\partial t = 0$, и гамильтониан коммутирует сам с собой).

Если гамильтониан системы не меняется при сдвиге вдоль какого-либо направления или поворота вокруг какой-либо определенной оси, то будут сохраняться соответственно проекция импульса на это направление или проекция момента количества движения на выделенную ось.

Законы сохранения возникают не только для непрерывных симметрий гамильтониана. Наличие у гамильтониана дискретных симметрий приводит в квантовой механике к сохранению ряда мультипликативных физических величин, которые (в отличие от аддитивных импульса и момента количества движения) не имеют аналога в классической механике. Так, инвариантность гамильтониана относительно преобразования пространственной инверсии $(\vec{r} \to -\vec{r})$ приводит к сохранению четности волновой функции относительно такой замены координат.

Рассмотрим примеры.

<u>Пример 1.</u> Составить оператор скорости $\hat{\vec{v}} = d\vec{r}/dt$ и оператор ускорения $\hat{\vec{a}} = \frac{1}{m}\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}$.

Решение. Воспользуемся общим выражением для дифференцирования операторов по времени (15). Так как $\hat{H} = \hat{\vec{p}}^2/2m + V(\vec{r},t)$, $\partial \vec{r}/\partial t = 0$ и при этом $\vec{r}V - V\vec{r} = 0$, то получим:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\vec{r},\hat{T}\right] = \frac{1}{i\hbar}\left\{\vec{i}\left[x,\hat{T}\right] + \vec{j}\left[y,\hat{T}\right] + \vec{k}\left[z,\hat{T}\right]\right\},$$ где $\vec{r} = \vec{i}x + \vec{j}y + \vec{k}z$ и $\hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$ — оператор кинетической энергии.

Достаточно рассчитать только коммутатор $\left[\hat{x},\hat{T}\right]$. Он был найден в примере 1 раздела 1: $\left[\hat{x},\hat{T}\right] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$.

В результате: $\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{m}\left(\vec{i}\hat{p}_x + \vec{j}\hat{p}_y + \vec{k}\hat{p}_z\right) = \frac{1}{m}\hat{\vec{p}}$.

При расчете оператора ускорения учтем, что $\partial\hat{\vec{p}}/\partial t = 0$ и $[\hat{\vec{p}}^2/2m, \hat{\vec{p}}] = 0$, следовательно, необходимо рассчитать коммутатор $[V, \hat{\vec{p}}]$. Для этого подействуем им на произвольную функцию $\varphi(\vec{r})$:

$$[V, \hat{\vec{p}}]\,\varphi(\vec{r}) = -i\hbar\left[V(\vec{r})\vec{\nabla}\varphi(\vec{r}) - \varphi(\vec{r})\vec{\nabla}V(\vec{r})\right] = i\hbar\,(\vec{\nabla}V)\,\varphi(\vec{r}).$$

Отсюда $\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt} = -\vec{\nabla}V = \hat{\vec{F}}$, где $\hat{\vec{F}}$ — оператор силы, действующей на частицу. Окончательно: $\vec{a} = \frac{1}{m}\hat{\vec{F}}$.

Заметим, что в отличие от классического соотношения между физическими величинами, полученное уравнение является операторным.

<u>Пример 2.</u> Доказать, что если потенциальная энергия степенным образом зависит от координаты ($U(\vec{r}) = \alpha r^n$, где $r = |\vec{r}|$), то для любого стационарного состояния существует связь между средними значениями кинетической и потенциальной энергией: $2 <T> = n <U>$ (теорема о вириале).

Решение. Рассмотрим полную производную по времени от скалярного произведения операторов $\vec{r}\hat{\vec{p}}$. Получим:

$$\frac{d}{dt}(\vec{r}\,\hat{\vec{p}}) = \frac{d\vec{r}}{dt}\hat{\vec{p}} + \frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}\vec{r}.$$

В предыдущем примере было показано, что

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\hat{\vec{p}}}{m}; \quad \frac{d\hat{\vec{p}}}{dt} = -\vec{\nabla}U(\vec{r}).$$

Тогда

$$\frac{d}{dt}(\vec r\,\hat{\vec p}) = \frac{\hat{\vec p}^{\,2}}{m} - \vec r\,\vec\nabla U(\vec r).$$

Учитывая вид потенциальной энергии, рассчитаем $\vec\nabla U(\vec r)$. Вычисления проведем в сферической системе координат:

$$\left\{\vec\nabla = \vec e_r\frac{\partial}{\partial r} + \vec e_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec e_\varphi\frac{1}{r\ \sin\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\};\ \ \vec r\,\vec\nabla U(r) = n\alpha r^{n-1}\vec e_r\vec r = n\alpha r^n = nU.$$

Таким образом, $\frac{d}{dt}(\vec r\,\hat{\vec p}) = \frac{\hat{\vec p}^{\,2}}{m} - nU$.

Усредним это равенство по произвольному стационарному состоянию

$$\psi(\vec r,t) = \varphi(\vec r)\,e^{-iEt/\hbar}:\ <\frac{d}{dt}(\vec r\,\hat{\vec p})> = <\frac{\hat{\vec p}^{\,2}}{m}> - n<U>.$$

В соответствии с определением полной производной физической величины по времени получим:

$$<\frac{d}{dt}(\vec r\,\hat{\vec p})> = d<\vec r\,\hat{\vec p}>/dt;$$

так как речь идет о стационарных состояниях, то очевидно:

$$\frac{d}{dt}<\vec r\,\hat{\vec p}> = \frac{d}{dt}\int\varphi^*(\vec r)\,e^{iEt/\hbar}(\vec r\,\hat{\vec p})\,\varphi(\vec r)\,e^{-iEt/\hbar}\,d^3r = 0.$$

И окончательно получаем $2<T> = n<U>$, где учтено, что $\frac{\hat{\vec p}^{\,2}}{m} = 2\hat T$.

Задачи для самостоятельного решения

1. Найти, какие из механических величин или их комбинации (энергия, проекции и квадрат момента количества движения, проекции импульса, четность) сохраняются при движении бесспиновых заряженных частиц в следующих полях:
   1) при свободном движении;
   2) в поле бесконечного однородного цилиндра с осью z;
   3) в поле бесконечно однородной плоскости (x, y);
   4) в поле однородного шара;
   5) в поле бесконечной однородной полуплоскости (x, z), $z > 0$;
   6) в поле двух точечных зарядов;
   7) в однородном переменном поле;
   8) в поле равномерно заряженного прямого провода с переменным зарядом;
   9) в поле однородного трехосного эллипсоида;
   10) в поле бесконечной однородной цилиндрической винтовой линии; (E, $L_z + ap_z/2\pi\hbar$; a — шаг винта);

11) в поле однородного конуса;
12) в поле кругового тора;
13) в поле $U(z,t) = a(t)\, z$.

2. Показать, что если физические величины f_1, f_2 (соответствующие операторы $\hat{f}_1$ и $\hat{f}_2$) являются интегралами движения, то операторам $\hat{f}_1\hat{f}_2 + \hat{f}_2\hat{f}_1$ и $i(\hat{f}_1\hat{f}_2 - \hat{f}_2\hat{f}_1)$ соответствуют физические величины, являющиеся интегралами движения.

6. Уравнение Шредингера

Уравнение наименьшего порядка, которому удовлетворяет волновая функция, описывающая свободное движение, имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_0\, \psi(\vec{r}, t) \ , \qquad (16)$$

где $\psi(\vec{r}, t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)\right]$; $\hat{H}_0 = \hat{\vec{p}}^{\,2}/2m$; $E = \vec{p}^{\,2}/2m$.

В квантовой механике постулируется, что зависимость волновой функции от времени для произвольного движения частицы (системы) описывается уравнением (16) с заменой $\hat{H}_0$ на гамильтониан, соответствующий этому движению.

Таким образом, основное уравнение квантовой механики (уравнение Шредингера) имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\, \psi(\vec{r}, t) \, , \qquad (17)$$

где $\hat{H} = \hat{\vec{p}}^{\,2}/2m + U(\vec{r},t)$; $U(\vec{r},t)$ — потенциальная энергия системы (частицы).

Решение уравнения Шредингера должно удовлетворять стандартным условиям. При этом требование непрерывности сохраняется и в тех случаях, когда само поле $U(\vec{r},t)$ имеет поверхности разрыва. На такой поверхности должны оставаться непрерывными как сама функция, так и ее первая производная по координате.

В том случае, когда гамильтониан $\hat{H}$ не зависит явно от времени, т.е. $\partial \hat{H}/\partial t = 0$, и, следовательно, $U = U(\vec{r})$ — потенциальная энергия системы (частицы), уравнение Шредингера (17) допускает решение с разделенными переменными:

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\, \varphi(t) \, .$$

В результате (17) распадается на два уравнения:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})\,; \tag{18}$$

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = E\varphi(t)\,; \qquad \varphi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right). \tag{19}$$

Уравнение (18) представляет собой уравнение на собственные функции и собственные значения оператора полной энергии $\hat{H}$, следовательно, состояния, удовлетворяющие уравнению (18), имеют определенную энергию. Такие состояния называются стационарными, а уравнение (18) называют стационарным уравнением Шредингера.

Волновая функция стационарного состояния есть:

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\,e^{-iEt/\hbar}.$$

Перечислим особенности стационарных состояний:

- зависимость волновых функций стационарных состояний от времени однозначно определяется значением энергии в этом состоянии;
- плотность вероятности и плотность тока вероятности не зависят от времени;
- среднее значение любой физической величины, оператор которой явно не зависит от времени, является постоянным;
- вероятность обнаружить определенное значение физической величины не зависит от времени.

Плотность тока вероятности.

Из уравнения Шредингера (17) с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x, y, z, t)$$

следует уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0,$$

где ρ — плотность вероятности обнаружить частицу в точке с координатами (x, y, z) в момент времени t, а вектор

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*)$$

по своему смыслу представляет собой плотность тока вероятности. Таким образом, вероятность частице пройти за единицу времени через площадку $\Delta\sigma$ равна $dW/dt = (\vec{j}\vec{n})\Delta\sigma$ ($\vec{n}$ — единичный вектор нормали к $\Delta\sigma$).

Если волновая функция представлена в виде

$$\psi = A(\vec{r},t)\,e^{i\varphi(\vec{r},t)},$$

где A и φ — действительные функции, то

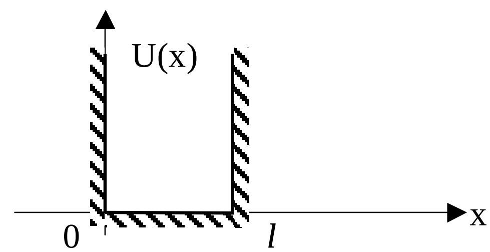
$$\vec{j} = \rho\frac{\hbar}{m}\vec{\nabla}\varphi,$$

и отличный от нуля ток вероятности существует только в том случае, если волновая функция имеет зависящую от координат фазу (если ψ — действительна, т.е. $\varphi = 0$ то $\vec{j} = 0$ также).

<u>Пример 1.</u> Решить стационарное уравнение Шредингера для частицы массы m, движущейся в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Решение. Потенциальная энергия имеет вид:

$$U(x) = \begin{cases} 0, \text{ если } \ 0 < x < l \ ; \\ \infty, \text{ если } \ x \geq l, \ x \leq 0 \ . \end{cases}$$



Частица не может проникать в область с бесконечной потенциальной энергией, из чего следует, что в области $x < 0$ и $x > l$ волновая функция тождественно равна нулю, что непосредственно следует из физического смысла квадрата модуля волновой функции. Требование непрерывности волновой функции во всей области приводит к условию $\psi(0) = \psi(l) = 0$. Уравнение Шредингера в области $0 < x < l$ имеет вид:

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

Введем обозначение: $k^2 = 2mE/\hbar^2$, тогда это уравнение примет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0.$$

Решение этого уравнения можно представить как линейную комбинацию экспонент или в виде комбинации синусов и косинусов. В том случае, когда движение происходит в ограниченной области пространства (финитное движение), удобнее пользоваться следующим представлением:

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) ;$$

граничное условие $\psi(0) = 0$ приводит к тому, что $B = 0$. Из условия $\psi(l) = A\sin(kl) = 0$ следует $kl = \pi n$, где $n = 1, 2, 3\ldots$. Следует отметить, что значения $A = 0$ или $n = 0$ тождественно обращают волновую функцию в нуль во всей области, что соответствует случаю отсутствия частицы. С учетом введенного обозначения энергетический спектр принимает вид:

$$E_n = n^2\pi^2\hbar^2/(2ml^2) .$$

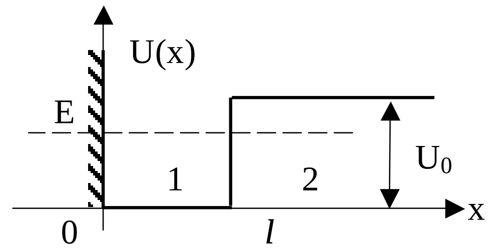
Видно, что совокупность собственных значений образует дискретный спектр, и это позволяет нам нормировать волновую функцию на 1:

$$|A|^2\int_0^l \sin^2(n\pi x/l)\,dx = 1, \text{ отсюда } A = (2/l)^{1/2},$$

и нормированная волновая функция принимает вид:

$$\psi_n(x) = (2/l)^{1/2}\sin(n\pi x/l)\ .$$

Поскольку существует взаимно однозначное соответствие между собственными функциями и собственными значениями, энергетический спектр частицы невырожден.



<u>Пример 2.</u> Частица массы m находится в одномерном потенциальном поле U(x), показанном на рисунке, где $U(0) = \infty$. Найти возможные уровни энергии частицы в области $E < U_0$.

Решение. Разобьем всю область движения частицы на две: $0 \le x \le l$ — область 1 и $x > l$ — область 2. Запишем уравнение Шредингера в каждой из этих областей:

$$\psi_1^{//}(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0,\quad k_1^2 = 2mE/\mathbf{h}^2;\quad \psi_2^{//}(x) - k_2^2\psi_2(x) = 0,\ k_2^2 = (U_0 - E)\frac{2m}{\mathbf{h}^2}\ ;$$

их общие решения:

$$\psi_1(x) = A\sin(k_1x) + B\cos(k_1x)\ ;\qquad \psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

должны удовлетворять стандартным условиям. Из условия $\psi_1(0) = 0$ следует, что B = 0. Чтобы волновая функция оставалась всюду конечной, необходимо соблюдение условия D = 0. Требование непрерывности волновой функции и ее производной по координате в точке $x = l$ приводит к системе линейных однородных алгебраических уравнений для определения коэффициентов A и C:

$$A\sin(k_1l) = Ce^{-k_2l};$$

$$Ak_1\cos(k_1l) = -k_2Ce^{-k_2l}.$$

Для того чтобы решение было нетривиальным, необходимо потребовать обращения в нуль определителя:

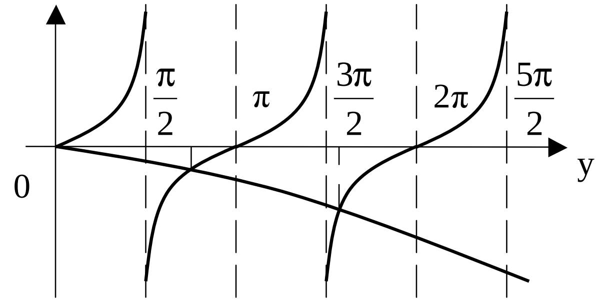
$$\begin{vmatrix} \sin(k_1l) & -e^{-k_2l} \\ k_1\cos(k_1l) & k_2e^{-k_2l} \end{vmatrix} = 0\,.$$

В результате получаем трансцендентное уравнение:

$$\mathrm{tg}\,(k_1l) = -k_1/k_2\,,$$

решать которое будем графически. Введем обозначения $k_1l = y,\ p^2 = 2mU_0\dfrac{l^2}{\mathbf{h}^2}$, после чего это уравнение принимает вид:

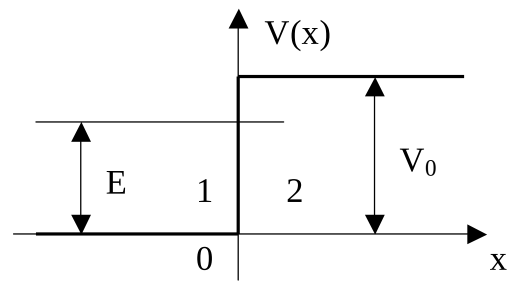
$$\mathrm{tg}\,(y) = -\,y/(p^2 - y^2)^{1/2}\ .$$



Графическое изображение правой и левой частей этого уравнения представлено на рисунке. В зависимости от величины p, которая определяется параметрами ямы l и U_0 (ширина и глубина), получаем различное количество решений. В случае, когда $p < \pi/2$, связанного состояния не существует. Если $\pi/2 < p < 3\pi/2$, существует только одно связанное состояние. Таким образом с увеличением параметра p количество связанных состояний растет.

Пример 3. Частица, двигаясь в положительном направлении оси x, падает на потенциальный порог:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0 \\ V_0 & \text{при } x > 0 \end{cases};$$



Рассмотрев случаи $E > V_0$ и $E < V_0$, найти коэффициенты прохождения D и отражения R частиц.

Решение. Так как V (x) имеет скачок конечной величины в точке x = 0, то, обозначив область $x < 0$ как область 1, а область $x > 0$ как область 2, составим и решим уравнение Шредингера для этих областей и сошьем эти решения, т.е. приравняем в точке разрыва потенциала функции и их первые производные.

Рассмотрим случай $E > V_0$.

В области 1 движение частицы описывается уравнением:

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0, \text{ где } k_1^2 = 2mE/\mathbf{h}^2;$$

его решение имеет вид: $\psi_1(x) = C_1 e^{i k_1 x} + C_2 e^{-i k_2 x}$.

Аналогичное уравнение получаем для области 2:

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k_2^2\psi_2(x) = 0, \text{ где } k_2^2 = 2m(E - V_0)/\mathbf{h}^2.$$

Его решение будет: $\psi_2(x) = C_3 e^{i k_2 x} + C_4 e^{-i k_2 x}$. Следует заметить, что полная энергия частицы при переходе из области 1 в область 2 сохраняется.

Условия сшивания дают:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \qquad \psi_1'(0) = \psi_2'(0);$$
$$C_1 + C_2 = C_3 + C_4; \qquad ik_1(C_1 - C_2) = ik_2(C_3 - C_4);$$

Проанализируем слагаемые, входящие в ψ_1 и ψ_2.

$C_1 e^{i k_1 x}$ — описывает частицы, которые движутся в положительном направлении оси x, т.е. падающие частицы; $C_2 e^{-i k_1 x}$ — соответствует отраженным частицам, движущимся в обратном направлении; $C_3 e^{i k_2 x}$ —

прошедшим частицам. В то же время отраженных частиц во второй области нет, следовательно, коэффициент $C_4 = 0$.

Определим коэффициенты отражения и прохождения как отношения соответствующих плотностей токов:

$$R = \frac{|j_{отр}|}{j_{пад}}, \qquad D = \frac{j_{прош}}{j_{пад}}.$$

Рассчитаем плотности токов по формуле:

$$j = \frac{i\mathbf{h}}{2m}\left(\psi\frac{d\psi^*}{dx} - \psi^*\frac{d\psi}{dx}\right).$$

Подставляя соответствующие волновые функции, получим:

$$j_{пад} = \frac{\mathbf{h}k_1}{m}|C_1|^2; \quad j_{отр} = -\frac{\mathbf{h}k_1}{m}|C_2|^2; \quad j_{прош} = \frac{\mathbf{h}k_2}{m}|C_3|^2.$$

Таким образом, нам для вычисления R и D необходимо найти отношения C_2/C_1 и C_3/C_1, которые определим из системы:

$$1 + C_2/C_1 = C_3/C_1\ ; \qquad ik_1(1 - C_2/C_1) = ik_2C_3/C_1.$$

Отсюда сразу находим:

$$R = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}; \qquad D = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

Очевидно, что вследствие сохранения числа частиц R + D = 1.

Рассмотрим случай $E < V_0$. В области 1 решение остается тем же, поэтому запишем уравнение Шредингера только для области 2:

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k^2\psi_2(x) = 0\ , \text{ где } k^2 = 2m(V_0 - E)/\mathbf{h}^2.$$

Решение будет иметь вид:

$$\psi(x) = C_3e^{-kx} + C_4e^{kx}.$$

Из требования конечности волновой функции следует, что $C_4 = 0$. Очевидно, что выражения для R и D могут быть получены путем замены k_2 на ik. В результате будем иметь:

$$R = \frac{|k_1 - ik|^2}{|k_1 + ik|^2} = 1\ , \qquad D = 0,$$

т.е. наблюдается полное отражение падающих частиц. Найдем эффективную глубину проникновения частицы под барьер $\mathbf{l}_{eff}$, т.е. расстояние от границы барьера до точки, в которой плотность вероятности нахождения частицы $W(x)$ уменьшается в e раз:

$$W(x) = |\psi_2(x)|^2 \approx e^{-2kx}, \quad \text{т.е.} \quad \mathbf{l}_{eff} = 1/2k.$$

Линейный гармонический осциллятор

Рассмотрим одну из важных задач квантовой механики — задачу о линейном гармоническом осцилляторе. В этом случае частица движется в поле $U(x) = \frac{1}{2} m\,\omega^2 x^2$ (m — масса частицы, ω — частота) и стационарное уравнение Шредингера допускает точное решение.

Решение классического уравнения движения частицы в этом случае имеет вид:

$$x(t) = a\cos(\omega t + \varphi).$$

Соответствующая система называется гармоническим осциллятором, а стационарное уравнение Шредингера, описывающее одномерное движение квантовой частицы, имеет вид:

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

Требования конечности волновой функции и обращения ее в нуль при $x \to \pm\infty$ приводят к квантованию энергии. В результате энергетический спектр принимает вид:

$$E_n = \hbar\omega\,(n + 1/2\ ); \quad n = 0, 1, 2 \ldots ,$$

а соответствующие собственные функции есть:

$$\psi_n(x) = [n!\, 2^n \sqrt{\pi}\ ]^{-1/2} H_n(\xi)^{-\xi^2/2};$$

где $\xi = x/x_0$; $x_0 = (\hbar/m\omega)^{1/2}$; $H_n(\xi)$ — полином Эрмита.

Инвариантность гамильтониана относительно преобразования пространственной инверсии приводит к тому, что волновые функции стационарных состояний обладают определенной четностью — четным n соответствуют четные состояния, а нечетным — нечетные состояния. Действительно, например,

$$H_0(\xi) = 1; \quad H_1(\xi) = 2\xi; \ H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,$$

а в общем случае $\psi_n(-x) = (-1)^n\,\psi_n(x)$.

Для полиномов Эрмита существует простое рекуррентное соотношение:

$$\xi H_n(\xi) = nH_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi).$$

Следует подчеркнуть, что минимальная энергия гармонического осциллятора (энергия основного состояния) отлична от нуля $(E_0 = \hbar\omega/2)$, в то время как по классической теории она равна нулю.

Легко показать, что средние значения координаты и импульса в любом стационарном состоянии гармонического осциллятора равны нулю. Действительно, в силу четности выражения $\psi_n^* x \psi_n = x\psi_n^2$,

$$<x>= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \, x \, \psi_n \, dx = 0$$

и $<(\Delta x)^2> = <x^2> - <x>^2 = <x^2>$;

аналогично, используя граничные условия на бесконечности, получим:

$$<p> = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \frac{d\psi_n}{dx} \, dx = -\frac{1}{2} i \hbar |\psi|^2 \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0;$$

т.е. $<(\Delta p)^2> = <p^2>$.

Покажем, что появление в теории Шредингера нулевой энергии тесным образом связано с соотношением неопределенностей, которое в нашем случае имеет вид:

$$<x^2> <p^2> \geq \hbar^2/4 . \qquad (20)$$

Полная энергия равна:

$$E = <H> = \frac{<p^2>}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} <x^2>.$$

Используя (20), получаем:

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m <x^2>} + \frac{m\omega^2 <x^2>}{2} . \qquad (21)$$

Отсюда видно, что ни при каких значениях $<x^2>$ энергия не обращается в нуль. Приравнивая нулю производную по $<x^2>$ от правой части (21), найдем значение $<x^2>$, при котором достигается минимум E: $<x^2> = \hbar/2m\omega$; тогда

$$E \geq \hbar\omega/4 + \hbar\omega/4 = \hbar\omega/2 \ ; \ \text{т.е. } E_{min} = \hbar\omega/2 = E_0 .$$

Существование конечной нулевой энергии у гармонического осциллятора является одним из наиболее характерных проявлений волновых свойств частиц. Нулевая энергия E_0 была обнаружена экспериментально в опытах по рассеянию рентгеновского излучения в кристаллах при низких температурах.

Пример 4. Для одномерного гармонического осциллятора, полная энергия которого равна $7\hbar\omega/2$, вычислить среднюю кинетическую энергию.

Решение. Решать эту задачу можно, используя обычную формулу для вычисления среднего значения физической величины:

$$<T> = \int \psi_n^*(x) \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi_n(x) \, dx \ ,$$

но для этого необходимо знать волновую функцию возбужденного состояния осциллятора. Использование теоремы о вириале позволяет значительно упростить решение. Зная спектр осциллятора ($E = \hbar\omega(n + 1/2)$), видим, что система находится в стационарном состоянии с n = 3. Учитывая вид потенциальной энергии — $U(x) = m\omega^2 x^2/2$, получаем соотношение: $<T> = <U>$.

Полная энергия системы $E = \langle T \rangle + \langle U \rangle$, где $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$. Таким образом, имеем систему из двух уравнений:

$$<T> = <U> \; ; \qquad 7/2\,\hbar\omega = <T> + <U>.$$

Отсюда находим: $<T> = \frac{7}{4}\hbar\omega$.

Задачи для самостоятельного решения

1. Доказать, что в стационарном состоянии дискретного спектра среднее значение проекции импульса равно нулю.
2. Гамильтониан заряженной частицы, движущейся в магнитном поле, имеет вид: $\hat{H} = (\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}})^2/2m$, где $\hat{\mathbf{A}}$ — оператор вектор-потенциала магнитного поля, являющийся функцией координат. Найти оператор $\hat{\mathbf{v}}$ скорости частицы в магнитном поле и правила коммутации операторов различных компонент скорости между собой.
3. Для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме вычислить среднюю силу, с которой частица действует на каждую из стенок ямы в основном состоянии. ($F = \pi^2\hbar^2/(ml^3)$).
4. Найти решение временного уравнения Шредингера для свободной частицы, движущейся с импульсом p в положительном направлении оси x.
5. Найти с помощью уравнения Шредингера энергию гармонического осциллятора с частотой ω в стационарных состояниях:
   а) $\psi(x) = A\exp(-a^2x^2)$; б) $\psi(x) = B\,x\exp(-a^2x^2)$, где a, A, B — постоянные ($E = \hbar\omega/2$; $E = 3/2\,\hbar\omega$).
6. Частица с массой m и энергией E падает на прямоугольный потенциальный барьер $U(x) = U_0$ при $0 < x < a$, и $U(x) = 0$ при $x < 0$ и $x > a$. Найти коэффициент прохождения D и коэффициент отражения R для случаев $E > U_0$ и $E < U_0$.

$$D = \left[1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_0 a}{4E(E - U_0)}\right]^{-1}; \quad R = \left[1 + \frac{4E(E - U_0)}{U_0^2 \sin^2 k_0 a}\right]; \; k = [2m(E - U_0)]^{1/2}/\hbar.$$

7. Частица находится в основном состоянии $\psi(x) = A\exp(-\alpha^2x^2/2)$ в одномерном потенциальном поле $U(x) = kx^2/2$. Определить вероятность пребывания частицы вне классических границ поля. ($W = 0{,}049$).

Литература

1. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. — М.: Высшая школа, 1976. — 620 с.
2. Давыдов А.С. Квантовая механика. — М.: Наука, 1973. — 704 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1989. — Т.III: Квантовая механика. — 768 с.
4. Галицкий В.М., Карнаков В.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. — М.: Наука, 1981. — 648 с.
5. Сборник задач по теоретической физике / Л.Г. Гречко, В.И. Сугаков, О.Ф. Томасевич и др. — М.: Высшая школа, 1972. — 336 с.
6. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. — М.: Мир, 1975. — Т.1. — 342 с.
7. Серова Ф.Г., Янкина А.А. Сборник задач по теоретической физике. М.: Просвещение. 1979. — 160 с.
8. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике. М.: Высшая школа. 1991. — 173 с.

Авторы:

Алмалиев Александр Николаевич
Копытин Игорь Васильевич
Корнев Алексей Станиславович
Чуракова Татьяна Алексеевна

Редактор **Тихомирова О.А.**