

Министерство образования Российской Федерации

Физический факультет
Кафедра теоретической физики

Задачи по квантовой механике

Часть 2

Методические указания к практическим занятиям по курсу “Квантовая механика” для студентов физического факультета спец. 20.02.00, 01.04.00 и 07.15.00 дневного и вечернего отделений

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

Воронеж 1999

Оглавление

1	Трехмерные задачи. Движение в центральном поле	3
1.1	Общие положения	3
1.2	Водородоподобный атом	7
2	Основы теории представлений	18
2.1	Представление волновой функции	18
2.2	Теория представлений для операторов физических величин	24
2.3	Теория представлений и наблюдаемые физические величины	29
3	Квазиклассическое приближение	34
3.1	Волновая функция в квазиклассическом приближении . . .	34
3.2	Правило квантования Бора–Зоммерфельда	37
3.3	Квазиклассическое прохождение через потенциальный барьер	42

Предисловие

Настоящие методические указания предназначены для практических занятий и самостоятельной работы по курсу “Квантовая механика” для студентов всех специальностей физического факультета. Указания содержат 3 главы, охватывающие следующие вопросы курса: движение в центральном поле (гл. 1), основы теории представлений (гл. 2) и квазиклассическое приближение (гл. 3).

Каждый раздел начинается с основных теоретических положений и формул, знание которых необходимо при решении задач, и содержит указания по их практическому использованию. Далее рассматривается подробное решение нескольких типичных задач и приводится ряд задач (без решения) для самостоятельной работы.

Приведем численные значения фундаментальных физических констант (в системе СГСЭ), упомянутых в настоящем пособии:

постоянная Планка $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-27}$ эрг·с;

масса электрона $m = 9.11 \cdot 10^{-28}$ г;

элементарный заряд $|e| = 4.803 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ.

Глава 1

Трехмерные задачи. Движение в центральном поле

1.1 Общие положения

Уравнение Шредингера является уравнением второго порядка в частных производных. Если физическая система обладает многими степенями свободы, то задача нахождения собственных функций и собственных значений становится гораздо более трудоемкой по сравнению с одномерным случаем. Однако наличие у гамильтониана определенных свойств симметрии позволяет в ряде случаев существенно облегчить решение уравнения. Может оказаться, что удачная замена переменных приведет к уравнению в частных производных с разделяющимися переменными; задача на собственные функции и собственные значения распадается при этом на несколько задач с меньшим числом переменных, т.е. более простых.

Такая ситуация имеет место при решении задачи о частице массы μ , движущейся в центрально-симметричном поле, когда потенциальная энергия зависит от расстояния до силового центра $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, но не от направления радиус-вектора \mathbf{r} ($U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}|) = U(r)$). В этом случае стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

из-за сферической симметрии потенциала удобно решать в сферической системе координат с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r^2} + U(r), \quad (1.2)$$

где

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right), \quad (1.3)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2 \quad (1.4)$$

— оператор квадрата момента количества движения (напомним, что $\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}]$). Первые два слагаемых в гамильтониане (1.2) являются оператором кинетической энергии; $\nabla_{\theta, \varphi}^2$ в (1.4) — угловая часть оператора Лапласа в сферической системе координат. Поскольку $\hat{\mathbf{L}}^2$ действует лишь на угловые переменные, он коммутирует с гамильтонианом (1.2), а, значит, \mathbf{L}^2 является интегралом движения. Интегралом движения в центральном поле, как легко видеть, является и проекция момента количества движения на выделенное направление (ось Oz). Соответствующий оператор в сферической системе координат имеет вид:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (1.5)$$

Заметим, что \mathbf{L}^2 и L_z измеримы совместно, поскольку их операторы коммутируют. Таким образом, система, описываемая гамильтонианом (1.2) (т.е. частица в центральном поле), может находиться в состояниях с определенной энергией, определенным значением квадрата углового момента и определенным значением проекции углового момента на выделенное направление. Волновые функции этих состояний являются одновременно собственными функциями всех трех вышеперечисленных операторов.

Собственные функции и собственные значения операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z могут быть найдены из решения уравнений

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \Psi(\theta, \varphi) = \mathbf{L}^2 \Psi(\theta, \varphi); \quad \hat{L}_z \Psi(\theta, \varphi) = L_z \Psi(\theta, \varphi) \quad (1.6)$$

на единичной сфере. Собственными значениями операторов (1.4) и (1.5) являются

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= \hbar^2 l(l+1), & l &= 0, 1, 2, \dots; \\ L_z &= \hbar m, & m &= 0, \pm 1, \dots \end{aligned}$$

Им соответствуют собственные функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, которые называются сферическими функциями. На единичной сфере они образуют полную ортонормированную систему:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{l'l} \delta_{m'm}; \quad (1.7)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\varphi' - \varphi). \quad (1.8)$$

l называют орбитальным, а m — магнитным квантовыми числами.

Приведем явный вид сферических функций с орбитальным квантовым числом $l = 0, 1$:

$$\left. \begin{aligned} Y_{00}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \\ Y_{10}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \\ Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \end{aligned} \right\} \quad (1.9)$$

Так как волновая функция стационарных состояний частицы с определенными значениями \mathbf{L}^2 , L_z в произвольном поле сферической симметрии должна одновременно быть собственной функцией операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z , то уравнения (1.6) будут автоматически удовлетворяться, если решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1.2) искать в виде:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi) = f_{El}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (1.10)$$

где $f_{El}(r)$ — радиальная волновая функция, которая определяется видом потенциальной энергии $U(r)$ и зависит от значений полной энергии E и орбитального момента l . Поскольку в поле сферической симметрии нет выделенных направлений в пространстве, то радиальная функция $f(r)$ не будет зависеть от значения магнитного квантового числа m . Представление $\Psi(\mathbf{r})$ в виде (1.10) позволяет разделить переменные r и (θ, φ) в уравнении Шредингера (1.1). Подставляя (1.10) в (1.1) и учитывая (1.2) и (1.4), для функций $f_{El}(r)$ получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) f_{El}(r) + \left[U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] f_{El}(r) = E f_{El}(r). \quad (1.11)$$

Граничным условием для решения уравнения (1.11) является требование конечного значения $f_{El}(r)$ в области r от 0 до ∞ .

Обычно $f_{El}(r)$ представляют в виде $f_{El}(r) = \frac{1}{r} R_{El}(r)$, что приводит к эквивалентной форме уравнения (1.11):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} R_{El}(r) + \left[U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] R_{El}(r) = E R_{El}(r) \quad (1.12)$$

с обязательным граничным условием $R_{El}(0) = 0$. Это уравнение называется радиальным уравнением Шредингера. По своей структуре (1.12)

совпадает с одномерным уравнением Шредингера с потенциалом

$$U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}. \quad (1.13)$$

Таким образом, квантовая механика, подобно классической, позволяет в центральном поле свести трехмерную задачу к одномерной добавлением центробежного слагаемого $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$.

На бесконечном удалении от силового центра граничное условие определяется конкретной постановкой задачи. Так, для связанных состояний $f_{El}(r)|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$, $R_{El}(r)|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$. При этом функции $f_{El}(r)$ и $R_{El}(r)$ следует нормировать на единицу условиями

$$\int_0^\infty f_{El}^2(r) r^2 dr = 1; \quad \int_0^\infty R_{El}^2(r) dr = 1. \quad (1.14)$$

Поскольку при фиксированном l магнитное квантовое число m может принимать значения $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ (всего $2l+1$ значение), каждое из стационарных состояний с определенным значением l будет $2l+1$ -кратно вырождено. Состояния, относящиеся к разным значениям $l = 0, 1, 2, \dots$, принято обозначать соответственно спектроскопическими символами s, p, d, f, g и далее в алфавитном порядке. Так, например, состояния с нулевым орбитальным моментом ($l = 0$) называют s -состояниями, состояния с $l = 1$ — p -состояниями и т.д.

Оператор Гамильтона (1.2) коммутирует с оператором пространственной инверсии \hat{I} ($\hat{I}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$), имеющим два собственных значения ± 1 . В связи с этим стационарные состояния рассматриваемых систем могут быть разделены на четные и нечетные. При операции инверсии координата r не меняется, а угловые переменные преобразуются по закону $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$, поэтому

$$\begin{aligned} \hat{I}\Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi) &= f_{El}(r) \hat{I}Y_{lm}(\theta, \varphi) = f_{El}(r) Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = \\ &= (-1)^l f_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l \Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Из (1.15) следует, что волновые функции в случае центральных полей являются собственными функциями оператора инверсии. Все состояния с четными l относятся к четным состояниям, состояния с нечетными l являются нечетными состояниями.

1.2 Водородоподобный атом

Важнейшей задачей теории центрального поля является задача о движении заряженной частицы в кулоновском поле притяжения $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ (водородоподобный атом). Стационарное уравнение Шредингера при этом имеет вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi). \quad (1.16)$$

Если рассматривать водородоподобный ион, то под массой μ в уравнении (1.16) следует понимать приведенную массу $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$ электрона и точечного¹ ядра ($m_e/m_p \approx 1836$, и поэтому $\mu \approx m_e$), под r — их относительное расстояние, под E — энергию относительного движения. Центр масс при этом движется свободно, а потому описывается плоской волной.

На рис. 1.1 показан примерный вид эффективного потенциала (1.13) радиального уравнения Шредингера (1.12) в кулоновском поле притяжения. При $E < 0$ движение финитно, т.к. электрон находится в “потенциальной яме”, образованной возрастающим кулоновским потенциалом и квадратично убывающим центробежным отталкиванием.

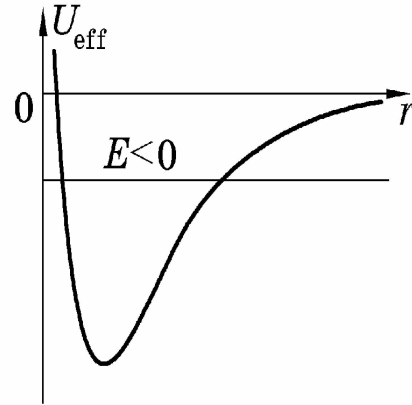


Рис. 1.1:

Если решения уравнения (1.16) искать в виде (1.10), переменные разделяются и мы получаем следующие собственные функции, нормированные условием (1.14):

$$f_{nl}(r) = N_{nl} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l \exp \left(-\frac{Zr}{na_0} \right) {}_1F_1(-n + l + 1; 2l + 2; 2Zr/na_0); \quad (1.17)$$

и собственные значения энергии:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{n^2 a_0}, \quad (1.18)$$

¹Эффект, обусловленный неточечностью ядра, будет рассмотрен в главе “Стационарная теория возмущений”.

где $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ — боровский радиус (для электрона $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$);

$$N_{nl} = \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^{3/2} \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}}$$

— нормировочный множитель;

$${}_1F_1(a; b; x) = 1 + \frac{1}{1!} \frac{a}{b} x + \frac{1}{2!} \frac{a(a+1)}{b(b+1)} x^2 + \dots$$

— вырожденная гипергеометрическая функция (при целом параметре $a \leq 0$ она превращается в полином степени $|a|$). $n = 1, 2, 3, \dots$ — главное квантовое число. Как видно из (1.18), значения энергии определяются только этим квантовым числом и не зависят от орбитального момента. Такое вырождение по орбитальному квантовому числу l (“случайное” вырождение) обусловлено спецификой кулоновского поля и в центральных потенциалах другого вида не встречается.

При *фиксированном* n число l принимает значения $l = 0, 1, \dots, n-1$ (напомним, что при *фиксированном* l магнитное квантовое число $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$, т.е. $(2l+1)$ значение). Таким образом, кратность вырождения уровня E_n равна

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (1.19)$$

Радиальные волновые функции (1.17), как и должно быть в центральном поле, не зависят от магнитного квантового числа m . Они характеризуются главным n и орбитальным l квантовыми числами по схеме nl , причем для l надо использовать буквенный спектроскопический символ. Так, $1s$ -состояние означает состояние с $n = 1$ и $l = 0$ и т.д. Поскольку E_n минимально при $n = 1$, основным является $1s$ -состояние.

Разберем несколько примеров.

Пример 1.1. *Записать оператор кинетической энергии в сферической системе координат.*

Решение. Запишем в декартовых координатах тождество, справедливое для произвольных векторных операторов $\hat{\mathbf{A}}$ и $\hat{\mathbf{B}}$:

$$(\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{B}})^2 = \sum_{jk} \hat{A}_j \hat{B}_k (\hat{A}_j \hat{B}_k - \hat{A}_k \hat{B}_j) \quad (j, k = x, y, z). \quad (1.20)$$

Подставляя в (1.20) вместо $\hat{\mathbf{A}}$ и $\hat{\mathbf{B}}$ соответственно операторы \mathbf{r} и $\hat{\mathbf{p}}$ и применяя повторно коммутационное соотношение $[r_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$ (проделать самостоятельно!), получаем:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]^2 = \mathbf{r}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})^2 + i\hbar(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}). \quad (1.21)$$

Поскольку $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, $x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} = r \frac{\partial}{\partial r}$, то, учитывая коммутационное соотношение $[r, \hat{p}_r] = i\hbar$ (доказать самостоятельно!), получим:

$$(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} = r\hat{p}_r + i\hbar,$$

где оператор \hat{p}_r определен в (1.3);

$$(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})^2 - i\hbar(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) \equiv ((\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) - i\hbar)(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) = r\hat{p}_r(r\hat{p}_r + i\hbar) = r^2\hat{p}_r^2. \quad (1.22)$$

Как можно видеть из (1.22), правая часть (1.21) равна $r^2(\hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{p}_r^2)$. Разделив обе части (1.21) на r^2 , получим

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \hat{\mathbf{L}}^2/r^2,$$

откуда

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r^2}.$$

Данный результат был использован в (1.2) при построении гамильтониана в сферической системе координат. Напомним, что вид $\hat{\mathbf{L}}^2$ в сферической системе координат приведен в (1.4). \square

Пример 1.2. Найти энергии стационарных состояний (энергетический спектр) и соответствующие им волновые функции для пространственного ротатора с моментом инерции I .

Решение. Ротатор имеет только две вращательные степени свободы, которые удобно характеризовать углами θ, φ сферической системы координат. Движение ротатора является свободным, и поэтому гамильтониан можно построить по аналогии с гамильтонианом свободного поступательного движения с заменой $\hat{\mathbf{p}}$ на $\hat{\mathbf{L}}$ и массы μ — на I :

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I}.$$

С этим гамильтонианом стационарное уравнение Шредингера для ротатора принимает вид

$$\frac{1}{2J} \hat{\mathbf{L}}^2 \Psi(\theta, \varphi) = E \Psi(\theta, \varphi)$$

или

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \Psi(\theta, \varphi) = 2IE \Psi(\theta, \varphi). \quad (1.23)$$

Уравнение (1.23) является уравнением на собственные функции и собственные значения² оператора $\hat{\mathbf{L}}^2$, которые нам известны:

$$\begin{aligned} 2IE_l &= \hbar^2 l(l+1), & l &= 0, 1, \dots; \\ \Psi_{lm}(\theta, \varphi) &= Y_{lm}(\theta, \varphi), & m &= 0, \pm 1, \dots, \pm l. \end{aligned}$$

Таким образом, каждому энергетическому уровню ротатора

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$

соответствуют состояния, которые задаются сферическими функциями $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (базис ротатора). Энергетический уровень E_l вырожден с кратностью $2l+1$. Основное состояние ($l=0$) является невырожденным. \square

Пример 1.3. *Используя (1.17), получить явный вид волновой функции основного состояния водородоподобного атома и показать, что она нормирована на единицу. Выписать полную волновую функцию 1s-состояния.*

Решение. Из (1.17) следует, что $f_{10}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{Zr}{a_0} \right)$.

В дальнейшем интегралы удобно заменой переменных приводить к виду

$$\int_0^\infty t^n e^{-t} dt = n! \quad (1.24)$$

Тогда

$$\int_0^\infty f_{10}^2(r) r^2 dr = \frac{4Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty r^2 \exp \left(-\frac{2Zr}{a_0} \right) dr = \frac{1}{2} \int_0^\infty t^2 e^{-t} dt = \frac{1}{2} \cdot 2! = 1,$$

²В данном случае им соответствует произведение $2IE$, где множитель E подлежит определению

что находится в согласии с (1.14) (проводилась замена переменных $t = \frac{2Z}{a_0}r$; $dt = \frac{2Z}{a_0}dr$).

Поскольку в s -состоянии $l = 0$, то m также равно нулю. Полная волновая функция находится в соответствии с (1.10):

$$\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = \Psi_{1s}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right), \quad (1.25)$$

где учтено, что $Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. □

Пример 1.4. Найти наивероятнейшее удаление электрона в $1s$ -состоянии от ядра с зарядом Ze .

Решение.

1 способ.

Согласно (1.10), полная волновая функция $1s$ -состояния

$$\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = f_{10}(r)Y_{00}(\theta, \varphi),$$

где радиальная функция $f_{10}(r)$ определена в (1.17). Поскольку $Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, $1s$ -состояние изотропно, т.е. сферически симметрично, и ответ не изменится, если по телесному углу провести интегрирование. Используя условия нормировки (1.7), (1.14), получаем:

$$\int |\Psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 d^3r = \int_0^\infty r^2 dr \int |\Psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 d\Omega = \int_0^\infty \underbrace{f_{10}^2(r)r^2}_{w_{10}(r)} dr = 1. \quad (1.26)$$

Наличие множителя r^2 в (1.26) обусловлено тем, что в сферической системе координат элемент объема $d^3r = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$. Поскольку квадрат модуля волновой функции имеет вероятностный смысл, обведенное фигурной скобкой в (1.26) следует рассматривать как плотность вероятности нахождения электрона в сферическом слое радиуса r толщиной dr :

$$w_{10}(r) = f_{10}^2(r)r^2 = R_{10}^2(r) \quad (1.27)$$

(напомним, что $R(r) = r^{-1}f(r)$). Из (1.17) следует, что

$$w_{10}(r) \sim r^2 \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right).$$

Таким образом, задача заключается в поиске максимума функции $w_{10}(r)$. График функции $w_{10}(r)$ представлен на рис. 1.2. Максимальное значение w_{10} , как несложно показать, достигается при $r_0 = \frac{a_0}{Z}$. Это и есть наивероятнейшее удаление электрона от силового центра. В атоме водорода оно равняется боровскому радиусу.

2 способ.

Если вместо функции $f_{10}(r)$ использовать $R_{10}(r) = r^{-1}f_{10}(r)$, то функция $R_{10}(r)$ будет удовлетворять одномерному уравнению Шредингера (1.12). Исходя из вероятностного смысла волновой функции, приходим к (1.27) и получаем тот же самый ответ.

Заметим, что вероятность обнаружения электрона на произвольном удалении от центра в $1s$ -состоянии всегда является ненулевой. Однако при больших r она уменьшается экспоненциально, так что реальный размер атома будет конечным. \square

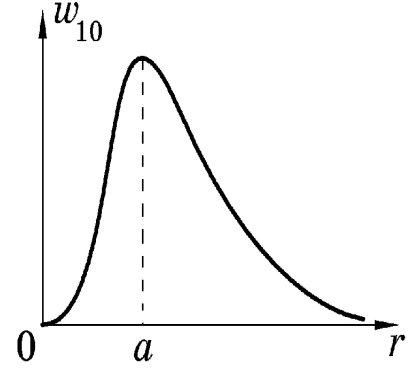


Рис. 1.2:

Пример 1.5. Найти явный вид полных волновых функций состояний со значением главного квантового числа $n = 2$. Показать, что эти функции нормированы на единицу.

Решение. При $n = 2$ имеется 4 различных состояния: $n = 2, l = 0, m = 0$ (Ψ_{200}); $n = 2, l = 1, m = 1$ (Ψ_{211}); $n = 2, l = 1, m = 0$ (Ψ_{210}); $n = 2, l = 1, m = -1$ (Ψ_{21-1}). На основании (1.10) имеем:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{200}(\mathbf{r}) &= f_{20}(r)Y_{00}(\theta, \varphi) \\ \Psi_{211}(\mathbf{r}) &= f_{21}(r)Y_{11}(\theta, \varphi) \\ \Psi_{210}(\mathbf{r}) &= f_{21}(r)Y_{10}(\theta, \varphi) \\ \Psi_{21-1}(\mathbf{r}) &= f_{21}(r)Y_{1-1}(\theta, \varphi) \end{aligned} \right\} \quad (2p) \quad (1.28)$$

где, согласно (1.17)

$$\begin{aligned} f_{20}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{Zr}{2a_0} \right) \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right); \\ f_{21}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{Zr}{2a_0} \right) \left(\frac{Zr}{a_0} \right). \end{aligned}$$

Обратим внимание на то, что последние три функции отличаются только сферическими функциями, нормированными на единицу согласно (1.7).

Покажем теперь, что и радиальные части (1.28) также нормированы на единицу. Используя (1.28) получаем:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty f_{20}^2(r) r^2 dr &= \frac{1}{2} \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) r^2 dr = \\ &= \frac{1}{2} \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{Z}{a_0}r + \frac{Z^2}{4a_0^2}r^2\right) r^2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) dr = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty t^2 \left(1 - t + \frac{1}{4}t^2\right) e^{-t} dt = \frac{1}{2} \left(2! - 3! + \frac{1}{4} \cdot 4!\right) = 1;\end{aligned}$$

$$\int_0^\infty f_{21}^2(r) r^2 dr = \frac{1}{24} \frac{Z^5}{a_0^5} \int_0^\infty r^4 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) dr = \frac{1}{24} \int_0^\infty t^4 e^{-t} dt = \frac{1}{24} \cdot 4! = 1.$$

В обоих случаях проводилась замена переменных $\frac{Zr}{a_0} = t$. □

Пример 1.6. *Непосредственным расчетом показать ортогональность волновых функций для 1s- и 2s-состояний водородоподобного атома.*

Решение. Необходимо показать, что интеграл от произведения $\Psi_{100}(\mathbf{r})$ и $\Psi_{200}(\mathbf{r})$ равен нулю:

$$I = \int \Psi_{200}^*(r, \theta, \varphi) \Psi_{100}(r, \theta, \varphi) r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = \int_0^\infty f_{20}(r) f_{10}(r) r^2 dr = 0.$$

Используя (1.25), (1.28) и делая замену переменных $\frac{3Z}{2a_0}r = t$, получаем:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty f_{20}(r) f_{10}(r) r^2 dr &= \sqrt{2} \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{3Zr}{2a_0}\right) r^2 dr = \\ &= \frac{8}{27} \sqrt{2} \int_0^\infty t^2 \left(1 - \frac{1}{3}t\right) e^{-t} dt = \frac{8}{27} \sqrt{2} \left(2! - \frac{1}{3} \cdot 6!\right) = 0,\end{aligned}$$

что и требовалось доказать. \square

Пример 1.7. Вычислить среднее значение r^{-1} в основном состоянии водородоподобного атома.

Решение.

1 способ.

Используя (1.25), имеем:

$$\langle r^{-1} \rangle = 4 \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty r \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right) dr = \frac{Z}{a_0} \int_0^\infty t e^{-t} dt = \frac{Z}{a_0}.$$

2 способ.

Воспользуемся теоремой вириала. Согласно этой теореме, $2\langle T \rangle = N\langle U \rangle$, где $\langle T \rangle$ и $\langle U \rangle$ — соответственно средняя кинетическая и потенциальная энергии системы и предполагается $U(r) \sim r^N$.

В атоме водорода $U(r) = -Ze^2/r \sim r^{-1}$, и теорема вириала принимает вид:

$$2\langle T \rangle = -\langle U \rangle \quad (1.29)$$

в произвольном стационарном состоянии.

В 1s-состоянии

$$\langle T \rangle + \langle U \rangle = E_{1s} = -\frac{1}{2} Z^2 \frac{e^2}{a_0}. \quad (1.30)$$

Решая уравнения (1.29) и (1.30) совместно относительно $\langle T \rangle$ и $\langle U \rangle$, получаем:

$$\langle U \rangle = -Ze^2 \langle r^{-1} \rangle = -Z^2 \frac{e^2}{a_0}, \text{ откуда } \langle r^{-1} \rangle = \frac{Z}{a_0}.$$

Данный метод не требует непосредственного вычисления интегралов и удобен при рассмотрении возбужденных состояний. \square

Пример 1.8. Найти уровни энергии частицы массы μ в сферической бесконечно глубокой потенциальной яме радиуса a .

Решение. Потенциальная энергия в данной задаче имеет вид:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a; \\ +\infty, & r > a, \end{cases}$$

т.е. поле центрально-симметрично. Поэтому достаточно решить уравнение (1.12). Так как потенциальная энергия имеет разрывный характер, решение уравнения (1.12) следует искать в виде

$R(r) = R_I(r)$ для $0 \leq r \leq a$ и $R(r) = R_{II}(r)$ для $r > a$.

В связи с тем, что $U(r) = \infty$ при $r > a$, $R_{II}(r) = 0$, и уравнение (1.12) необходимо решать в области $0 \leq r \leq a$ с $U(r) = 0$ и граничными условиями $R_I(0) = 0$ и $R_{II}(a) = 0$. Второе граничное условие следует из стандартных условий, а именно из условия непрерывности $R(r)$ в точке $r = a$. В результате имеем:

$$R_I'' - \frac{l(l+1)}{r^2} R_I + k^2 R_I = 0. \quad (1.31)$$

Здесь $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$. Использование подстановки $R_I(r) = \sqrt{r}Z(r)$ с введением новой переменной $x = kr$ приводит уравнение (1.31) к уравнению для функций Бесселя с полуцелым параметром:

$$x^2 \frac{d^2 Z_l}{dx^2} + x \frac{dZ_l}{dx} + \left[x^2 - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \right] Z_l = 0. \quad (1.32)$$

Решение (1.32) можно записать в виде

$$Z_l(r) = C_1 J_{l+\frac{1}{2}}(kr) + C_2 J_{-l-\frac{1}{2}}(kr).$$

Из условия $R_I(0) = 0$ необходимо положить $C_2 = 0$ (т.к. функция $J_\nu(x)$ в нуле ведет себя как x^ν). Используя граничное условие $R_I(a) = 0$, имеем:

$$J_{l+\frac{1}{2}}(ka) = J_{l+\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a \right) = 0. \quad (1.33)$$

Таким образом, значения уровней энергии частицы, заключенной в сферически симметричной яме с бесконечно высокими стенками, являются решениями уравнения (1.33). В частном случае $l = 0$ (s -состояние), учитывая, что $J_{\frac{1}{2}}(x) = \frac{\sin x}{x}$, вместо (1.33) получаем уравнение $\sin(ka) = 0$, откуда $ka = \pi n$ ($n = 1, 2, \dots$). Тогда спектр s -состояний имеет вид:

$$E_{ns} = \frac{\pi \hbar^2}{2\mu a^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \dots)$$

($n = 0$ не удовлетворяет физической постановке задачи).

Для произвольного значения l

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 X_{nl}^2}{2\mu a^2},$$

где $X_{nl} > 0$ — n -й корень уравнения $J_{l+\frac{1}{2}}(x) = 0$. Значения X_{nl} затабулированы. Заметим, что среди всех возможных значений X_{nl} , соответствующих *различным* парам (n, l) , совпадающих нет. Таким образом, специфическое для кулоновского потенциала “случайное” вырождение в данном случае отсутствует. \square

Задачи для самостоятельного решения

1. Найти $\langle \cos \theta \rangle$ и $\langle \cos^2 \theta \rangle$ в s -состоянии пространственного ротатора.
(Ответ: $0, \frac{1}{3}$.)
2. Найти $\langle \cos^2 \theta \rangle$ в p -состоянии пространственного ротатора с $m = 0, \pm 1$.
(Ответ: $\frac{3}{5}, \frac{1}{5}$.)
3. Показать ортогональность водородных функций Ψ_{200} и Ψ_{210} , Ψ_{100} и Ψ_{210} . Убедиться в неортогональности $f_{20}(r)$ и $f_{21}(r)$, $f_{10}(r)$ и $f_{21}(r)$. Объяснить причину.
4. Найти среднее значение r^n в $1s$ -состоянии водородоподобного атома ($n > -2$). (Ответ: $\frac{(n+2)!}{2^{n+1}} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^n$.)
5. Найти среднее значение r^n в $2s$ -состоянии водородоподобного атома ($n > -2$). (Ответ: $\frac{1}{8} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^n (n^2 + 3n + 4)(n+2)!$)
6. Найти среднее значение r^n в $2p$ -состоянии водородоподобного атома ($n > -4$). (Ответ: $\frac{1}{24} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^n (n+4)!$)
7. Найти средние значения $\hat{\mathbf{p}}^2$ и r^{-1} в произвольном стационарном состоянии водородоподобного атома с главным квантовым числом n . (Ответ: $\langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle = \mu \frac{Z^2 e^2}{n^2 a_0}$; $\langle r^{-1} \rangle = \frac{Z}{n^2 a_0}$.)
8. Электрон в водородоподобном атоме с зарядом Z занимает уровень с главным квантовым числом $n = 2$. Как известно, данный уровень 4-кратно вырожден. Будем нумеровать волновые функции, соответствующие $n = 2$, следующим образом:

$$\Psi_{200}(\mathbf{r}) \equiv \Psi_1(\mathbf{r}); \Psi_{210}(\mathbf{r}) \equiv \Psi_2(\mathbf{r}); \Psi_{211}(\mathbf{r}) \equiv \Psi_3(\mathbf{r}); \Psi_{21-1}(\mathbf{r}) \equiv \Psi_4(\mathbf{r}).$$

Вычислить интегралы $F_{ij} = \int \Psi_i^*(\mathbf{r}) z \Psi_j(\mathbf{r}) d^3r$ (z — декартова координата). (Ответ: $F_{12} = F_{21} = -3 \frac{a_0}{Z}$; в остальных случаях $F_{ij} = 0$).

9*. Найти дискретный спектр для электрона в поле $U(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\alpha}{r^2}$.

(Ответ: $E_{nl} = -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{(n - \mu_l)^2} \frac{e^2}{a_0}$, где $\mu_l = \frac{\alpha\mu}{\hbar^2(l + \frac{1}{2})}$.)

10*. Найти средний потенциал электростатического поля, создаваемого водородоподобным ионом в $1s$ -состоянии, как функцию расстояния до точечного ядра с зарядом Z . В чем состоит принципиальное отличие случая $Z = 1$ от $Z > 1$?

(Ответ:

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r} - \frac{e}{r} \left\{ 1 - \left[\frac{2Z^2}{a_0^2} r^2 + \frac{2Z}{a_0} r + 1 \right] \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right) \right\} - \frac{Ze}{a_0} \left(\frac{2Ze}{a_0} + 1 \right) \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right).$$

При $Z = 1$ потенциал $\varphi(r)$ становится короткодействующим.)

11*. Определить уровни энергии для движения частицы массы μ с моментом $l = 0$ в сферической прямоугольной потенциальной яме конечной глубины:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq a; \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

При какой минимальной глубине в яме присутствует лишь один уровень?

Глава 2

Основы теории представлений

2.1 Представление волновой функции

Задание волновой функции $\Psi_a(\mathbf{r})$ (“ a ” — набор квантовых чисел) в конфигурационном пространстве (координата \mathbf{r} в аргументе $\Psi_a(\mathbf{r})$) не является единственным. Фактически для *данного* состояния существенным является лишь набор квантовых чисел “ a ” (“индекс состояния”). Сам же вид волновой функции $\Psi_a(\mathbf{r})$ вторичен и представляет собой лишь “математическое изображение” данного состояния “ a ”. Вместо $\Psi_a(\mathbf{r})$ для описания состояния “ a ” можно использовать коэффициенты $c_a(G_n)$ разложения $\Psi_a(\mathbf{r})$

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \sum_n c_a(G_n) \Phi_{G_n}(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

по *полной* системе собственных функций $\Phi_{G_n}(\mathbf{r})$ *любого* эрмитова оператора \hat{G} ($\hat{G}\Phi_{G_n} = G_n\Phi_{G_n}$), действующего в *том же пространстве*, в котором определены функции $\Psi_a(\mathbf{r})$. Это следует из того, что между $\Psi_a(\mathbf{r})$ и набором коэффициентов $c_a(G_n)$ существует взаимно однозначное соответствие: задание $c_a(G_n)$ однозначно определяет $\Psi_a(\mathbf{r})$ по формуле (2.1), а знание $\Psi_a(\mathbf{r})$ позволяет найти *все* $c_a(G_n)$:

$$c_a(G_n) = \int \Phi_{G_n}^*(\mathbf{r}) \Psi_a(\mathbf{r}) d^3r. \quad (2.2)$$

Упорядоченный набор $c_a(G_n)$ называется волновой функцией состояния “ a ” в G -представлении. Величина $|c_a(G_n)|^2$ (т.е. квадрат модуля волновой функции в G -представлении) дает распределение вероятностей различных значений величины G в состоянии, характеризуемом набором квантовых чисел “ a ”.

Отметим, что все сказанное здесь справедливо для оператора \hat{G} как с дискретным, так и с непрерывным спектром. В последнем случае G_n является непрерывной величиной, а суммирование в (2.1) заменяется интегрированием:

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \int c_a(G) \Phi_G(\mathbf{r}) dG; \quad (2.3)$$

$$c_a(G) = \int \Phi_G^*(\mathbf{r}) \Psi_a(\mathbf{r}) d^3r. \quad (2.4)$$

Рассмотрим теперь тот частный случай, когда $\Psi_a(\mathbf{r})$ совпадает с одной из собственных функций оператора \hat{G} , например, $\Phi_{G_m}(\mathbf{r})$, тогда из (2.2) следует, что

$$c_a(G_n) = \int \Phi_{G_n}^*(\mathbf{r}) \Phi_{G_m}(\mathbf{r}) d^3r = \delta_{G_n G_m} = \delta_{nm}. \quad (2.5)$$

Таким образом, собственная функция оператора \hat{G} в G -представлении имеет вид δ -символа (для дискретного спектра) и δ -функции (для непрерывного спектра оператора \hat{G}).

Описание состояния с помощью $\Psi_a(\mathbf{r})$ называется *координатным представлением* (\mathbf{r} -представлением). Если в качестве оператора \hat{G} используется оператор импульса $\hat{\mathbf{p}}$, преобразование (2.2) дает волновую функцию состояния “ a ” в *импульсном представлении* (\mathbf{p} -представлении). Напомним, что спектр оператора $\hat{\mathbf{p}}$ вещественный и непрерывный, а произвольному собственному значению \mathbf{p} соответствует собственная функция

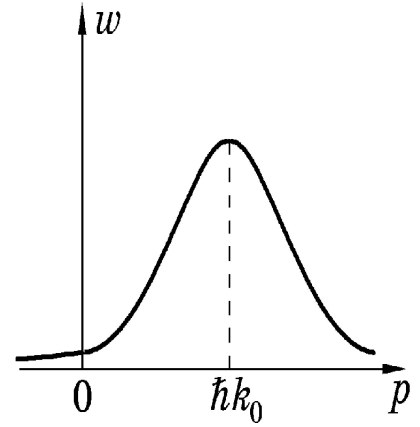


Рис. 2.1:

$$\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right). \quad (2.6)$$

Подставляя (2.6) в (2.4), получим формулу перехода от координатного представления к импульсному:

$$c_a(\mathbf{p}) = \int \Phi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \Psi_a(\mathbf{r}) d^3r = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right) \Psi_a(\mathbf{r}) d^3r. \quad (2.7)$$

Аргумент \mathbf{p} этой функции является непрерывной величиной. Таким образом, переход от координатного представления к импульсному является, по сути дела, известным преобразованием Фурье волновой функции.

Если оператором \hat{G} является гамильтониан \hat{H} , то преобразование (2.2) дает *энергетическое представление* волновой функции (E -представление).

Пример 2.1. Волновой пакет задается функцией:

$$\Psi(x) = \frac{1}{x_0^{1/2} \pi^{1/4}} \exp \left(ik_0 x - \frac{x^2}{2x_0^2} \right).$$

Найти импульсное представление данного состояния (одномерный случай). Получить распределение по импульсам в пакете.

Решение. Используем формулу (2.6). Напомним, что в одномерном случае множитель $(2\pi\hbar)^{-3/2}$ заменяется на $(2\pi\hbar)^{-1/2}$:

$$\begin{aligned} c(p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{1}{x_0^{1/2} \pi^{1/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} p x + ik_0 x - \frac{x^2}{2x_0^2} \right) dx = \\ &= \frac{1}{(2\hbar x_0)^{1/2} \pi^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -i \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right) x - \frac{x^2}{2x_0^2} \right\} dx. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Выделим в показателе экспоненты (2.8) полный квадрат:

$$\begin{aligned} \frac{x^2}{2x_0^2} + i \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right) x &= \frac{1}{2x_0^2} \left\{ x^2 + 2ixx_0^2 \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right) \right\} = \\ &= \frac{1}{2x_0^2} \left\{ x^2 + 2ixx_0^2 \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right) - x_0^4 \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right)^2 + x_0^4 \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right)^2 \right\} = \\ &= \frac{1}{2x_0^2} \left\{ x + ix_0^2 \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right) \right\}^2 + \frac{x_0^2}{2} \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right)^2. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Заметим также, что при произвольной комплексной константе α_0

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(t+\alpha_0)^2} dt = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi}. \quad (2.10)$$

Подставляя (2.9) в (2.8) и учитывая (2.10), получаем импульсное представление волнового пакета:

$$c(p) = \sqrt{\frac{x_0}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp \left\{ -\frac{x_0^2}{2} \left(\frac{p}{\hbar} - k_0 \right)^2 \right\}$$

(рекомендуем самостоятельно проделать соответствующие выкладки).
Распределение по импульсам

$$w(p) = |c(p)|^2 = \frac{x_0}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp \left\{ -\frac{x_0^2}{\hbar^2} (p - \hbar k_0)^2 \right\}$$

имеет гауссову форму с параметрами $\hbar k_0$ (средний импульс) и $\frac{\hbar^2}{2x_0^2}$ (ширина). График показан на рис. 2.1. Предлагаем самостоятельно убедиться в выполнении условия нормировки $\int_{-\infty}^{+\infty} w(p) dp = 1$. \square

Пример 2.2. Найти распределение по импульсам в основном состоянии водородоподобного иона с зарядом Z .

Решение. Волновая функция основного состояния ($1s$) в координатном представлении имеет вид

$$\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{Z|\mathbf{r}|}{a_0}\right), \quad (2.11)$$

где a_0 — боровский радиус. Подставляя (2.11) в (2.7), получим волновую функцию $1s$ -состояния в импульсном представлении:

$$c_{1s}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{Z}{2\hbar a_0}\right)^{3/2} \int \exp\left\{-\frac{Z|\mathbf{r}|}{a_0} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right\} d^3r. \quad (2.12)$$

Для вычисления интеграла (2.11) направим ось Oz вдоль вектора \mathbf{p} и перейдем в сферическую систему координат (в этом случае угол θ отсчитывается от вектора \mathbf{p} , и $\mathbf{p} \mathbf{r} = pr \cos \theta$, $d^3r = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$):

$$c_{1s}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{Z}{2\hbar a_0}\right)^{3/2} \int_0^\infty \int_0^\pi r^2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{i}{\hbar} pr \cos \theta\right) \sin \theta d\theta dr \int_0^{2\pi} d\varphi. \quad (2.13)$$

Последний интеграл в (2.13) равен 2π . Интегрирование по углу θ осуществляется с использованием замены $\cos \theta = t$ (при этом $\sin \theta d\theta = -dt$; $\cos 0 = 1$; $\cos \pi = -1$):

$$\int_0^\pi \exp\left(-\frac{i}{\hbar} pr \cos \theta\right) \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 e^{-\frac{i}{\hbar} prt} dt = \frac{i\hbar}{pr} \left(e^{-ipr/\hbar} - e^{ipr/\hbar}\right);$$

$$\int_0^\infty r^2 e^{-Zr/a_0} \frac{1}{r} r^{\pm i p r / \hbar} dr = \int_0^\infty r \exp \left\{ - \left(\frac{Z}{a_0} \mp \frac{i}{\hbar} p \right) r \right\} dr = \frac{1}{\left(\frac{Z}{a_0} \mp \frac{i}{\hbar} p \right)^2}.$$

После алгебраических преобразований из выражения (2.13) получаем:

$$\begin{aligned} c_{1s}(\mathbf{p}) &= \frac{2i\hbar}{\pi p} \left(\frac{Z}{2\hbar a_0} \right)^{3/2} \left\{ \frac{1}{\left[\frac{Z}{a_0} + \frac{i}{\hbar} p \right]^2} - \frac{1}{\left[\frac{Z}{a_0} - \frac{i}{\hbar} p \right]^2} \right\} = \\ &= -\frac{4\hbar}{\pi p} \left(\frac{Z}{2\hbar a_0} \right)^{3/2} \operatorname{Im} \frac{1}{\left(\frac{Z}{a_0} + \frac{i}{\hbar} p \right)^2} = \frac{8}{\pi} \left(\frac{a_0}{2\hbar Z} \right)^{3/2} \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{a_0 p}{\hbar Z} \right)^2 \right]^2}. \end{aligned}$$

Распределение по импульсам (плотность вероятности) дается выражением

$$w_{1s}(\mathbf{p}) = |c_{1s}(\mathbf{p})|^2 = \frac{8}{\pi^2} \left(\frac{a_0}{\hbar Z} \right)^3 \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{a_0 p}{\hbar Z} \right)^2 \right]^4}.$$

Предлагаем самостоятельно убедиться в выполнении условия нормировки $\int w_{1s}(\mathbf{p}) d^3 p = 1$ и найти наивероятнейшее значение импульса. \square

Пример 2.3. Квантовая система находится в состоянии, описываемом в полярных координатах волновой функцией $\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{19\pi}}(3 + \cos \varphi)$. Записать ее в энергетическом представлении по базису плоского ротатора с моментом инерции I и пояснить смысл величин $|c(E_m)|^2$.

Решение. Разложим функцию $\Phi(\varphi)$ по базисным функциям плоского ротатора $\Psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ ($m = 0, \pm 1, \dots$; спектр дискретный: $E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$).

Применяя формулу Эйлера, получаем:

$$\Phi(\varphi) = 3\sqrt{\frac{2}{19}}\Psi_0(\varphi) + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{19}}\{\Psi_1(\varphi) + \Psi_{-1}(\varphi)\},$$

т.е. $c(E_0) = 3\sqrt{\frac{2}{19}}$, $c(E_{\pm 1}) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{19}}$. В остальных случаях ($|m| > 1$) $c(E_m) = 0$. Другими словами, волновая функция в E -представлении изображается бесконечным столбцом. $|c(E_m)|^2$ дает вероятность w_m обнаружения состояния $\Psi_m(\varphi)$ в состоянии $\Psi(\varphi)$. В частности, в нашей задаче при каждом измерении энергии будет получаться одно из двух значений

энергии: $E_0 = 0$ (основное состояние) или $E_{\pm 1}$ (первое возбужденное состояние). Вероятности их обнаружения

$$w_0 = |c(E_0)|^2 = \frac{18}{19};$$

$$w_{\pm 1} = 2|c(E_{\pm 1})|^2 = \frac{1}{19} \text{ (двукратное вырождение).}$$

Как и следовало ожидать, выполняется условие нормировки $\sum_m w_m = 1$. □

Задачи для самостоятельного решения

12. Частица массы m находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной a . Найти волновые функции стационарных состояний в импульсном представлении (*Ответ:* $c_n = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar^3 a^3}{\pi}} \frac{(-1)^n e^{-ipa/\hbar} - 1}{(pa)^2 - (\pi \hbar n)^2}$; $n = 0, 1, \dots$).

13. Линейный гармонический осциллятор (масса — m , частота — ω) находится в основном состоянии. Найти импульсное представление волновой функции. (*Ответ:* $c_0(p) = \frac{1}{\sqrt{p_0} \sqrt{\pi}} e^{-\xi^2/2}$; $\xi = \frac{p}{p_0}$; $p_0^2 = m\hbar\omega$; *Указание:* см. пример 2.1).

14. Частица массы m находится в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a и приведена в состояние $\Psi(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(x-a)$. Найти его энергетическое представление, среднее значение энергии, а также флуктуацию энергии (*Ответ:* $C_n = -\frac{\sqrt{240}}{\pi^3} \frac{1 + (-1)^{n+1}}{n^3}$; $\langle E \rangle = 5 \frac{\hbar^2}{ma^2}$; $\sqrt{\langle (\Delta E)^2 \rangle} = \sqrt{5} \frac{\hbar^2}{ma^2}$; $n = 0, 1, \dots$. *Указание:* $\sum_{k=0}^{\infty} (2k+1)^{-4} = \pi^4/96$; $\sum_{k=0}^{\infty} (2k+1)^{-2} = \pi^2/8$).

15. Записать волновую функцию частицы в центральном поле в L^2 -представлении. (*Ответ:* Радиальная функция $f_{El}(r)$).

16. Записать сферическую функцию $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ в L_z -представлении. (*Ответ:* $\sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta)$, где $P_l^m(x)$ — присоединенный полином

Лежандра).

2.2 Теория представлений для операторов физических величин

При переходе от координатного к другому представлению для описания системы меняется вид не только у волновых функций, но и у операторов физических величин. Оператору \hat{F} в G -представлении соответствует матрица F_{kn} :

$$F_{kn} = \int \Phi_{G_k}^*(\mathbf{r}) \hat{F} \Phi_{G_n}(\mathbf{r}) d^3r \equiv \langle G_k | \hat{F} | G_n \rangle \equiv \langle k | \hat{F} | n \rangle, \quad (2.14)$$

где G_n и $\Phi_n(x)$ — собственные значения и соответствующие им собственные функции оператора \hat{G} с дискретным спектром (часто собственные функции $\Phi_{G_n}(\mathbf{r})$ называют базисными).

Пример 2.4. Найти оператор координаты в энергетическом представлении по базису линейного гармонического осциллятора с частотой ω и массой m .

Решение. Напомним, что под базисными функциями системы понимаются собственные функции ее гамильтониана. Базисные функции осциллятора имеют вид

$$\Phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \Phi_n^{(\text{osc})} \left(\frac{x}{x_0} \right) = [x_0 n! 2^n \sqrt{\pi}]^{-1/2} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2},$$

где $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $\xi = \frac{x}{x_0}$, $H_n(\xi)$ — полином Чебышева–Эрмита; $n = 0, 1, \dots$

Они ортогональны и нормированы на 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_m^*(x) \Phi_n(x) dx = \delta_{mn}. \quad (2.15)$$

Для функций $\Phi_n^{(\text{osc})}(\xi)$ известно следующее рекуррентное соотношение:

$$\xi \Phi_n^{(\text{osc})}(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}} \Phi_{n-1}^{(\text{osc})}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Phi_{n+1}^{(\text{osc})}(\xi). \quad (2.16)$$

Вычисление матричного элемента оператора координаты осуществляется по формуле (2.14) с учетом (2.15), (2.16) и замены $x = \xi x_0$:

$$\begin{aligned}
x_{mn} &\equiv \langle m | x | n \rangle = \frac{1}{x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_m^{(\text{osc})*} \left(\frac{x}{x_0} \right) x \Phi_n^{(\text{osc})} \left(\frac{x}{x_0} \right) dx = \\
&= x_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_m^{(\text{osc})*}(\xi) \underbrace{\xi \Phi_n^{(\text{osc})}(\xi)}_{(2.16)} d\xi = \\
&= x_0 \left\{ \underbrace{\sqrt{\frac{n}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_m^{(\text{osc})*}(\xi) \Phi_{n-1}^{(\text{osc})}(\xi) d\xi}_{(2.15)} + \underbrace{\sqrt{\frac{n+1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_m^{(\text{osc})*}(\xi) \Phi_{n+1}^{(\text{osc})}(\xi) d\xi}_{(2.15)} \right\} = \\
&= x_0 \left\{ \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right\}
\end{aligned}$$

Матричные элементы x_{mn} можно записать несколько иначе: $\langle n-1 | x | n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}}$; $\langle n+1 | x | n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}$, подразумевая все остальные элементы равными нулю. Приведем явный вид фрагмента бесконечной матрицы x_{mn} :

$$x_{mn} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{5} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{5} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

□

Пример 2.5. Записать оператор $\hat{F} = \cos \theta$ (сферическая система координат) в энергетическом представлении по базису пространственного ротатора.

Решение. Базисом пространственного ротатора являются сферические функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, характеризующиеся орбитальным l и магнитным m квантовыми числами (см. пример 1.2). Для сферических функций известно рекуррентное соотношение

$$\cos \theta Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,m}(\theta, \varphi) +$$

$$+ \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}} Y_{l-1,m}(\theta, \varphi) \quad (2.17)$$

Непосредственное вычисление с использованием (2.17) и условия нормировки сферических функций (1.7) дает:

$$\begin{aligned} \langle l' m' | \cos \theta | l m \rangle &= \int Y_{l' m'}^*(\theta, \varphi) \cos \theta Y_{l m}(\theta, \varphi) d\Omega = \\ &= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l', l+1} \delta_{m' m} + \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}} \delta_{l', l-1} \delta_{m' m} \end{aligned}$$

Другими словами,

$$\begin{aligned} \langle l+1 m | \cos \theta | l m \rangle &= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}; \\ \langle l-1 m | \cos \theta | l m \rangle &= \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}; \\ \langle l' m' | \cos \theta | l m \rangle &= 0; \quad \text{если } m \neq m', \end{aligned}$$

т.е. матрица оператора $\cos \theta$ оказывается диагональной по магнитному квантовому числу. \square

Определение (2.14) пригодно и для оператора \hat{G} с непрерывным спектром. В этом случае индексы состояния G и G' в матрице $\langle G' | \hat{F} | G \rangle$ будут пробегать непрерывный ряд значений.

Действие оператора \hat{F} на функцию Ψ ($\Phi = \hat{F}\Psi$) в G -представлении может быть записано следующим образом:

а) для оператора \hat{G} с дискретным спектром:

пусть $\{a(G_n)\}$ и $\{b(G_n)\}$ – соответственно функции Φ и Ψ в дискретном G -представлении, тогда

$$a(G_k) = \sum_n \langle G_k | \hat{F} | G_n \rangle b(G_n), \quad (2.18)$$

т.е. действие оператора на функцию осуществляется по правилу перемножения матрицы оператора на вектор, составленный из коэффициентов G -представления функции.

б) для оператора \hat{G} с непрерывным спектром:

Таблица 2.1: Некоторые операторы в \mathbf{r} - и \mathbf{p} -представлениях

Оператор	\mathbf{r} -представление	\mathbf{p} -представление
Координата $\hat{\mathbf{r}}$	\mathbf{r}	$i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}$
Импульс $\hat{\mathbf{p}}$	$-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$	\mathbf{p}
Момент импульса $\hat{\mathbf{L}}$	$-i\hbar[\mathbf{r} \times \nabla_{\mathbf{r}}]$	$i\hbar[\nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{p}]$
Кинетическая энергия \hat{T}	$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2$	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$
Потенциальная энергия \hat{U}	$U(\mathbf{r})$	$U(i\hbar\nabla_{\mathbf{p}})$

пусть $a(G)$ и $b(G)$ – соответственно функции Φ и Ψ в непрерывном G -представлении, тогда

$$a(G') = \int \langle G' | \hat{F} | G \rangle b(G) dG, \quad (2.19)$$

что отличается от (2.18) заменой суммирования интегрированием, и действие оператора на функцию осуществляется с помощью интегрального преобразования с ядром $\langle G' | \hat{F} | G \rangle$.

Использованные ранее операторы в координатном представлении также могут быть записаны в матричной форме: $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{r}' \rangle = \mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$; $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'})$ и т.д. При этом интегрирование (2.19) по d^3r' снимается δ -функцией.

По формуле (2.19) известные нам операторы могут быть переведены в импульсное представление. Так, для матрицы оператора координаты в импульсном представлении имеем: $\langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') i\hbar\nabla_{\mathbf{p}'}$, что по структуре аналогично оператору импульса в координатном представлении, *за исключением знака*.

Ниже приведена таблица 2.1 для некоторых операторов в координатном и импульсном представлениях.

Пример 2.6. Записать оператор $\hat{T}_{\mathbf{a}}$, осуществляющий пространственный параллельный перенос квантовой системы на вектор \mathbf{a} , в импульсном представлении.

Решение. Согласно определению оператора $\hat{T}_{\mathbf{a}}$,

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}). \quad (2.20)$$

Вычисляя матричный элемент (2.19) на собственных функциях оператора импульса $\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$ с учетом (2.20), получаем матрицу

оператора $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ в импульсном представлении:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} | \hat{T}_{\mathbf{a}} | \mathbf{p}' \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right) \hat{T}_{\mathbf{a}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \mathbf{r}\right) d^3 r = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \mathbf{a}\right) \underbrace{\int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\right\} d^3 r}_{(2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})} = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \mathbf{a}\right).\end{aligned}$$

Множитель, находящийся после δ -функции, как раз и будет оператором сдвига в импульсном представлении:

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{a}\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \mathbf{p}\right). \quad (2.21)$$

В координатном представлении оператор $\hat{T}_{\mathbf{a}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \hat{\mathbf{p}}\right)$, т.е. по структуре формально совпадает с (2.21). Однако в этом случае $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}$, т.е. оператор, и $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ выражается через операторную экспоненту, а в импульсном представлении (2.21) $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ – обычный множитель, являющийся функцией \mathbf{p} . \square

Пример 2.7. Функции $\{\Phi_n(\mathbf{r})\}$ образуют полную ортонормированную систему. Выразить $\langle n' | \hat{A} \hat{B} | n \rangle$ через $\langle n' | \hat{A} | n \rangle$ и $\langle n' | \hat{B} | n \rangle$.

Решение. Вспоминая условие полноты $\sum_n \Phi_n^*(\mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$, получаем:

$$\begin{aligned}\langle n' | \hat{A} \hat{B} | n \rangle &= \int \Phi_{n'}^*(\mathbf{r}') \hat{A} \hat{B} \Phi_n(\mathbf{r}') d^3 r' = \\ &= \iint \Phi_{n'}^*(\mathbf{r}') \hat{A} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{B} \Phi_n(\mathbf{r}') d^3 r' d^3 r = \\ &= \sum_{n''} \iint \Phi_{n'}^*(\mathbf{r}') \hat{A} \Phi_{n''}(\mathbf{r}') \Phi_{n''}^*(\mathbf{r}) \hat{B} \Phi_n(\mathbf{r}) d^3 r' d^3 r = \\ &= \sum_{n''} \int \Phi_{n'}^*(\mathbf{r}') \hat{A} \Phi_{n''}(\mathbf{r}') d^3 r' \cdot \int \Phi_{n''}^*(\mathbf{r}) \hat{B} \Phi_n(\mathbf{r}) d^3 r = \\ &= \sum_{n''} \langle n' | \hat{A} | n'' \rangle \langle n'' | \hat{B} | n \rangle.\end{aligned}$$

Итак,

$$\langle n' | \hat{A} \hat{B} | n \rangle = \sum_{n''} \langle n' | \hat{A} | n'' \rangle \langle n'' | \hat{B} | n \rangle, \quad (2.22)$$

что соответствует обычному правилу перемножения матриц. Формула (2.22) справедлива и для непрерывно меняющихся индексов состояния; при этом суммирование по n'' заменяется интегрированием. \square

Задачи для самостоятельного решения

17. Найти оператор координаты в энергетическом представлении по базису частицы в бесконечной прямоугольной потенциальной яме ширины a . (Ответ: $\langle n | x | n \rangle = \frac{1}{2}a$; $\langle n' | x | n \rangle = \frac{a}{\pi^2} \left\{ \frac{(-1)^{n'-n} - 1}{(n' - n)^2} - \frac{(-1)^{n'+n} - 1}{(n' + n)^2} \right\}$; $n, n' = 1, 2, \dots; n \neq n'$).

18. Найти оператор $\hat{F} = \cos \varphi$ (в полярных координатах) в энергетическом представлении по базису плоского ротатора. (Ответ: $\langle m' | \cos \varphi | m \rangle = \frac{1}{2} (\delta_{m', m+1} + \delta_{m', m-1})$ или $\langle m \pm 1 | \cos \varphi | m \rangle = \frac{1}{2}$.)

19. Найти энергетическое представление оператора x^2 по базису линейного гармонического осциллятора с массой m и частотой ω . (Ответ: $\langle n \pm 2 | x^2 | n \rangle = \frac{x_0^2}{2} \sqrt{(n+1 \pm 1)(n \pm 1)}$; $\langle n | x^2 | n \rangle = x_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)$; $n = 0, 1, \dots; x_0^2 = \hbar/m\omega$).

2.3 Теория представлений и наблюдаемые физические величины

Переход от одного представления к другому затрагивает вид волновых функций и операторов. Неизменными, однако, остаются следующие величины и соотношения:

- нормировка волновых функций;
- ортогональность волновых функций;
- коммутационные соотношения операторов (а, значит, соотношения неопределенностей и интегралы движения);
- собственные значения операторов.

Таким образом, вид представления не влияет на значения наблюдаемых характеристик исследуемой системы. Тем не менее, удачно выбранное представление позволяет значительно упростить решение задачи.

Пример 2.8. Найти волновые функции стационарных состояний одномерного движения частицы массы m в однородном поле $U(x) = -Fx$ ($F = \text{const}$).

Решение. В уравнении Шредингера

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - F\hat{x} \right) \Psi = E\Psi \quad (2.23)$$

оператор \hat{p} возводится в квадрат, а \hat{x} — в первую степень. Поэтому уравнение (2.23) в координатном представлении является уравнением второго порядка, а в импульсном — первого, следовательно, задачу удобно решать в импульсном представлении. Уравнение (2.23) при этом примет вид (см. табл. 2.1):

$$\left[\frac{p^2}{2m} - i\hbar F \frac{d}{dp} \right] \Psi_E(p) = E\Psi_E(p). \quad (2.24)$$

Поскольку в однородном поле движение всегда инфинитно, энергетический спектр непрерывен.

При заданной энергии E , используя метод разделения переменных, решение (2.24) (с точностью до произвольного постоянного множителя) можно выписать сразу:

$$\Psi_E(p) = C \exp \left\{ \frac{ip}{\hbar F} \left(E - \frac{p^2}{6m} \right) \right\}. \quad (2.25)$$

Для перехода к координатному представлению необходимо найти фурье-образ функции (2.25). После замены $p = z\sqrt[3]{2m\hbar F}$ с точностью до постоянного множителя получаем:

$$\begin{aligned} \psi(x) &\sim \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(p) \exp \left(\frac{i}{\hbar} px \right) dp = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -i \left[-\frac{p}{\hbar} \left(x + \frac{E}{F} \right) + \frac{p^3}{6m\hbar F} \right] \right\} dp \sim \\ &\sim \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -iz \left[\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(x + \frac{E}{F} \right) + \frac{z^3}{3} \right] \right\} dz \sim \Phi \left(-\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(x + \frac{E}{F} \right) \right), \end{aligned}$$

где $\Phi(\xi)$ – функция Эйри, имеющая интегральное представление

$$\Phi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos \left(z\xi + \frac{z^3}{3} \right) dz.$$

Таким образом, волновые функции движения в однородном поле в координатном представлении выражаются через специальную функцию — функцию Эйри. В импульсном же представлении решение уравнения Шредингера дается в элементарных функциях (2.25). Таким образом, в данной задаче импульсное представление оказывается предпочтительнее координатного.

Рекомендуем самостоятельно нормировать волновые функции $\Psi_E(p)$ “по шкале энергий”, т.е. найти нормировочный множитель C , исходя из условия $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{E'}^*(p) \Psi_E(p) dp = \delta(E' - E)$. \square

Пример 2.9. Найти собственную функцию оператора координаты в координатном представлении.

Решение. Необходимо решить следующее уравнение:

$$\mathbf{r} \Psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}' \Psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}),$$

где $\Psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r})$ есть собственная функция оператора координаты, соответствующая собственному значению \mathbf{r}' . Очевидно, что этому уравнению удовлетворяет единственное решение

$$\Psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

что согласуется с (2.5).

Спектр собственных значений непрерывен, набор собственных функций обладает свойствами ортонормированности и полноты:

$$\begin{aligned} \int \Psi_{\mathbf{r}'}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{r}''}(\mathbf{r}) d^3r &= \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') d^3r = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}''); \\ \int \Psi_{\mathbf{r}}^*(\mathbf{r}_1) \Psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}_2) d^3r &= \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \end{aligned}$$

Данную задачу можно решить и другим способом: собственные функции оператора координаты ищутся в импульсном представлении, а результат переводится в координатное представление. Предлагаем сделать это самостоятельно.

Пример 2.10. Найти импульсное представление сферических функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

Решение. Сферические функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ являются собственными функциями оператора $\hat{\mathbf{L}}^2$, соответствующие собственным значениям $\hbar^2 l(l+1)$, в координатном представлении:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (2.26)$$

Такому же уравнению (2.26) будут удовлетворять собственные функции и в импульсном представлении. Следует заметить, что собственные значения при этом не изменятся.

Сравним прежде всего вид декартовых компонент \hat{L}_i в различных представлениях.

В координатном представлении:

$$\hat{L}_i = \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} x_j \hat{p}_k = -i\hbar \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}.$$

В импульсном представлении (см. табл. 2.1):

$$\begin{aligned} \hat{L}_i &= \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j p_k = i\hbar \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial p_j} p_k = (\varepsilon_{ijj} = 0; \varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{ikj}) = \\ &= -i\hbar \sum_{jk} \varepsilon_{ikj} p_k \frac{\partial}{\partial p_j} = (j \rightleftharpoons k) = -i\hbar \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} p_j \frac{\partial}{\partial p_k}. \end{aligned}$$

Итак, в координатном и импульсном представлениях структура компонент \hat{L}_i идентична. Отметим далее, что $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ в любом представлении, и поэтому структура $\hat{\mathbf{L}}^2$ и в координатном, и в импульсном представлениях одинакова. Поэтому собственными функциями $\hat{\mathbf{L}}^2$ в импульсном представлении также являются сферические функции $Y_{lm}(\theta_{\mathbf{p}}, \varphi_{\mathbf{p}})$. Отличие от координатного представления состоит в том, что углы $\theta_{\mathbf{p}}$ и $\varphi_{\mathbf{p}}$ теперь задают направление \mathbf{p} , а не \mathbf{r} .

Заметим, что данную задачу можно было бы решить, вычислив лишь фурье-образ $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, однако в нашем случае этого делать не нужно. \square

Уравнение Шредингера $(\hat{H} - E)\Psi(\mathbf{r}) = 0$ в энергетическом представлении (за базис которого выбраны собственные функции некоторого гамильтониана \hat{H}_0 , отличного от \hat{H} , с собственными значениями $E_k^{(0)}$) имеет вид линейной системы уравнений относительно коэффициентов разложения по базису:

$$\sum_n \left\{ \left\langle E_{n'}^{(0)} \right| \hat{H} \left| E_n^{(0)} \right\rangle - \delta_{n'n} E \right\} C_{E_n^{(0)}} = 0.$$

Собственные значения энергии являются корнями характеристического уравнения

$$\det \left| \left\langle E_{n'}^{(0)} \right| \hat{H} \left| E_n^{(0)} \right\rangle - \delta_{n'n} E \right| = 0.$$

Уравнение Шредингера в импульсном представлении есть

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E \right) \Psi_E(\mathbf{p}) + \int \langle \mathbf{p} | U | \mathbf{p}' \rangle \Psi_E(\mathbf{p}') d^3 p' = 0,$$

где $\langle \mathbf{p} | U | \mathbf{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \mathbf{r} \right\} U(\mathbf{r}) d^3 r.$

В практических приложениях наиболее часто используется координатное представление. Это обусловлено тем, что энергия взаимодействия выражается функцией координат частиц и в координатном представлении совпадает с соответствующим оператором. Кинетическая энергия является простой функцией импульса. Поэтому ее оператор в координатном представлении также имеет простой вид. При исследовании систем, состоящих из слабо взаимодействующих частиц, часто применяется импульсное представление, а если используется теория возмущений, то энергетическое.

Задачи для самостоятельного решения

20. Линейный гармонический осциллятор (масса — m , частота — ω) находится в стационарном состоянии. Найти импульсное представление волновой функции. (Ответ: $c_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! p_0 \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$; $\xi = \frac{p}{p_0}$; $p_0^2 = m\hbar\omega$; $n = 0, 1, \dots$).

21. Система может находиться лишь в двух состояниях: Ψ_1 и Ψ_2 . Матричные элементы оператора \hat{H} известны: $H_{11} = a$; $H_{22} = d$; $H_{12} = b$; $H_{21} = c$. Найти собственные значения энергии. (Ответ: $E_{\pm} = \frac{1}{2}(a + d \pm \sqrt{(a - d)^2 + 4bc})$).

22*. Записать уравнение Шредингера с кулоновским потенциалом $U(\mathbf{r}) = \frac{\alpha}{r}$ в импульсном представлении.

(Ответ: $\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E \right) \Psi_E(\mathbf{p}) + \int \frac{4\pi\alpha}{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|^2} \Psi_E(\mathbf{p}') d^3 p' = 0.$)

Глава 3

Квазиклассическое приближение

3.1 Волновая функция в квазиклассическом приближении

Аналитическое решение стационарного уравнения Шредингера существует лишь для весьма ограниченного круга потенциалов (осцилляторный, кулоновский и некоторые другие). В большинстве же случаев требуется численное интегрирование соответствующего дифференциального уравнения. Однако, для сильно возбужденных состояний частицы, находящейся в потенциальной яме, когда волновая функция быстро осциллирует (вспомним вид волновых функций осциллятора и атома водорода с большими квантовыми числами; фактически об этом же говорится и в осцилляционной теореме), решение уравнения Шредингера все же может быть получено с достаточной точностью *в аналитической форме*, если использовать некоторые дополнительные предположения. Для достаточно высоких и широких потенциальных барьеров произвольной формы величина коэффициента прохождения также может быть найдена аналитически.

В данной ситуации следует несколько изменить сам подход к решению задачи. Прежде всего заметим, что сильно возбужденные системы по своим свойствам близки к классическим, поскольку в этом случае классическое действие по порядку величины значительно превосходит постоянную Планка \hbar , которую тогда можно рассматривать как малый параметр. Тем не менее, предельный переход $\hbar \rightarrow 0$ в самом уравнении Шредингера смысла не имеет. Он осуществляется посредством представления волновой функции в виде

$$\Psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$$

и разложением действия S в ряд по степеням \hbar/i . Данный метод носит название *квазиклассического приближения*, или метода *Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна* (ВКБ). В дальнейшем для простоты ограничимся рассмотрением одномерной задачи, т.к. для нее данный метод разработан наиболее полно.

Волновая функция частицы с заданной энергией E в поле $U(x)$ с точностью до членов порядка \hbar/i будет иметь вид

$$\Psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'}, \quad E > U(x); \quad (3.1)$$

$$\Psi(x) = \frac{C'_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^x |p(x')| dx'} + \frac{C'_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int^x |p(x')| dx'}, \quad E < U(x), \quad (3.2)$$

где

$$p(x) = \sqrt{2\mu(E - U(x))} - \quad (3.3)$$

*классический импульс*¹ частицы; μ — масса частицы; C_1, C_2, C'_1, C'_2 — подлежащие определению произвольные константы. Из-за специфической структуры функции (3.1) данный метод иногда называют методом *фазовых интегралов*. Главное его преимущество состоит в том, что для нахождения волновых функций не требуется численное интегрирование уравнения Шредингера, дающее основную погрешность в результаты расчетов. При этом функции могут быть получены аналитически для достаточно широкого класса потенциалов.

Условием применимости данного метода является

$$p^2 \gg \hbar \left| \frac{dp}{dx} \right|, \quad \lambda \frac{1}{k} \left| \frac{dk}{dx} \right| \ll 1, \quad (3.4)$$

где $p = p(x)$, $k = k(x) = p(x)/\hbar$, $\lambda = 2\pi/k$ — де-бройлевская длина волны.

Условиям (3.4) можно придать и другую эквивалентную формулировку:

$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad (3.5)$$

т.е. относительное изменение волнового числа на протяжении де-бройлевской длинны волны должно быть мало по сравнению с единицей. Производную $d\lambda/dx$ можно оценить по порядку величины как λ/d , где d — характерный размер области движения, поэтому неравенство (3.5) сводится к условию $\lambda \ll d$.

Пример 3.1. *Какому условию должна удовлетворять потенциальная энергия $U(x)$ для применимости квазиклассического приближения?*

¹Это функция координат, и ее нельзя путать с оператором импульса.

Решение. Подставляя (3.3) в (3.4) и опуская несущественные для (3.4) безразмерные множители порядка единицы, получаем:

$$\left| \frac{dU}{dx} \right| \ll \frac{|p|^3}{\mu \hbar}, \quad (3.6)$$

откуда следует, что ВКБ-приближение применимо в случае движения с достаточно большими импульсами, причем классическая сила $F = |dU/dx|$, действующая на частицу, должна быть не очень большой. Другими словами, потенциальная энергия должна изменяться достаточно мало на протяжении де-бройлевской длины волны. \square

Из условия применимости квазиклассического приближения (3.4) следует, что экспоненты, фигурирующие в (3.1), (3.2), являются быстро меняющимися функциями координат, в то время как предэкспоненциальные множители изменяются медленно. Поэтому *при дифференцировании функции $\Psi(x)$ предэкспоненциальные множители можно рассматривать как константы.*

Характер полученной волновой функции существенно зависит от знака разности $E - U(x)$. В так называемой *классически доступной* области, где $E > U(x)$, импульс является вещественным. При этом волновая функция осциллирует. Совершенно иная ситуация наблюдается в *классически недоступной* области, где $E < U(x)$. Здесь импульс становится мнимым, а волновая функция имеет вид суперпозиции двух экспонент. На рис. 3.1 (частица с энергией E находится в потенциальной яме) область II ($a < x < b$) является классически доступной, а области I и III ($x < a$, $x > b$) — классически недоступными.

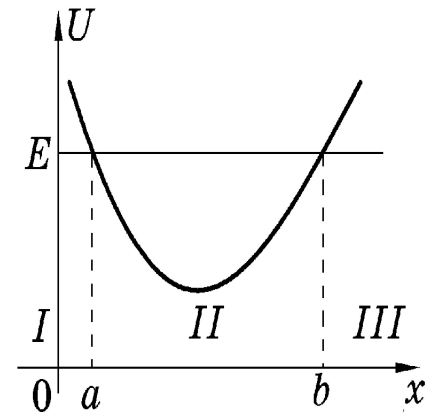


Рис. 3.1:

с энергией E находится в потенциальной яме) область II ($a < x < b$) является классически доступной, а области I и III ($x < a$, $x > b$) — классически недоступными.

Границы классически доступной области называются *классическими точками поворота*. Их координаты определяются из решения уравнения

$$U(x) = E. \quad (3.7)$$

Точка поворота называется *левой (правой)*, если классически доступная область находится *справа (слева)* от нее. На рис. 3.1 точка a является левой, а точка b — правой классическими точками поворота.

Практическое использование квазиклассических волновых функций возможно лишь в том случае, когда известна связь осциллирующего ре-

шения (3.1) с экспоненциальным (3.2) при переходе через точки поворота, т.е. связь между константами C_1, C_2, C'_1, C'_2 . Однако для правильной точки поворота обычная процедура сшивания функций, заключающаяся в приравнивании их логарифмических производных в соседних областях, является незаконной, поскольку в окрестности этой точки условия применимости квазиклассического приближения (3.4)–(3.6) *не выполняются* ($p = 0$). В этом случае используют так называемые *формулы сопряжения*.

Для частицы с энергией E , находящейся в потенциальной яме (дискретный спектр), волновая функция должна убывать при $x \rightarrow \pm\infty$ (рис. 3.1, области I, III). При этом связь экспоненциально убывающего решения в классически недоступной области с решением в классически разрешенной области движения определяется следующей формулой сопряжения:

$$\frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x |p(x')| dx' \right| \right) \rightarrow \frac{2C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.8)$$

$U(x) > E$
 $U(x) < E$

Формула сопряжения (3.8) записана в виде, не зависящем от того, с какой стороны от точки поворота (точка a) лежит классически недоступная область движения. Так, она применима непосредственно как к левой точке поворота a , так и к правой точке поворота b (рис. 3.1) с соответствующей заменой $a \rightarrow b$ и $\frac{\pi}{4} \rightarrow -\frac{\pi}{4}$. При этом следует помнить о том, что при углублении в классически недоступную область волновая функция должна экспоненциально затухать.

3.2 Правило квантования Бора–Зоммерфельда

С помощью формул сопряжения можно получить условие, определяющее в ВКБ-приближении положение энергетических уровней дискретного спектра (правило квантования Бора–Зоммерфельда).

Пример 3.2. *Получить правило квантования Бора–Зоммерфельда для случая движения частицы в поле, изображенном на рис. 3.1.*

Решение. Поскольку обе точки поворота являются правильными, запишем волновую функцию в классически доступной области возле каждой

из этих точек, пользуясь формулой сопряжения (3.8):

$$\Psi_a(x) = \frac{C_a}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right), \quad (3.9)$$

$$\Psi_b(x) = \frac{C_b}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), \quad (3.10)$$

где C_a и C_b — произвольные константы.

В любой точке x классически доступной области ($a < x < b$), достаточно удаленной от точек поворота, функции $\Psi_a(x)$ и $\Psi_b(x)$ должны переходить друг в друга, т.е. необходимо приравнять их логарифмические производные. Помня о том, что множители перед косинусами *можно рассматривать как константы*, после несложных преобразований получаем:

$$\operatorname{tg}\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) = \operatorname{tg}\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right). \quad (3.11)$$

Для тождественного выполнения равенства (3.11) аргументы тангенсов должны различаться на целое число π :

$$\int_a^b p(x) dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (3.12)$$

Отрицательные значения n исключены из-за того, что в классически разрешенной области, как можно видеть из (3.3), $p(x) > 0$.

Выражение (3.12) является правилом квантования энергетических уровней в 1-мерной потенциальной яме. Координаты пределов интегрирования a и b (точек поворота) — функции энергии E , которые задаются неявно уравнением (3.7). Классический импульс $p(x)$ также зависит от энергии, как от параметра (см. (3.3)). Поэтому выражение (3.12) представляет собой в общем случае трансцендентное уравнение относительно энергии E с целым неотрицательным параметром n . Очевидно, что решение этого уравнения определяется величиной n и дает значение энергии n -го возбужденного состояния. Можно также показать, что при этом выполняется осцилляционная теорема: волновая функция n -го возбужденного состояния внутри потенциальной ямы обращается в нуль ровно n раз. \square

Фактически правило квантования (3.12) применимо при больших значениях n . Действительно,

$$n \sim \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = \int_a^b \frac{dx}{\lambda} \sim \frac{d}{\lambda} \gg 1,$$

т.к. в квазиклассическом приближении де-бройлевская длина волны значительно меньше размеров области движения.

Пример 3.3. *Используя правило квантования Бора–Зоммерфельда, получить для линейного гармонического осциллятора с массой μ и частотой ω энергетический спектр.*

Решение. Как известно, потенциальная энергия осциллятора

$$U(x) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2.$$

Поэтому, используя (3.3) и (3.7), записываем в явном виде классический импульс и координаты точек поворота при заданной полной энергии E :

$$p(x) = \sqrt{2\mu \left(E - \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \right)}; \quad (3.13)$$

$$b = \sqrt{\frac{2E}{\mu \omega^2}}, \quad a = -b. \quad (3.14)$$

Фазовый интеграл в левой части (3.12) вычисляется с подынтегральной функцией (3.13) и пределами интегрирования (3.14). Учитывая четность

$p(x)$ и делая замену $\sqrt{\frac{\mu \omega^2}{2E}} x = \sin v$, имеем:

$$J = \int_a^b p(x) dx = \sqrt{8\mu E} \int_0^b \sqrt{1 - \frac{\mu \omega^2}{2E} x^2} dx = \frac{4E}{\omega} \int_0^{\pi/2} \cos^2 v dv = \frac{\pi E}{\omega}.$$

Приравнявая вычисленный интеграл $\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$, получаем энергетический спектр осциллятора в ВКБ-приближении:

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

Интересно, что в данном частном случае результат оказывается точным, хотя фактически правило квантования Бора–Зоммерфельда справедливо лишь для высоковозбужденных уровней ($n \gg 1$). \square

Пример 3.4. *Получить правило квантования Бора–Зоммерфельда для случая, когда движение с одной стороны ограничено непроницаемой стенкой.*

Решение. Пусть для определенности частица не может проникать в область $x > b$, т.е. $U(x) = \infty$ при $x > b$ (см. рис. 3.3), и здесь волновая функция $\Psi(x) \equiv 0$. Она также должна обратиться в нуль и на границе при $x = b$ (стандартные условия требуют непрерывности волновой функции):

$$\Psi(b) = 0. \quad (3.15)$$

Правило квантования в форме (3.12) не учитывает граничного условия (3.15), поскольку при его выводе предполагалось, что волновая функция должна экспоненциально затухать в области $x > b$.

Чтобы обобщить правило квантования, воспользуемся формулой сопряжения (3.9) для точки поворота a . Для точки поворота b формула сопряжения (3.10) неприменима, поскольку в классически разрешенной области при достаточно высокой энергии движение квазиклассично всюду вплоть до точки b . Потребуем для функции (3.9) выполнения граничного условия (3.15), т.е., полагая $x = b$, приравняем аргумент косинуса величине $\frac{\pi}{2} + \pi n$ (n — целое). В результате получим правило квантования при наличии непроницаемой стенки:

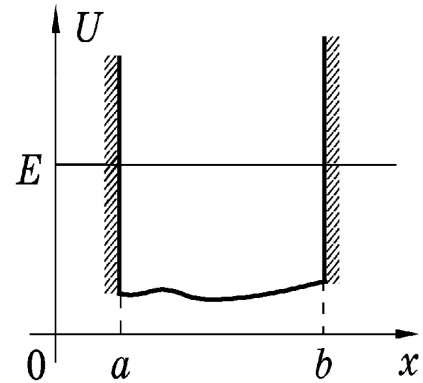


Рис. 3.3:

$$\int_a^b p(x) dx = \pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right), \quad n = 0, 1, \dots$$

(как и ранее, начало отсчета n выбрано с учетом положительной определенности $p(x)$ в классически доступной области).

Таким же будет результат и при наличии стенки в точке a (при этом точка b является правильной). В обоих случаях выполняется осцилляционная теорема. Рекомендуем самостоятельно проверить данные утверждения. \square

Заметим, что, хотя метод ВКБ и использует малость параметра \hbar , в его рамках формальным предельным переходом $\hbar \rightarrow 0$ уравнение Шредингера не сводится к уравнениям классической механики (например, к уравнениям Гамильтона), подобно тому, как нерелятивистские уравнения механики получаются из релятивистских формальным переходом к пределу $c \rightarrow \infty$ (c — скорость света). Здесь требуются иные подходы и специальный математический аппарат.

Задачи для самостоятельного решения

23. В квазиклассическом приближении определить положение энергетических уровней частицы с массой μ , совершающей одномерное движение в поле $U(x) = F|x|$ (параметр $F > 0$). (Ответ: $E_n =$

$$\frac{1}{2\mu^{1/3}} \left[\frac{3}{2} F \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{2/3}, \quad n = 0, 1, \dots)$$

24. Частица массы μ вертикально падает на горизонтальную пластину и упруго отражается от нее. С квазиклассической точностью определить уровни энергии и допустимые максимальные высоты.

(Ответ: $E_n = \frac{1}{2}(9g^2\mu)^{1/3} \left[\pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right) \right]^{2/3}$, $h_n^{(\max)} = \frac{E_n}{\mu g}$, $n = 0, 1, \dots$, где g — ускорение свободного падения.)

25. Обобщить правило квантования Бора–Зоммерфельда для случая, когда движение с двух сторон ограничено непроницаемыми стенками в точках a и b ($a < b$, см. рис. 3.3). В качестве примера рассмотреть движение частицы в потенциальной яме ширины L с бесконечно высокими стенками и плоским дном:

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

Сравнить результат квазиклассического расчета энергетического спектра с точным.

Указание: воспользоваться формулой (3.1).

$$(Ответ: \int_a^b p(x) dx = \pi \hbar n, \quad n = 1, 2, \dots \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2}.)$$

26*. Определить в квазиклассическом приближении уровни энергии частицы массы μ в модифицированной потенциальной яме Пешля–Теллера:

$$U(x) = -\frac{U_0}{\operatorname{ch}^2 \frac{x}{\alpha}}, \quad U_0 > 0,$$

где $U_0 > 0$ и $\alpha > 0$ — параметры. Сравнить квазиклассический результат с точным.

Указание: При вычислении интеграла использовать метод дифференцирования по параметру E .

$$(\text{Ответ: } E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu\alpha^2} \left[\sqrt{\frac{2\mu\alpha^2 U_0}{\hbar^2}} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2, \quad n = 0, 1, \dots)$$

3.3 Квазиклассическое прохождение через потенциальный барьер

На рис. 3.4 показан потенциальный барьер. В отличие от ямы, здесь классически доступными являются области I ($x < a$) и III ($x > b$), где решение уравнения Шредингера осциллирует. В классически недоступной области II ($a < x < b$) решение содержит экспоненциально растущую и экспоненциально убывающую компоненты. Для коэффициента прохождения частиц с заданной энергией $0 < E < U_m$ через потенциальный барьер $U(x)$ в квазиклассическом приближении получается также достаточно простая формула, не требующая решения уравнения Шредингера:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\}. \quad (3.16)$$

Конкретное выражение для множителя D_0 зависит от вида потенциальной энергии, характера точек поворота и является медленно меняющейся функцией энергии E . Экспоненциальный же множитель, наоборот, является быстро меняющейся функцией энергии, и во всех задачах данного раздела требуется рассчитать именно его множитель. Условие применимости ВКБ-приближения (3.6) существенно требует подбарьерного значения энергии частиц ($E < U_0$) и достаточно большой ширины барьера. В этом случае коэффициент прохождения будет мал ($D \ll 1$).

Пример 3.5. Найти в квазиклассическом приближении (с точностью до экспоненциального множителя) коэффициент прохождения частицы

с массой μ и энергией E через потенциальный барьер $U(x) = U_0 e^{-|x|/x_0}$, где $U_0 > 0$ и $x_0 > 0$ — параметры.

Решение. Вычислим интеграл в показателе экспоненты в формуле для коэффициента прохождения (3.16). С учетом четности подынтегральной функции и кусочно-гладкого поведения потенциала получаем:

$$J \equiv \int_a^b |p(x)| dx = 2\sqrt{2\mu E} \int_0^b \sqrt{\frac{U_0}{E} e^{-x/x_0} - 1} dx,$$

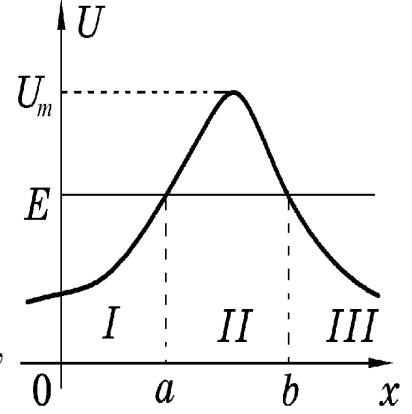


Рис. 3.4:

где a и b — точки поворота; $b = x_0 \ln \frac{U_0}{E}$,
 $a = -b$. Интеграл вычисляется посредством замены переменной:

$$\sqrt{\frac{U_0}{E} e^{-x/x_0} - 1} = y, \quad dx = -\frac{2yx_0}{y^2 + 1} dy;$$

$$\begin{aligned} J &= 4x_0 \sqrt{2\mu E} \int_0^{\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1}} \frac{y^2 dy}{y^2 + 1} = 4x_0 \sqrt{2\mu E} \int_0^{\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1}} \left(1 - \frac{1}{1 + y^2}\right) dy = \\ &= 4x_0 \sqrt{2\mu E} \left(\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} - \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} \right). \end{aligned}$$

При замене пределов интегрирования учтено, что $y(b) = 0$. Коэффициент прохождения через барьер определяется по формуле (3.16):

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{8x_0 \sqrt{2\mu E}}{\hbar} \left(\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} - \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} \right) \right\}.$$

Данная формула применима при $U_0 \gg E$. □

Задачи для самостоятельного решения

27. Найти в квазиклассическом приближении коэффициент прохождения частицы массы μ через прямоугольный потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} U_0 > 0, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x < 0, x > a. \end{cases}$$

Квазиклассический результат сравнить с точным.

(Ответ: $D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2\mu(U_0 - E)} \right\}$.)

28. Найти в квазиклассическом приближении коэффициент прохождения частицы массы μ через параболический барьер

$$U(x) = \begin{cases} U_0 \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right), & |x| \leq a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

(Ответ: $D = D_0 \exp \left\{ -\frac{\pi a}{\hbar} (U_0 - E) \sqrt{\frac{2\mu}{U_0}} \right\}$.)

29. Найти в квазиклассическом приближении коэффициент прохождения частицы массы μ через потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} F(a - |x|), & |x| \leq a, F > 0, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

(F и a — параметры).

(Ответ: $D = D_0 \exp \left\{ -\frac{8\sqrt{2\mu}}{3\hbar F} (Fa - E)^{3/2} \right\}$.)

30. Холодное вырывание электронов с поверхности металла электростатическим полем можно интерпретировать следующим образом. В отсутствии поля электроны находятся в потенциале, имеющем “ступеньку” на поверхности металла (рис. 3.5а). Они по понятным причинам не могут уйти с поверхности проводника. Однако, при наложении внешнего электростатического поля напряженности \mathcal{E} потенциальная энергия вне проводника приобретает “скос”. Если поле направлено по нормали к поверхности проводника, то образуется потенциальный барьер (рис. 3.5б):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0 - e\mathcal{E}x, & x > 0, \end{cases}$$

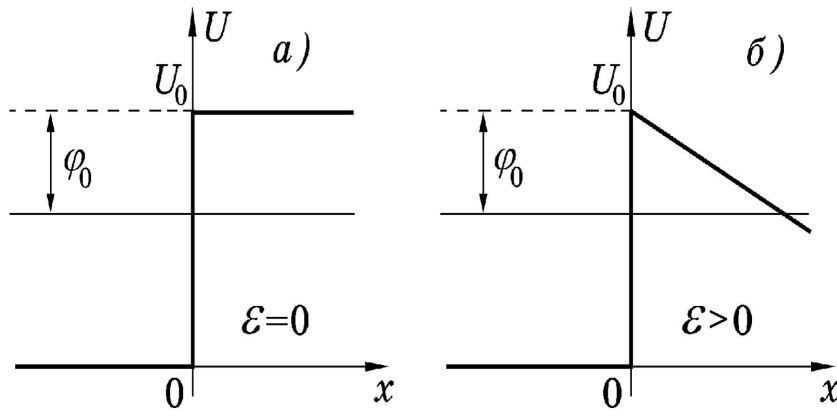


Рис. 3.5:

где U_0 — высота “ступеньки”, e — заряд электрона. Электрон, имея работу выхода $e\varphi_0$, туннелирует через этот барьер. Найти в квазиклассическом приближении вероятность вырывания электрона. Записать условие применимости квазиклассики.

(Ответ: $D = D_0 \exp \left\{ -\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2\mu e \varphi_0^3}}{\hbar \mathcal{E}} \right\}$; $\mathcal{E} \ll \frac{\sqrt{\mu e \varphi_0^3}}{\hbar}$.)

31. При α -распаде, согласно теории Гамова, α -частица туннелирует через потенциальный барьер

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, U_0 > 0, \\ 2e^2 Z/r, & r \geq R, \end{cases}$$

где U_0 и R — глубина и радиус потенциальной ямы (рис. 3.6), Ze — заряд дочернего ядра. Этот барьер образован силами ядерного притяжения при $r < R$ и кулоновского отталкивания при $r \geq R$. В квазиклассическом приближении найти вероятность вылета α -частицы в s -состоянии с энергией $E > 0$ из ядра. Записать условие применимости квазиклассики.

(Ответ:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{Ze^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2\mu}{E}} \left[\arctg \Phi + \frac{ER}{2Ze^2} \left(1 - \frac{ER}{Ze^2} \right) \Phi \right] \right\},$$

где $\Phi = \sqrt{\frac{2Ze^2}{ER} - 1}$, μ — масса α -частицы;

$$\left(\frac{\hbar^2 Z^2 e^4}{R^4 \mu} \right)^{1/3} \ll \left(\frac{2Ze^2}{R} - E \right).$$

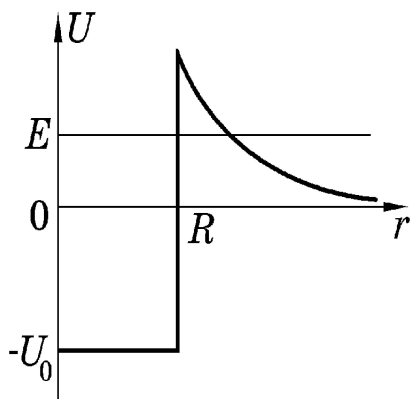


Рис. 3.6:

32. Найти в квазиклассическом приближении коэффициент прохождения частицы массы μ через потенциальный барьер

$$U(x) = \frac{U_0}{\operatorname{ch}^2 \frac{x}{a}}, \quad U_0 > 0$$

(U_0 и a — параметры). Сравнить квазиклассический результат с точным.

(*Ответ:* $D = D_0 \exp \left\{ -\frac{\sqrt{8\mu a^2 E}}{\hbar} \left(\sqrt{\frac{U_0}{E}} - 1 \right) \right\}$.)

Литература

1. Давыдов А.С. Квантовая механика. — М.: Наука, 1973. — 704 с.
2. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. — М.: Высшая школа, 1963. — 620 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. — М.: Наука, 1989. — Т.III: Квантовая механика. — 768 с.
4. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики. — М.: Наука, 1971. — Т.II. — 936 с.
5. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. — М.: Мир, 1974. — Т.1. — 342 с.
6. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. — М.: Наука, 1981. — 648 с.
7. Сборник задач по теоретической физике / Л.Г. Гречко, В.И. Сугаков, О.Ф. Томасевич и др. — М.: Высшая школа, 1972. — 336 с.

Редактор **Кузнецова З.Е.**