МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

В. І. Висоцький
М. В. Максюта
І. О. Ястремський

ЗБІРНИК ЗАДАЧ ІЗ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
(версія PS для друку)

Навчальний посібник

КИЇВСЬКИЙ УНІВЕРСИТЕТ 2019

УДК 530.145(075.8)
В53

Рецензенти:

д-р фіз.-мат. наук, проф. В. А. Львов,
канд. фіз.-мат. наук, доц. В. М. Хотяїнцев

Рекомендовано до друку вченою радою факультету радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем (протокол № 3 від 17 жовтня 2017 року)

Ухвалено науково-методичною радою Київського національного університету імені Тараса Шевченка (протокол № 5-18/19 н. р. від 27 березня 2019 року)

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
(Версія не для друку)

Висоцький В. І.

В53 Збірник задач із квантової механіки : навч. посіб. / В. І. Висоцький, М. В. Максюта, І. О. Ястремський. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2019. – 287 с.

ISBN 978-966-439-992-7

У збірнику наведено задачі з відповідних розділів дисципліни "Квантова механіка", починаючи від задач про різні операторні співвідношення і закінчуючи задачами про спіновий формалізм. Задачам передують короткі теоретичні відомості щодо основних законів і співвідношень, які необхідні для їхнього розв'язання. Усі нескладні задачі супроводжуються вказівками чи відповідями, а до задач підвищеної складності наведено детальне розв'язання.

Для студентів, аспірантів і викладачів фізичних спеціальностей університетів.

УДК 530.145(075.8)

ISBN 978-966-439-992-7

© Висоцький В. І., Максюта М. В., Ястремський І. О., 2019
© Київський національний університет імені Тараса Шевченка, ВПЦ "Київський університет", 2019

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА 5
Розділ 1. ОПЕРАТОРИ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ 9
Короткі теоретичні відомості 9
1.1. Особливості дії операторів, обчислення комутаторів операторів, відшукання ермітово-спряжених операторів 15
1.2. Власні функції та власні значення найпростіших операторів 28
1.3. Середні величини і струм імовірності 32
1.4. Диференціювання операторів 39
1.5. Теорія представлень операторів 46
Розділ 2. ОДНОВИМІРНИЙ РУХ 61
Короткі теоретичні відомості 61
2.1. Рух частинок у простих одновимірних потенціальних полях 66
2.2. Рух частинок у складних одновимірних потенціалах 79
2.3. Характеристики і стани неперервного спектра. Проходження крізь потенціальні бар'єри 99
2.4 Функція Гріна рівняння Шредінгера. Інтегральна форма рівняння Шредінгера 113
2.5. Частинки в періодичних потенціалах 121
Розділ 3. РУХ У ДВОВИМІРНИХ І ТРИВИМІРНИХ СИСТЕМАХ 131
Короткі теоретичні відомості 131
3.1. Системи з декількома ступенями вільності, що зводяться до одновимірного руху 137

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

3.2. Момент кількості руху 141
3.3. Рух частинок у сферично-симетричних потенціалах 152
3.4. Системи з аксіальною симетрією 166
3.5. Імовірності, середні величини, струми в системах із центральною симетрією 173
Розділ 4. НАБЛИЖЕНІ МЕТОДИ 184
Короткі теоретичні відомості 184
4.1. Метод квазікласичного наближення 190
4.2. Прямий варіаційний метод Рітца 201
4.3. Стаціонарна теорія збурень без виродження 207
4.4. Стаціонарна теорія збурень за наявності виродження 217
4.5. Нестаціонарна теорія збурень. Раптові збурення. Адіабатичні збурення 227
Розділ 5. РУХ ЧАСТИНОК В ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ПОЛЯХ. СПІН 241
Короткі теоретичні відомості 241
5.1. Рух заряджених частинок у постійних електричних і магнітних полях без урахування спіну 248
5.2. Векторні, комутаційні та ймовірнісні задачі з операторами спіну 267
5.3. Власні функції і власні значення операторів спіну 274
5.4. Вищі спіни. Системи тотожних частинок 279
5.5. Рух частинок у постійних і змінних магнітних полях з урахуванням спіну 283
ЛІТЕРАТУРА 287

Видавничо-поліграфічний центр Київського університету імені Бориса Грінченка

ПЕРЕДМОВА

Навчальний посібник "Збірник задач із квантової механіки" містить 300 задач різних рівнів складності. При цьому нескладні задачі супроводжуються відповідями чи вказівками, а до задач підвищеної складності наведено детальне розв'язання (у багатьох випадках ілюстроване рисунками). Це допоможе студентам самостійно поглиблювати свої навички в розв'язуванні задач з курсу навчальної дисципліни "Квантова механіка" і краще засвоювати теоретичний матеріал. Задачник може бути корисним також аспірантам, які можуть звертатися до нього як до довідника, та викладачам при підборі задач до семінарських занять.

Збірник задач побудований таким чином, щоб при розв'язуванні кожної задачі пояснення мало б максимально замкнену форму (автори навіть відмовились від посилань у межах окремих задач, використовуючи замість цього стиль додаткових повторень необхідних формул, рівнянь, перетворень тощо). Окрім того, відповіді, вказівки, а також детальні розв'язування задач у збірнику, наводяться одразу ж після формулювання умов задач, що, на думку авторів, спрощує самостійну роботу студентам. Таке оформлення задач буде більш зручним і викладачам при підготовці до семінарських занять та на заняттях при пояснюванні розв'язання задач.

Усі задачі в задачнику розподілені по п'яти розділах, кожному з яких передують короткі теоретичні відомості, які містять усі необхідні формули і співвідношення, що використовуються в задачах.

У першому розділі розглядаються властивості операторів та їхня дія на хвильові функції. Наведено відповідні задачі на послідовну дію різних операторів, на розрахунок комутаторів операторів, на обчислення ермітово-спряжених операторів, на доведення різних операторних тотожностей, включаючи визначення комутаторів операторів знищення та народження. Також розглядаються лінійні інтегральні оператори, а для деяких конкретних операторів визначаються їхні ядра.

На деяких прикладах задач на визначення власних значень і відповідних їм власних функцій для найпростіших операторів роз'яснено процедуру нормування власних функцій. Наведено задачі на обчислення середніх величин різних операторів, їх середньоквадратичних відхилень, на перевірку співвідношення невизначеностей Гейзенберга на основі обчислення дисперсій для координати та імпульсу, на розрахунок густини струму ймовірності тощо. Показано, що рівняння Ньютона справедливе і в квантовій механіці. Далі наведено задачі на диференціювання операторів, розглядаються інтеграли руху. Сформульовано теорему про те, що середнє значення від похідної ермітового оператора за деяким параметром λ дорівнює похідній від середнього значення цього оператора за λ (ця теорема доводиться для оператора Гамільтона). І нарешті, розглянуто задачі з теорії представлень операторів. У них обчислюються хвильові функції та оператори в різних представленнях (напр., в імпульсному представленні, енергетичному тощо); встановлюються співвідношення між ядрами одного й того самого оператора в координатному та імпульсному представленнях і т. д.

Другий розділ присвячений вивченню руху заряджених частинок в одновимірних квантових системах. Зокрема, розглянуто задачі на розв'язування рівняння Шредінгера в простих одновимірних потенціальних полях. При цьому на рисунках багатьох задач зображено потенціальні ями, а також проілюстровано процедури графічного розв'язування трансцендентних дисперсійних рівнянь, що виникають, для відшукання власних значень. При вивченні руху частинок у складних одновимірних потенціальних ямах та в результаті ряду перетворень рівняння Шредінгера зводиться або до диференціальних рівнянь для відомих спеціальних функцій (напр., для функцій Ейрі, Бесселя, гіпергеометричних функцій тощо), після чого легко приходимо до спектральних значень, або до диференціальних рівнянь, які далі розв'язуються за методом степеневих рядів, у результаті чого приходимо до відповідних рекурентних рівностей для одержання власних значень. Багато задач проілюстровано наочними рисунками із зображенням потенціальних ям, енергетичних рівнів і хвильових функцій.

Розглянуто також задачі на проходження частинок крізь різні потенціальні бар'єри, на відбиття від потенціальних стінок, на визначення функцій Гріна рівняння Шредінгера при вільному русі заряджених частинок, а також у простих потенціальних ямах. Окрім того, наведено задачі для визначення хвильових функцій з використанням інтегральної форми рівняння Шредінгера та розв'язання цього рівняння в періодичних потенціалах.

У третьому розділі вивчається рух частинок у двовимірних і тривимірних системах. Зокрема, підрозд. 3.1 містить декілька задач із кількома ступенями вільності, що зводяться до одновимірних задач. Далі розглядаються задачі на момент кількості руху, у яких доводяться різні операторні співвідношення, обчислюються операторні вирази у сферичній системі координат, розглядаються задачі на власні значення та власні функції, на відшукання середніх значень. Підрозд. 3.3 присвячено руху частинок у сферично-симетричних потенціальних ямах, у ньому окрім традиційних задач зі степеневими центральними потенціалами, також розглядаються потенціальні поля Вуда–Саксона, Хюльтена, тривимірна дельта-яма тощо. У збірнику розглянуто і задачі: на аксіальну симетрію, на визначення функцій Гріна вільної частинки, на розрахунок імовірностей перебування електронів у різних квантових станах в атомі водню, на розрахунок середніх значень координатних та імпульсних функцій, на знаходження найбільш імовірних відстаней тощо.

У четвертому розділі вивчаються наближені методи, зокрема, розглянуто задачі на метод квазікласичного наближення (метод Вентцеля–Крамерса–Бріллюена), у яких за використання умови Бора–Зоммерфельда виконуються розрахунки ВКБ-спектрів у різних одновимірних потенціальних ямах. Одну із задач присвячено визначенню енергетичних рівнів частинки в кулонівському полі із застосуванням методу ВКБ до радіального хвильового рівняння. За допомогою цього наближення обчислюються також коефіцієнти проходження частинок крізь потенціальні бар'єри.

Наведено задачі на прямий варіаційний метод Рітца, у яких в основному визначаються енергії основних станів, використовую-

чи вдало підібрані пробні хвильові функції. Розглянуто також задачі на використання стаціонарної теорії збурень без виродження для наближених розрахунків спектральних рівнів і відповідних їм наближених хвильових функцій. У підрозд. 4.4 наведено задачі зі стаціонарної теорії збурень за наявності виродження. Наприклад, в одній із задач розглянуто розщеплення енергетичних рівнів під дією електричного поля (ефект Штарка). І нарешті, підрозд. 4.5 містить задачі з нестаціонарної теорії збурень (напр., задача на фотоефект) і задачі на раптові та адіабатичні збурення.

П'ятий розділ присвячено вивченню руху заряджених частинок в електромагнітних полях без урахування спіну і за його наявності. Окрім того, у цьому розділі розглянуто достатню кількість "спінових" задач. Наприклад, це векторні, комутаційні та ймовірнісні задачі з операторами спіну, які можна виразити через матриці Паулі, та задачі на власні значення і власні функції операторів спіну (зокрема, на відшукання власних значень і власних функцій (спінорів) для матриць Паулі). Наведено також задачі на вищі спіни і задачі для систем тотожних частинок (напр., для систем ферміонів, для яких виконується так званий принцип Паулі, а також для систем бозонів, у яких спостерігається так звана бозе-конденсація). Одну із задач присвячено обмінній взаємодії.

Послідовність задач, їхній аналіз і конкретна тематика задач повністю узгоджуються з матеріалом курсу лекцій із дисципліни "Квантова механіка", що викладається на факультеті радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем і дуже близький до аналогічного курсу, який викладається бакалаврам фізичного факультету.

Таким чином, навчальний посібник "Збірник задач із квантової механіки", у якому зібрана велика кількість задач з різних розділів нерелятивістської квантової механіки, може бути корисним доповненням до тих збірників задач із даної дисципліни, на які посилаються автори.

Розділ 1

ОПЕРАТОРИ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

Короткі теоретичні відомості

1. Будь-якому матеріальному об'єкту, який вільно рухається і характеризується енергією $E = \hbar\omega$ та імпульсом $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, ставиться у відповідність плоска хвиля де Бройля

$$\psi(\vec{r},t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left[i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar \right].$$

В одновимірному випадку вона має вигляд

$$\psi(x,t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp\left[i(p_x x - Et)/\hbar \right].$$

Хвилі де Бройля в необмеженому просторі нормовані на δ-функції. У гільбертовому просторі існують неперервні регулярні хвильові функції $\psi(\vec{r},t)$, які нормуються на одиницю, тобто $\int |\psi(\vec{r},t)|^2 d\tau = 1$. Тут діють також і лінійні оператори, що узгоджується з принципами квантової механіки і, зокрема, із принципом суперпозиції $\hat{L}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = C_1\hat{L}(\psi_1) + C_2\hat{L}(\psi_2)$, де C_1 і C_2 – довільні комплексні числа.

Над операторами можна виконувати певні дії: додавати, віднімати, множити тощо. Наприклад, добуток операторів $\hat{L}\hat{M}$ позначає оператор, який проявляється в послідовній дії оператора $\hat{M}$ на ψ, а потім оператора $\hat{L}$ на функцію $\varphi = \hat{M}\psi$. У загальному випадку в добутку операторів суттєвим є їхній порядок: $\hat{L}\hat{M}\psi \neq \hat{M}\hat{L}\psi$, тобто множення операторів не комутативне. Оператор $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ називається *комутатором операторів*

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
імені Бориса Грінченка

$\hat{A}$ і $\hat{B}$. Якщо добуток операторів не залежить від їхнього порядку $\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0\right)$, то оператори називаються *комутативними*.

Оператори можна представляти також в інтегральній формі $\hat{L}\psi=\int_{-\infty}^{\infty}L(x,\xi)\psi(\xi)d\xi$, де $L(x,\xi)$ – ядро інтегрального оператора. Ядро оператора $\hat{N}$ добутку інтегральних операторів $\hat{M}\hat{L}$, якщо воно існує, записується у вигляді

$$N(x,\xi)=\int_{-\infty}^{\infty}M(x,y)L(y,\xi)dy\,.$$

У гільбертовому просторі для хвильових функцій можна використовувати позначення Дірака: кет-вектори $|\psi\rangle$ і бра-вектори $\langle\psi|$, які тотожно дорівнюють $|\psi\rangle^{+}$. Добуток $\langle f|g\rangle=\int f^{*}(q)g(q)dq$ за визначенням є числом. Добуток $|f\rangle\langle g|$ є оператором, який вектору $|\psi\rangle$ ставить у відповідність вектор $|f\rangle\langle g|\psi\rangle=\left(\langle g|\psi\rangle\right)|f\rangle$.

Число $\left\langle f\left|\hat{L}\right|g\right\rangle=\int f^{*}(q)\hat{L}g(q)dq$ називається *матричним елементом оператора* $\hat{L}$. Якщо для довільних функцій ψ і φ виконується співвідношення $\left\langle\psi\left|\hat{L}\right|\varphi\right\rangle=\left(\left\langle\varphi\left|\hat{L}^{+}\right|\psi\right\rangle\right)^{*}$, то оператор $\hat{L}^{+}$ називається *спряженим оператору* $\hat{L}$. Якщо оператор $\hat{L}$ збігається зі своїм спряженим оператором $\hat{L}^{+}$, то він називається *ермітовим* (або *самоспряженим*). Оператор $\hat{U}$ називається *унітарним*, якщо $\hat{U}^{+}=\hat{U}^{-1}$.

2. Якщо для оператора $\hat{L}$ і функції ψ виконується співвідношення $\hat{L}\psi=\lambda\psi$, де λ – комплексне число, то ψ називається *власною функцією*, а λ – власним значенням оператора $\hat{L}$. Якщо множина власних значень не більша за зліченну, то власну функцію ψ_n, яка відповідає власному значенню λ_n, зазвичай позначатимемо як $|n\rangle$.

Видання підготовлено
в друкарському центрі
"Київський університет"
(зверстано не для продажу)

Власні значення ермітових операторів дійсні: $\hat{L}\psi_n = \lambda_n \psi_n$, $\left\langle n \middle| \hat{L} \middle| n \right\rangle = \lambda_n \left\langle n | n \right\rangle = \left(\left\langle n \middle| \hat{L}^+ \middle| n \right\rangle \right)^* = \lambda_n^* \left\langle n | n \right\rangle$, тобто $\lambda_n = \lambda_n^*$ (оператори, які відповідають фізичним величинам, ермітові).

Власні функції ермітового оператора, що стосуються різних власних значень, ортогональні: $\hat{L}\psi_n = \lambda_n \psi_n$, $\hat{L}\psi_m = \lambda_m \psi_m$, $\left\langle m \middle| \hat{L} \middle| n \right\rangle = \lambda_n \left\langle m | n \right\rangle$, $\left\langle m \middle| \hat{L}^+ \middle| n \right\rangle = \left(\left\langle n \middle| \hat{L} \middle| m \right\rangle \right)^* = \lambda_m \left\langle m | n \right\rangle$. Оскільки $\left\langle m \middle| \hat{L} \middle| n \right\rangle = \left\langle m \middle| \hat{L}^+ \middle| n \right\rangle$, то одержуємо $(\lambda_n - \lambda_m)\left\langle m | n \right\rangle = 0$. Тоді з умови $\lambda_n \neq \lambda_m$ маємо $\left\langle m | n \right\rangle = 0$, що й необхідно було довести.

Система власних функцій лінійного ермітового оператора повна, а це означає, що довільну функцію $\psi(q)$ з інтегрованим квадратом модуля можна розкласти в ряд за власними функціями ермітового оператора. Оскільки серед власних функцій можуть бути такі, що відповідають дискретному й неперервному спектрам, то $\psi(q) = \sum_i C_i \psi_i(q) + \int C_\alpha \psi_\alpha(q) d\alpha$, де коефіцієнти розкладу C_i і C_α визначаються з умов нормування: $C_i = \int \psi_i^*(q)\psi(q)dq$, $C_\alpha = \int \psi_\alpha^*(q)\psi(q)dq$. Ураховуючи, що функція $\psi(q)$ нормована, матимемо

$$\int |\psi(q)|^2 dq = \sum_i |C_i|^2 + \int |C_\alpha|^2 d\alpha = 1 .$$

Цей вираз називається *рівністю Парсеваля*.

Якщо власному значенню λ_n оператора $\hat{L}$ відповідає більше, ніж одна власна функція, то власне значення λ_n називається *виродженим*, а число g різних лінійно незалежних власних функцій ψ_{ng} називається *кратністю виродження*. Якщо функції ψ_n, які відповідають виродженому значенню λ_n, не взаємно ортогональні, то з них утворюють лінійні комбінації $\varphi_n = \sum_{i=1}^{g} a_{in}\psi_n$ і ортогоналізують їх за так званою процедурою Шмідта.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

3. Середнє значення $\langle L \rangle$ величини L у стані ψ визначається діагональним матричним елементом $\langle L \rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{L} \middle| \psi \right\rangle = \int \psi^* \hat{L} \psi d\tau$. Якщо хвильова функція ψ_n є власною функцією оператора $\hat{L}$, то середнє значення величини L у цьому стані дорівнює власному значенню $\langle L \rangle = \left\langle n \middle| \hat{L} \middle| n \right\rangle = \lambda_n \langle n | n \rangle = \lambda_n$. Наприклад, при обчисленні середніх значень радіуса-вектора $\langle \vec{r} \rangle$ та імпульсу $\langle \vec{p} \rangle$ використовуються оператори $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$ і $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$:

$$\langle \vec{r} \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \vec{r} \psi(\vec{r}) d\vec{r}, \qquad \langle \vec{p} \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) (-i\hbar\nabla) \psi(\vec{r}) d\vec{r}.$$

Ці результати узагальнюються для довільних функцій радіуса-вектора $f_1(\vec{r})$ і цілих раціональних функцій імпульсу $f_2(\vec{p})$:

$$\langle f_1(\vec{r}) \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{f}_1(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r}, \langle f_2(\vec{p}) \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{f}_1\left(\hat{\vec{p}}\right) \psi(\vec{r}) d\vec{r}.$$

Якщо функція f є сумою функцій $f_1(\vec{r})$ та $f_2(\vec{p})$, то і в цьому випадку обчислення середнього значення $\langle f \rangle$ у стані $\psi(\vec{r})$ зводиться до обчислення інтеграла $\langle f \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{f} \psi(\vec{r}) d\vec{r}$, де величина $\hat{f}\left(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}\right) = \hat{f}_1(\vec{r}) + \hat{f}_2(-i\hbar\nabla)$ є диференціальним оператором. Наприклад, таким оператором є оператор Гамільтона $\hat{H} = \hat{\vec{p}}^2 / 2\mu + \hat{U}\left(\hat{\vec{r}}\right) = -\hbar^2 \nabla^2 / 2\mu + \hat{U}(\vec{r})$, де μ – маса частинки.

Ступенями відхилень вимірювання координати та імпульсу вибирають середні значення від квадратів індивідуальних відхилень. Наприклад, для x-складових вони визначаються формулами $\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2$ і $\left\langle (\Delta p_x)^2 \right\rangle = \left\langle p_x^2 \right\rangle - \langle p_x \rangle^2$. Ці вирази пов'язані між собою співвідношенням невизначеностей Гейзенберга $\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta p_x)^2 \right\rangle \geq \hbar^2 / 4$ (для y- і z-складових справедливі такі ж співвідношення). У загальному випадку двох довільних самоспряжених операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$, які задовольняють переста-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

новочне співвідношення $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=i\hat{C}$, виконується нерівність $\left\langle(\Delta A)^2\right\rangle\left\langle(\Delta B)^2\right\rangle\geq\langle C\rangle^2/4$.

Рівнянням, яке описує зміну квантово-механічних систем із часом і виражає принцип причинності в квантовій механіці, є нестаціонарне хвильове рівняння Шредінгера $i\hbar\partial\psi/\partial t=\hat{H}\psi$. Це рівняння узгоджується також із законом збереження густини ймовірності $\rho=|\psi|^2$, а саме, з рівнянням неперервності $\partial\rho/\partial t+\operatorname{div}\vec{j}=0$, де $\vec{j}=i\hbar\left(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi\right)/2\mu$ – густина струму ймовірності.

4. При дослідженні зміни з часом середнього значення фізичної величини f, що перебуває в довільному квантовому стані $\psi(q,t)$, по-перше, встановлюється рівність $d\langle f\rangle/dt=\langle df/dt\rangle$, а, по-друге, відшукується рівняння руху для оператора $\hat{f}$: $d\hat{f}/dt=\partial\hat{f}/\partial t+\left[\hat{f},\hat{H}\right]/i\hbar$. Наприклад, для $\hat{f}=\hat{x},\hat{p}_x$ ми одержуємо рівняння Гейзенберга $\dot{\hat{x}}=\hat{p}_x/\mu$, $\dot{\hat{p}}_x=-\partial U/\partial x$ – аналог класичних рівнянь Гамільтона. Усереднюючи ці рівняння за довільним станом ψ, одержуємо $\langle dx/dt\rangle=d\langle x\rangle/dt=\langle p_x\rangle/\mu$, $\langle dp_x/dt\rangle=d\langle p_x\rangle/dt=-\langle\partial U/\partial x\rangle=\langle F_x\rangle$, а також, як наслідок, знаходимо квантове рівняння Ньютона: $\mu\partial^2\langle x\rangle/\partial t^2=\langle F_x\rangle$. Усі ці рівняння складають суть теореми Еренфеста.

Величина f є інтегралом руху, якщо $d\hat{f}/dt=0$. Якщо вона явно не залежить від часу, то вона буде інтегралом руху за умови $\left[\hat{f},\hat{H}\right]=0$.

5. Сукупність коефіцієнтів $\langle F|a\rangle$ розкладу $|a\rangle=\sum_F|F\rangle\langle F|a\rangle$ вектора стану $|a\rangle$ за власними векторами $|F\rangle\equiv\psi_F$ оператора $\hat{F}$ ($\hat{F}|F\rangle=F|F\rangle$) називається *хвильовою функцією* стану $|a\rangle$

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

у F-представленні. Якщо F і a набувають дискретних значень, то таку хвильову функцію можна розглядати як матрицю

$$\psi_a(F) \equiv \langle F|a\rangle = \begin{pmatrix} \langle F_1|a_1\rangle & \dots & \langle F_1|a_n\rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle F_m|a_1\rangle & \dots & \langle F_m|a_n\rangle \end{pmatrix}.$$

Якщо F чи a (або F і a) набувають неперервних значень, то в такому вигляді хвильову функцію записати неможливо. Наприклад, в імпульсному представленні базисними функціями є ортонормовані власні функції оператора імпульсу

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar).$$

Розкладаючи функцію $\langle \vec{r}|a\rangle$ за повною системою функцій $\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle$, одержуємо $\langle \vec{r}|a\rangle = \int \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|a\rangle d\vec{p}$. У цьому випадку функції $\langle \vec{p}|a\rangle = \int \langle \vec{p}|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|a\rangle d\vec{r}$ визначають вектор стану $|a\rangle$ в імпульсному представленні.

Нехай оператор $\hat{L}$ у координатному представленні діє на функцію $\langle x|a\rangle$ і відповідно породжує функцію $\langle x|b\rangle$ за формулою $\langle x|b\rangle = \hat{L}\langle x|a\rangle$. Знайдемо вигляд оператора $\hat{L}$ у F-представленні. Для цього перетворюємо функції координатного представлення за такими формулами: $\langle x|a\rangle = \sum_F \langle x|F\rangle\langle F|a\rangle$ і $\langle x|b\rangle = \sum_F \langle x|F\rangle\langle F|b\rangle$. Після їх підстановки в попереднє співвідношення та множення обох частин на функцію $\langle F'|x\rangle$ та інтегрування за змінною x маємо

$$\langle F'|b\rangle = \sum_F \langle F'|\hat{L}|F\rangle\langle F|a\rangle.$$

Звідси видно, що оператор $\hat{L}$ у F-представленні являє собою сукупність всіх чисел $\langle F'|\hat{L}|F\rangle = \int \psi^*_{F'}(q)\hat{L}\psi_F(q)dq$, які в за-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Вроса нова друку)

гальному випадку є компонентами, що утворюють матрицю $\left(L_{F'F}\right)$. Очевидно, що у своєму власному представленні оператор $\hat{L}$ буде діагональною матрицею.

1.1. Особливості дії операторів, обчислення комутаторів операторів, відшукання ермітово-спряжених операторів

1. Розкрити дужки в таких операторних виразах:

1) $\left(\frac{d}{dx}+x^2\right)^2$; 2) $\left(\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}\right)^2$; 3) $\left(\frac{d}{dx}+x\right)^3$; 4) $\left(x\frac{d}{dx}\right)^3$;

5) $\left(\frac{d}{dx}x\frac{d}{dx}\right)^2$; 6) $\left(x\frac{d}{dx}x\right)^2$; 7) $\left(x\frac{d}{dx}+1\right)^2$; 8) $\left(x^2\frac{d}{dx}\right)^2$;

9) $\left(\nabla+\vec{r}\right)^2$; 10) $\left[i\hbar\nabla+\vec{A}\left(\vec{r}\right)\right]^2$; 11) $\left(\hat{L}-\hat{M}\right)\left(\hat{L}+\hat{M}\right)$;

12) $\left(\frac{\partial}{\partial x}r\right)^2$; 13) $\left(\vec{a}\cdot\nabla+r\right)\left(\vec{a}\cdot\nabla-r\right)$; 14) $\left(x\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial x}\right)$;

15) $\left(\frac{\partial}{\partial x}+y\right)\left(\frac{\partial}{\partial y}+x\right)$; 16) $\frac{\partial}{\partial x}x+\frac{\partial}{\partial y}y+\frac{\partial}{\partial z}z$; 17) $\frac{\partial}{\partial\rho}\frac{1}{\rho}+\frac{\partial}{\partial\varphi}$;

18) $\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial}{\partial\rho}\rho+\frac{\partial}{\partial z}z\right)^2$; 19 $\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta$; 20) $\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)^2$.

Відповіді:

1) $\frac{d^2}{dx^2}+2x^2\frac{d}{dx}+x^4+2x^2$; 2) $\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d}{dx}$;

3) $\frac{d^3}{dx^3}+3\frac{d^2}{dx^2}+3\left(x^2+1\right)\frac{d}{dx}+x^3+3x$;

4) $x^3\frac{d^3}{dx^3}+3x^2\frac{d^2}{dx^2}+x\frac{d}{dx}$, 5) $x^2\frac{d^4}{dx^4}+4x\frac{d^3}{dx^3}+2\frac{d^2}{dx^2}$;

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

6) $x^4\dfrac{d^3}{dx^3}+4x^2\dfrac{d}{dx}+2x^2$; 7) $x^2\dfrac{d^2}{dx^2}+3x\dfrac{d}{dx}+1$;

8) $x^4\dfrac{d^3}{dx^3}+4x^2\dfrac{d}{dx}+2x^2$; 9) $\Delta+2\vec{r}\nabla+\vec{r}^{\,2}+3$;

10) $-\hbar^2\Delta+2i\hbar\vec{A}\cdot\nabla+i\hbar\operatorname{div}\vec{A}+\vec{A}^2$; 11) $\hat{L}^2-\hat{M}^2+\left[\hat{L},\hat{M}\right]$;

12) $r^2\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+3x\dfrac{\partial}{\partial x}+1$; 13) $\left(\vec{a}\cdot\nabla\right)^2-\left(\vec{a}\cdot\vec{r}\right)/r-r^2$;

14) $x\dfrac{\partial}{\partial x}+xy\dfrac{\partial^2}{\partial x\partial y}$; 15) $\dfrac{\partial^2}{\partial x\partial y}+x\dfrac{\partial}{\partial x}+y\dfrac{\partial}{\partial y}+xy+1$;

16) $\vec{r}\cdot\nabla+3$; 17) $\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial\rho}+\dfrac{\partial}{\partial\varphi}-\dfrac{1}{\rho^2}$;

18) $z^2\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}+\rho^2\dfrac{\partial^2}{\partial\rho^2}+2z\rho\dfrac{\partial^2}{\partial z\partial\rho}+5z\dfrac{\partial}{\partial z}+5\rho\dfrac{\partial}{\partial\rho}+4$;

19) $\cos\theta+\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}$;

20) $\dfrac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\sin^2\theta\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}+2\sin\theta\dfrac{\partial^2}{\partial\theta\partial r}+\cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r}$.

2. Знайти комутатори операторів:

1) $x^2,\ \dfrac{d}{dx}$; 2) $x,\ x\dfrac{d}{dx}$; 3) $\dfrac{d}{dx}+\dfrac{d}{dy},\ xy$; 4) $x\dfrac{d}{dy},\ y$;

5) $x\dfrac{d}{dy},\ y\dfrac{d}{dx}$; 6) $\nabla,\ \vec{r}^{\,2}$; 7) $i\hbar\nabla,\ \vec{A}\left(\vec{r}\right)$;

8) $\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\varphi},\ f\left(\theta,\varphi\right)$; 9) $\operatorname{tg}\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta},\ r\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$; 10) $\operatorname{ctg}\theta\dfrac{\partial}{\partial\varphi},\ \dfrac{\partial}{\partial\theta}$;

11) $z\dfrac{\partial}{\partial\rho},\ \dfrac{\partial}{\partial z}$; 12) $\dfrac{\partial}{\partial x},\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}$; 13) $\rho\dfrac{\partial}{\partial\rho},\ \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$;

14) $\dfrac{\partial}{\partial\varphi},\ f\left(\theta,\varphi\right)$; 15) $\rho\dfrac{\partial}{\partial z},\ z\dfrac{\partial}{\partial\rho}$;

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (вірсія не для друку)

3. Знайти оператори, ермітово-спряжені таким операторам:

1) $\frac{d}{dx}$; 2) $\frac{d^n}{dx^n}$; 3) $x\frac{d}{dx}$; 4) $ix+\frac{d}{dx}$; 5) $x\frac{d}{dx}x$; 6) $\frac{d}{dx}x^2$;

7) $x\frac{d^2}{dx^2}$; 8) $\frac{d}{dx}x\frac{d}{dx}$; 9) $\frac{d^2}{dx^2}x$; 10) $x\frac{d^2}{dx^2}x$.

Відповіді:

1) $-\frac{d}{dx}$; 2) $(-1)^n\frac{d^n}{dx^n}$; 3) $-x\frac{d}{dx}-1$; 4) $-ix-\frac{d}{dx}$;

5) $x^2\frac{d}{dx}+3x$; 6) $-x^2\frac{d}{dx}$; 7) $x\frac{d^2}{dx^2}+2\frac{d}{dx}$;

8) $x\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d}{dx}$; 9) $x\frac{d^2}{dx^2}$; 10) $x^2\frac{d^2}{dx^2}+2x\frac{d}{dx}$.

4. Визначити оператори трансляції, які переводять:

а) $\psi(x)$ у $\psi(x+a)$; б) $\psi(\vec{r})$ у $\psi(\vec{r}+\vec{a})$;

в) знайти оператор повороту простору на кут α.

Розв'язання:

а) означимо оператор зсуву $\hat{T}_a$ рівністю $\hat{T}_a\psi(x)=\psi(x+a)$ і представимо $\psi(x+a)$ у вигляді ряду за степенями a:

$$\psi(x+a)=\psi(x)+a\frac{d\psi(x)}{dx}+\frac{a^2}{2!}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\ldots=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x).$$

Оскільки $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}=\exp x$, то одержимо $\hat{T}_a=\exp\left(a\frac{d}{dx}\right)$;

б) означаючи $\hat{T}_{\vec{a}}$ рівністю $\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r}+\vec{a})$, одержимо $\hat{T}_{\vec{a}}=\exp(\vec{a}\cdot\nabla)$;

в) означаючи $\hat{T}_\alpha$ рівністю $\hat{T}_\alpha\psi(\varphi)=\psi(\varphi+\alpha)$, одержимо $\hat{T}_\alpha=\exp\left(\alpha\frac{d}{d\varphi}\right)$;

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

5. Розглянути такі оператори $\left(-\infty < x < +\infty\right)$:

1) інверсії $\hat{I}$: $\hat{I}\psi\left(x\right) = \psi\left(-x\right)$;

2) зсуву $\hat{T}_\alpha$: $\hat{T}_a\psi\left(x\right) = \psi\left(x + a\right)$;

3) зміни масштабу $\hat{M}_c$: $\hat{M}_c\psi\left(x\right) = \sqrt{c}\psi\left(cx\right), c > 0$;

4) комплексного спряження $\hat{K}$: $\hat{K}\psi\left(x\right) = \psi^*\left(x\right)$;

5) перестановки координат двох частинок $\hat{P}_{12}$: $\hat{P}_{12}\psi\left(x_1, x_2\right) = \psi\left(x_2, x_1\right)$. Чи лінійні ці оператори? Знайти вигляд операторів, які щодо них: а) ермітово-спряжені; б) обернені.

Відповідь: усі оператори, окрім $\hat{K}$, лінійні; $\hat{I}^+ = \hat{I}$, $\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$, $\hat{M}_c^+ = \hat{M}_{1/c}$, $\hat{P}_{12}^+ = \hat{P}_{12}$; оскільки оператор $\hat{K}$ нелінійний, то поняття оператора $\hat{K}^+$ йому не притаманне; усі наведені оператори мають обернені: $\hat{I}^{-1} = \hat{I}$, $\hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a}$, $\hat{M}_c^{-1} = \hat{M}_{1/c}$, $\hat{K}^{-1} = \hat{K}$, $\hat{P}_{12}^{-1} = \hat{P}_{12}$.

6. Побудувати квантово-механічний оператор, який відповідає класичному добутку xp_x.

Розв'язання: оскільки оператори $\hat{x}$ і $\hat{p}_x$ не комутують, то слід очікувати, що класичному добутку xp_x буде відповідати ермітовий оператор вигляду

$$\hat{\Omega} = \left(1 - \alpha\right)\hat{x}\hat{p}_x + \alpha\hat{p}_x\hat{x}.$$

Це означає, що для довільних комплексних хвильових функцій $\psi_1\left(x\right)$ і $\psi_2\left(x\right)$ має виконуватись співвідношення

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\left(x\right)\hat{\Omega}\psi_2\left(x\right)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2\left(x\right)\left[\hat{\Omega}\psi_1\left(x\right)\right]^* dx.$$

Тепер, підставляючи в цю рівність оператор $\hat{\Omega}$, одержуємо

$$-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\left[\left(1-\alpha\right)x\frac{\partial\psi_2}{\partial x} + \alpha\frac{\partial\left(x\psi_2\right)}{\partial x}\right]dx =$$

$$= i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2\left[\left(1-\alpha\right)x\frac{\partial\psi_1^*}{\partial x} + \alpha\frac{\partial\left(x\psi_1^*\right)}{\partial x}\right]dx$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Електронне видання)

або

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\left(x\frac{\partial\psi_2}{\partial x}+\alpha\psi_2\right)dx=-\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2\left(x\frac{\partial\psi_1^*}{\partial x}+\alpha\psi_1^*\right)dx\,.$$

Змінюючи порядок доданків, одержуємо

$$\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi_1^*\psi_2\right)dx=-2\alpha\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\psi_2dx\,.$$

Узявши частинами інтеграл, який стоїть зліва, знаходимо

$$-\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\psi_2dx=-2\alpha\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\psi_2dx\,.$$

Звідси випливає, що стала α дорівнює $1/2$.

7. Вважаючи λ малою величиною, знайти розклад оператора $\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1}$ за степенями λ.

Відповідь: $\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1}=\hat{A}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^n$.

8. Для операторів $\hat{L}$ і $\hat{M}$, які задовольняють співвідношення $\left[\hat{L},\hat{M}\right]=1$, знайти $f\left(\hat{L}\right)\hat{M}-\hat{M}f\left(\hat{L}\right)$.

Розв'язання: спочатку за допомогою методу математичної індукції доведемо співвідношення $\hat{M}\hat{L}^n-\hat{L}^n\hat{M}=-n\hat{L}^{n-1}$. Справедливість його за $n=2$ випливає з попередньої задачі. Доведемо для $n+1$:

$$\hat{M}\hat{L}^{n+1}-\hat{L}^{n+1}\hat{M}=$$
$$=\hat{M}\hat{L}^{n+1}-\hat{L}\left(\hat{M}\hat{L}^n+n\hat{L}^{n-1}\right)=\left(\hat{M}\hat{L}-\hat{L}\hat{M}\right)\hat{L}^n-n\hat{L}^n=-\left(n+1\right)\hat{L}^n\,.$$

За означенням $f\left(\hat{L}\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}\hat{L}^n$, тому

$$f\left(\hat{L}\right)\hat{M}-\hat{M}f\left(\hat{L}\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}\left(\hat{L}^n\hat{M}-\hat{M}\hat{L}^n\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{(n-1)!}\hat{L}^{n-1}.$$

Але, якщо ввести $n-1=k$, то

Видавничий поліграфічний центр
Київський університет
(версія, не для друку)

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{f^{(k+1)}(0)}{k!}\hat{L}^k=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\left[f'(0)\right]^{(k)}}{k!}\hat{L}^k=f'\left(\hat{L}\right)$$

і, таким чином, $f\left(\hat{L}\right)\hat{M}-\hat{M}f\left(\hat{L}\right)=f'\left(\hat{L}\right)$.

9. Для будь-яких некомутуючих операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ довести справедливість співвідношень:

а) $\hat{A}^{-1}\hat{B}^2\hat{A}=\left(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}\right)^2$; б) $\hat{A}^{-1}\hat{B}^n\hat{A}=\left(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}\right)^n$;

в) $\hat{A}^{-1}f\left(\hat{B}\right)\hat{A}=f\left(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}\right)$.

Вказівка: для доведення співвідношень а) і б) слід представити $\hat{B}^2$ як $\hat{B}\hat{A}\hat{A}^{-1}\hat{B}$, а для доведення в) треба скористатись розкладом $f\left(\hat{B}\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}\hat{B}^n$ і пунктом б).

10. Довести рівність $\exp\left(\xi\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\xi\hat{A}\right)=\hat{B}+C\xi$, якщо $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=C$, де C – число, а ξ – параметр.

Розв'язання: на основі рівності $\hat{B}\hat{A}^n-\hat{A}^n\hat{B}=-nC\hat{A}^{n-1}$ і розкладу $\exp\left(-\xi\hat{A}\right)$ у ряд обчислюємо комутатор

$$\hat{B}\exp\left(-\xi\hat{A}\right)-\exp\left(-\xi\hat{A}\right)\hat{B}=$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\xi)^n}{n!}\left(\hat{B}\hat{A}^n-\hat{A}^n\hat{B}\right)=C\xi\exp\left(-\xi\hat{A}\right).$$

Тоді

$$\exp\left(\xi\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\xi\hat{A}\right)=$$

$$=\exp\left(\xi\hat{A}\right)\left[\exp\left(-\xi\hat{A}\right)\hat{B}+C\xi\exp\left(-\xi\hat{A}\right)\right]=\hat{B}+C\xi.$$

11. Довести рівність $\exp\left(i\xi\hat{p}/\hbar\right)F\left(\hat{q}\right)\exp\left(-i\xi\hat{p}/\hbar\right)=F\left(\hat{q}+\xi\right)$, де $\hat{p}$ і $\hat{q}$ – оператори імпульсу та координати.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

Розв'язання: використавши рівність $\hat{A}^{-1} f\left(\hat{B}\right)\hat{A} = f\left(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}\right)$ для операторів $\hat{A} = \exp\left(-i\xi\hat{p}/\hbar\right)$, $\hat{A}^{-1} = \exp\left(i\xi\hat{p}/\hbar\right)$ і $\hat{B} = \hat{q}$, маємо

$$\exp\left(\frac{i\xi\hat{p}}{\hbar}\right)F\left(\hat{q}\right)\exp\left(-\frac{i\xi\hat{p}}{\hbar}\right) = F\left(\exp\left(\frac{i\xi\hat{p}}{\hbar}\right)\hat{q}\exp\left(-\frac{i\xi\hat{p}}{\hbar}\right)\right).$$

Оскільки $\left[\hat{p},\hat{q}\right] = -i\hbar$, то на основі попередньої задачі доводимо рівність $\exp\left(i\xi\hat{p}/\hbar\right)F\left(\hat{q}\right)\exp\left(-i\xi\hat{p}/\hbar\right) = F\left(\hat{q}+\xi\right)$.

12. Довести таку операторну тотожність:

$$\exp\left(\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\hat{A}\right) = \hat{B} + \frac{1}{1!}\left[\hat{A},\hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + \ldots$$

Розв'язання: введемо оператор $\hat{F}\left(\eta\right) = \exp\left(\eta\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\eta\hat{A}\right)$ і, диференціюючи його за параметром η, одержимо рівняння

$$\frac{d\hat{F}\left(\eta\right)}{d\eta} = \left[\hat{A},\hat{F}\left(\eta\right)\right].$$

Очевидно, що друга похідна від оператора $\hat{F}\left(\eta\right)$ за параметром η дорівнює $d^2\hat{F}\left(\eta\right)/d\eta^2 = \left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{F}\left(\eta\right)\right]\right]$ і т. д. Записавши оператор $\hat{F}\left(\eta\right)$ у вигляді розкладу в ряд Тейлора і врахувавши операторні рівності $\hat{F}\left(0\right) = \hat{B}$, $\hat{F}\left(1\right) = \exp\left(\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\hat{A}\right)$, доведемо операторну тотожність.

13. Показати, що у випадку, коли комутатор операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ є числом $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = iC$, справедливе співвідношення

$$\exp\left(\hat{A}+\hat{B}\right) = \left(\exp\hat{A}\right)\left(\exp\hat{B}\right)\exp\left(-iC/2\right).$$

Розв'язання: введемо оператор $\exp\left[\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\right]$ і запишемо його у вигляді

$$\exp\left[\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\right] = \exp\left(\lambda\hat{A}\right)\exp\left(\lambda\hat{B}\right)\exp\left(-i\lambda^2 C/2\right)\hat{G}\left(\lambda\right).$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (друга нелегальна друкарня)

Диференціюючи обидві частини цієї рівності за параметром λ і користуючись співвідношенням

$$\exp\left(\lambda\hat{A}\right)\hat{B} = \left(\hat{B} + i\lambda C\right)\exp\left(\lambda\hat{A}\right)$$

(його можна встановити, якщо розкласти $\exp\left(\lambda\hat{A}\right)$ у ряд Тейлора і врахувати, що $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = iC$), знайдемо $d\hat{G}/d\lambda = 0$, тобто $\hat{G}$ від λ не залежить. Очевидно, що $\hat{G} = 1$ і за $\lambda = 1$ випливає твердження задачі.

14. Довести, що для операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$, які є перестановочними зі своїм комутатором $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$, справедливі такі рівності:

$$\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right) = \exp\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\exp\left(\hat{B}\right)\exp\left(\hat{A}\right),$$

$$\left[\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right)\right]^n = \exp\left(\frac{1}{2}n(n-1)\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\exp\left(n\hat{B}\right)\exp\left(n\hat{A}\right).$$

Розв'язання: використовуючи рівність $\hat{A}f\left(\hat{B}\right)\hat{A}^{-1} = f\left(\hat{A}\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)$, можна записати

$$\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right)\exp\left(-\hat{A}\right)\exp\left(\hat{A}\right) = \exp\left[\exp\left(\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\hat{A}\right)\right]\exp\left(\hat{A}\right).$$

При використанні тотожності

$$\exp\left(\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\hat{A}\right) = \hat{B} + \frac{1}{1!}\left[\hat{A},\hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + \ldots$$

та умови задачі одержимо $\exp\left(\hat{A}\right)\hat{B}\exp\left(-\hat{A}\right) = \hat{B} + \left[\hat{A},\hat{B}\right]$.

Отже, $\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right) = \exp\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\exp\left(\hat{B}\right)\exp\left(\hat{A}\right)$. Оскільки $\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] = \left[\hat{B},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] = 0$, то перша частина твердження доведена. Далі, якщо використати рівність

$$\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(k\hat{B}\right) = \exp\left(k\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\exp\left(k\hat{B}\right)\exp\left(\hat{A}\right),$$

де k – число, одержимо

$$\left[\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right)\right]^n = \left[\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right)\right]^{n-1}\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right) =$$

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

$$=\left[\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right)\right]^{n-1}\exp\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\exp\left(\hat{B}\right)\exp\left(\hat{A}\right)=$$

$$=\exp\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\left[\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right)\right]^{n-1}\exp\left(\hat{B}\right)\exp\left(\hat{A}\right)=$$

$$=\exp\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\exp\left(2\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\left[\exp\left(\hat{A}\right)\exp\left(\hat{B}\right)\right]^{n-2}\exp\left(2\hat{B}\right)\exp\left(2\hat{A}\right)=$$

$$=\exp\left\{\sum_{k=1}^{n}k\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\}\exp\left(n\hat{B}\right)\exp\left(n\hat{A}\right)=$$

$$=\exp\left(n\left(n-1\right)\left[\hat{A},\hat{B}\right]/2\right)\exp\left(n\hat{B}\right)\exp\left(n\hat{A}\right),$$

де ми скористалися відомим виразом для суми арифметичної прогресії.

15. Довести, що для операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$, які є перестановочними зі своїм комутатором $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$, справедлива така тотожність Вейля: $\exp\left(\hat{A}+\hat{B}\right)=\exp\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right]/2\right)\exp\left(\hat{B}\right)\exp\left(\hat{A}\right)$.

Розв'язання: обчислимо $\exp\left(\hat{A}+\hat{B}\right)$ як границю

$$\exp\left(\hat{A}+\hat{B}\right)=\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{1}{n}\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\right)=\lim_{n\to\infty}\left[\exp\left(\hat{A}/n\right)\exp\left(\hat{B}/n\right)\right]^{n},$$

де порядок співмножників під знаком степеня може бути вибраним і як зворотний, що не применшує загальності подальшого розгляду. У попередній задачі показано, що

$$\left[\exp\left(\hat{A}/n\right)\exp\left(\hat{B}/n\right)\right]^{n}=\exp\left(\frac{n\left(n-1\right)}{2n^{2}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\exp\left(\hat{B}\right)\exp\left(\hat{A}\right),$$

тому

$$\exp\left(\hat{A}+\hat{B}\right)=\lim_{n\to\infty}\exp\left(\frac{n\left(n-1\right)}{2n^{2}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\exp\left(\hat{B}\right)\exp\left(\hat{A}\right)=$$

$$=\exp\left(\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right)\exp\left(\hat{B}\right)\exp\left(\hat{A}\right).$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

16. Довести рівність $\frac{\partial}{\partial\lambda}\mathrm{Sp}\left(\exp\left(\lambda\hat{A}+\hat{B}\right)\right)=\mathrm{Sp}\left(\hat{A}\exp\left(\lambda\hat{A}+\hat{B}\right)\right)$, де $\hat{A}$ і $\hat{B}$ –довільні матриці однакового рангу. Чи суттєве взяття сліду матриць у цьому співвідношенні?

Вказівка: для доведення необхідно розкласти експоненти в ряди і після диференціювання та взяття слідів порівняти члени з однаковими степенями λ. При цьому, якщо оператори $\hat{A}$ і $\hat{B}$ не комутують, взяття сліду є необхідним для справедливості розглядуваного співвідношення.

17. У загальному випадку лінійний оператор $\hat{L}$ можна розглядати як лінійний інтегральний оператор, тобто $\Phi(\xi)=\hat{L}\Psi(\xi)=\int L(\xi,\xi')\Psi(\xi')d\xi'$, де $L(\xi,\xi')$ – ядро оператора $\hat{L}$. Як ядро $L^{+}(\xi,\xi')$ оператора $\hat{L}^{+}$ пов'язане з ядром оператора $\hat{L}$? Знайти ядра операторів $\hat{I}$, $\hat{T}_a$, $\hat{M}_c$, $\hat{x}\equiv x$, $\hat{p}\equiv -i\hbar\, d/dx$.

Відповіді:

$L^{+}(\xi,\xi')=L^{*}(\xi',\xi)$; $I(x,x')=\delta(x+x')$,

$T_a(x,x')=\delta(x-x'+a)$, $X(x,x')=x\delta(x-x')$,

$P(x,x')=-i\hbar\partial\delta(x-x')/\partial x$.

18. Який вигляд має ядро $L(x,x')$ оператора $\hat{L}$, якщо цей оператор комутує з оператором: а) координати $\hat{x}\equiv x$, б) імпульсу $\hat{p}\equiv -i\hbar\, d/dx$; в) показати, що оператор $\hat{L}$, комутуючий як із $\hat{x}$, так і з $\hat{p}$, кратний одиничному, тобто $\hat{L}\equiv L_0=\mathrm{const}$.

Розв'язання: а) беручи до уваги, що ядро оператора $\hat{C}=\hat{A}\hat{B}$ дорівнює $C(x,x')=\int A(x,x'')B(x'',x')dx''$, і враховуючи вигляд ядра $X(x,x')=x\delta(x-x')$ оператора $\hat{x}$, за умови $\left[\hat{L},\hat{x}\right]=0$ знаходимо $(x'-x)L(x,x')=0$, а отже, $L(x,x')=f(x)\delta(x-x')$, де $f(x)$ – довільна функція; б) аналогічно, за умови $\left[\hat{L},\hat{p}\right]=0$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

та вигляду ядра $P(x,x') = -i\hbar\,\partial\delta(x-x')/\partial x$ випливає $(\partial/\partial x + \partial/\partial x')L(x,x') = 0$, тому $L(x,x') = g(x-x')$, де $g(x)$ – також довільна функція; співвідношення $L(x,x') = f(x)\delta(x-x')$ і $L(x,x') = g(x-x')$ одночасно можуть виконуватись лише за умови $f(x) = L_0 = \text{const}$. При цьому $L(x,x') = L_0\delta(x-x')$, а оператор з таким ядром має вигляд $\hat{L} \equiv L_0$.

19. Обчислити такі комутатори:

а) $\left[\hat{p}_x, f(x,y,z)\right]$; б) $\left[\hat{p}_x, \hat{x}^n\right]$;

в) $\left[\hat{x}, \hat{T}\right]$; г) $\left[\hat{p}_x, \left[f(x,y,z), \hat{p}_x\right]\right]$.

Відповіді: а) $\hat{p}_x f$; б) $-in\hbar x^{n-1}$; в) $-2\hbar\hat{p}_x$; г) $-\hat{p}_x^2 f$.

20. Довести тотожність Якобі

$$\left[\left[\hat{p},\hat{q}\right],\hat{r}\right] + \left[\left[\hat{q},\hat{r}\right],\hat{p}\right] + \left[\left[\hat{r},\hat{p}\right],\hat{q}\right] = 0.$$

Вказівка: скористатися означенням комутатора.

21. Показати, що оператор $\hat{P}(f_i)$, який діє на власні функції оператора фізичної величини $\hat{f}$ таким чином:

$$\hat{P}(f_i)\psi_{f_k} = \delta_{f_i,f_k}\psi_{f_i} = \begin{cases} \psi_{f_i}, f_i = f_k, \\ 0, f_i \neq f_k, \end{cases}$$

є проекційним (*проекційним* називається ермітовий оператор $\hat{P}$, який задовольняє співвідношення $\hat{P}^2 = \hat{P}$). На які стани проектує цей оператор? Який фізичний сенс має середнє значення $\left\langle \hat{P}(f_i) \right\rangle$ у довільному стані, що описується хвильовою функцією Ψ?

Розв'язання: записуючи довільні нормовані на одиницю функції Ψ і Φ у вигляді $\Psi = \sum_k c_k\psi_{f_k}$ і $\Phi = \sum_k b_k\psi_{f_k}$ (розглядаємо випадок невироджених власних значень), переконуємось в ермітовості оператора $\hat{P}(f_i)\,\hat{P}(f_i)$:

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\int \Phi^* \hat{P}(f_i)\Psi d\tau = c_i \int \Phi^* \psi_{f_i} d\tau = c_i b_i^* = \int \left[\hat{P}(f_i)\Phi\right]^* \Psi d\tau =$$
$$= \int \left[\hat{P}^+(f_i)\Phi\right]^* \Psi d\tau,$$

де врахована ортогональність власних функцій оператора $\hat{f}$. Зі співвідношень $\hat{P}^2(f_i)\Psi = \hat{P}(f_i)\left(c_i \psi_{f_i}\right) = c_i \psi_{f_i} = \hat{P}(f_i)\Psi$ випливає, що $\hat{P}^2(f_i) = \hat{P}(f_i)$. Таким чином, $\hat{P}(f_i)$ – проекційний оператор, який проектує на стан з конкретним власним значенням f_i фізичної величини f. Знаходимо $\left\langle \hat{P}(f_i) \right\rangle = \int \Psi^* \hat{P}(f_i)\Psi d\tau = |c_i|^2 \equiv |c(f_i)|^2$, тобто середнє $\left\langle \hat{P}(f_i) \right\rangle$ дає ймовірність значення f_i величини f у стані Ψ.

22. Знайти проекційні оператори $\hat{P}_\pm$, які проектують на парні $\hat{P}_+$ та непарні $\hat{P}_-$ щодо інверсії координат стани частинки (виразити їх через оператор інверсії $\hat{I}$).

Розв'язання: запишемо довільну функцію у вигляді суперпозиції парної та непарної складових:

$$\Psi(\vec{r}) = \left[\Psi(\vec{r}) + \Psi(-\vec{r})\right]/2 + \left[\Psi(\vec{r}) - \Psi(-\vec{r})\right]/2.$$

Із сенсу операторів $\hat{P}_\pm$ маємо $\hat{P}_\pm \Psi = \left[\Psi(\vec{r}) \pm \Psi(-\vec{r})\right]/2$, тобто вони мають вигляд $\hat{P}_\pm = \left(1 \pm \hat{I}\right)/2$. При цьому $\hat{P}_\pm^2 = \hat{P}_\pm$, а також $\hat{P}_+ + \hat{P}_- = 1$.

23. Перейти від класичної дужки Пуассона до квантової, вважаючи, що її властивості, і зокрема $\{f, g\varphi\} = g\{f, \varphi\} + \{f, g\}\varphi$, де f, g, φ – функції, що представляють фізичні величини, $\{f, g\}$ – дужка Пуассона, зберігаються й для операторів $\hat{f}, \hat{g}, \hat{\varphi}$.

Розв'язання: скористаємось правилом, указаним в умові задачі, а саме:

$$\left\{\hat{f}_1 \hat{f}_2, \hat{g}\right\} = \left\{\hat{f}_1, \hat{g}\right\}\hat{f}_2 + \hat{f}_1\left\{\hat{f}_2, \hat{g}\right\},$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\left\{\hat{f},\hat{g}_1\hat{g}_2\right\}=\left\{\hat{f},\hat{g}_1\right\}\hat{g}_2+\hat{g}_1\left\{\hat{f},\hat{g}_2\right\}.$$

Покладемо в одержаних рівностях $\hat{f}=\hat{f}_1\hat{f}_2$ та $\hat{g}=\hat{g}_1\hat{g}_2$ і згідно з тим самим правилом, зберігаючи при цьому порядок множників, знаходимо

$$\hat{g}_1\left\{\hat{f}_1,\hat{g}_2\right\}\hat{f}_2+\left\{\hat{f}_1,\hat{g}_1\right\}\hat{g}_2\hat{f}_2+\hat{f}_1\hat{g}_1\left\{\hat{f}_2,\hat{g}_2\right\}+\hat{f}_1\left\{\hat{f}_2,\hat{g}_1\right\}\hat{g}_2=$$
$$=\hat{f}_1\left\{\hat{f}_2,\hat{g}_1\right\}\hat{g}_2+\left\{\hat{f}_1,\hat{g}_1\right\}\hat{f}_2\hat{g}_2+\hat{g}_1\hat{f}_1\left\{\hat{f}_2,\hat{g}_2\right\}+\hat{g}_1\left\{\hat{f}_2,\hat{g}_2\right\}\hat{f}_2.$$

Після скорочення на тотожні вирази цю рівність можна переписати у вигляді

$$\left\{\hat{f}_1,\hat{g}_1\right\}\left(\hat{f}_2\hat{g}_2-\hat{g}_2\hat{f}_2\right)=\left(\hat{f}_1\hat{g}_1-\hat{g}_1\hat{f}_1\right)\left\{\hat{f}_2,\hat{g}_2\right\}.$$

Ця рівність справедлива для довільних операторів $\hat{f}_1,\hat{g}_1$ і $\hat{f}_2,\hat{g}_2$. Звідси можна стверджувати, що для довільних $\hat{f}$ і $\hat{g}$ справедлива рівність $\left\{\hat{f},\hat{g}\right\}=C\left(\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}\right)$. Вимагаючи, щоб $\left(\hat{f},\hat{g}\right)^+=\left(\hat{f},\hat{g}\right)$ при $\hat{f}^+=\hat{f}$, $\hat{g}^+=\hat{g}$ (умова ермітовості), одержуємо $C^*=-C$, тобто $C=i/\hbar$. За аналогією з розмірністю класичної дужки Пуассона $\{f,g\}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}-\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}\right)$ розмірність C має бути оберненою до розмірності дії. Таким чином, $\hbar$ – довільна величина, яка має розмірність дії, а $\left\{\hat{f},\hat{g}\right\}=\left(\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}\right)\Big/\hbar=\left[f,\hat{g}\right]\Big/\hbar$ – квантова дужка Пуассона.

24. Знайти комутатор операторів знищення $\hat{a}=\left(\omega\hat{q}+i\hat{p}\right)\Big/\sqrt{2\hbar\omega}$ і народження $\hat{a}^+=\left(\omega\hat{q}-i\hat{p}\right)\Big/\sqrt{2\hbar\omega}$.

Відповідь: $\hat{a}\hat{a}^+-\hat{a}^+\hat{a}=1$.

25. Виразити оператор $\hat{H}$ для гармонічного осцилятора через оператори $\hat{a}$ та $\hat{a}^+$.

Відповідь: $\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^+\right)\Big/2$.

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія тільки для друку)

1.2. Власні функції та власні значення найпростіших операторів

1. Знайти власні функції та власні значення для операторів d/dx, $i\,d/dx$.

Розв'язання: Оскільки $d\psi/dx = \lambda\psi$ є рівнянням для власних функцій оператора d/dx, то після відокремлення змінних та інтегрування одержимо $\psi(x) = \exp(\lambda x)$. З умови скінченності $\psi(x)$ за $t \to \pm\infty$ випливає, що $\lambda = i\beta$, де β – довільне дійсне число. Аналогічно для оператора $i\,d/dx$ одержимо власні функції $\psi(x) = \exp(-i\lambda x)$, де λ – довільне дійсне число.

2. Знайти власні значення та нормовані власні функції $\psi(x)$ оператора $\hat{A} = -d^2/dx^2$, якщо $\psi(0) = 0$ та $\psi(l) = 0$.

Відповідь: $\lambda_n = -\pi^2 n^2/l^2$, $\psi_n(x) = \sqrt{2/l}\sin(\pi n x/l)$, $n = 1, 2, \ldots$.

3. Знайти власні функції та власні значення оператора $d/dx + x$.

Розв'язання: рівняння для власних функцій оператора $d/dx + x$ буде таким: $(d/dx + x)\varphi(x) = \lambda\varphi(x)$. Відокремлюючи змінні та інтегруючи це рівняння, одержуємо власні функції $\varphi(x) = \exp\left(\lambda x - x^2/2\right)$. Цей розв'язок задовольняє умови скінченності, неперервності та однозначності за будь-яких величин λ, як дійсних, так і комплексних (спектр неперервний).

4. Знайти власні функції та власні значення оператора $\hat{f} = \alpha\hat{p}_x + \beta\hat{x}$, де α, β – дійсні параметри.

Розв'язання: рівняння на власні функції та власні значення оператора $\hat{f}$ і його розв'язок мають вигляд

$$-i\hbar\alpha\frac{d\psi_f(x)}{dx} + \beta x\psi_f(x) = f\psi_f(x),$$

$$\psi_f(x) = C\exp\left[-i(\beta x - f)^2/2\hbar\alpha\beta\right].$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Звідси видно, що власні значення f є довільними дійсними величинами (за комплексних значень f хвильова функція зростає на великих відстанях). Умова нормування

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{f'}^{*}(x)\psi_{f}(x)dx = \delta(f - f')$$

приводить до значення $C = (2\pi\alpha\hbar)^{-1/2}$.

5. Знайти власні функції та власні значення ермітового оператора $\hat{F}$, ядро якого має вигляд $F(x,x') = f(x)f^{*}(x')$. Яка кратність виродження власних значень?

Розв'язання: рівняння для власних функцій і власних значень $f(x)\int_{-\infty}^{+\infty} f^{*}(x')\psi_n(x')dx' = f_n\psi_n(x)$ має такі розв'язки: 1) одна власна функція $\psi_0(x) = Cf(x)$ відповідає власному значенню $f_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx > 0$; 2) друге власне значення $f_1 = 0$ нескінченно-кратно вироджене, йому відповідають власні функції $\psi_i(x)$, які характеризуються властивістю $\int_{-\infty}^{+\infty} f^{*}(x)\psi_i(x)dx = 0$ (тобто, як і має бути, ці функції ортогональні власній функції $\psi_0(x)$). Ніяких інших функцій не існує.

6. Знайти власні функції і власні значення оператора $d^2/dx^2 + (2/x)(d/dx)$.

Розв'язання: вводимо нову функцію $\chi(x) = x\psi(x)$. Тоді маємо $\frac{d^2\chi}{dx^2} = 2\frac{d\psi}{dx} + x\frac{d^2\psi}{dx^2} = x\left(\frac{2}{x}\frac{d\psi}{dx} + \frac{d^2\psi}{dx^2}\right) = x\lambda\psi = \lambda\chi$. Звідси $\psi(x) = \left[A\exp\left(\sqrt{\lambda}x\right) + B\exp\left(-\sqrt{\lambda}x\right)\right]/x$. За умови скінченності цієї функції при $x \to \pm\infty$ одержуємо $\sqrt{\lambda} = i\delta$, де δ – дійсне число. З умови скінченності за $x = 0$ одержуємо $A + B = 0$, тобто $\psi(x) = C\sin(\delta x)/x$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

7. Знайти власні функції та власні значення оператора $d/d\varphi$.

Відповідь: $\psi_m(\varphi) = \exp(im\varphi)/\sqrt{2\pi}$, $\lambda_m = im$, $m = 0, \pm 1, \ldots$.

8. Знайти власні функції та власні значення оператора $\sin(d/d\varphi)$.

Розв'язання: рівняння для власних функцій $\psi(\varphi)$ і власних значень λ буде таким: $\sin(d/d\varphi)\psi(\varphi) = \lambda\psi(\varphi)$. Розкладаємо ліву частину цього рівняння в ряд Тейлора

$$\sin\frac{d}{d\varphi}\psi(\varphi) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\frac{d^{2k+1}}{d\varphi^{2k+1}}\psi(\varphi) = \lambda\psi(\varphi).$$

Звідси видно, що власні функції оператора $\sin(d/d\varphi)$ такі самі, як і в оператора $d/d\varphi$, а саме: $\psi_m(\varphi) = \exp(im\varphi)/\sqrt{2\pi}$, де $m = 0, \pm 1, \ldots$, а власні значення обчислюються таким чином:

$$\lambda_m = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}(im)^{2k+1} = \sin(im) = i\,\mathrm{sh}\,m.$$

9. Знайти власні функції та власні значення оператора $\exp(i\alpha d/d\varphi)$.

Відповідь:

$\psi_m(\varphi) = \exp(im\varphi)/\sqrt{2\pi}$, $\lambda_m = \exp(-\alpha m)$, $m = 0, \pm 1, \ldots$.

10. Знайти нормовані хвильові функції та власні значення оператора $\hat{L}_z^2 = -\hbar^2\,\partial^2/\partial\varphi^2$, $(0 \le \varphi \le 2\pi)$.

Розв'язання: запишемо рівняння для власних функцій $-\hbar^2\,\partial^2\psi/\partial\varphi^2 = \lambda\psi$. Розв'язок цього рівняння має вигляд $\psi(\varphi) = A\cos\left(\sqrt{\lambda}\varphi/\hbar + \alpha\right)$, де α – довільна фаза. Через однозначність власних функцій має виконуватись рівність $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$. Підставляючи у цю рівність знайдений розв'язок, знаходимо власні значення задачі $\lambda_m = \hbar^2 m^2$, де $m = 0, \pm 1, \ldots$.

Таким чином, $\psi_m(\varphi) = A_m\cos(m\varphi + \alpha)$. Зауважимо, що записане рівняння для власних функцій має також розв'язок і за від'-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

ємних власних значень $\psi(\varphi) \sim \exp\left[\pm\sqrt{|\lambda|}\varphi/\hbar\right]$, але цей розв'язок не задовольняє умову однозначності. Використовуючи умову нормування $\int_0^{2\pi}\left|\psi(\varphi)\right|^2 d\varphi = 1$, знаходимо $A_m = 1/\sqrt{\pi}$.

Отже, нормовані власні функції оператора $\hat{L}_z^2$ мають вигляд $\psi_m(\varphi) = \cos(m\varphi + \alpha)/\sqrt{\pi}$, а відповідні власні значення такі: $\lambda_m = \hbar^2 m^2$, де $m = 0, \pm 1, \ldots$.

11. Знайти нормовані власні функції та власні значення оператора $\hat{A} = -i\hbar\partial/\partial\varphi + \alpha\sin\varphi$.

Відповідь: $\psi_m(\varphi) = \exp\left[i\left(m\varphi + \alpha\cos\varphi/\hbar\right)\right]/\sqrt{2\pi}$, $\lambda_m = \hbar m$, $m = 0, \pm 1, \ldots$.

12. Ермітовий оператор (матриця) $\hat{f}$ має N різних власних значень. Показати, що оператор $\hat{f}^N$ лінійно виражається через оператори $\hat{1}, \hat{f}, \ldots, \hat{f}^{N-1}$. Як ілюстрації розглянути оператор інверсії $\hat{I}$.

Розв'язання: дія оператора $\hat{G} \equiv \left(\hat{f} - f_1\right)\left(\hat{f} - f_2\right)\cdot\ldots\cdot\left(\hat{f} - f_N\right)$ на довільну хвильову функцію Ψ дає рівняння $\hat{G}\Psi = 0$. Дійсно, Ψ можна представити у вигляді суперпозиції власних функцій Ψ_{f_k}, які утворюють повну систему $\Psi = \sum_k C_k \Psi_{f_k}$, а $\left(\hat{f} - f_k\right)\Psi_{f_k} = 0$.

Отже, $\hat{G} \equiv 0$, тобто випливає твердження задачі:

$$\hat{f}^N - \sum_{i=1}^N f_i \hat{f}^{N-1} + \frac{1}{2}\sum_{i,k;i\neq k} f_i f_k \hat{f}^{N-2} + \ldots + (-1)^N \prod_{i=1}^N f_i = 0.$$

Наприклад, при $N = 2$ маємо $\hat{f}^2 = (f_1 + f_2)\hat{f} - f_1 f_2$. Звідси у випадку оператора інверсії, у якого власні значення дорівнюють ± 1, одержуємо $\hat{I}^2 = \hat{1}$, що й очікувалось.

13. Знайти вигляд оператора $\hat{F} = F\left(\hat{f}\right)$, де $\hat{f}$ – ермітовий оператор, $F(z)$ – довільна функція, у випадку, коли оператор $\hat{f}$ має N різних власних значень. Розглянути випадки $N = 2$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія тільки для друку)

і $N=3$, причому в останньому спектр власних значень складається із величин $0, \pm f_0$.

Розв'язання: на основі попередньої задачі можна записати

$$\hat{F}=F\left(\hat{f}\right)=\sum_{n=0}^{N-1} c_n \hat{f}^n\ ,\ F\left(f_i\right)=\sum_{n=0}^{N-1} c_n f_i^n\ ,\ i=1,2,...,N\ .$$

Друге із цих співвідношень представляє систему рівнянь, яка дозволяє визначати значення c_n.

У випадку $N=2$ легко знайти $c_{0,1}$, а разом з ними і

$$\hat{F}=\frac{f_2 F\left(f_1\right)-f_1 F\left(f_2\right)}{f_2-f_1}+\frac{F\left(f_1\right)-F\left(f_2\right)}{f_1-f_2}\hat{f}\ .$$

У випадку $N=3$ для вказаних в умові задачі власних значень одержуємо

$$\hat{F}=F\left(0\right)+\frac{F\left(f_0\right)-F\left(-f_0\right)}{2f_0}\hat{f}+\frac{F\left(f_0\right)+F\left(-f_0\right)-2F\left(0\right)}{2f_0^2}\hat{f}^2\ .$$

14. Розв'язати задачу на власні функції та власні значення для оператора комплексного спряження $\hat{K}$.

Відповідь: $\psi_\alpha\left(x\right)=g\left(x\right)\exp\left(i\alpha\right)$, $k_\alpha=\exp\left(-2i\alpha\right)$, де $g\left(x\right)$ – довільна дійсна функція, а α – довільне комплексне число.

15. Знайти власні функції та власні значення оператора інверсії.

Відповідь: парні хвильові функції відповідають власному числу $\lambda_1=1$, а непарні хвильові функції відповідають власному числу $\lambda_2=-1$.

1.3. Середні величини та струм імовірності

1. Хвильова функція вільної частинки має вигляд $\psi\left(x\right)=A\exp\left(-x^2/2a^2+ik_0x\right)$. Знайти константу нормування A, середні значення координати $\left\langle x\right\rangle$, імпульсу $\left\langle p_x\right\rangle$, кінетичної

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

енергії $\langle T \rangle$, область локалізації частинки та густину струму ймовірності $j_x(x)$.

Розв'язання: використовуючи умову нормування хвильової функції $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-x^2/a^2\right)dx = 1$, одержуємо $A^2 = 1/a\sqrt{\pi}$. Середнє значення координати дорівнює $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx = 0$. Середнє значення імпульсу дорівнює $\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\left(-i\hbar\partial/\partial x\right)\psi(x)dx = \hbar k_0$. Середнє значення кінетичної енергії $\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\left(\partial^2/\partial x^2\right)\psi(x)dx$ обчислюємо частинами:

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}dx\right].$$

Оскільки $\psi(x) \to 0$ при $|x| \to \infty$, то

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2 dx = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu}.$$

Підставляючи функцію $\psi(x)$ у формулу для густини струму

$$j_x(x) = \frac{i\hbar}{2\mu}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right),$$

маємо

$$j_x(x) = \frac{\hbar k_0}{\mu}\exp\left(-x^2/a^2\right).$$

2. Хвильова функція вільної частинки має вигляд $\psi(x) = A\exp\left(-x^2/2a^2 + ik_0 x\right)$. Розрахувати $\langle \Delta x^2 \rangle$, $\langle \Delta p_x^2 \rangle$. Перевірити співвідношення невизначеностей Гейзенберга.

Відповідь: $\langle \Delta x^2 \rangle = a^2/2$, $\langle \Delta p_x^2 \rangle = \hbar^2/2a^2$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

3. Знайти коефіцієнти Фур'є і визначити ширину хвильового пакета в k -просторі для хвильової функції

$$\psi(x) = A\exp\left(-x^2/2a^2 + ik_0x\right).$$

Розв'язання: представимо $\psi(x)$ у вигляді пакета хвиль $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k)\exp(ikx)dk$, де $C(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\exp(-ikx)dx =$ $= \left(Aa/\sqrt{2\pi}\right)\exp\left[-a^2(k_0-k)^2/2\right]$; $C(k)$ відрізняється від нуля поблизу $k = k_0$. Вираз $\left|C(k)\right|^2 dk = \frac{A^2a^2}{2\pi}\exp\left[-a^2(k_0-k)^2\right]dk$ пропорціональний імовірності знайти у частинки квазіімпульс в інтервалі $[k, k+dk]$; $\Delta k \sim 1/a$ визначає ширину пакета в k -просторі.

4. Хвильова функція частинки має вигляд $\psi(x) = C\exp(ip_0x/\hbar)\varphi(x)$. Знайти $\langle x\rangle$ та $\langle x^2\rangle$.

Відповідь: $\langle x\rangle = 0$, $\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\varphi^2 dx \Big/ \int_{-\infty}^{\infty}\varphi^2 dx$.

5. Хвильова функція частинки має вигляд $\psi(x) = C\exp(ip_xx/\hbar)\varphi(x)$. Знайти $\langle p_x\rangle$ та $\langle p_x^2\rangle$.

Відповідь: $\langle p_x\rangle = p_x$, $\langle p_x^2\rangle = p_x^2 - \int_{-\infty}^{\infty}(\partial\varphi/\partial x)^2 dx \Big/ \int_{-\infty}^{\infty}\varphi^2 dx$.

6. Хвильова функція частинки $\varphi(x) = C\exp(ip_xx/\hbar)$ при $0 \le x \le a$, $\varphi(x) = 0$ за $x < 0$ і $x > a$. Знайти $\langle p_x\rangle$, $\langle p_x^2\rangle$ та $\langle(\Delta p_x)^2\rangle$.

Відповідь: $\langle p_x\rangle = p_x$, $\langle p_x^2\rangle = p_x^2$, $\langle(\Delta p_x)^2\rangle = 0$.

7. Електрон перебуває в одновимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a у стані з квантовим числом n.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Знайти середні значення координати $\langle x \rangle$, імпульсу $\langle p_x \rangle$ та кінетичної енергії $\langle T \rangle$.

Відповідь: $\langle x \rangle = a/2$, $\langle p_x \rangle = 0$, $\langle T \rangle = \hbar^2 \pi^2 n^2 / a^2$.

8. Довести, що середнє значення квадрата фізичної величини додатне.

Вказівка: скористатися визначеннями

$$\langle F \rangle = \int \Psi^* (\vec{r},t) \hat{F} \Psi (\vec{r},t) d\vec{r} \text{ і } \int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 d\vec{r} = \int \Psi_2 \left[\hat{F}^+ \Psi_1 \right]^* d\vec{r} .$$

9. Знайти загальний розв'язок одновимірного нестаціонарного рівняння Шредінгера для вільної частинки.

Розв'язання: розв'язок рівняння $i\hbar \partial\psi / \partial t = -\left(\hbar^2 / 2\mu \right) \partial^2 \psi / \partial x^2$ шукаємо у вигляді $\psi(x,t) = \varphi(x) \chi(t)$, тобто маємо

$$\frac{i\hbar}{\chi} \frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2\mu\varphi} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = a .$$

Щоб $\varphi(x)$ було скінченним при $|x| \to \infty$, має бути $a > 0$. Позначаючи $2\mu a / \hbar^2 = k^2$, одержуємо $\chi(t) = \exp\left(-i\hbar k^2 t / 2\mu \right)$, де k – довільне дійсне число. Загальний розв'язок має вигляд

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \exp\left(ikx - i\hbar k^2 t / 2\mu \right) dk .$$

10. У момент часу $t = 0$ хвильова функція вільної частинки має вигляд $\psi(x) = A \exp\left(-x^2 / 2a^2 + ik_0 x \right)$. Розглянути еволюцію хвильової функції $\psi(x,t)$, густини ймовірності $\rho(x,t)$ і густини струму ймовірності $j_x(x,t)$.

Розв'язання: підставляючи $C(k)$ із задачі 3 у розв'язок задачі 9, одержуємо

$$\psi(x,t) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(ikx - \frac{i\hbar k^2 t}{2\mu} - \frac{a^2 k^2}{2} + a^2 k k_0 - \frac{a^2 k_0^2}{2} \right) dk.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (вебсайт для друку)

Після виділення у показнику експоненти повного квадрата, приводимо цей інтеграл до інтеграла Пуассона, тобто маємо

$$\psi(x,t)=\frac{A}{\sqrt{1+i\hbar t/\mu a^2}}\exp\left[-\frac{x^2-2ixa^2k_0+i\hbar a^2k_0^2t/\mu}{2\left(1+i\hbar t/\mu a^2\right)a^2}\right].$$

За визначенням густина ймовірності дорівнює

$$\rho=|\psi|^2=\frac{|A|^2}{\sqrt{1+\hbar^2t^2/\mu^2a^4}}\exp\left[-\frac{\left(x-\hbar k_0t/\mu\right)^2}{\left(1+\hbar^2t^2/\mu^2a^4\right)a^2}\right].$$

Цей вираз показує, що максимум кривої густини ймовірності переміщається зі швидкістю $\hbar k_0/\mu$, а ширина цієї кривої зростає із часом як $a(t)=a\sqrt{1+\hbar^2t^2/\mu^2a^4}$. Густину струму ймовірності можна представити у такому вигляді:

$$j_x(x,t)=\frac{i\hbar}{2\mu}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=\rho\frac{\hbar k_0}{\mu}\frac{\left(1+\hbar tx/\mu k_0a^4\right)}{\left(1+\hbar^2t^2/\mu^2a^4\right)}.$$

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія для друку)

11. Знайти середні значення координати, імпульсу, їх дисперсій та перевірити співвідношення невизначеностей Гейзенберга для частинки, яка перебуває в одновимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a: $V(x)=0$, якщо $0\le x\le a$ і $V(x)=\infty$, якщо $x<0$ і $x>a$.

Відповідь: $\langle x\rangle=a/2$, $\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle=\left(a^2/12\right)\left(1-6/\pi^2n^2\right)$, $\langle p_x\rangle=0$, $\left\langle(\Delta p_x)^2\right\rangle=\left(\hbar\pi n/a\right)^2$, $\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle\left\langle(\Delta p_x)^2\right\rangle=\hbar^2\left(\pi^2n^2-6\right)/12\ge\hbar^2/4$.

12. Для одновимірного гармонічного осцилятора повна енергія дорівнює $7\hbar\omega/2$. Записати хвильову функцію для цього стану та обчислити середню кінетичну енергію.

Розв'язання: оскільки для одновимірного випадку оператор кінетичної енергії $\hat{T}=-\left(\hbar^2/2\mu\right)\left(d^2/dx^2\right)$, то

$$\langle T\rangle = -\left(\hbar^2/2\mu\right)\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(d^2/dx^2\right)\psi dx = \left(\hbar^2/2\mu\right)\int_{-\infty}^{\infty}\left|d\psi/dx\right|^2 dx\,.$$

У даному випадку $n=3$ $\psi=\psi_3=C_3\exp\left(-\xi^2/2\right)H_3(\xi)$, де $C_3^2=\sqrt{\mu\omega/\pi\hbar}\,/\,2^3\,3!$, $H_3=8\xi^3-12\xi$. Виконавши заміну змінної $x=\xi\sqrt{\hbar/\mu\omega}$, одержимо

$$\langle T\rangle_3 = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\pi}\,3!}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\xi^2\right)\left(4\xi^8-36\xi^6+93\xi^4-54\xi^2+9\right)d\xi\,.$$

Інтеграли беруться просто, якщо застосувати диференціювання за параметром. Оскільки $\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\alpha\xi^2\right)d\xi=\sqrt{\pi/\alpha}$, то

$$\int_{-\infty}^{\infty}\xi^{2n}\exp\left(-\alpha\xi^2\right)d\xi=\left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^n\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\alpha\xi^2\right)d\xi=\frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}}$$

і $\langle T\rangle_3=\left(\hbar\omega/2\right)\left(3+1/2\right)$.

13. Показати, що середнє значення дипольного моменту системи заряджених частинок у стані, що характеризується відповідною парністю, дорівнює нулю.

Розв'язання: середнє значення дипольного моменту системи

$$\left\langle\vec{d}\right\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left(\vec{r}_1,...,\vec{r}_n\right)\sum\nolimits_a e_a\vec{r}_a\,\Psi\left(\vec{r}_1,...,\vec{r}_n\right)\prod\nolimits_b d\vec{r}_b\,.$$

Зробивши заміну змінних $\vec{r}_a'=-\vec{r}_a$, маємо

$$\left\langle\vec{d}\right\rangle=-\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\left(-\vec{r}_1',...,-\vec{r}_n'\right)\sum\nolimits_a e_a\vec{r}_a'\,\Psi\left(-\vec{r}_1',...,-\vec{r}_n'\right)\prod\nolimits_b d\vec{r}_b'\,.$$

Оскільки за умовою задачі $\Psi\left(-\vec{r}_1,...,-\vec{r}_n\right)=l\Psi\left(\vec{r}_1,...,\vec{r}_n\right)$, де $l=\pm1$ – парність стану, то знаходимо $\left\langle\vec{d}\right\rangle=-\left\langle\vec{d}\right\rangle=0$.

14. Знайти зв'язок між середніми значеннями координати та імпульсу частинки в двох станах, у яких хвильові функції Ψ_1 і Ψ_2 пов'язані співвідношенням:

а) $\Psi_2(x)=\Psi_1(x+a)$; б) $\Psi_2(x)=\exp\left(ip_0x/\hbar\right)\Psi_1(x)$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Відповідь:

а) $\langle x_2 \rangle = \langle x_1 \rangle - a$, $\langle p_2 \rangle = \langle p_1 \rangle$;

б) $\langle x_2 \rangle = \langle x_1 \rangle$, $\langle p_2 \rangle = \langle p_1 \rangle + p_0$, де індекси 1, 2 відповідають середнім значенням у станах з хвильовими функціями $\Psi_{1,2}(x)$.

15. Показати, що основне рівняння класичної механіки $d\vec{p}/dt = \vec{F}$, де $\vec{p}$ – імпульс, а $\vec{F}$ – сила, що діє на частинку, для просторових середніх справедливе і в квантовій механіці.

Розв'язання: нехай сила $\vec{F}$ виражена через потенціал, $\vec{F} = -\nabla V$, а імпульс $\vec{p}$ замінимо оператором $-i\hbar\nabla$. Покажемо, що середні значення $\langle \vec{p} \rangle$ і $\langle \vec{F} \rangle$ задовольняють рівняння Ньютона, якщо хвильові функції ψ і ψ^* задовольняють рівняння Шредінгера

$$i\hbar\,\partial\psi/\partial t = -\hbar^2\nabla^2\psi/2\mu + V\psi\,,\quad -i\hbar\,\partial\psi^*/\partial t = -\hbar^2\nabla^2\psi^*/2\mu + V\psi^*\,.$$

Доведення почнемо з диференціювання $\langle \vec{p} \rangle$ за часом:

$$d\langle \vec{p} \rangle/dt = -i\hbar\int\left(\psi^*\nabla\psi + \psi^*\nabla\psi\right)d\vec{r} = -i\hbar\int\left(\psi^*\nabla\psi - \dot{\psi}\nabla\psi^*\right)d\vec{r}\,.$$

Тут враховано, що внесок від поверхневого інтеграла, який з'являється при інтегруванні в останньому виразі другого доданка, дорівнює нулю і його можна опустити. Підставляючи $\dot{\psi}^*$ і $\dot{\psi}$ за допомогою рівнянь Шредінгера, одержимо

$$d\langle \vec{p} \rangle/dt = -\left(\hbar^2/2\mu\right)\int\left[\left(\nabla^2\psi^*\right)\left(\nabla\psi\right) + \left(\nabla^2\psi\right)\left(\nabla\psi^*\right)\right]d^3x + \\ + \int\left(\psi^* V\nabla\psi + V\psi\nabla\psi^*\right)d^3x\,.$$

Інтегрування частинами $\int\left(\nabla^2\psi^*\right)\left(\nabla\psi\right)d^3x = -\int\left(\nabla\psi^*\right)\left(\nabla^2\psi\right)d^3x$ показує, що перший інтеграл в останньому виразі стає таким, що дорівнює нулю. Застосовуючи далі інтегрування частинами до останнього доданка, одержимо $\vec{p} = \int\psi^*\left[V\nabla\psi - \nabla\left(V\psi\right)\right]d^3x$. Нарешті, користуючись формулою $\vec{p} = \int\psi^*\left[V\nabla\psi - \nabla\left(V\psi\right)\right]d^3x$, приходимо до рівняння $d\langle \vec{p} \rangle/dt = -\int\psi^*\left(\nabla V\right)\psi d^3x = \vec{F}$.

Видано в електронному вигляді Київським університетом імені Тараса Шевченка (Друкувати для друку)

1.4. Диференціювання операторів

1. Перевірити справедливість правила диференціювання $d\left(\hat{A}\hat{B}\right)/dt = \left(d\hat{A}/dt\right)\hat{B} + \hat{A}\left(d\hat{B}/dt\right)$ для операторів $\hat{A}$ та $\hat{B}$.

Вказівка: скористатися формулою $d\hat{F}/dt = \partial\hat{F}/\partial t + i\left[\hat{H},\hat{F}\right]/\hbar$.

2. Пересвідчитись у справедливості квантових рівнянь Ньютона $d\hat{\vec{r}}/dt = \hat{\vec{p}}/\mu$, $d\hat{\vec{p}}/dt = \hat{\vec{F}}$.

Розв'язання: скористаємось загальним визначенням $\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial\hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{L}\right]$. Оскільки $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + \hat{V}\left(\vec{r}\right)$ і $\frac{\partial\hat{\vec{r}}}{\partial t} = 0$, з урахуванням комутативності складових оператора $\hat{\vec{r}}$, то маємо $\hat{\vec{r}}\hat{V} - \hat{V}\hat{\vec{r}} = 0$ і $d\hat{\vec{r}}/dt = \left(\hat{\vec{p}}^2\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}}^2\right)/2\mu\hbar$. Після введення замін $\hat{\vec{r}} = \vec{e}_x\hat{x} + \vec{e}_y\hat{y} + \vec{e}_z\hat{z}$ та $\hat{\vec{p}}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$, а також використання комутаційних співвідношень $\hat{p}_j\hat{x}_k - \hat{x}_k\hat{p}_j = -i\hbar\delta_{jk}$ одержуємо

$$\frac{d\hat{\vec{r}}}{dt} = \frac{i}{2\mu\hbar}\left[\vec{e}_x\left(\hat{p}_x^2\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x^2\right) + \vec{e}_y\left(\hat{p}_y^2\hat{y} - \hat{y}\hat{p}_y^2\right) + \vec{e}_z\left(\hat{p}_z^2\hat{z} - \hat{z}\hat{p}_z^2\right)\right] =$$

$$= \frac{i}{2\mu\hbar}\left(-2i\hbar\right)\left(\vec{e}_x\hat{p}_x + \vec{e}_y\hat{p}_y + \vec{e}_z\hat{p}_z\right) = \frac{\hat{\vec{p}}}{\mu}.$$

Оскільки оператор $\hat{\vec{p}}$ також явно не залежить від часу, то маємо

$$\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\vec{p}}\right] = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{V}\hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}}\hat{V}\right) = -\nabla\hat{V} = \hat{\vec{F}}.$$

3. Знайти вираз для середньої густини струму, визначаючи оператор струму $\hat{\vec{j}}$ на основі класичної формули $\vec{j} = e\delta\left(\vec{r} - \vec{r}_0\right)\vec{v}$.

Розв'язання: оскільки оператори $\hat{\vec{r}}$ і $\hat{\vec{\vec{r}}} = -i\hbar\nabla/\mu$ не комутують, то оператор $\hat{\vec{j}}$ необхідно скласти у вигляді симетризованого виразу

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (авторське не для друку)

$$\hat{\vec{j}} = -\frac{i\hbar e}{2\mu}\left[\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\nabla + \nabla\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\right].$$

Тоді середня густина струму $\left\langle \vec{j} \right\rangle = \int \psi^*(\vec{r})\hat{\vec{j}}\psi(\vec{r})d\vec{r}$ після інтегрування другого доданка частинами набуває вигляду

$$\left\langle \vec{j} \right\rangle = -\frac{i\hbar e}{2\mu}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)_{\vec{r}=\vec{r}_0}.$$

4. Скласти похідні $d\hat{a}/dt$ та $d\hat{a}^+/dt$ для операторів $\hat{a}$ і $\hat{a}^+$.

Відповідь: $d\hat{a}/dt = -i\omega\hat{a}$, $d\hat{a}^+/dt = i\omega\hat{a}^+$.

5. Для частинки, потенціальна енергія якої дорівнює α/r, скласти оператор, який відповідає в класичній механіці величині $\vec{K} = \left[\vec{v},\vec{L}\right] + \alpha\vec{r}/r$. Показати, що $\hat{K}_x$, $\hat{K}_y$, $\hat{K}_z$ є інтегралами руху.

Розв'язання: оскільки оператори $\hat{v}_y$ і $\hat{L}_z$, а також $\hat{v}_z$ і $\hat{L}_y$ некомутативні, то після операції симетризації оператор $\hat{K}_x$ можна записати у вигляді

$$\hat{K}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{v}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{v}_y - \hat{v}_z\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{v}_z\right) + \frac{\alpha x}{r}.$$

Аналогічним чином записуються й інші два оператори $\hat{K}_y$, $\hat{K}_z$. Оскільки поле сферично-симетричне, то оператор $\hat{H}$ комутує з операторами $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$. Тому для доведення, наприклад, рівності $d\hat{K}_x/dt = 0$ необхідно обчислити комутатори $\hat{H}$ із $\hat{v}_y$, $\hat{v}_z$ та x/r. Вони виражаються таким чином:

$$\left[\hat{H},\hat{v}_y\right] = -i\hbar\alpha y/\mu r^3,\ \left[\hat{H},\hat{v}_z\right] = -i\hbar\alpha z/\mu r^3,$$

$$\left[\hat{H},x/r\right] = \hbar^2\left[x/r^3 - i\left(\hat{p}_x/r - x\left(\vec{r}\hat{\vec{p}}\right)/r^3\right)/\hbar\right]/\mu.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Херсонське для друку)

Підставляючи ці комутатори у вираз $d\hat{K}_x/dt = i\left[\hat{H}, \hat{K}_x\right]/\hbar$, переконуємось, що $d\hat{K}_x/dt = 0$. Аналогічно можна показати, що й $\hat{K}_y$ і $\hat{K}_z$ є інтегралами руху.

6. Показати, що для системи частинок за відсутності зовнішніх сил імпульс системи буде інтегралом руху.

Розв'язання: для системи частинок оператор імпульсу системи дорівнює $\hat{\vec{P}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{p}}_i$, а оператор енергії дорівнює

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{p}}_i^{\,2}/2\mu_i + \sum_{i=1}^{N} U_i\left(\vec{r}_i\right) + \sum_{i>k}^{N} U_{ik}\left(\vec{r}_{ik}\right),$$

де $\sum_{i=1}^{N} U_i\left(\vec{r}_i\right)$ – потенціальна енергія в зовнішньому полі, $\sum_{i>k}^{N} U_{ik}\left(\vec{r}_{ik}\right)$ – енергія взаємодії частинок, які входять у систему. Застосовуючи комутаційні правила, знаходимо $d\hat{\vec{P}}/dt = -\sum_{k=1}^{N} \nabla_k U_k$. Очевидно, що за відсутності зовнішніх сил імпульс системи буде інтегралом руху.

7. Знайти рівняння руху, якщо гамільтоніан частинки має вигляд $\hat{H} = \left(\hat{\vec{p}} - e\vec{A}/c\right)^2/2\mu + e\varphi$, де $\varphi\left(\vec{r},t\right)$ і $\vec{A}\left(\vec{r},t\right)$ – скалярний і векторний потенціали, відповідно.

Розв'язання: вводимо позначення $\hat{P}_x = \hat{p}_x - eA_x/c$, а також ураховуючи комутатор $\left[\hat{p}_x, \hat{x}\right] = -i\hbar$ і комутативність оператора $\hat{x}$ з операторами $\hat{P}_y$ і $\hat{P}_z$ (а тим більше з $\varphi\left(\vec{r},t\right)$), одержуємо

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{x}\right] = \frac{i}{2\hbar\mu}\left(\hat{P}_x^2\hat{x} - \hat{x}\hat{P}_x^2\right) =$$

$$= \frac{i}{2\hbar\mu}\left[\hat{P}_x\left(\hat{P}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{P}_x\right) + \left(\hat{P}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{P}_x\right)\hat{P}_x\right] = \frac{\hat{P}_x}{\mu}.$$

Ураховуючи $\partial\hat{P}_x/\partial t = -e\partial\hat{A}_x/c\partial t$, складемо оператор $d\hat{P}_x/dt$:

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = -\frac{e}{c}\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial t} + \frac{i}{2\mu\hbar}\left[\hat{P}_y^2\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{P}_z^2\right] + \frac{ie}{\hbar}\left(\hat{\varphi}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{\varphi}\right);$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

Очевидно, що $\hat{\varphi}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{\varphi} = \hat{\varphi}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{\varphi} = i\hbar\,\partial\hat{\varphi}/\partial x$. Нехай

$$\hat{D} = \hat{P}_y^2\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{P}_y^2 = \hat{P}_y\left(\hat{P}_y\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{P}_y\right) + \left(\hat{P}_y\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{P}_y\right)\hat{P}_y .$$

Складемо спочатку вираз

$$\hat{P}_y\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{P}_y = \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}\hat{A}_y\right)\left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x\right) - \left(\hat{p}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x\right)\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c}\hat{A}_y\right) =$$

$$= -\frac{e}{c}\left(\hat{p}_y\hat{A}_x - \hat{A}_x\hat{p}_y + \hat{A}_y\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{A}_y\right).$$

Оскільки $\hat{p}_y\hat{A}_x - \hat{A}_x\hat{p}_y = -i\hbar\,\partial\hat{A}_x/\partial y$, то $\hat{P}_y\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{P}_y = -\dfrac{i\hbar e}{c}\left(\operatorname{rot}\vec{A}\right)_z$ і $\hat{D} = -\dfrac{i\hbar e}{c}\left(\hat{P}_y\hat{H}_z + \hat{H}_z\hat{P}_y\right)$, де $\vec{H} = \operatorname{rot}\vec{A}$.

Таким чином, маємо

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = -\frac{e}{c}\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial t} - e\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \frac{e}{2\mu c}\left(\hat{P}_y\hat{H}_z + \hat{H}_z\hat{P}_y - \hat{P}_z\hat{H}_y - \hat{H}_y\hat{P}_z\right),$$

а оскільки $E_x = -\partial A_x/c\partial t - \partial\varphi/\partial x$, то одержана x-компонента сили Лоренца в операторному вигляді

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = -e\hat{E}_x + \frac{e}{2c}\left(\hat{v}_y\hat{H}_z + \hat{H}_z\hat{v}_y - \hat{v}_z\hat{H}_y - \hat{H}_y\hat{v}_z\right),$$

де $\vec{E}$ і $\vec{H}$ – напруженість електричного і магнітного полів, відповідно.

8. Знайти $d\hat{x}_i/dt$ і $d\left(\hat{p}_i - e\hat{A}_i/c\right)/dt$, якщо гамільтоніан має вигляд $\hat{H} = \sum_{k=1}^{3} c\hat{\alpha}_k\left(\hat{p}_k - e\hat{A}_k/c\right) + mc^2\hat{\alpha}_4 + e\hat{\varphi}(\vec{x})$, де $\hat{\alpha}_k, \hat{\alpha}_4$ – матриці, які задовольняють умови $\hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_i = 2\delta_{ik}$; $\vec{A} = \vec{A}(\vec{x}, t)$.

Розв'язання: оператор $\hat{x}$ комутує з $\hat{\alpha}_i$, $\hat{\alpha}_4$, $\vec{A}$ та φ. Тому, користуючись звичайним правилом комутації імпульсів і координат $\left[\hat{p}_i, \hat{x}_k\right] = -i\hbar\delta_{ik}$, одержуємо

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\frac{d\hat{x}_1}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left[c\hat{\alpha}_1\left(\hat{p}_1-\frac{e}{c}\hat{A}_1\right)\hat{x}_1-\hat{x}_1c\hat{\alpha}_1\left(\hat{p}_1-\frac{e}{c}\hat{A}_1\right)\right]=\frac{i}{\hbar}c\hat{\alpha}_1\left[\hat{p}_1,\hat{x}_1\right]=c\hat{\alpha}_1.$$

Позначаючи $\hat{p}_1-eA_1/c$ через $\hat{P}_1$, обчислимо $d\hat{P}_1/dt$:

$$\frac{d\hat{P}_1}{dt}=-\frac{e}{c}\frac{\partial\hat{A}_1}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\left\{c\hat{\alpha}_2\left[\hat{P}_2,\hat{P}_1\right]+c\hat{\alpha}_3\left[\hat{P}_3,\hat{P}_1\right]\right\}+\frac{i}{\hbar}e\left[\hat{\varphi},\hat{P}_1\right].$$

Оскільки оператори $\hat{P}_i$ комутують з $\hat{\alpha}_i$ і, окрім того,

$$\left[\hat{P}_2,\hat{P}_1\right]=-\frac{i\hbar e}{c}\hat{H}_3,\ \left[\hat{P}_3,\hat{P}_1\right]=\frac{i\hbar e}{c}\hat{H}_2,\ \left[\hat{\varphi},\hat{P}_1\right]=\left[\hat{\varphi},\hat{p}_1\right]=i\hbar\frac{\partial\hat{\varphi}}{\partial x_1},$$

то маємо $\frac{d\hat{P}_1}{dt}=-\frac{e}{c}\frac{\partial\hat{A}_1}{\partial t}-e\frac{\partial\hat{\varphi}}{\partial x_1}+\frac{e}{c}\left[c\hat{\alpha}_2\hat{H}_3-c\hat{\alpha}_3\hat{H}_2\right]$. Оскільки $c\hat{\alpha}_i=\hat{v}_i$, то одержано силу Лоренца в операторному вигляді.

9. Показати, що для частинки в однорідному полі оператор $\hat{\vec{G}}=\hat{\vec{p}}-\vec{F}_0t$ є оператором величини, що зберігається ($\vec{F}_0$ – сила, яка діє на частинку). Порівняти з результатом класичної механіки.

Розв'язання: вважаючи, що $\hat{H}=\vec{p}^{\,2}/2\mu-\vec{F}_0\vec{r}$, знаходимо

$$\frac{d}{dt}\hat{\vec{G}}=\frac{\partial}{\partial t}\hat{\vec{G}}+\frac{1}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\vec{G}}\right]=-\vec{F}_0-\frac{i}{\hbar}\left[\left(\vec{F}_0,\vec{r}\right),\hat{\vec{p}}\right]=0,$$

тому середнє значення $\left\langle\vec{G}\right\rangle=\left\langle\vec{p}\left(t\right)\right\rangle-\vec{F}_0t=\text{const}$. Це природне квантово-механічне узагальнення класичної механіки, згідно з якою при русі в однорідному полі вектор $\vec{p}_0=\vec{p}\left(t\right)-\vec{F}_0t$ (оскільки $\vec{v}\left(t\right)=\vec{v}\left(0\right)+\vec{F}_0t/\mu$) є інтегралом руху і дорівнює імпульсу частинки при $t=0$.

10. Довести, що для частинки в потенціальному полі $U\left(x\right)$ справджується таке операторне співвідношення:

$$\frac{d}{dt}\left(\hat{x}\hat{p}_x\right)=-x\frac{\partial U}{\partial x}+\frac{1}{\mu}\hat{p}_x^2.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Навчальна література)

Розв'язання: записавши гамільтоніан частинки у вигляді $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$, знайдемо

$$\frac{d}{dt}(\hat{x}\hat{p}_x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)x\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right).$$

Подіявши цим оператором на довільну хвильову функцію $\psi(x)$, після нескладних перетворень дістанемо

$$\frac{d}{dt}(\hat{x}\hat{p}_x)\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - x\frac{\partial U}{\partial x}\psi, \text{ тобто } \frac{d}{dt}(\hat{x}\hat{p}_x) = \frac{\hat{p}_x^2}{\mu} - x\frac{\partial U}{\partial x}.$$

11. Потенціальна енергія частинки $U(x) = ax$, де a – стала величина. Які з механічних величин зберігаються?

Розв'язання: якщо $U(x) = ax$, то оператор Гамільтона набуває вигляду $\hat{H} = \left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right)/2\mu + ax$. Тоді з оператором $\hat{H}$ комутують лише оператори $\hat{H}, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{L}_x$. Отже, зберігаються енергія, проекції імпульсу $\hat{p}_y$ і $\hat{p}_z$, та проекція моменту імпульсу $\hat{L}_x$.

12. Які з механічних величин зберігаються під час руху частинки в змінному полі $U(z,t) = f(t)z$?

Розв'язання: гамільтоніан частинки $\hat{H} = -\hbar^2\Delta/2\mu + f(t)z$ залежить від часу, у зв'язку з чим енергія частинки не зберігається. Зберігаються величини p_x, p_y, L_z, оскільки їхні оператори $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{L}_z$ комутують з оператором $\hat{H}$. Решта механічних величин $p_z, L_x, L_y, \vec{L}^2$ не зберігаються.

13. Довести справедливість операторного співвідношення $d\hat{L}_z/dt = \hat{M}_z$, де $\hat{L}_z$ – оператор z-проекції моменту імпульсу, а $\hat{M}_z$ – оператор z-проекції моменту зовнішніх потенціальних сил.

Розв'язання: записавши оператор Гамільтона частинки $\hat{H} = \hat{T}_r + \hat{\vec{L}}^2/2\mu r^2 + U(\vec{r})$, де $\hat{T}_r = -\left(\hbar^2/2\mu r^2\right)\partial\left(r^2\partial/\partial r\right)/\partial r$, і

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

враховуючи, що оператор $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$ комутує з операторами $\hat{T}_r$ та $\hat{\vec{L}}^2 \big/ 2\mu r^2$, матимемо

$$\frac{d\hat{L}_z}{dt} = \left[\hat{H}, \hat{L}_z\right] = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{H}\right) = -\frac{\partial U}{\partial\varphi} = \nabla U \cdot \frac{\partial\vec{r}}{\partial\varphi}.$$

Оскільки $x = r\sin\theta\cos\varphi$, $y = r\sin\theta\sin\varphi$, $z = r\cos\theta$, дістанемо

$$\frac{\partial x}{\partial\varphi} = -r\sin\theta\sin\varphi = -y, \quad \frac{\partial y}{\partial\varphi} = r\sin\theta\cos\varphi = x, \quad \frac{\partial z}{\partial\varphi} = 0.$$

Узявши до уваги також $\vec{F} = -\nabla U$, остаточно знаходимо

$$d\hat{L}_z \big/ dt = x\hat{F}_y - y\hat{F}_x = \hat{M}_z.$$

14. Визначити, за яких умов квадрат моменту кількості руху $\hat{\vec{L}}^2$ і його проекція $\hat{L}_z$ можуть бути інтегралами руху.

Розв'язання: відповідно до правил комутації маємо $d\hat{L}_z \big/ dt = \hat{x}\partial\hat{V}\big/\partial y - \hat{y}\partial\hat{V}\big/\partial x$ і $\hat{L}_z$ є інтегралом руху в полі з віссю симетрії Oz; $d\hat{\vec{L}}^2 \big/ dt = i\hbar\left(\Delta_{\theta\varphi}V - V\Delta_{\theta\varphi}\right) = 0$ у полі центральної сили, коли $V = V(r)$.

15. Нехай гамільтоніан $\hat{H}$ і його власні значення E_n залежать від параметра λ. Довести рівність

$$\partial E_n(\lambda)/\partial\lambda = \left\langle n \middle| \partial\hat{H}(\lambda)/\partial\lambda \middle| n \right\rangle.$$

Розв'язання: нехай гамільтоніан системи $\hat{H}$, а отже, його власні значення і власні функції, залежать від деякого параметра λ. Продиференціюємо рівняння на власні значення для $\hat{H}$ за цим параметром:

$$\frac{\partial\hat{H}(\lambda)}{\partial\lambda}\psi(q,\lambda) + \hat{H}(\lambda)\frac{\partial\psi(q,\lambda)}{\partial\lambda} = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda}\psi(q,\lambda) + E(\lambda)\frac{\partial\psi(q,\lambda)}{\partial\lambda}.$$

Помноживши це рівняння зліва на функцію $\psi^*(q,\lambda)$ і проінтегрувавши за змінною q, одержимо

$$\int \psi^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi dq + \int \psi^* \hat{H} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} dq = \frac{\partial E}{\partial \lambda} + E \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} dq .$$

Користуючись самоспряженістю оператора $\hat{H}$, "перекидаємо" його дію в другому доданку зліва на ψ^*. У результаті цей доданок скорочується з другим доданком у правій частині рівняння.

Отже, одержуємо остаточно, що $\left\langle \partial \hat{H} / \partial \lambda \right\rangle = \partial \left\langle \hat{H} \right\rangle / \partial \lambda$. Скориставшись власною функцією ψ_n оператора $\hat{H}$, приходимо до рівності $\partial E_n(\lambda)/\partial \lambda = \left\langle n \left| \partial \hat{H}(\lambda)/\partial \lambda \right| n \right\rangle$, відомої як співвідношення Фейнмана–Хеллманна. Цей результат справедливий, очевидно, для будь-якого ермітового оператора. Він відомий як теорема про те, що середнє значення від похідної ермітового оператора за параметром λ дорівнює похідній від середнього значення цього оператора за λ. Бачимо, що ця теорема нагадує результат, який можна одержати для швидкості зміни середнього значення оператора із часом, і нічого дивного в цьому немає, оскільки час t у нерелятивістській теорії є параметром, а не змінною.

Видано лише для ознайомлення
(власність університету)

1.5. Теорія представлень операторів

1. Частинка перебуває в нескінченно глибокій одновимірній потенціальній ямі у стані з енергією $E_2 = 2\hbar^2\pi^2/ma^2$. Визначити для неї розподіл за імпульсами.

Розв'язання: частинка в такій потенціальній ямі з енергією $E_n = n^2\hbar^2\pi^2/2ma^2$ в x-представленні відповідає функції $\psi_n(x) = \sqrt{2/a}\sin(\pi n x/a)$ на відрізку $0 \le x \le a$. Розподіл за імпульсами визначається хвильовою функцією в p-представленні, до якого можна перейти від $\psi_n(x)$ за звичайним правилом $\psi_2(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2(x)\psi_p^*(x)dx$, де $\psi_p(x) = \exp(ipx/\hbar)/\sqrt{2\pi\hbar}$ – власні функції оператора імпульсу в x-представленні, нормовані таким чином, що

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_p^*(x)\psi_{p'}(x)dx=\delta(p-p').$$

За умовою задачі $n=2$, тому маємо

$$\psi_2(p)=\sqrt{\frac{1}{a\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\sin\frac{2\pi x}{a}\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)dx=\frac{2\sqrt{\pi a}\hbar^{3/2}\left(\exp\left(\frac{ipa}{2\hbar}\right)-1\right)}{\left(p^2a^2-4\pi^2\hbar^2\right)},$$

і, відповідно, імовірність знайти цю частинку з імпульсом, який лежить в інтервалі $p, p+dp$, дорівнює

$$dW_2(p)=\left|\psi_2(p)\right|^2dp=16\pi a\hbar^3\sin^2(pa/2\hbar)dp\Big/\left(p^2a^2-4\pi^2\hbar^2\right)^2.$$

2. Вказати нормовані відповідним чином власні функції радіуса-вектора $\Psi_{\vec{r}_0}$ та імпульсу $\Psi_{\vec{p}_0}$ у $\vec{r}$- та $\vec{p}$-представленнях.

Відповідь: $\Psi_{\vec{r}_0}(\vec{r})=\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$, $\Psi_{\vec{p}_0}(\vec{r})=(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(i\vec{p}_0\vec{r}/\hbar)$, $\Psi_{\vec{r}_0}(\vec{p})=(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(-i\vec{p}\vec{r}_0/\hbar)$, $\Psi_{\vec{p}_0}(\vec{p})=\delta(\vec{p}-\vec{p}_0)$.

3. Знайти в імпульсному представленні хвильову функцію стану частинки $\Psi(x)=C\exp\left[ip_0x/\hbar-(x-x_0)^2/2a^2\right]$.

Відповідь: $\Psi(p)=C\sqrt{\frac{a^2}{\hbar}}\exp\left[-\frac{i(p-p_0)x_0}{\hbar}-\frac{(p-p_0)^2a^2}{2\hbar^2}\right]$.

4. За заданої хвильової функції $\Psi(x,y,z)$ обчислити ймовірність перебування частинки в інтервалах значень z від z_1 до z_2 і p_y від p_1 до p_2.

Розв'язання: шукана ймовірність

$$W=\int_{z_1}^{z_2}\int_{p_1}^{p_2}\int_{-\infty}^{\infty}\left|F(x,z,p_y)\right|^2dxdzdp_y,$$

де $F(x,z,p_y)=(2\pi\hbar)^{-1/2}\int\Psi(x,y,z)\exp(-ip_yy/\hbar)dy$, причому функція $\Psi(x,y,z)$ вважається нормованою на 1.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

5. Знайти явний вигляд операторів інверсії, зсуву, зміни масштабу, комплексного спряження та перестановки двох частинок.

Розв'язання:

1) у координатному представленні дія оператора інверсії така: $\Psi_2(x) = \hat{I}\Psi_1(x) = \Psi_1(-x)$. Помножимо ці співвідношення на $\Psi_p^*(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp(-ipx/\hbar)$ та інтегруємо за x. У результаті одержуємо

$$\Psi_2(p) = \hat{I}\Psi_1(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int \exp(-ipx/\hbar)\Psi_1(-x)\,dx =$$

$$= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int \exp(ipx/\hbar)\Psi_1(x)\,dx = \Psi_1(-p),$$

тобто оператор $\hat{I}$ в імпульсному представленні також є оператором інверсії.

Аналогічно знаходимо й для інших операторів:

2) $\hat{T}_a\Psi(p) = \exp(ipa/\hbar)\Psi(p)$; 3) $\hat{M}_c\Psi(p) = \left(1/\sqrt{c}\right)\Psi\left(p/\sqrt{c}\right)$;

4) $\hat{K}\Psi(p) = \Psi^*(-p)$; 5) $\hat{P}_{12}\Phi(p_1, p_2) = \Phi(p_2, p_1)$.

6. Знайти в одновимірному випадку вигляд оператора $\hat{p}^{-1}$ у x-представленні та оператора $\hat{x}^{-1}$ у p-представленні.

Розв'язання: оскільки $\hat{p}\hat{p}^{-1} \equiv 1$, то

$$(d/dx)\left(\hat{p}^{-1}\Psi(x)\right) \equiv (i/\hbar)\Psi(x).$$

Інтегруючи в межах від $-\infty$ до x, знаходимо явний вигляд оператора $\hat{p}^{-1}$ у координатному представленні

$$\frac{\hat{1}}{p}\Psi(x) = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{x}\Psi(x')\,dx'.$$

З іншого боку, інтегруючи в межах від x до ∞, одержимо дещо інше співвідношення:

$$\frac{\hat{1}}{p}\Psi(x) = -\frac{i}{\hbar}\int_{x}^{\infty}\Psi(x')\,dx'.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Звідси видно, що такі функції задовольняють співвідношення $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x)dx=0$, яке забезпечує перетворення на нуль функції $\hat{p}^{-1}\Psi(x)$ при $x\to\pm\infty$.

Аналогічно для оператора $\hat{x}^{-1}$ у p-представленні одержимо

$$\frac{\hat{1}}{x}\Psi(p)=\frac{i}{\hbar}\int_{p}^{\infty}\Psi(p')dp'=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{p}\Psi(p')dp';\ \int_{-\infty}^{\infty}\Psi(p)dp=0.$$

7. Знайти оператор $\hat{x}$ в імпульсному представленні і визначити його власні функції та власні значення.

Розв'язання: щоб перейти до нового представлення, скористаємось таким виразом для середнього значення x оператора $\hat{x}=x$: $\langle x\rangle=\int\psi^{*}\hat{x}\psi dx$. Виражаючи $\psi(x)$ через $\psi(p)$: $\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p)\exp(ipx/\hbar)dp$, і підставляючи в $\langle x\rangle$, маємо $\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}(x)x\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p)\exp(ipx/\hbar)dpdx$. Змінюючи порядок інтегрування за p і x, беручи до уваги $x\exp(ipx/\hbar)=-i\hbar\partial\exp(ipx/\hbar)/\partial p$ та інтегруючи за p частинами, одержуємо

$$\langle x\rangle=-i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}(x)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(p)\frac{\partial}{\partial p}\exp(ipx/\hbar)dpdx=$$

$$=i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}(x)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(ipx/\hbar)\frac{\partial\psi(p)}{\partial p}dpdx.$$

Оскільки $\int\psi^{*}(x)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(ipx/\hbar)dx=\psi^{*}(p)$, то маємо

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}(p)i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\psi(p)dp,\ \text{тобто}\ \hat{x}_{p}=i\hbar\partial/\partial p.$$

Власні функції $\hat{x}_{p}$ шукаємо за загальним правилом. Ці функції задовольняють рівняння $i\hbar\partial\psi(p)/\partial p=x\psi(p)$ та умови скін-

Видавничо-поліграфічний Центр Київського університету (Взірця неслідно друкує)

ченності, однозначності та неперервності. Розв'язок цього рівняння $\psi(p)=\exp(-ipx/\hbar)\big/\sqrt{2\pi\hbar}$ задовольнятиме всі умови за довільних дійсних x; спектр $\hat{x}$ неперервний.

8. Для частинки, що перебуває в однорідному потенціальному полі, визначити власні значення та власні функції оператора енергії в імпульсному представленні.

Розв'язання: для частинки в однорідному потенціальному полі $\hat{V}=A\hat{x}=Ai\hbar\,\partial/\partial p$ (див. попередню задачу) рівняння для власних функцій оператора енергії в імпульсному представленні має вигляд

$\dfrac{p^2\varphi}{2\mu}+i\hbar A\dfrac{\partial\varphi}{\partial p}=E\varphi$. Відокремлюючи змінні $\dfrac{d\varphi}{\varphi}=\dfrac{E-p^2/2\mu}{i\hbar A}dp$, одержуємо $\varphi=C\exp\left[i\left(p^3/6\mu-Ep\right)\big/\hbar A\right]$. Скінченність $\varphi(p)$ забезпечується за довільних дійсних E, тобто спектр енергії неперервний. Стала C визначається з умови нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_E^*(p)\varphi_{E'}(p)\,dp=\delta(E-E')=C^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[i(E-E')\,p/\hbar A\right]dp\,.$$

Оскільки

$$\delta(E-E')=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[i(E-E')\right]dp\text{, то } C^2=1/2\pi\hbar A\,.$$

9. Знайти матричні елементи дипольного моменту x^2 і p для частинки в нескінченно глибокій одновимірній потенціальній ямі, розташованій в області $|x|\le a/2$.

Розв'язання: очевидно, що нормовані хвильові функції в цій потенціальній ямі для n парних і відповідно непарних будуть такими:

$$\psi_n(x)=\sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a)\,,\ \psi_n(x)=\sqrt{2/a}\cos(n\pi x/a)\,.$$

Матричний елемент $\langle n|ex|m\rangle=e\int_{-a/2}^{a/2}\psi_n^*x\psi_m dx$ не дорівнює нулю, очевидно, лише тоді, коли n і m мають різну парність (у протилежному випадку під інтегралом буде непарна функція, і він перетво-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

риться на нуль). Нехай n – парне, а m – непарне. Унаслідок парності підінтегральної функції, вводячи $y = \pi x/a$, маємо

$$\langle n|ex|m\rangle = \frac{4e}{a}\int_0^{a/2} \sin\frac{n\pi x}{a}\, x \cos\frac{m\pi x}{a}\, dx = (-1)^{(n-m+1)/2}\, \frac{8aemn}{\pi^2\left(n^2-m^2\right)^2}.$$

Із аналогічних міркувань вираз $\langle n|x^2|m\rangle = \int_{-a/2}^{a/2} \psi_n^* x^2 \psi_m\, dx$ відмінний від нуля тільки за умови однакової парності n і m. Якщо n і m парні, то

$$\langle n|x^2|m\rangle = \frac{4}{a}\int_0^{a/2} \sin\frac{n\pi x}{a}\, x^2 \cos\frac{m\pi x}{a}\, dx = (-1)^{(n-m)/2}\, \frac{8a^2mn}{\pi^2\left(n^2-m^2\right)^2}.$$

Для непарних n і m: $\langle n|x^2|m\rangle = 4a^2\left(n^2+m^2\right)\Big/\pi^2\left(n^2-m^2\right)^2$.

Матричний елемент імпульсу $\langle n|p|m\rangle = \frac{\hbar}{i}\int_{-a/2}^{a/2} \psi_n^* \frac{d\psi_m}{dx}\, dx$ не дорівнює нулю, якщо n і m мають різну парність, і дорівнює (для парного n і непарного m):

$$\langle n|p|m\rangle = \frac{2\hbar}{ia}\int_{-a/2}^{a/2} \sin\frac{n\pi x}{a}\frac{d}{dx}\left(\cos\frac{m\pi x}{a}\right) dx = (-1)^{n-m+1}\, \frac{4\hbar mn}{ia\left(n^2-m^2\right)}.$$

Якщо n і m поміняються парністю, результат для $\langle n|p|m\rangle$ залишається таким самим.

10. Знайти власні функції оператора енергії для одновимірного гармонічного осцилятора в імпульсному представленні.

Розв'язання: рівняння для власних функцій одновимірного гармонічного осцилятора в p-представленні має вигляд

$$\frac{p^2}{2\mu}\psi(p) + \frac{\mu\omega^2}{2}\left(i\hbar\frac{d}{dp}\right)^2 \psi(p) = E\psi(p).$$

Вводячи безрозмірну змінну $\eta = p/\sqrt{\mu\hbar\omega}$ і покладаючи $\lambda = 2E/\hbar\omega$, приходимо до рівняння, яке збігається з безрозмір-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія 1.0 для друку)

ним рівнянням для цієї ж задачі в x-представленні. Отже, маємо $\psi_n(p) = C_n \exp\left(-p^2/2\mu\hbar\omega\right) H_n\left(p/\sqrt{\mu\hbar\omega}\right)$, де $H_n(x)$ – поліном Ерміта; $E_n = \hbar\omega\left(n+1/2\right)$.

Таким чином, для гармонічного осцилятора розподіл за координатами та імпульсами однотипний.

11. Знайти власні значення енергії одновимірного гармонічного осцилятора і матричні елементи координати та імпульсу в енергетичному представленні, використовуючи тільки перестановочні співвідношення між $\hat{p}$ і $\hat{q}$.

Розв'язання: для гармонічного осцилятора маємо

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2\hat{q}^2}{2}, \quad \langle H\rangle = \frac{1}{2\mu}\left\langle p^2\right\rangle + \frac{\mu\omega^2}{2}\left\langle q^2\right\rangle \geq 0.$$

Таким чином, оператор $\hat{H}$ не має від'ємних власних значень, тобто $E_n \geq 0$. Вводячи $\hat{X} = \hat{p} + i\mu\omega\hat{q}$ та $\hat{X}^+ = \hat{p} - i\mu\omega\hat{q}$ і враховуючи, що $\left[\hat{p},\hat{q}\right] = -i\hbar$, одержимо

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}^2 + \mu^2\omega^2\hat{q}^2\right) = \frac{1}{2\mu}\left\{\hat{X}\hat{X}^+ + i\mu\omega\left[\hat{p},\hat{q}\right]\right\} = \frac{1}{2\mu}\hat{X}\hat{X}^+ + \frac{\hbar\omega}{2},$$

або $\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{X}^+\hat{X} - \frac{\hbar\omega}{2}$. Складемо комутатори $\hat{H}$ із $\hat{X}$ і $\hat{X}^+$:

$$\left[\hat{H},\hat{X}\right] = \left(\frac{1}{2\mu}\hat{X}\hat{X}^+ + \frac{\hbar\omega}{2}\right)\hat{X} - \hat{X}\left(\frac{1}{2\mu}\hat{X}^+\hat{X} - \frac{\hbar\omega}{2}\right) = \hbar\omega\hat{X},$$

$$\left[\hat{H},\hat{X}^+\right] = -\hbar\omega\hat{X}^+.$$

Запишемо ці рівності у власному представленні $\hat{H}$, де $\left\langle n\middle|\hat{H}\middle|n'\right\rangle = E_n\delta_{nn'}$:

$$\hbar\omega\left\langle n\middle|\hat{X}\middle|n'\right\rangle = \left\langle n\middle|\hat{H}\hat{X}\middle|n'\right\rangle - \left\langle n\middle|\hat{X}\hat{H}\middle|n'\right\rangle =$$

$$= \sum\nolimits_{n''}\left[\left\langle n\middle|\hat{H}\middle|n''\right\rangle\left\langle n''\middle|\hat{X}\middle|n'\right\rangle - \left\langle n\middle|\hat{X}\middle|n''\right\rangle\left\langle n''\middle|\hat{H}\middle|n'\right\rangle\right] =$$

$$= \left(E_n - E_{n'}\right)\left\langle n\middle|\hat{X}\middle|n'\right\rangle.$$

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія на для друку)

Звідси випливає, що $\left(E_n - E_{n'} - \hbar\omega\right)\left\langle n\left|\hat{X}\right|n'\right\rangle = 0$, тобто $\left\langle n\left|\hat{X}\right|n'\right\rangle$ не дорівнює нулю лише за рівності $E_{n'} = E_n - \hbar\omega$. Аналогічно маємо $\left\langle n\left|\hat{X}^+\right|n'\right\rangle \neq 0$, якщо $E_{n'} = E_n + \hbar\omega$. Із рівності $\hat{H} = \hat{X}^+\hat{X}/2\mu - \hbar\omega/2$ у цьому ж представленні діагональний матричний елемент записується у вигляді

$$\left\langle n\left|\hat{H}\right|n\right\rangle = E_n = \frac{1}{2\mu}\sum\nolimits_{n'}\left\langle n\left|\hat{X}^+\right|n'\right\rangle\left\langle n'\left|\hat{X}\right|n\right\rangle - \frac{\hbar\omega}{2}.$$

У сумі може бути відмінний від нуля член з $\left\langle n\left|\hat{X}^+\right|n'\right\rangle$ лише якщо $E_{n'} = E_n + \hbar\omega$ є також власним значенням $\hat{H}$. Якщо ж це не так, то сума дорівнює нулю і $E_n = -\hbar\omega/2$, що неможливо внаслідок зазначеного раніше. Таким чином, має бути правильним перше припущення, тобто, якщо E_n – власне значення $\hat{H}$, то і $E_{n'} = E_n + \hbar\omega$ є також його власним значенням.

Розглядаючи вираз $\hat{H} = \hat{X}\hat{X}^+/2\mu + \hbar\omega/2$, так само одержимо, що $E_n = \frac{1}{2\mu}\sum\nolimits_{n'}\left\langle n\left|\hat{X}\right|n'\right\rangle\left\langle n'\left|\hat{X}^+\right|n\right\rangle + \hbar\omega/2$, де $E_{n'} = E_n - \hbar\omega$. Це означає, що або $E_{n'}$ – також власне значення $\hat{H}$ (тобто E_n – не найменше власне значення), або, якщо це не так, то $\left\langle n\left|\hat{X}\right|n'\right\rangle = 0$ і $E_n = \hbar\omega/2$ – найнижчий рівень енергії, а наступний за ним більший на $\hbar\omega$. Таким чином, знайдено, що $E_n = \hbar\omega\left(n + 1/2\right)$, а $\left\langle n\left|\hat{X}\right|n-1\right\rangle$ і $\left\langle n\left|\hat{X}^+\right|n+1\right\rangle$ відмінні від нуля. З урахуванням $\left\langle n\left|\hat{X}\right|n-1\right\rangle^* = \left\langle n-1\left|\hat{X}^+\right|n\right\rangle$ маємо $\left|\left\langle n\left|\hat{X}\right|n-1\right\rangle\right|^2 = 2\mu n\hbar\omega$, звідки $\left\langle n\left|\hat{X}\right|n-1\right\rangle = \left\langle n-1\left|\hat{X}^+\right|n\right\rangle^* = \sqrt{2\mu m\hbar\omega}\exp i\varphi$. Узявши $\varphi = \pi/2$, нарешті, одержуємо:

$$\left\langle n\left|\hat{q}\right|n-1\right\rangle = \left\langle n-1\left|\hat{q}\right|n\right\rangle^* = \sqrt{\hbar n/2\mu\omega},$$

Видавничо-поліграфічний центр
Київського університету
(версія не для друку)

$$\langle n|\hat{p}|n-1\rangle = \langle n-1|\hat{p}|n\rangle^* = i\sqrt{\mu\hbar\omega n/2}\,.$$

12. Встановити співвідношення між ядрами $L(\vec{r},\vec{r}')$ і $L(\vec{p},\vec{p}')$ одного й того ж оператора $\hat{L}$ у $\vec{r}$- і $\vec{p}$-представленнях.

Розв'язання: у загальному випадку лінійний оператор $\hat{L}$ можна розглядати як лінійний інтегральний оператор, тобто $\Phi(\xi) = \hat{L}\Psi(\xi) = \int L(\xi,\xi')\Psi(\xi')d\xi'$, де $L(\xi,\xi')$ – ядро оператора $\hat{L}$. Наприклад, ядро оператора координати $\hat{x}$ записується у вигляді $X(x,x') = x\delta(x-x')$, ядро оператора інверсії записується у вигляді $I(x,x') = \delta(x+x')$, ядро оператора імпульсу записується у вигляді $P(x,x') = -i\hbar\, d\delta(x-x')/dx$, ядро оператора трансляції записується у вигляді $T_a(x,x') = \delta(x-x'+a)$, ядром оператора зміни масштабу є $M_c(x,x') = \sqrt{c}\delta(cx-x')$.

Знайдемо зв'язок між ядрами $L^+(\xi,\xi')$ і $L(\xi,\xi')$ операторів $\hat{L}^+$ та $\hat{L}$. Нехай $\Phi(\xi) = \hat{L}\Psi(\xi) = \int L(\xi,\xi')\Psi(\xi')d\xi'$. Помноживши це співвідношення на $\Phi^*(\xi)$ та інтегруючи за ξ, одержимо

$$\int \Phi^*(\xi)\hat{L}\Psi(\xi)d\xi = \int \Phi^*(\xi)\left[\int L(\xi,\xi')\Psi(\xi')d\xi'\right]d\xi =$$

$$= \int\left[\int L(\xi,\xi')\Phi^*(\xi)d\xi\right]\Psi(\xi')d\xi' = \int\left[\int L^*(\xi',\xi)\Phi(\xi')d\xi'\right]^*\Psi(\xi)d\xi =$$

$$= \int\left[\int \hat{L}^+(\xi,\xi')\Phi(\xi')d\xi'\right]^*\Psi(\xi)d\xi,$$

тобто одержуємо такий зв'язок: $L^+(\xi,\xi') = L^*(\xi',\xi)$.

Знайдемо тепер зв'язок між ядрами $L(\vec{r},\vec{r}')$ і $L(\vec{p},\vec{p}')$ одного й того самого лінійного оператора $\hat{L}$ у $\vec{r}$- і $\vec{p}$-представленнях. На основі $\Phi(\vec{r}) = \int L(\vec{r},\vec{r}')\Psi(\vec{r}')d\vec{r}'$ і $\Phi(\vec{p}) = \int L(\vec{p},\vec{p}')\Psi(\vec{p}')d\vec{p}'$ проведемо такі перетворення:

$$\Phi(\vec{r}) = h^{-3/2}\int \exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar)\Phi(\vec{p})d\vec{p} =$$

Державне підприємство "Київський університет" (Державне підприємство) Видавничо-поліграфічний комплекс

$$= h^{-3/2}\int d\vec{p}\exp\left(i\vec{p}\vec{r}/\hbar\right)\int L\left(\vec{p},\vec{p}\,'\right)\Psi\left(\vec{p}\,'\right)d\vec{p}\,' =$$

$$= h^{-3}\int d\vec{r}\,'\Psi\left(\vec{r}\,'\right)\left\{\iint\exp\left[i\left(\vec{p}\vec{r}-\vec{p}\,'\vec{r}\,'\right)/\hbar\right]L\left(\vec{p},\vec{p}\,'\right)d\vec{p}d\vec{p}\,'\right\} =$$

$$= \int L\left(\vec{r},\vec{r}\,'\right)\Psi\left(\vec{r}\,'\right)d\vec{r}\,',$$

тобто $L\left(\vec{r},\vec{r}\,'\right) = h^{-3/2}\iint\exp\left[i\left(\vec{p}\vec{r}-\vec{p}\,'\vec{r}\,'\right)/\hbar\right]L\left(\vec{p},\vec{p}\,'\right)d\vec{p}d\vec{p}\,'$. Також одержимо $L\left(\vec{p},\vec{p}\,'\right) = h^{-3/2}\iint\exp\left[i\left(\vec{p}\,'\vec{r}\,'-\vec{p}\vec{r}\right)/\hbar\right]L\left(\vec{r},\vec{r}\,'\right)d\vec{r}d\vec{r}\,'$.

13. Знайти оператори $\hat{r}^{-1}$ та $\hat{r}^{-2}$ у p-представленні.

Розв'язання: оператор $\hat{G}_1 \equiv \dfrac{\hat{1}}{r}$ має в координатному представленні ядро $G_1\left(\vec{r},\vec{r}\,'\right) = \delta\left(\vec{r}-\vec{r}\,'\right)/r$, а в імпульсному представленні його ядро записується таким чином:

$$G_1\left(\vec{p},\vec{p}\,'\right) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int\frac{1}{r}\exp\left[i\left(\vec{p}\,'-\vec{p}\right)\vec{r}/\hbar\right]dV = \left[2\hbar\pi^2\left(\vec{p}\,'-\vec{p}\right)^2\right]^{-1}.$$

Цей інтеграл обчислювався так:

$$\int\frac{\exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right)}{r}dV = \lim_{\kappa\to 0}\int\frac{\exp\left(i\vec{k}\vec{r}-\kappa r\right)}{r}dV = \lim_{\kappa\to 0}\int_0^\infty r\exp\left(-\kappa r\right)dr\int_0^{2\pi}d\varphi\cdot$$

$$\cdot\int_0^\pi\sin\theta\exp\left(ikr\cos\theta\right)d\theta = 2\pi\lim_{\kappa\to 0}\int_0^\infty r\exp\left(-\kappa r\right)dr\int_{-1}^1\exp\left(ikrx\right)dx =$$

$$= \frac{4\pi}{k}\lim_{\kappa\to 0}\int_0^\infty\sin kr\exp\left(-\kappa r\right)dr = 4\pi\lim_{\kappa\to 0}\frac{1}{k^2+\kappa^2} = \frac{4\pi}{k^2}.$$

Оператор $\hat{G}_2 \equiv \dfrac{\hat{1}}{r^2}$ має в координатному представленні ядро $G_2\left(\vec{r},\vec{r}\,'\right) = \delta\left(\vec{r}-\vec{r}\,'\right)/r^2$, а в імпульсному представленні його ядро

$$G_2\left(\vec{p},\vec{p}\,'\right) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int\frac{1}{r^2}\exp\left[i\left(\vec{p}\,'-\vec{p}\right)\vec{r}/\hbar\right]dV = \left[4\pi\hbar^2\left|\vec{p}\,'-\vec{p}\right|\right]^{-1}.$$

Цей інтеграл був обчислений таким чином:

Видавничо-поліграфічний центр Київського університету (версія не для друку)

$$\int \frac{\exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right)}{r^2}dV = \lim_{\kappa\to 0}\int \frac{\exp\left(i\vec{k}\vec{r}-\kappa r\right)}{r^2}dV = \lim_{\kappa\to 0}\int_0^\infty \exp\left(-\kappa r\right)dr\int_0^{2\pi} d\varphi\cdot$$

$$\cdot\int_0^\pi \sin\theta\exp\left(ikr\cos\theta\right)d\theta = 2\pi\lim_{\kappa\to 0}\int_0^\infty \exp\left(-\kappa r\right)dr\int_{-1}^1 \exp\left(ikrx\right)dx =$$

$$= \frac{4\pi}{k}\lim_{\kappa\to 0}\int_0^\infty \frac{\sin kr\exp\left(-\kappa r\right)}{r}dr = \frac{4\pi}{k}\lim_{\kappa\to 0}\int_\kappa^\infty d\kappa\int_0^\infty \sin kr\exp\left(-\kappa r\right)dr =$$

$$= \frac{4\pi}{k}\lim_{\kappa\to 0}\int_0^\infty \frac{d\kappa}{\kappa^2+k^2} = \frac{4\pi}{k}\lim_{\kappa\to 0}\operatorname{arctg}\frac{\kappa}{k}\Big|_\kappa^\infty = \frac{4\pi}{k}\lim_{\kappa\to 0}\left(\frac{\pi}{2}-\operatorname{arctg}\frac{\kappa}{k}\right) = \frac{2\pi^2}{k}.$$

14. Довести, що в довільному представленні справедливе співвідношення $\left[\hat{\vec{r}},\hat{H}\right] = i\hbar\hat{\vec{p}}/\mu$.

Вказівка: скористатися виразом для оператора Гамільтона $\hat{H} = \hat{\vec{p}}^2/2\mu + \hat{V}\left(\vec{r}\right)$.

15. Користуючись енергетичним представленням, одержати на основі співвідношення із попередньої задачі зв'язок між $\left\langle n\middle|\vec{p}\middle|s\right\rangle$ і $\left\langle n\middle|\vec{r}\middle|s\right\rangle$.

Відповідь: $\left\langle n\middle|\vec{p}\middle|s\right\rangle = im\omega_{ns}\left\langle n\middle|\vec{r}\middle|s\right\rangle$, де $\omega_{ns} = \left(E_n - E_s\right)/\hbar$.

16. Виходячи із правил комутації для координат та імпульсів, довести таке правило сум: $\sum_{ns}\omega_{ns}\left|\left\langle s\middle|\vec{r}\middle|n\right\rangle\right|^2 = -3\hbar/\mu$.

Вказівка: скласти вираз $\hat{\vec{r}}\left[\hat{\vec{r}},\hat{H}\right] - \left[\hat{\vec{r}},\hat{H}\right]\hat{\vec{r}} = 3\hbar^2/\mu$ і записати його діагональний матричний елемент в енергетичному представленні.

17. Використати перестановочні співвідношення складових моменту кількості руху і знайти власні значення квадрата моменту кількості руху $\hat{\vec{L}}^2$, його складової вздовж осі z $\hat{L}_z$ та матричні елементи $\hat{L}_x$ і $\hat{L}_y$ в $\left(\hat{\vec{L}}^2,\hat{L}_z\right)$-представленні.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Серія на допомогу другу)

Розв'язання: будемо базуватися на таких комутаційних співвідношеннях моменту імпульсу: $\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z$, $\hat{L}_x\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{L}_x = 0$, де $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$. Вводимо $\hat{X} = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$, $\hat{X}^+ = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$. Очевидно, $\hat{L}_z$, $\hat{X}$ і $\hat{X}^+$ комутують з $\hat{\vec{L}}^2$. Записуючи рівність $\hat{L}^2\hat{X} - \hat{X}\hat{L}^2 = 0$ у тому представленні, де $\hat{\vec{L}}^2$ і $\hat{L}_z$ діагональні, тобто $\left\langle l\left|\hat{L}^2\right|l'\right\rangle = L_l^2\delta_{ll'}$, одержимо $\left\langle lm\left|\hat{X}\right|l'm'\right\rangle\left(L_l^2 - L_{l'}^2\right) = 0$. При цьому відмінними від нуля будуть тільки діагональні по l матричні елементи $\hat{X}$, а також $\hat{X}^+$ і $\hat{L}_z$. Тому в подальших співвідношеннях між цими операторами величину $\hat{\vec{L}}^2$ можна вважати її власним значенням L_l^2. Запишемо $\hat{\vec{L}}^2$ у вигляді

$$\hat{\vec{L}}^2 = \left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_x - i\hat{L}_y\right) + i\left(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x\right) + \hat{L}_z^2 =$$

$$= \hat{X}\hat{X}^+ + \left(\hat{L}_z - \hbar/2\right)^2 - \hbar^2/4.$$

З іншого боку, $\hat{L}^2 = \hat{X}^+\hat{X} + \left(\hat{L}_z + \hbar/2\right)^2 - \hbar^2/4$. Склавши комутатори $\hat{L}_z$ з $\hat{X}$ та з $\hat{X}^+$, переконуємось, що

$$\hat{L}_z\hat{X} - \hat{X}\hat{L}_z = \hat{L}_z\left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right) - \left(\hat{L}_x + i\hat{L}_y\right)\hat{L}_z = \hbar\hat{X}.$$

Аналогічно одержуємо $\left[\hat{L}_z, \hat{X}^+\right] = -\hbar\hat{X}^+$. Записуючи ці співвідношення в $\left(\hat{L}^2, \hat{L}_z\right)$-представленні і позначаючи $\left\langle lm\left|\hat{L}_z\right|lm'\right\rangle = m\hbar\delta_{mm'}$, маємо

$$\hbar\left\langle lm\left|\hat{X}\right|lm'\right\rangle = \sum\nolimits_{m''}\left[\left\langle lm\left|\hat{L}_z\right|lm''\right\rangle\left\langle lm''\left|\hat{X}\right|lm'\right\rangle -\right.$$

$$\left. -\left\langle lm\left|\hat{X}\right|lm''\right\rangle\left\langle lm''\left|\hat{L}_z\right|lm'\right\rangle\right] = \left\langle lm\left|\hat{X}\right|lm'\right\rangle\left(m - m'\right)\hbar,$$

тобто $\left\langle lm\left|\hat{X}\right|lm'\right\rangle\left(m - m' - 1\right)\hbar = 0$.

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

Отже, $\left\langle lm\left|\hat{X}\right|lm'\right\rangle \neq 0$ лише, якщо $m' = m-1$; аналогічно $\left\langle lm\left|\hat{X}^{+}\right|lm'\right\rangle \neq 0$, якщо $m' = m+1$.

18. Стан частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі, стінки якої розташовані при $x=0$ і $x=a$, описується функцією $\psi(x) = Ax(x-a)$. Знайти для неї розподіл за енергіями, середню енергію $\langle E\rangle$ та $\left\langle \Delta E^2\right\rangle$.

Розв'язання: щоб знайти розподіл за енергіями, $\langle E\rangle$ і $\left\langle \Delta E^2\right\rangle$, необхідно нормувати функцію $\psi(x) = Ax(x-a)$, а потім представити її у вигляді розкладу за нормованими власними функціями оператора енергії, що дорівнюють $\psi_n(x) = \sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a)$, $n = 1,2,\ldots$. З умови $A^2\int_0^a x^2(a-x)^2\,dx = 1$ знаходимо $A^2 = 30/a^5$. Шукаємо c_n:

$$c_n = \int_0^a \psi(x)\psi_n^*(x)\,dx = A\sqrt{2/a}\int_0^a x(a-x)\sin(n\pi x/a)\,dx =$$
$$= 2a^3 A\sqrt{2/a}\left[1-(-1)^n\right]/(n\pi)^3 .$$

Тоді $W(E_n) = |c_n|^2 = 240\left[1-(-1)^n\right]^2/(n\pi)^6$. Очевидно, що $W(E_n) \neq 0$ лише для $n = 1,3,\ldots$. При цьому для $n=1$ $W(E_1) = 960/\pi^6 \approx 0{,}999$, тобто з переважною ймовірністю частинка буде мати енергію $E_1 = \hbar^2\pi^2/2\mu a^2$.

Середню енергію можна обчислити як $\langle E\rangle = \sum_n W(E_n)E_n$ і як

$$\langle E\rangle = A^2\int_0^a x(a-x)\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\right)\left[x(a-x)\right]dx = 5\hbar^2/\mu a^2 .$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

Легко переконатися, що $\langle E\rangle = \sum_{n=1,3,\ldots}^{\infty}\left(\frac{960}{n^6\pi^6}\cdot\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2\mu a^2}\right)$ дає той самий результат. Величину $\langle E^2\rangle$ можна обчислити таким чином:

$$\langle E^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{H}^2\psi dx = \int_0^a\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\left[Ax(a-x)\right]\right\}^2 dx = 30\hbar^4/\mu^2a^4,$$

або

$$\langle E\rangle = \sum_{n=1,3,\ldots}^{\infty}\left(\frac{960}{n^6\pi^6}\cdot\frac{\hbar^4\pi^4n^4}{4\mu^2a^4}\right) = \frac{240\hbar^4}{\mu^2\pi^2a^4}\sum_{n=1,3,\ldots}^{\infty}\frac{1}{n^2},$$

звідки $\langle \Delta E^2\rangle = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = 5\hbar^4/\mu^2a^4$.

19. Плоский ротатор перебуває в стані з хвильовою функцією $\psi(\varphi) = A\sin^2\varphi$. Визначити для нього ймовірність знайти різні значення проекції моменту кількості руху $\hat{L}_z$ і середні значення $\langle \hat{L}_z\rangle$ і $\langle \hat{L}_z^2\rangle$.

Розв'язання: нормовану хвильову функцію $\psi(\varphi) = A\sin^2\varphi$ запишемо у вигляді $\psi(\varphi) = \left[1+\exp(i2\varphi)/2 - \exp(-i2\varphi)/2\right]/\sqrt{3\pi}$, звідки зрозуміло, що при вимірюванні моменту імпульсу можна одержати значення $\hat{L}_z = 0, +2\hbar, -2\hbar$ з імовірностями $W(0) = 2/3$, $W(2) = W(-2) = 1/6$; $\langle \hat{L}_z\rangle = 0$, $\langle \hat{L}_z^2\rangle = 4\hbar^2/3$.

20. Знайти хвильові функції в x- та p-представленнях для частинки, яка локалізована в точці x_0, і для частинки, яка рухається з визначеним імпульсом p_0.

Розв'язання: для частинки, яка локалізована в точці x_0, хвильову функцію необхідно шукати як власну функцію оператора $\hat{x}$. У x-представленні $\hat{x} = x$, і рівняння зводиться до $x\psi = x_0\psi$, тобто $(x - x_0)\psi = 0$ і $\psi(x) \neq 0$ при $x = x_0$.

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

Таким чином, $\psi(x) = A\delta(x - x_0)$; спектр неперервний. Умова нормування

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\delta(x - x_0')\,dx = \delta(x_0 - x_0')$$

дає $A = 1$, тобто $\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$. У p-представленні $\hat{x} = i\hbar\partial/\partial p$, тобто його власні функції одержуються із рівняння $i\hbar\partial\varphi/\partial p = x_0\varphi$, а саме $\varphi_{x_0}(p) = C\exp(-ix_0 p/\hbar)$. Стала C визначається з умови нормування $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{x_0}^*(p)\varphi_{x_1}(p)dp = \delta(x_1 - x_0)$; $C^2 = 1/2\pi\hbar$, оскільки $\delta(x_1 - x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[i(x_1 - x_0)t\right]\Big/2\pi$.

Аналогічно власні функції імпульсу дорівнюють

$$\psi_{p_0}(x) = C\exp(ip_0 x/\hbar) \text{ і } \varphi_{p_0}(p) = \delta(p - p_0).$$

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
(версія не для друку)

Розділ 2

ОДНОВИМІРНИЙ РУХ

Короткі теоретичні відомості

1. Якщо оператор Гамільтона явно не залежить від часу, то в результаті розв'язування нестаціонарного рівняння Шредінгера $i\hbar\partial\Psi(x,t)/\partial t = \hat{H}(x)\Psi(x,t)$ методом відокремлення змінних знаходимо хвильові функції стаціонарних станів

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\exp(-iEt/\hbar).$$

При цьому функція $\psi(x)$ є розв'язком такого стаціонарного рівняння Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right]\psi(x) = E\psi(x).$$

В області енергій $\min U(x) < E < U(\pm\infty)$ одновимірної потенціальної ями всі рівні дискретного спектра не вироджені. При цьому, якщо $\min U(x) < E < U(+\infty)$ ($U(+\infty) < U(-\infty)$), то ці рівні дискретні.

Для хвильових функцій дискретного спектра справедлива така осциляційна теорема: функція $\psi_n(x)$, що відповідає $(n+1)$ власному значенню E_n (найбільшому за величиною), перетворюється на нуль (за скінченних значень x) n разів.

2. Для багатьох одновимірних потенціальних ям при переході до відповідних змінних рівняння Шредінгера зводиться до диференціальних рівнянь другого порядку зі змінними коефіцієнтами, розв'язками яких є деякі спеціальні функції. Наприклад, для лі-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

нійного осцилятора з потенціальною енергією $U(x)=kx^2/2$ розв'язок рівняння Шредінгера дає спектр власних значень $E_n=\hbar\omega(n+1/2)$ і відповідні власні функції

$$\psi_n(x)=\left(1/\pi b^2\right)^{1/4}\left(1/\sqrt{2^n n!}\right)\exp\left(-x^2/2b^2\right)H_n(x/b),$$

де $H_n(z)=(-1)^n\exp\left(z^2\right)d^n\exp\left(-z^2\right)/dz^n$ – поліноми Ерміта, $\omega=\sqrt{k/\mu}$, $b=\sqrt{\hbar/\mu\omega}$. Розрахунок з використанням цих функцій приводить до таких матричних елементів оператора координати: $x_{n,n+1}=x_{n+1,n}=b\sqrt{(n+1)/2}$ (інші дорівнюють нулю), а також пов'язаних з ними матричних елементів оператора імпульсу $p_{nk}=i\mu\omega_{nk}x_{nk}$, причому $\omega_{nk}=\pm\omega$ для $n=k\pm1$.

Для ряду задач рівняння Шредінгера зводиться до диференціальних рівнянь для гіпергеометричних функцій, зазвичай до гіпергеометричних функцій Куммера

$${}_1F_1(\alpha;\beta;z)=\sum_{n=0}^{\infty}\left[(\alpha)_n z^n/n!(\beta)_n\right]$$

та функцій Гаусса

$${}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma;z)=\sum_{n=0}^{\infty}\left[(\alpha)_n(\beta)_n z^n/n!(\gamma)_n\right].$$

3. В області $E>\min U(\pm\infty)$ спектр рівнів енергії неперервний. Значення енергії $E>\max U(\pm\infty)$ (для яких у класичній механіці можливий інфінітний рух в обох напрямках: як при $x\to-\infty$, так і при $x\to+\infty$) є двократно виродженими. Як незалежні розв'язки рівняння Шредінгера в цьому випадку розглядаються такі, що пов'язані з фізичною задачею про відбиття частинок потенціалом і однозначно визначаються виглядом асимптотики хвильової функції при $x\to\pm\infty$. Наприклад, у випадку частинок, які падають на силовий центр зліва

$$\Psi(x)\approx\begin{cases}\exp(ik_1x)+A(E)\exp(-ik_1x), & x\to-\infty,\\ B(E)\exp(ik_2x), & x\to+\infty,\end{cases}$$

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

де $k_{1,2}=\sqrt{2\mu\left(E-U\left(\mp\infty\right)\right)/\hbar^2}$. Амплітуди $A(E)$, $B(E)$ визначають коефіцієнти проходження $D(E)=\left(k_2/k_1\right)|B|^2$ і відбиття $R(E)=|A|^2$ частинок. Ці коефіцієнти характеризуються такими властивостями:

$$D(E)+R(E)=1;\quad D_+(E)=D_-(E);$$

$$D(E)\to 1 \text{ при } E\to\infty;$$

$$D(E)\to 0 \text{ при } E\to\max U\left(\mp\infty\right).$$

Друга із цих властивостей ($D_+(E)=D_-(E)$) виражає незалежність значення коефіцієнта проходження за заданої енергії E від напрямку падіння частинок, зліва чи справа, на силовий центр.

4. Функція Гріна задовольняє рівняння

$$\left(\hat{H}-E\right)G_E\equiv-\left(\hbar^2/2\mu\right)\left(\partial^2/\partial x^2\right)G_E-EG_E=\delta\left(x-x'\right).$$

За допомогою функції Гріна загальний розв'язок рівняння $-\left(\hbar^2/2\mu\right)\Psi''(x)-E\Psi(x)=f(x)$ для $E<0$ можна записати у вигляді $\Psi(x)=A\exp(-\kappa x)+B\exp(\kappa x)+\int_{-\infty}^{\infty}G_E(x,x')f(x')dx'$.

Якщо покласти $f=-U(x)\Psi(x)$, а також зважаючи лише на розв'язки рівняння Шредінгера, які не зростають при $x\to\pm\infty$ (у цьому випадку $A=B=0$), тоді рівняння Шредінгера в інтегральній формі набуває вигляду

$$\Psi_E(x)=-\left(\mu/\kappa\hbar^2\right)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\kappa|x-x'|\right)U(x')\Psi_E(x')dx'.$$

Воно еквівалентне диференціальному рівнянню Шредінгера з урахуванням граничних умов – згасання $\Psi(x)$ при $x\to\pm\infty$ і має розв'язок лише за значень $E<0$, що належать енергетичному спектру.

5. Якщо потенціальна енергія $V(x)$ є періодичною функцією з періодом a, тобто $V(x+na)=V(x)$, де $n=0,\pm1,\ldots$, то рівняння Шредінгера інваріантне щодо всіх трансляцій, кратних a.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Позначимо через $u_1(x)$ і $u_2(x)$ два лінійно незалежних розв'язки рівняння Шредінгера. Тоді функції $u_1(x+a)$ і $u_2(x+a)$ також мають бути розв'язками цього рівняння. Оскільки довільний розв'язок можна представити у вигляді лінійної комбінації $u_1(x)$ і $u_2(x)$, то це повинно бути справедливим і щодо розв'язків $u_1(x+a)$ і $u_2(x+a)$:

$$u_1(x+a) = C_{11}u_1(x) + C_{12}u_2(x),$$
$$u_2(x+a) = C_{21}u_1(x) + C_{22}u_2(x).$$

Тепер можна довести (теорема Флоке), що серед цих розв'язків існують таких два, скажімо $\psi_1(x)$ і $\psi_2(x)$, що $\psi(x+a) = \lambda\psi(x)$, де λ – стала. У цьому випадку буде $\psi(x+na) = \lambda^n\psi(x)$. Нехай $\psi(x) = Au_1(x) + Bu_2(x)$. Тоді, спираючись на вищезазначене, маємо

$$\psi(x+a) = (AC_{11} + BC_{21})u_1(x) + (AC_{12} + BC_{22})u_2(x).$$

Цей вираз дорівнює $\lambda\psi(x)$, якщо

$$AC_{11} + BC_{21} = \lambda A,$$
$$AC_{12} + BC_{22} = \lambda B.$$

Ця система однорідних лінійних рівнянь щодо A і B має нетривіальний розв'язок, коли перетворюється на нуль визначник

$$\begin{vmatrix} C_{11} - \lambda & C_{21} \\ C_{12} & C_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Це квадратне щодо λ рівняння, двом кореням якого, λ_1 і λ_2, відповідають дві функції, $\psi_1(x)$ і $\psi_2(x)$.

Із формули $\psi(x+a) = \lambda\psi(x)$ можна побачити, що визначник Вронського $D = \psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1'$ задовольняє співвідношення $D(x+a) = \lambda_1\lambda_2 D(x)$. За теоремою Гріна визначник Вронського D не залежить від x, звідки випливає, що $\lambda_1\lambda_2 = 1$. Про параметри λ_1 і λ_2 можемо говорити більш детально на основі рів-

Видавничо-поліграфічний центр
Київського університету
(вересень 2008)
Друкується за авторською редакцією

ності $\psi(x+na)=\lambda^n\psi(x)$. Нехай $|\lambda|>1$, тоді амплітуда хвильової функції $\psi(x)$ буде необмежено зростати при $x\to\infty$ і необмежено спадати при $x\to-\infty$. Протилежний випадок спостерігається, якщо $|\lambda|<1$. Такі розв'язки не нормовані навіть у тому сенсі, який ми вкладаємо в це поняття у випадку плоских хвиль, тому фізично значимі розв'язки існують лише при $|\lambda|=1$, тобто, коли $\lambda_1=\exp(iKa)$ і $\lambda_2=\exp(-iKa)$, а K – дійсна величина. Оскільки $\exp(2\pi in)=1$, то можна обмежитись тими значеннями K, які лежать в інтервалі $-\pi/a\le K\le\pi/a$, що дає нам повний набір всіх допустимих хвильових функцій.

Таким чином, для всіх обмежених розв'язків $\psi(x)$ маємо $\psi(x+na)=\exp(inKa)\psi(x)$. Це можливо лише в тому випадку, якщо $\psi(x)=\exp(iKx)u_K(x)$, а $u_K(x)$ – періодична функція, тобто $u_K(x)=u_K(x+a)$. У цьому полягає сенс теореми Блоха.

Звернемось тепер до питання про енергетичний спектр. В інтервалі $0\le x\le a$ побудуємо розв'язок $\psi(x)$ із будь-яких двох розв'язків $u_1(x)$, $u_2(x)$: $\psi(x)=Au_1(x)+Bu_2(x)$. Для сусіднього інтервалу періодичності $a\le x\le 2a$ згідно із формулою $\psi(x+na)=\exp(inKa)\psi(x)$ маємо

$$\psi(x)=\exp(iKa)\left[Au_1(x-a)+Bu_2(x-a)\right],$$

причому значення аргументу $x-a$ потрапляють у попередній інтервал. На межі цих інтервалів, у точці $x=a$, мають виконуватися такі рівності:

$$Au_1(a)+Bu_2(a)=\exp(iKa)\left[Au_1(0)+Bu_2(0)\right],$$

$$Au_1'(a)+Bu_2'(a)=\exp(iKa)\left[Au_1'(0)+Bu_2'(0)\right].$$

Ця однорідна щодо A і B система рівнянь має ненульовий розв'язок, якщо перетворюється на нуль визначник

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\begin{vmatrix} u_1(a)-\exp(iKa)u_1(0) & u_2(a)-\exp(iKa)u_2(0) \\ u_1'(a)-\exp(iKa)u_1'(0) & u_2'(a)-\exp(iKa)u_2'(0) \end{vmatrix} = 0 .$$

Розкриваючи цей визначник, приходимо до кінцевої рівності

$$\cos Ka = \frac{\left[u_1(0)u_2'(a)+u_1(a)u_2'(0)\right]-\left[u_2(0)u_1'(a)+u_2(a)u_1'(0)\right]}{2\left(u_1u_2'-u_2u_1'\right)} .$$

Це рівняння являє собою умову існування власних значень. Воно має розв'язки тільки в тому випадку, якщо абсолютна величина правої частини не перевищує одиницю, тоді можна обчислити величину K. Існують інтервали значень енергії, які задовольняють вказану умову та сусідні з ними інтервали значень енергії, для яких ця умова не виконується.

Таким чином, енергетичний спектр складається не з окремих рівнів, а представляє собою почергову послідовність дозволених і заборонених енергетичних зон. Межі енергетичних зон визначаються зі співвідношення $\cos Ka = \pm 1$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

2.1. Рух частинок у простих одновимірних потенціальних полях

1. Частинка перебуває в одновимірній прямокутній потенціальній ямі нескінченної глибини: $V(x)=0$, якщо $0 \le x \le a$; $V(x)=\infty$, якщо $x<0$ і $x>a$. Знайти розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера.

Розв'язання: розглянемо області I $(x<0)$ і III $(x>a)$, де $V=\infty$. Записуючи рівняння Шредінгера в цих областях як

$$\frac{1}{\psi_{\mathrm{I,III}}}\frac{d^2\psi_{\mathrm{I,III}}}{dx^2} = \frac{2\mu}{\hbar^2}(V-E),$$

бачимо, що при $V=\infty$ функції $\psi_{\mathrm{I,III}}$ мають перетворюватися на нуль.

В області II $(0 \le x \le a)$ рівняння Шредінгера зводиться до вигляду $d^2\psi_{II}/dx^2 + 2\mu E\psi_{II}/\hbar^2 = 0$. Вводячи позначення $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$, можна його розв'язок записати у вигляді $\psi_{II} = A\sin(kx+\alpha)$. Унаслідок вимоги неперервності функції в усіх точках і, зокрема, при переході з області I в область II $(x=0)$ та з області II в область III $(x=a)$ покладемо $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ і $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$, тобто маємо $A\sin\alpha = 0$ і $A\sin(ka+\alpha) = 0$. Таким чином, $\alpha = 0$ і k може набувати тільки дискретних значень, що дорівнюють $k_n = n\pi/a$, де $n = 1,2,\ldots$. Спектр енергетичних рівнів частинки визначаються формулою $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2\mu a^2$. З умови нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\,dx = \int_0^a|\psi_{II}|^2\,dx = A^2\int_0^a \sin^2\frac{n\pi x}{a}\,dx = 1$$

маємо $A = \sqrt{2/a}$.

Отже, хвильова функція в усьому просторі задається у вигляді рівностей $\psi_I = 0$; $\psi_{II} = \sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a)$; $\psi_{III} = 0$.

2. Розв'язати рівняння Шредінгера для частинки, що перебуває в такій одновимірній прямокутній потенціальній ямі скінченної глибини: $V(x) = -V_0$, якщо $|x| \le a$; $V(x) = 0$, якщо $|x| > a$.

Розв'язання: розв'язуємо задачу для $E < 0$. В областях I і III після введення позначення $\kappa^2 = -2\mu E/\hbar^2 > 0$ рівняння Шредінгера набувають вигляду $d^2\psi_{I,III}/dx^2 - \kappa^2\psi_{I,III} = 0$, а отже:

$$\psi_I = A\exp(\kappa x) + B\exp(-\kappa x),\ \psi_{III} = C\exp(\kappa x) + D\exp(-\kappa x).$$

Із вимоги скінченності ψ_I і ψ_{III} при $x \to \pm\infty$ випливає умова, що $B = C = 0$, тобто $\psi_I = A\exp(\kappa x)$, $\psi_{III} = D\exp(-\kappa x)$.

В області II рівняння Шредінгера записується так:

$$d^2\psi_{II}/dx^2 + k^2\psi_{II} = 0,$$

де $k^2 = 2\mu(V_0 + E)/\hbar^2$ і розв'язок $\psi_{II} = \alpha\sin\kappa x + \beta\cos\kappa x$. У точках $x = -a$ та $x = a$ вимагаємо неперервності хвильової функції

Видавничо-поліграфічний центр
«Київський університет»
(версія не для друку)

та її першої похідної (це можна зробити, оскільки розрив потенціальної енергії в цих точках скінченний):

$$\psi_{\mathrm{I}}(-a)=\psi_{\mathrm{II}}(-a),\ \psi_{\mathrm{II}}(a)=\psi_{\mathrm{III}}(a),$$

$$\left.\frac{d\psi_{\mathrm{I}}}{dx}\right|_{x=-a}=\left.\frac{d\psi_{\mathrm{II}}}{dx}\right|_{x=-a},\ \left.\frac{d\psi_{\mathrm{II}}}{dx}\right|_{x=a}=\left.\frac{d\psi_{\mathrm{III}}}{dx}\right|_{x=a}.$$

Для коефіцієнтів A, D, α, β одержуємо чотири однорідні лінійні рівняння:

$$A\exp(-\kappa a)+\alpha\sin ka-\beta\cos ka=0,$$
$$A\kappa\exp(-\kappa a)-\alpha k\cos ka-\beta k\sin ka=0,$$
$$D\exp(-\kappa a)-\alpha\sin ka-\beta\cos ka=0,$$
$$D\kappa\exp(-\kappa a)-\alpha k\cos ka-\beta k\sin ka=0.$$

Із рівності нулю визначника цієї системи випливає існування нетривіальних розв'язків:

$$\kappa^2-k^2+2k\kappa\operatorname{ctg}2ka=0.$$

Розв'язуючи це рівняння щодо κ, одержуємо два кореня: $\kappa=k\operatorname{tg}ka$ і $\kappa=-k\operatorname{ctg}ka$. Після підстановки першого кореня в систему рівнянь одержуємо

$$\alpha=0,\ A=D,\ \beta=A\exp(-\kappa a)/\cos ka;\ \psi_{\mathrm{I}}=A\exp(\kappa x),$$
$$\psi_{\mathrm{II}}=A\exp(-\kappa a)\frac{\cos kx}{\cos ka},\ \psi_{\mathrm{III}}=A\exp(-\kappa x),$$

тобто $\psi(x)=\psi(-x)$ – функція парна. Після підстановки другого кореня в систему рівнянь одержуємо

$$\alpha=-A\exp(-\kappa a)\frac{\sin kx}{\sin ka},\ \beta=0;\ A=-D;\ \psi_{\mathrm{I}}=A\exp(\kappa x),$$
$$\psi_{\mathrm{II}}=-A\exp(-\kappa a)\frac{\sin kx}{\sin ka},\ \psi_{\mathrm{III}}=-A\exp(-\kappa x),$$

тобто $\psi(x)=-\psi(-x)$ – функція непарна.

Коефіцієнт A визначаємо з умов нормування. Наприклад, для першого випадку одержуємо

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$|A|^2\left[\int_{-\infty}^{-a}\exp(2\kappa x)dx+\frac{\exp(-2\kappa a)}{\cos^2 ka}\int_{-a}^{a}\cos^2 kxdx+\int_{a}^{\infty}\exp(-2\kappa x)dx\right]=$$

$$=|A|^2\exp(-2\kappa a)\left(\frac{1}{\kappa}+\frac{a}{\cos^2 ka}+\frac{\sin 2ka}{2k\cos^2 ka}\right)=1.$$

Використовуючи значення кореня $\kappa = k\,\mathrm{tg}\,ka$, знаходимо кінцевий вираз для A, справедливий і в другому випадку:

$$|A|^{-2}=a\exp(-2\kappa a)\left(1/\kappa a+1+\kappa^2/k^2+\kappa/k^2 a\right).$$

Для визначення рівнів енергії скористаємось тим, що $\kappa^2+k^2=2\mu V_0/\hbar^2=C_1^2/a^2$, де C_1 – безрозмірна константа, що характеризує глибину потенціальної ями. Звідси одержуємо $\kappa a=\sqrt{C_1^2-(ka)^2}$. Тоді вирази $\kappa = k\,\mathrm{tg}\,ka$ та $\kappa = -k\,\mathrm{ctg}\,ka$ зводяться до вигляду

$$\sqrt{C_1^2-(ka)^2}\,/ka=\mathrm{tg}\,ka,\ ka\Big/\sqrt{C_1^2-(ka)^2}=-\mathrm{tg}\,ka.$$

За різних значень константи C_1 можна графічно знайти корені цих рівнянь. Графіки функцій

$$f_1=\frac{\sqrt{C_1^2-(ka)^2}}{ka}\ \text{і}\ f_2=\mathrm{tg}\,ka,\ f_3=\frac{ka}{\sqrt{C_1^2-(ka)^2}}\ \text{і}\ f_4=-\mathrm{tg}\,ka$$

показують, що для значень $C_1<\pi/2$ існує всього один рівень (одна точка перетину кривих $y=f_1$ і $y=f_2$; у цьому разі криві $y=f_3$ і $y=f_4$ не перетинаються), який відповідає парній хвильовій функції. Зі зростанням величини C_1 кількість рівнів буде поступово збільшуватись.

3. Знайти рівні енергії та кількість зв'язаних станів у одновимірній потенціальній ямі шириною a з різновисокими стінками $V_1>V_2$.

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

Розв'язання: як видно з рис. 2.1, *а*, структура потенціалу дозволяє чітко виділити три просторові області: область I $(x<0)$, область II $(0\le x\le a)$ та область III $(x>a)$. Розглянемо ці області відокремлено, а потім "зшиємо" одержані результати в точках $x=0$ і $x=a$.

Рівняння Шредінгера для області I має такий вигляд:

$$\Psi_1''-\kappa_1^2\Psi_1=0,\ \kappa_1^2=2\mu(V_1-E)/\hbar^2,$$

для області II:

$$\Psi_2''+k^2\Psi_2=0,\ k^2=2\mu E/\hbar^2,$$

для області III:

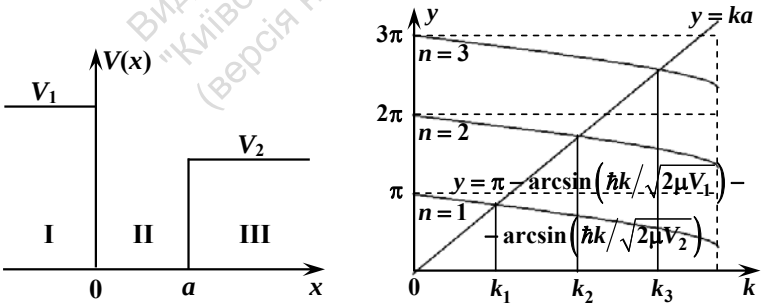
$$\Psi_3''-\kappa_2^2\Psi_3=0,\ \kappa_2^2=2\mu(V_2-E)/\hbar^2.$$

Загальні розв'язки цих диференціальних рівнянь можна записати у вигляді

$$\Psi_1(x)=A_1\exp(\kappa_1 x)+B_1\exp(-\kappa_1 x),$$
$$\Psi_2(x)=A_2\cos kx+B_2\sin kx,$$
$$\Psi_3(x)=A_3\exp(\kappa_2 x)+B_3\exp(-\kappa_2 x).$$

Обмеження хвильової функції вимагає, щоб $B_1=0$, $A_3=0$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)



а) б)

Рис. 2.1: а) зображення одновимірної потенціальної ями шириною a з різновисокими стінками $V_1>V_2$; б) ілюстрація графічного розв'язання рівняння $ka=\pi n-\arcsin\left(\hbar k/\sqrt{2\mu V_1}\right)-\arcsin\left(\hbar k/\sqrt{2\mu V_2}\right)$

Таким чином, $\Psi_1(x) = A_1 \exp(\kappa_1 x)$ і $\Psi_3(x) = B_3 \exp(-\kappa_2 x)$, а хвильову функцію $\Psi_2(x)$ записуємо як $C\sin(kx+b)$, де $C = \sqrt{A_2^2 + B_2^2}$, $b = -\operatorname{arctg}(B_2/A_2)$.

Застосуємо тепер умови неперервності до самої функції і до її першої похідної в точках $x = 0$ і $x = a$:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0),\ \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0),$$
$$\Psi_2(a) = \Psi_3(a),\ \Psi_2'(a) = \Psi_3'(a).$$

У результаті приходимо до системи рівнянь:

$$A_1 = C\sin b,\ C\sin(ka+b) = B_3 \exp(-\kappa_2 a),$$
$$\kappa_1 A_1 = kC\cos b,\ kC\cos(ka+b) = -\kappa_2 B_3 \exp(-\kappa_2 a).$$

Поділивши третє рівняння на перше, а четверте відповідно на друге, маємо $\kappa_1 = k\operatorname{ctg} b$, $\kappa_2 = -k\operatorname{ctg}(ka+b)$. Далі знаходимо $\sin b = \left(1+\operatorname{ctg}^2 b\right)^{-1/2} = \hbar k \Big/ \sqrt{2\mu V_1}$. Аналогічно знаходимо $\sin(ka+b) = -\hbar k \Big/ \sqrt{2\mu V_2}$. У результаті одержуємо рівняння, з якого можна знайти величину k (а відповідно, і рівні енергії) у неявному вигляді

$$ka = \pi n - \arcsin\left(\hbar k \Big/ \sqrt{2\mu V_1}\right) - \arcsin\left(\hbar k \Big/ \sqrt{2\mu V_2}\right),$$

де $n = 1,2,\ldots$. На рис. 2.1, *б* зображено графіки функцій від k лівої і правої частини цього рівняння. Якщо збільшити ширину ями, то буде зростати нахил прямої $y = ka$, у результаті чого змінюватиметься розташування і кількість можливих енергетичних рівнів. При зменшенні ширини ями нахил вказаної прямої буде зменшуватись, при цьому рівні "поповзуть" з ями, а їх кількість буде поступово зменшуватись. Бачимо, що існує вплив і глибини потенціальної ями на спектр енергетичних рівнів, а саме, чим більша її глибина, тим більше рівнів буде в ямі.

4. Розглянути поведінку частинки за довільної енергії $E \geq 0$ у потенціальному полі $U(x) = \infty$, якщо $x \leq 0$, $U(x) = 0$, якщо $0 < x < a$ і $U(x) = U_0$, якщо $x \geq a$.

Видавничо-поліграфічний центр Київського університету
Зразок для друкування

Розв'язання: оскільки частинка не може проникнути в область $x<0$, то в цій області хвильова функція дорівнює нулю. Тому достатньо розглянути хвильову функцію в областях I і II (рис. 2.2, *а*), беручи до уваги, що в точці $x=0$ унаслідок неперервності хвильова функція перетворюється на нуль.

Розглянемо спочатку випадок $E>U_0$. Тоді рівняння Шредінгера в областях I $(0<x<a)$, II $(a<x<\infty)$ має вигляд

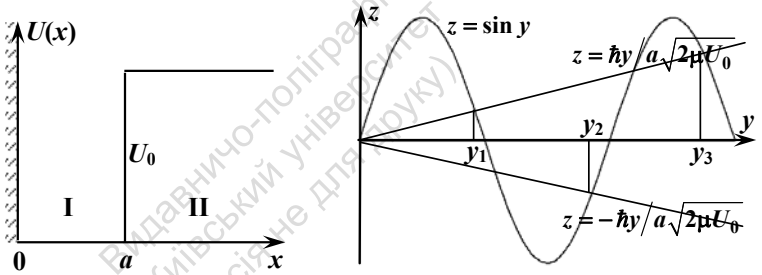
$$\Psi_1''+\kappa_1^2\Psi_1=0,\ \kappa_1^2=2\mu E/\hbar^2,$$

$$\Psi_2''+\kappa_2^2\Psi_2=0,\ \kappa_2^2=2\mu(E-U_0)/\hbar^2.$$

Розв'язки для цих областей можна записати таким чином:

$$\Psi_1=A_1\sin\kappa_1 x+B_1\cos\kappa_1 x,$$

$$\Psi_2=A_2\sin\kappa_2(x-a)+B_2\cos\kappa_2(x-a).$$



а) б)

Рис. 2.2: а) зображення одновимірної потенціальної ями $U(x)=\infty$, якщо $x\le 0$, $U(x)=0$, якщо $0<x<a$ і $U(x)=U_0$, якщо $x\ge a$;
б) ілюстрація графічного розв'язання рівняння $\sin y=\hbar y/a\sqrt{2\mu U_0}$

З умови $\Psi_1(0)=0$ випливає, що $B_1=0$, а умови неперервності функції та її похідної $\Psi_1(a)=\Psi_2(a)$, $\Psi_1'(a)=\Psi_2'(a)$ дають для коефіцієнтів A_2 і B_2 вирази $A_2=-\kappa_1 A_1\cos\kappa_1 a/\kappa_2$ та $B_2=A_1\sin\kappa_1 a$. Очевидно, що ці умови можуть бути завжди задоволені. Тому у випадку $E>U_0$ спектр енергії неперервний,

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

а частинка при своєму русі не локалізована в скінченній області простору, тобто її рух інфінітний.

Переходимо до випадку $E < U_0$. Тепер рівняння Шредінгера в області II записується таким чином:

$$\Psi_2'' - k^2\Psi_2 = 0,\ k^2 = 2\mu\left(U_0 - E\right)\big/\hbar^2 > 0,$$

а в області I рівняння Шредінгера залишається без зміни. Тоді розв'язки набувають вигляду

$$\Psi_1 = A_1 \sin\kappa_1 x,\ \Psi_2 = C_2\exp\left(-kx\right) + D_2\exp\left(kx\right).$$

Унаслідок того, що хвильова функція скрізь має бути скінченною, а $\exp\left(kx\right)$ при $x \to \infty$ необмежено зростає, D_2 покладаєм таким, що дорівнює нулю. Далі, з умов зшивання функції та її першої похідної в точці $x = a$ маємо

$$A_1\sin\kappa_1 a = C_2\exp\left(-ka\right),\ A_1\kappa_1\cos\kappa_1 a = -kC_2\exp\left(-ka\right).$$

Розділивши перше рівняння на друге, одержуємо умову квантування енергії $\kappa_1\operatorname{ctg}\kappa_1 a = -k$. Для графічного розв'язування цього рівняння зручно зробити перетворення

$$\sin\kappa_1 a = 1\big/\sqrt{1+\operatorname{ctg}^2\kappa_1 a} = 1\big/\sqrt{1+E/U_0}.$$

Оскільки $\sqrt{E} = \hbar\kappa_1\big/\sqrt{2\mu}$, то маємо $\sin y = \hbar y\big/a\sqrt{2\mu U_0}$, $y = \kappa_1 a$. Це рівняння розв'язується за допомогою побудови, що показана на рис. 2.2, *б*. Як розв'язки беруться не всі перетини прямих $z = \pm\hbar y\big/a\sqrt{2\mu U_0}$ із синусоїдою $z = \sin y$, а лише ті, які узгоджуються зі знаком у рівнянні $\kappa_1\operatorname{ctg}\kappa_1 a = -k$, тобто точки перетину в парних чвертях. Цим значенням y_n, яких має бути тільки скінченна кількість, відповідають енергії $E_n = \hbar^2 y_n^2\big/2\mu a^2$.

Із рис. 2.2, *б* видно, що найменше значення енергії дорівнює $E_{\min} = \hbar^2\pi^2\big/8\mu a^2$, а при $U_0 < \hbar^2\pi^2\big/8\mu a^2$ не існує жодного власного значення енергії, тобто стаціонарний рух частинки в скінченній області не існує. Зазначимо, що при $x > a$ хвильова функція має вигляд $\Psi_2\left(x\right) = C_2\exp\left(-kx\right)$. Вона, очевидно, згасає при віддаленні від $x = a$, але все ж таки не дорівнює нулю. Це озна-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

чає, що існує ненульова ймовірність проникнення частинки в область $x > a$, маючи при цьому енергію $E < U_0$. Цей ефект зумовлює важливе квантово-механічне явище проходження мікрочастинки крізь потенціальний бар'єр.

5. Знайти хвильові функції та рівні енергії одновимірного гармонічного осцилятора, який перебуває в електричному полі напруженістю $\vec{E}$. Заряд частинки e.

Розв'язання: для цього випадку рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\left(\frac{\mu\omega^2 x^2}{2}-e\left|\vec{E}\right|x\right)\psi = E\psi$$

може буде зведене до задачі гармонічного осцилятора виділенням повного квадрата у виразі потенціальної енергії. Шляхом заміни $x_1 = x - e\left|\vec{E}\right|/\mu\omega^2$, $\xi = x_1\sqrt{\hbar/\mu\omega}$, $E_1 = E + e^2\left|\vec{E}\right|^2/2\mu\omega^2$ приходимо до такого рівняння:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx_1^2}+\frac{\mu\omega^2 x_1^2}{2}\psi = E_1\psi\ .$$

Тепер одержуємо власні функції $\psi_n = C_n \exp\left(-\xi^2/2\right)H_n(\xi)$ і власні значення $E_n = (n+1/2)\hbar\omega - e^2\left|\vec{E}\right|^2/2\mu\omega^2$ оператора енергії.

6. Застосовуючи співвідношення невизначеностей до операторів $\hat{x}$ та $\hat{p}_x$, оцінити нижній рівень енергії одновимірного гармонічного осцилятора.

Розв'язання: оскільки $\hat{x} = x$ і $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$, то з невід'ємності виразу $J(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty}\left|\hat{p}_x\psi + i\eta\hat{x}\psi\right|^2 dx \geq 0$ випливає, що $\left\langle p_x^2\right\rangle\left\langle x^2\right\rangle \geq \hbar^2/4$. Розглянемо оператор енергії одновимірного гармонічного осцилятора $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2\mu + \mu\omega^2\hat{x}^2/2$. Очевидно, що $\langle H\rangle = \left\langle p_x^2\right\rangle/2\mu + \mu\omega^2\left\langle x^2\right\rangle/2$. Замінюючи $\left\langle p_x^2\right\rangle$ величиною $\hbar^2/4\left\langle x^2\right\rangle$, маємо $\langle H\rangle \geq \hbar^2/8\mu\left\langle x^2\right\rangle + \mu\omega^2\left\langle x^2\right\rangle/2 = f\left(\left\langle x^2\right\rangle\right)$. Ви-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія по для друку)

бираючи $\left\langle x^2 \right\rangle$, яке відповідає мінімуму функції f, тобто з умови $\partial f \big/ \partial \left\langle x^2 \right\rangle = -\hbar^2 \big/ 8\mu \left\langle x^2 \right\rangle^2 + \mu\omega^2 \big/ 2 = 0$ і, підставляючи його в f, одержуємо $\left\langle H \right\rangle \geq \hbar\omega/2$.

7. Знайти хвильову функцію та енергію частинки, що перебуває в дельта-потенціалі $V(x) = -\alpha\delta(x)$. Який вигляд хвильової функції в імпульсному представленні?

Розв'язання: розв'язок рівняння Шредінгера з потенціалом $V(x) = -\alpha\delta(x)$ має вигляд $\Psi(x) = A\exp(-\kappa x)$ за $x > 0$ і $\Psi(x) = B\exp(\kappa x)$ за $x < 0$, де $\kappa = \left(-2\mu E \big/ \hbar^2\right)^{1/2} > 0$. Застосовуючи умову неперервності $\Psi(+0) = \Psi(-0)$, а після цього виконуючи нормування хвильової функції, знаходимо $A = B = \sqrt{\kappa}$, тобто маємо $\Psi(x) = \sqrt{\kappa}\exp(-\kappa|x|)$.

Для знаходження значень енергії в потенціальній ямі $V(x) = -\alpha\delta(x)$ необхідно знайти умову "зшивання" похідної цієї хвильової функції. Виконуючи інтегрування

$$\int_{-0}^{+0} \left\{ \Psi'' + 2\mu\left[E + \alpha\delta(x)\right]\Psi \big/ \hbar^2 = 0 \right\},$$

одержуємо шукану умову $\psi'(+0) - \psi'(-0) = -2\mu\alpha\psi(0) \big/ \hbar^2$. Після її використання знайдемо $\kappa_0 = \mu\alpha \big/ \hbar^2$, тобто маємо $E_0 = -\mu\alpha^2 \big/ 2\hbar^2$ і $\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0}\exp(-\kappa_0|x|)$.

Запишемо хвильову функцію основного стану в імпульсному представленні:

$$\Psi_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(x)\exp(-ipx)\,dx = \sqrt{2\kappa_0^3\hbar^3} \Big/ \sqrt{\pi}\left(p^2 + \hbar^2\kappa_0^2\right).$$

8. Знайти середнє значення потенціальної та кінетичної енергій для частинки, що перебуває в дельта-ямі $U(x) = -\alpha\delta(x)$. Перевірити квантову віріальну теорему $2\left\langle T \right\rangle = k\left\langle U \right\rangle$.

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

Розв'язання: хвильова функція і відповідна їй повна енергія для частинки, яка перебуває у дельта-ямі, такі: $\psi(x)=\sqrt{\kappa}\exp(-\kappa|x|)$ $E=-\mu\alpha^2/2\hbar^2$, де $\kappa=\mu\alpha/\hbar^2$. Середнє значення потенціальної енергії обчислюється як

$$\langle U\rangle=-\alpha\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^2(x)\delta(x)dx=-\mu\alpha^2/\hbar^2=2E.$$

Середнє значення кінетичної енергії будемо обчислювати з використанням умови $\psi'(+0)-\psi'(-0)=-2\kappa^{3/2}$:

$$\langle T\rangle=-\frac{\hbar^2\kappa}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-\kappa|x|)\frac{d^2}{dx^2}\exp(-\kappa|x|)dx=$$

$$=-\frac{\hbar^2\kappa}{2\mu}\lim_{\varepsilon\to 0}\left\{\int_{-\infty}^{-\varepsilon}\exp(\kappa x)\frac{d^2}{dx^2}\exp(\kappa x)dx+\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\frac{d^2}{dx^2}\exp(-\kappa|x|)dx+\right.$$

$$\left.+\int_{+\varepsilon}^{+\infty}\exp(-\kappa x)\frac{d^2}{dx^2}\exp(-\kappa x)dx\right\}=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu}\left\{1+\frac{1}{\kappa^{3/2}}\int_{-0}^{+0}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx\right\}=$$

$$-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu}\left\{1+\frac{1}{\kappa^{3/2}}\left[\psi'(+0)-\psi'(-0)\right]\right\}=\frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu}=-E.$$

Із наступної рівності (у якій урахована властивість δ-функції Дірака):

$$U(kx)=-\alpha\delta(kx)=-\frac{\alpha}{k}\delta(x)=\frac{1}{k}U(x)$$

випливає, що потенціальна енергія є однорідною функцією степеня $k=-1$, тобто квантова віріальна теорема $2\langle T\rangle=k\langle U\rangle$ виконується.

9. Для частинки в потенціальному полі вигляду $U(x)=\infty$, якщо $x\le 0$ і $U(x)=\alpha\delta(x-a)$, якщо $x>0$, знайти кількість зв'язаних станів залежно від значень параметрів потенціалу.

Розв'язання: очевидно, що частинка не може проникнути в область $x<0$. Тому будемо розглядати хвильову функцію в областях $0<x<a$ і $x>a$ (рис. 2.3, *а*). Хвильові функції в цих областях записуються у вигляді

Видавничий поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\Psi_1 = C_1 \exp\left[-\kappa\left(x-a\right)\right] + C_2 \exp\left[\kappa\left(x-a\right)\right]$$

і

$$\Psi_2 = C_3 \exp\left[-\kappa\left(x-a\right)\right].$$

Застосовуючи до них умови неперервностей $\Psi_1(0)=0$ і $\Psi_1(a)=\Psi_2(a)$ відповідно у точках $x=0$ і $x=a$, а також користуючись умовою для перших похідних $\Psi_1'(a+0)-\Psi_2'(a-0)=-2\mu\alpha\Psi_2(a)/\hbar^2$ (див. задачу 7), прийдемо до такої однорідної системи рівнянь щодо C_1 і C_3:

$$\kappa C_1 + \left(\mu\alpha/\hbar^2 - \kappa\right)C_3 = 0,\ 2\,\mathrm{sh}\,\kappa a C_1 + \exp\left(-\kappa a\right)C_3 = 0.$$

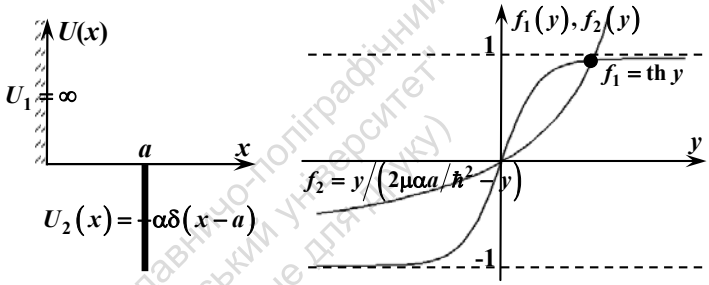


Рис. 2.3: а) зображення одновимірної потенціальної ями $U(x)=\infty$, якщо $x\le 0$ і $U(x)=\alpha\delta(x-a)$, якщо $x>0$; б) ілюстрація графічного розв'язання рівняння $\mathrm{th}\,y = y/(b-y)$

З умови існування нетривіального розв'язку даної системи випливає умова квантування енергії $\mathrm{th}\,y = y/(b-y)$, де $y=\kappa a$, $b=2\mu\alpha a/\hbar^2$. Графічне розв'язування, як видно з рис. 2.3, *б*, доводить, що можлива як максимум лише одна точка перетину. Це буде, коли кутові коефіцієнти дотичних у точці $y=0$ функцій $f_1(y)=\mathrm{th}\,y$ і $f_2(y)=y/(b-y)$ перебувають у співвідношенні

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

$1 > 1/b$, тобто для існування зв'язаного енергетичного рівня треба, щоб виконувалася нерівність $\mu\alpha a/\hbar^2 > 1/2$.

10. Частинка розташована в полі, яке має вигляд двох однакових симетричних потенціальних ям, розташованих на деякій відстані одна від одної (рис. 2.4); області дії ям не перекриваються, тому $U(0) = 0$. Показати, що середня сила, з якою частинка діє на ями в стаціонарних станах дискретного спектра, приводить до взаємного притягування ям у парних станах і до їхнього взаємного відштовхування в непарних станах.

Розв'язання: середнє значення сили, що діє з боку частинки на праву яму, дорівнює $\left\langle \left(F_{np}\right)_{nn} \right\rangle = \int_0^\infty (dU/dx)\Psi_n^2(x)\,dx$.

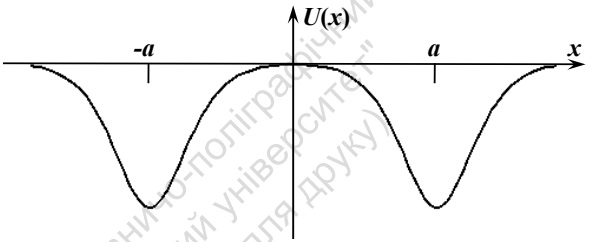


Рис. 2.4. Зображення двох однакових симетричних потенціальних ям

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Інтегруючи частинами з використанням рівняння Шредінгера, маємо

$$\left\langle \left(F_{np}\right)_{nn} \right\rangle = \Psi_n^2(x)U(x)\Big|_0^\infty - 2\int_0^\infty U(x)\Psi_n(x)\Psi_n'(x)\,dx =$$

$$= -2E_n\int_0^\infty \Psi_n(x)\Psi_n'(x)\,dx - \left(\hbar^2/\mu\right)\int_0^\infty \Psi_n'(x)\Psi_n''(x)\,dx =$$

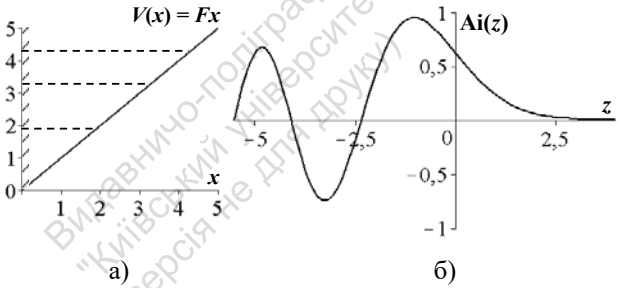
$$= E_n\Psi_n^2(0) + \hbar^2\left[\Psi_n'(0)\right]^2/2\mu .$$

Для парних станів маємо $\Psi_n'(0) = 0$, а оскільки $E_n < 0$, то $\left\langle \left(F_{np}\right)_{nn} \right\rangle < 0$; для непарних рівнів $\Psi_n(0) = 0$ і $\left\langle \left(F_{np}\right)_{nn} \right\rangle > 0$, що й необхідно було довести.

2.2. Рух частинок у складних одновимірних потенціальних ямах

1. Знайти енергетичний спектр і хвильові функції стаціонарних станів частинки в потенціалі $V(x)=\infty$, якщо $x\le 0$, $V(x)=Fx$, якщо $x>0$.

Розв'язання: рівняння Шредінгера з даним потенціалом (рис. 2.5, *а*) заміною $z=\beta(x-E/F)$ з $\beta=\left(2\mu F/\hbar^2\right)^{1/3}$ зводиться до вигляду $\psi''(z)-z\psi(z)=0$. Його розв'язком, що спадає при $z\to\infty$, є функція Ейрі першого роду $\mathrm{Ai}(z)=\dfrac{1}{\sqrt{\pi}}\displaystyle\int_0^\infty \cos\left(uz+u^3/3\right)du$ (рис. 2.5, *б*).



а) б)

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Рис. 2.5: а) зображення одновимірної потенціальної ями $V(x)=\infty$, якщо $x\le 0$ і $V(x)=Fx$, якщо $x>0$; б) графік функції Ейрі $\mathrm{Ai}(z)$

Таким чином, $\psi(x)=C\,\mathrm{Ai}\left[\beta(x-E/F)\right]$. При цьому гранична умова $\psi(0)=C\,\mathrm{Ai}(-\beta E/F)=0$ визначає енергетичний спектр. Позначаючи через $-\alpha_k$, де $k=1,2,\ldots$, послідовність нулів функції Ейрі (вони від'ємні) у порядку зростання α_k, знаходимо рівні енергії

$$E_n=\left(\hbar^2F^2/2\mu\right)^{1/3}\alpha_{n+1},\ n=0,1,\ldots.$$

Зокрема, для перших трьох нулів $\alpha_1 \approx 2{,}338$, $\alpha_2 \approx 4{,}088$ і $\alpha_3 \approx 5{,}521$ енергетичні рівні в одиницях $\left(\hbar^2 F^2/\mu\right)^{1/3}$ схематично нанесені пунктирними лініями на рис. 2.5, *а*.

2. Знайти рівні енергії та хвильові функції для частинки, яка перебуває в одновимірній кулонівській потенціальній ямі $V(x) = -e^2/|x|$.

Розв'язання: рівняння $-\left(\hbar^2/2\mu\right) d^2\psi/dx^2 - e^2\psi/|x| = E\psi$ для $E > 0$ має неперервний спектр. Розглянемо $E < 0$. Вводячи позначення $2\mu E/\hbar^2 = -\gamma^2$ та $\mu e^2/\hbar^2\gamma = \kappa$ і нову змінну $\xi = 2\gamma x$, одержуємо рівняння Шредінгера в безрозмірних змінних $d^2\psi/d\xi^2 - \left(\kappa/|\xi| - 1/4\right)\psi = 0$.

Спочатку розглянемо тільки область $\xi > 0$. При $\xi \to \infty$ рівняння переходить у $d^2\psi_\infty/d\xi^2 - \psi_\infty/4 = 0$ і розв'язок, який задовольняє вимогу скінченності, буде $\psi_\infty = \exp\left(-\xi/2\right)$. Після підстановки $\psi = \exp\left(-\xi/2\right) f(\xi)$ одержуємо для нової функції $f(\xi)$ рівняння $\xi d^2 f/d\xi^2 - \xi\, df/d\xi + \kappa f = 0$. Для дослідження поведінки $f(\xi)$ поблизу $\xi = 0$ замінимо $f(\xi)$ на ξ^α і, зберігаючи члени з найменшим степенем ξ, одержуємо, що $\alpha(\alpha - 1) = 0$, тобто існують два розв'язки: $f(\xi) = 1$, $f(\xi) = \xi$. Але перший розв'язок у точці $\xi = 0$ приводить до того, що $V\psi = -e^2\psi/\xi \to \infty$, а відповідно $d^2\psi/d\xi^2 \to \infty$ і $\psi(\xi)$, стане нескінченною, тому справедливий тільки другий розв'язок.

Підстановка $f(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \xi^k$ приводить звичайним шляхом до рекурентного співвідношення для коефіцієнтів

$$a_{k+1} = (k - \kappa) a_k / k(k+1), \quad k = 0,1,2,\ldots .$$

Віртуальна лабораторія "Київський університет" (версія 2.2) для Linux

Із границі цього відношення при $k >> 1$ випливає, що у цьому випадку функція $f(\xi)$ перетворюється на експоненту $\exp\xi$, ряд для якої характеризується таким самим відношенням коефіцієнтів. Таким чином, для скінченності $\psi = \exp(-\xi/2) f(\xi)$ необхідно, щоб функція $f(\xi)$ була поліномом, а це можливо при обриванні ряду на n-му члені.

Умовою виконання $a_{n+1} = 0$, як видно із рекурентного співвідношення, є рівність $\kappa = n$, з якої одержуємо дискретний спектр енергій $E_n = -\mu e^4 / 2\hbar^2 n^2$ і відповідні власні функції $\psi_n(\xi) = \exp(-\xi/2)\xi \sum_{k=1}^{n-1} a_{k+1}\xi^k$.

Щоб одержати розв'язок для $\xi < 0$, вводимо змінну $\eta = -\xi$. Рівняння Шредінгера набуває такого ж вигляду, як і для $\xi > 0$: $d^2\psi / d\eta^2 + (\kappa/\eta - 1/4)\psi = 0$. Це означає, що розв'язок для $\xi < 0$, який неперервним чином продовжує $\psi(\xi)$ при $\xi > 0$, буде

$$\psi_n(\xi) = -\exp(\xi/2)\xi \sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1}(-\xi)^k.$$

3. Розв'язати рівняння Шредінгера для частинки, яка перебуває в потенціалі $V(x) = V_0\left[\exp(-2\alpha x) - 2\exp(-\alpha x)\right]$ (потенціал Морзе).

Розв'язання: після введення змінної $y = \exp(-\alpha x)$ і позначень $\beta^2 = 2\mu V_0 / \hbar^2\alpha^2$ і $\varepsilon = 2\mu E / \hbar^2\alpha^2$ рівняння Шредінгера з потенціалом $V(x)$ набуває вигляду

$$y^2 \frac{d^2\psi}{dy^2} + y\frac{d\psi}{dy} - \beta^2\left(y^2 - 2y\right)\psi + \varepsilon\psi = 0.$$

Якщо $y \to \infty$ $(x \to -\infty)$, із цього рівняння одержуємо рівняння для асимптотичної функції ψ_∞:

$$\frac{d^2\psi_\infty}{dy^2} - \beta^2\psi_\infty = 0,$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

регулярним розв'язком якого є функція $\psi_\infty = \exp(-\beta y)$. Поблизу $y = 0$ підстановка $\psi = y^k$ дає для k рівняння $k^2 + \varepsilon = 0$, тобто $k = \pm\sqrt{-\varepsilon}$. При $\varepsilon > 0$ розв'язки $\psi_0 = y^{\pm\sqrt{-\varepsilon}} = \exp\left(\pm\alpha\sqrt{-\varepsilon}x\right)$ є скінченними, а спектр енергії неперервним. Якщо $\varepsilon = -\lambda^2 < 0$, то вимогу скінченності задовольняє лише функція $\psi_0 = y^\lambda$ при $\lambda > 0$.

Щоб знайти загальний розв'язок, після підстановки $\psi = y^\lambda \exp(-\beta y) F(y)$ приходимо до рівняння для $F(y)$ вигляду

$$y^2\, d^2F/dy^2 + \left[(1+2\lambda)y - 2\beta y^2\right] dF/dy + 2\beta y(\beta - \lambda - 1/2)F = 0.$$

Підставляючи сюди степеневий ряд $F(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k$ і прирівнюючи до нуля коефіцієнти при довільному степені y, одержимо для a_k рекурентне співвідношення

$$a_{k+1} = a_k\, 2\beta(k + \lambda + 1/2 - \beta)/(k+1)(k+1+2\lambda),\ k = 0,1,2,\ldots.$$

Оскільки при великих k відношення a_{k+1}/a_k прямує до $2\beta/k$ і, відповідно, $F_{y\to\infty} \approx \exp(2\beta y)$, умова скінченності розв'язку при $y \to \infty$ виконується, якщо за деякого $k = n$ буде $\beta - n - 1/2 = \lambda$ і, крім того, λ має бути невід'ємним. У результаті хвильові функції зв'язаних станів записуються у вигляді

$$\psi_n(y) = C_n y^{\beta - n - 1/2} \exp(-\beta y) \sum_{k=0}^{n} a_k y^k,$$

де C_n – стала нормування, а дискретні енергетичні рівні будуть

$$E_n = -V_0\left[1 - \sqrt{\hbar^2\alpha^2/2\mu V_0}\,(n + 1/2)\right]^2, \quad n = 0,1,2,\ldots.$$

Їхня кількість обмежена умовою $n + 1/2 < \beta = \sqrt{2\mu V_0/\hbar^2\alpha^2}$ і залежить від глибини потенціальної ями V_0. На рис. 2.6 показано потенціальні ями типу Морзе з різними глибинами. Зокрема, при $\beta < 1/2$ дискретних рівнів не існує, при $1/2 < \beta < 3/2$ існує один енергетичний рівень і т. д.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

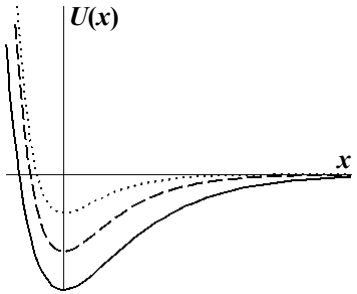


Рис. 2.6. Зображення потенціальних ям типу Морзе з різними глибинами

4. Розв'язати рівняння Шредінгера для частинки, яка перебуває в потенціальному полі

$$U(x)=U_1\Big/\left[1+\exp(x/a)\right]^2-U_2\Big/\left[1+\exp(x/a)\right],\ U_{1,2}>0,\ a>0.$$

Для розв'язання рівняння Шредінгера зробити заміну змінної $z=-\exp(x/a)$ і підстановку $\Psi(z)=(1-z)^{-\varepsilon}z^{\sigma}w(z)$ (при відповідному виборі параметрів ε і σ рівняння Шредінгера зводиться до гіпергеометричного рівняння).

Розв'язання: розв'язавши рівняння $dU/dx=0$, бачимо, що потенціал $U(x)$ має точку мінімуму $x_{\min}=a\ln(2U_1/U_2-1)$ лише за умови $U_1>U_2/2$. Очевидно, що і стани дискретного спектра можуть виникнути тільки в цьому випадку в інтервалі енергій $U_{\min}<E<\min(0,U_1-U_2)$, де $U_{\min}=U(x_{\min})=-U_2^2/4U_1$. Додатково на наведеному рис. 2.7 показано структури потенціалу $U(x)$ при різних співвідношеннях між параметрами U_1 і U_2, а саме, при $U_1<U_2$ (суцільна крива) маємо потенціальну яму з $x_{\min}<0$, при $U_1=U_2$ (штрихова крива) виникає симетрична потенціальна яма з $x_{\min}=0$ і, нарешті, при $U_1>U_2$ (пунктирна крива) маємо потенціальну яму з $x_{\min}>0$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

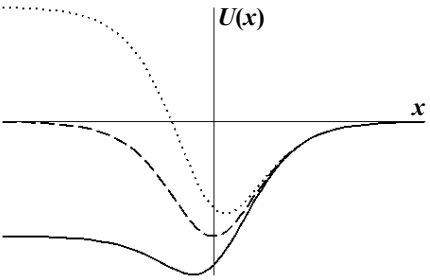


Рис. 2.7. Зображення потенціальних ям вигляду
$U(x) = U_1 \big/ \left[1+\exp(x/a)\right]^2 - U_2 \big/ \left[1+\exp(x/a)\right]$
при різних співвідношеннях між параметрами U_1 і U_2

Рівняння Шредінгера набуває вигляду ($\kappa_{1,2} = 2\mu U_{1,2}/\hbar^2$, $\kappa = \left(-2\mu E/\hbar^2\right)^{1/2}$):

$$z^2 w'' + \left[2\varepsilon z^2/(1-z) + (2\sigma+1)z\right]w' +$$

$$+\left[\frac{\varepsilon(\varepsilon+1)z^2 - \kappa_1^2 a^2}{(1-z)^2} + \frac{\varepsilon(2\sigma+1)z + \kappa_2^2 a^2}{(1-z)^2} - \kappa^2 a^2 + \sigma^2\right]w = 0 .$$

Якщо параметри ε і σ вибрати так: $\varepsilon = -1/2 + \sqrt{1/4 + \kappa_1^2 a^2}$, $\sigma = \sqrt{\left(\kappa^2 + \kappa_1^2 - \kappa_2^2\right)a^2}$, то останнє рівняння зводиться до гіпергеометричного рівняння

$$z(1-z)w'' + \left[2\sigma + 1 - (2\sigma - 2\varepsilon + 1)z\right]w' -$$

$$-\left(\sigma^2 + \kappa_1^2 a^2 - 2\varepsilon\sigma - \varepsilon - \kappa^2 a^2\right)w = 0$$

з параметрами $\alpha = \sigma - \varepsilon + \kappa a$, $\beta = \sigma - \varepsilon - \kappa a$, $\gamma = 1 + 2\sigma$. Оскільки $\Psi(x)$ при $x \to -\infty$ $(z \to 0)$ має вигляд $\Psi \propto \exp(\sigma x/a) = z^\sigma$, то розв'язок останнього рівняння необхідно вибрати у вигляді

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

$w = CF(\alpha,\beta,\gamma,z)$. Відповідно $\Psi(z) = C(1-z)^{-\varepsilon} z^{\sigma}\, {}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma,z)$. Звідси при z (і x) $\to +\infty$ маємо

$$\Psi(z) \approx \tilde{C} z^{-\varepsilon+\sigma} \left\{ \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)} (-z)^{-\alpha} + \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)} (-z)^{-\beta} \right\}.$$

Оскільки $z^{-\varepsilon+\sigma-\beta} = \exp(\kappa x)$ зростає при $x \to +\infty$, то необхідне виконання умови $\alpha = -n$ (n – ціле), яка визначає енергетичний спектр

$$\sqrt{-E_n} + \sqrt{U_1 - U_2 - E_n} = \sqrt{U_1 + \hbar^2/8\mu a^2} - \sqrt{\hbar^2/2\mu a^2}\,(n+1/2),$$

де $n = 0,1,\ldots$. Звідси видно, що число n не може бути більшим за число $N = \left[\sqrt{1/4 + 2\mu a^2 U_1/\hbar^2} - 1/2 \right]$ (тут $[x]$ – ціла частина числа x). Тому від'ємні енергетичні рівні E_n шукаємо чисельним шляхом за таким алгоритмом: беремо $n = 0$ й обчислюємо $U(x_{\min}) < E_0 < \min(0, U_1 - U_2)$, далі переходимо до $n = 1$, обчислюючи аналогічним чином E_1, і так далі доти, поки енергії потрапляють в інтервал $(U_{\min}, \min(0, U_1 - U_2))$. Зрозуміло, що ця процедура завершиться раніше, ніж ми досягнемо числа N. Очевидно, що, як і в випадку потенціалу Морзе, при $U_1 \neq U_2$ не виключається випадок, коли в неглибоких потенціальних ямах відсутні зв'язані стани.

Зазначимо, що при $U_1 = U_2 = U_0$ розглядуваний потенціал переходить у модифікований потенціал Пешля–Теллера $U(x) = -U_0/4\,\mathrm{ch}^2(x/2a)$.

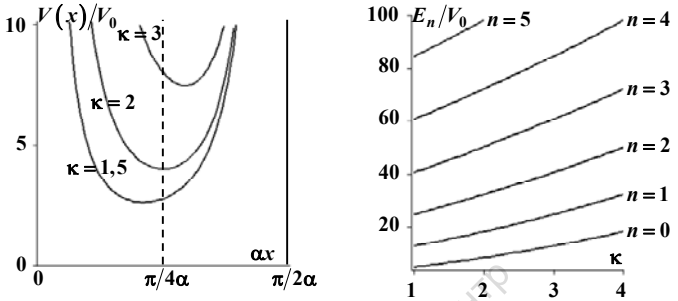
5. Розв'язати рівняння Шредінгера з потенціалом Пешля–Теллера

$$V(x) = \frac{V_0}{2}\left[\frac{\kappa(\kappa-1)}{\sin^2 \alpha x} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2 \alpha x} \right], \text{ де } V_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{\mu},\ \kappa > 1,\ \lambda > 1.$$

Обмежитись розглядом інтервалу $0 \le x \le \pi/2\alpha$, на межах якого потенціал $V(x)$ перетворюється на нескінченність.

Видання оптографічним способом
(Власність Національного університету
«Львівська політехніка»)

Розв'язання: потенціал $V(x)$ показано на рис. 2.8, *а* для випадку $\lambda = 2$ і декількох значень $\kappa > 1$.



а) б)

Рис. 2.8. Зображення за різних параметрів асиметрії κ:
а) потенціальних ям Пешля–Теллера; б) енергетичних рівнів у них

Якщо $\kappa = \lambda$, то яма буде симетричною щодо прямої $x = \pi/4\alpha$. Якщо ж $\kappa > \lambda$, то яма перекошується таким чином, що її мінімум зсувається в бік більших значень x. При $1 < \kappa < \lambda$ мінімум ями зсувається у протилежний бік, а сингулярність у точці $x = 0$ стає менш чітко вираженою і, нарешті, зовсім зникає при $\kappa = 1$. У цьому випадку потенціальні ями, які існують в інтервалах $-\pi/2\alpha \le x \le 0$ та $0 \le x \le \pi/2\alpha$, об'єднуються в одну потенціальну яму більшого розміру. Але її розгляд можна звести до випадку $\kappa = \lambda$, якщо скористатись тотожністю

$$1/\cos^2 \alpha x = \left[1/\sin^2\left(\alpha x/2 - \pi/4\right) + 1/\cos^2\left(\alpha x/2 - \pi/4\right)\right]/4$$

і, окрім цього, замінити α на $\alpha/2$ та V_0 на $V_0/4$.

Слід зауважити, що потенціал $V(x)$ є періодичним, але це несуттєво для розв'язування рівняння Шредінгера, тому що між сусідніми ямами існують непроникні бар'єри, зумовлені сингулярностями потенціалу $V(x)$. Таким чином, можна обмежитись розглядом однієї-єдиної потенціальної ями, скажімо в

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
імені Тараса Шевченка

інтервалі $0 \le x \le \pi/2\alpha$, і розв'язати в цьому інтервалі рівняння Шредінгера з граничними умовами $\psi(0) = 0$ і $\psi(\pi/2\alpha) = 0$. Після заміни незалежної змінної $y = \sin^2 \alpha x$ рівняння Шредінгера зводиться до вигляду

$$y(1-y)\psi'' + \left(\frac{1}{2} - y\right)\psi' + \frac{1}{4}\left[\frac{k^2}{\alpha^2} - \frac{\kappa(\kappa-1)}{y} - \frac{\lambda(\lambda-1)}{1-y}\right]\psi = 0,$$

де $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$. Це диференціальне рівняння має три регулярні особливі точки, $y = 0, 1, \infty$, тому підстановкою

$$\psi(y) = y^{\xi}(1-y)^{\eta} f(y)$$

при $\xi = \kappa/2$ і $\eta = \lambda/2$ його можна звести до гіпергеометричного рівняння

$$y(1-y)f'' + \left[\left(\kappa + \frac{1}{2}\right) - y(\kappa + \lambda + 1)\right]f' + \frac{1}{4}\left[\frac{k^2}{\alpha^2} - (\kappa+\lambda)^2\right]f = 0.$$

Загальний розв'язок цього рівняння має такий вигляд:

$$f(y) = C_1 {}_2F_1(a, b; c; y) + C_2 y^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c; 2-c; y),$$

де $a = (\kappa + \lambda + k/\alpha)/2$, $b = (\kappa + \lambda - k/\alpha)/2$, $c = \kappa + 1/2$. Сталі інтегрування C_1 і C_2 знаходять з використанням граничних умов $\psi(0) = 0$ і $\psi(1) = 0$, якщо користуватись змінною y. У точці $y = 0$ обидва гіпергеометричні ряди перетворюються на одиницю, тому

$$\psi(y) \approx y^{\xi}\left(C_1 + C_2 y^{1/2-\kappa}\right) = C_1 y^{\kappa/2} + C_2 y^{(1-\kappa)/2}.$$

Оскільки $\kappa > 1$, то у другому доданку існує сингулярність, звідки випливає, що $C_2 = 0$. Щоб розглянути випадок $y = 1$, скористаємось перетворенням

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(восстановлено для друку)

$$ {}_2F_1(a,b;c;y) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}\,{}_2F_1(a,b;a+b-c+1;1-y) + $$

$$ + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}(1-y)^{c-a-b}\,{}_2F_1(c-a,c-b;c-a-b+1;1-y). $$

А оскільки $c-a-b=1/2-\lambda$, то другий доданок у цьому виразі дає внесок у розв'язок $\psi(y)$ в околі точки $y=1$:

$$ \psi(y) = \ldots + C_1(1-y)^{\eta+c-a-b}\,\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)/\Gamma(a)\Gamma(b). $$

При показнику $\eta+c-a-b=(1-\lambda)/2<0$ цей внесок є сингулярним, тобто граничну умову можна задовольнити лише в тому випадку, коли в другому доданку перетворюється на нуль множник, який містить Γ-функції, тобто лише тоді, коли або a, або b – ціле від'ємне число. Якщо $a=-n$, де $n=0,1,\ldots$, то $b=\kappa+\lambda+n>0$. Якщо ж $b=-n$, то $a=\kappa+\lambda+n$. Оскільки при заміні параметра a параметром b хвильова функція не змінюється, то обидві умови приводять до того ж самого розв'язку. Виключаючи зі співвідношень $a=-n$ і $a=(\kappa+\lambda+k/\alpha)/2$ параметр a, одержуємо таку формулу для власних значень:

$$ k^2 = \alpha^2(\kappa+\lambda+2n)^2 \text{ або } E_n = V_0(\kappa+\lambda+2n)^2/2. $$

Відповідні їм власні функції мають вигляд

$$ \psi_n(x) = C_1 \sin^{\kappa}\alpha x \cos^{\lambda}\alpha x\,{}_2F_1\left(-n,\kappa+\lambda+n;\kappa+1/2;\sin^2\alpha x\right), $$

де стала C_1 визначається з умови нормування. На рис. 2.8, *б* показано залежність енергетичних рівнів від параметра асиметрії κ для потенціалів Пешля–Теллера з $\lambda=2$. Зіставляючи наведені результати з кривими потенціальної енергії, зображеними на рис. 2.8, *а*, бачимо, що чим вужча потенціальна яма, тим вище, як і слід очікувати, розташовуються енергетичні рівні. Якщо $2n >> \kappa+\lambda$, то власні значення наближено описуються формулою $k^2=4\alpha^2n^2$ $(n=1,2,\ldots)$, яка відповідає випадку прямокутної потенціальної ями. Цей результат також цілком зрозумілий,

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

оскільки зі зростанням енергії викривлення дна потенціальної ями має відігравати все меншу і меншу роль.

6. Знайти дискретні рівні енергії та хвильові функції для частинки, яка перебуває в модифікованій потенціальній ямі Пешля–Теллера $U(x) = -U_0 / \mathrm{ch}^2(x/b)$.

Розв'язання: записуємо рівняння Шредінгера із цим потенціалом у вигляді $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + U_0 \Big/ \mathrm{ch}^2 \frac{x}{b}\right)\psi(x) = 0$, вважаючи, що $E < 0$, тобто будемо шукати дискретні енергетичні рівні та відповідні їм хвильові функції. Після введення нової змінної $\xi = \mathrm{th}(x/b)$ і позначень $\varepsilon = b\sqrt{-2\mu E}/\hbar$, $2\mu U_0 b^2/\hbar^2 = s(s+1)$, де $s = \left(-1 + \sqrt{1 + 8\mu U_0 b^2/\hbar^2}\right)\Big/2$, рівняння Шредінгера переписується у вигляді

$$\frac{d\psi(\xi)}{d\xi}\left[\left(1-\xi^2\right)\frac{d\psi(\xi)}{d\xi}\right] + \left[s(s+1) - \frac{\varepsilon^2}{1-\xi^2}\right]\psi(\xi) = 0.$$

Це є рівнянням узагальнених функцій Лежандра. Зведемо його тепер до гіпергеометричного вигляду за допомогою підстановки $\psi(\xi) = \left(1-\xi^2\right)^{\varepsilon/2} w(\xi)$, переходячи при цьому до тимчасової змінної $u = (1-\xi)/2$:

$$u(1-u)w'' + (\varepsilon+1)(1-2u)w' - (\varepsilon - s)(\varepsilon + s + 1)w = 0.$$

Це означає, що хвильову функцію зі змінною ξ можна записати у вигляді $\psi(\xi) = \left(1-\xi^2\right)^{\varepsilon/2} {}_2F_1\left[\varepsilon - s, \varepsilon + s + 1; \varepsilon + 1; (1-\xi)/2\right]$. Для того, щоб ця функція залишалась скінченною і при $\xi = -1$ (тобто при $x \to -\infty$), має бути $\varepsilon - s = -n$, де $n = 0, 1, \ldots$. Тоді функція ${}_2F_1$ є поліномом степеня n, скінченним при $\xi = -1$.

Таким чином, рівні енергії визначаються умовою $s - \varepsilon = n$, звідки

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$E_n = -\hbar^2\left[-(1+2n)+\sqrt{1+8\mu b^2 U_0/\hbar^2}\right]^2 \Big/ 8\mu b^2 ,$$

де $n = 0,1,...,[s]$, $[s]$ – ціла частина величини s. Цим рівням енергії відповідають у змінній x такі хвильові функції:

$$\psi_n(x) = C_n\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^{n-s} {}_2F_1\left[-n, 2s+1-n; s+1-n; \frac{1}{2}\left(1-\operatorname{th}\frac{x}{b}\right)\right],$$

для яких сталі C_n визначаються з умови нормування і дорівнюють

$$C_n = \frac{1}{2^{s-n}}\left[\frac{2\Gamma(2s-n+1)}{n!\Gamma(2s-2n+1)\mathrm{B}(s-n,s-n)b}\right]^{1/2}.$$

Запишемо в явному вигляді перші шість нормованих хвильових функцій:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{2^s}\left[\frac{2}{b\mathrm{B}(s,s)}\right]^{1/2}\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^{-s},$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{2^{s-1}}\left[\frac{s-1}{b\mathrm{B}(s,s)}\right]^{1/2}\operatorname{sh}\frac{x}{b}\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^{-s},$$

$$\psi_2(x) = \frac{(s-1)}{2^{s-2}}\left[\frac{s-2}{2b(2s-1)\mathrm{B}(s,s)}\right]^{1/2}\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^{-s}\left[\left(\operatorname{sh}\frac{x}{b}\right)^2-\frac{1}{2(s-1)}\right],$$

$$\psi_3(x) = \frac{1}{2^{s-1}}\left[\frac{(s-1)(s-3)}{3b(2s-1)\mathrm{B}(s,s)}\right]^{1/2}\operatorname{sh}\frac{x}{b}\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^{-s}\cdot$$

$$\cdot\left[(2s-1)\left(\operatorname{sh}\frac{x}{b}\right)^2-3\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^2\right],$$

$$\psi_4(x) = \frac{1}{2^s}\left[\frac{(s-1)(s-4)}{3b(2s-1)(2s-3)\mathrm{B}(s,s)}\right]^{1/2}\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^{-s}\cdot$$

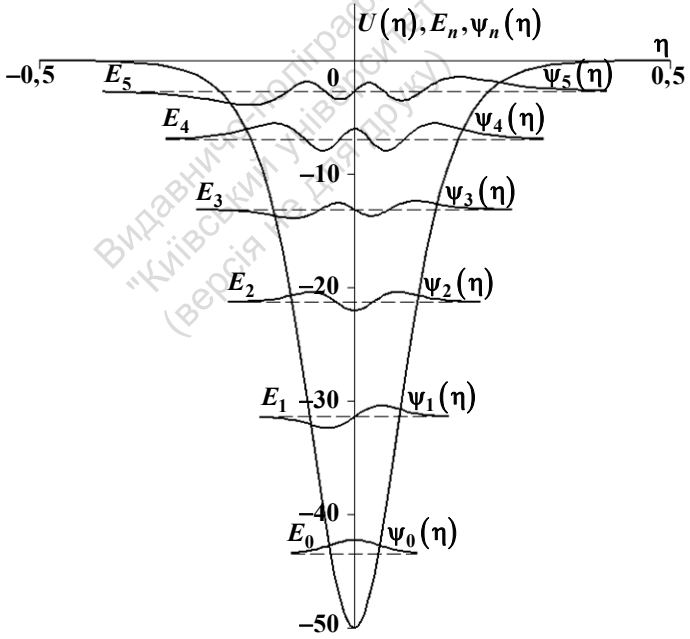
Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (Версія не для друку)

$$\cdot\left\{(2s-3)\left(\operatorname{sh}\frac{x}{b}\right)^2\left[(2s-1)\left(\operatorname{sh}\frac{x}{b}\right)^2-6\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^2\right]+3\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^4\right\},$$

$$\psi_5(x)=\frac{1}{2^{s-1}}\left[\frac{(s-1)(s-2)(s-5)}{30b(2s-1)(2s-3)\mathrm{B}(s,s)}\right]^{1/2}\operatorname{sh}\frac{x}{b}\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^{-s}\cdot$$

$$\cdot\left\{(2s-3)\left(\operatorname{sh}\frac{x}{b}\right)^2\left[(2s-1)\left(\operatorname{sh}\frac{x}{b}\right)^2-10\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^2\right]+15\left(\operatorname{ch}\frac{x}{b}\right)^4\right\}.$$

Тут $\mathrm{B}(s,s)$ – бета-функція Ейлера. Наприклад, для значень $U_0=50\,\text{еВ}$, $b=1A$ на рис. 2.9 зображено у відносних одиницях $\eta=x/b$ потенціал взаємодії $U(\eta)$, енергетичні рівні E_n і відповідні їм хвильові функції $\psi_n(\eta)$.



Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

Рис. 2.9. Зображення модифікованого потенціалу Пешля–Теллера, шести енергетичних рівнів і відповідних їм хвильових функцій

7. Знайти власні значення і власні хвильові функції у випадку осциляторного потенціалу $V(x)=\mu\omega^2x^2/2$.

Розв'язання: вводячи позначення $k^2=2\mu E/\hbar^2$ і $\lambda=\mu\omega/\hbar$, рівняння Шредінгера можна записати у вигляді

$$d^2\psi/dx^2+\left(k^2-\lambda^2x^2\right)\psi=0.$$

Розв'язки цього диференціального рівняння при $|x|>>k/\lambda$ мають асимптотики $\exp\left(\pm\lambda x^2/2\right)$. Виділяючи цю експоненту із функції $\psi(x)$, покладаючи $\psi(x)=\exp\left(-\lambda x^2/2\right)v(x)$, знаходимо, що функція $v(x)$ задовольняє рівняння

$$v''-2\lambda xv'+\left(k^2-\lambda\right)v=0.$$

Розв'язуючи це рівняння за допомогою розкладу в ряд $v(x)=\sum_{j=0}^{\infty}a_jx^j$, одержуємо рекурентне співвідношення $a_{j+2}=\left[\lambda(2j+1)-k^2\right]a_j/(j+1)(j+2)$. При $j\to\infty$ виконується асимптотичне співвідношення $a_{j+2}=(2\lambda/j)a_j$, яке відповідає степеневому розкладу функції $\exp\left(\lambda x^2\right)$.

Таким чином, розв'язок $\psi(x)$ нормується, якщо ряд обривається на скінченному члені, що відбувається за умови $a_{n+2}=0$, тобто при $k^2=\lambda(2n+1)$. У цьому випадку маємо $E_n=\hbar\omega(n+1/2)$, $n=0,1,\ldots$. Власні функції $\psi_n(x)$ можна визначити за допомогою рекурентного співвідношення та умови нормування $\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^2(x)dx=1$. Декілька перших власних функцій наведено нижче:

$$\psi_0(x)=(\lambda/\pi)^{1/4}\exp\left(-\lambda x^2/2\right),$$

$$\psi_1(x)=\left(4\lambda^3/\pi\right)^{1/4}x\exp\left(-\lambda x^2/2\right),$$

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
Версія не для друку

$$\psi_2(x)=\left(\lambda/4\pi\right)^{1/4}\left(1-2\lambda x^2\right)\exp\left(-\lambda x^2/2\right),$$

$$\psi_3(x)=\left(9\lambda^3/\pi\right)^{1/4}\left(x-2\lambda x^2/3\right)\exp\left(-\lambda x^2/2\right),$$

$$\psi_4(x)=\left(9\lambda/64\pi\right)^{1/4}\left(1-4\lambda x^2+4\lambda^2x^4/3\right)\exp\left(-\lambda x^2/2\right),$$

$$\psi_5(x)=\left(225\lambda^3/16\pi\right)^{1/4}\left(x-4\lambda x^3/3+4\lambda^2x^5/15\right)\exp\left(-\lambda x^2/2\right).$$

На рис. 2.10 показано потенціал, еквідистантні енергетичні рівні та відповідні їм хвильові функції (напр., при $\lambda=\pi/16$).

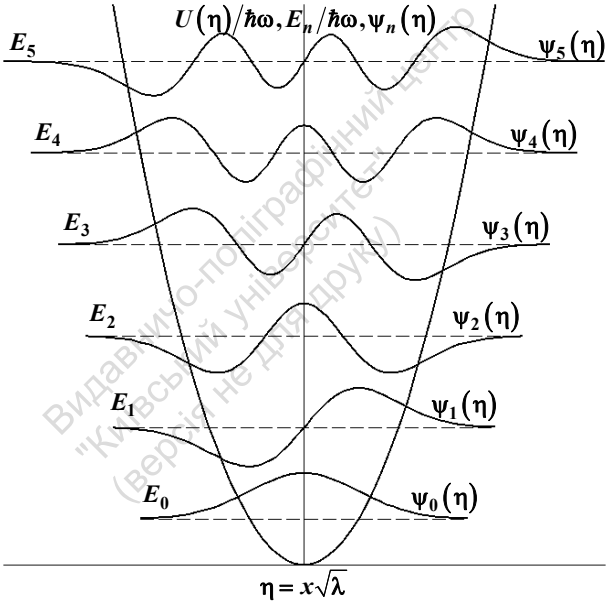


Рис. 2.10. Зображення осциляторного потенціалу, шести енергетичних рівнів і відповідних їм хвильових функцій

8. Визначити енергетичні рівні та хвильові функції частинки у потенціальному полі $U(x)=U_0\operatorname{ctg}^2(\pi x/a)$ $(0<x<a)$ (рис. 2.11). Провести нормування хвильової функції основного стану.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Розв'язання: виконуючи підстановку

$$\psi(x)=\left[\sin(\pi x/a)\right]^{-2\lambda}u(x)$$

у рівнянні Шредінгера

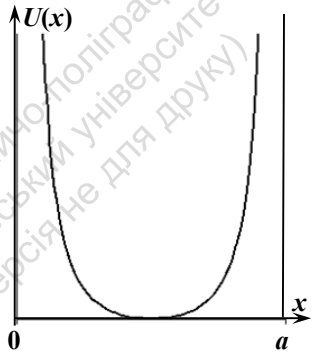
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U_0\operatorname{ctg}^2(\pi x/a)\psi=E\psi,$$

прийдемо до рівняння для функції $u(x)$:

$$\frac{d^2u}{dx^2}-\frac{4\pi\lambda}{a}\operatorname{ctg}^2(\pi x/a)\frac{du}{dx}+\frac{4\pi^2}{a^2}\left(\nu^2-\lambda^2\right)u=0,$$

де

$$\lambda=\frac{1}{4}\left[\left(8\mu U_0a^2/\hbar^2\pi^2+1\right)^{1/2}-1\right],\ \nu=\left[\mu a^2(E+U_0)/2\hbar^2\pi^2\right]^{1/2}.$$



Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Рис. 2.11. Графік потенціалу $U(x)=U_0\operatorname{ctg}^2(\pi x/a)\ \ (0<x<a)$

Після введення незалежної змінної $z=\cos^2(\pi x/a)$ останнє рівняння зводиться до гіпергеометричного рівняння

$$z(1-z)d^2u/dz^2+\left[1/2-(1-2\lambda)z\right]du/dz+\left(\nu^2-\lambda^2\right)u=0,$$

яке має два розв'язки:

$$u_1 = {}_2F_1\left(-\nu-\lambda,\nu-\lambda,1/2;z\right),$$
$$u_2 = \sqrt{z}\,{}_2F_1\left(-\nu-\lambda+1/2,\nu-\lambda+1/2;3/2;z\right).$$

Перший із цих розв'язків відмінний від нуля і скінченний при $z=0$ $\left(x=a/2\right)$, а інший перетворюється на нуль. Щоб визначити поведінку цих розв'язків при $z=1$ (це значення відповідає двом значенням $x=0$ і $x=a$), скористаємось співвідношенням

$${}_2F_1\left(\alpha,\beta;\gamma;z\right)=\left(1-z\right)^{-\alpha}\,{}_2F_1\left[\alpha,\gamma-\beta;\gamma;z/\left(z-1\right)\right].$$

Тоді для u_1 і u_2 одержуємо

$$u_1=\left(1-z\right)^{\nu+\lambda}\,{}_2F_1\left[-\nu-\lambda,-\nu+\lambda+1/2,1/2;z/\left(z-1\right)\right],$$
$$u_2=\sqrt{z}\left(1-z\right)^{\nu+\lambda-1/2}\,{}_2F_1\left[-\nu-\lambda+1/2,-\nu+\lambda+1,3/2;z/\left(z-1\right)\right].$$

Для того щоб виконувалась умова перетворення на нуль хвильової функції ψ при $x=0$ і $x=a$, необхідно, щоб ряди за степенями $z/\left(z-1\right)$ мали скінченну кількість доданків. Гіпергеометричний ряд у виразі для u_1 обривається, якщо або $\nu+\lambda$ – ціле додатне число чи нуль, або $\nu-\lambda-1/2$ – ціле додатне число чи нуль. Але умову $\psi=0$ при $x=0$ і $x=a$ задовольняє тільки другий випадок $\nu-\lambda-1/2=k$ $\left(k=0,1,...\right)$. Рівні енергії при цьому

$$E_k=\left[\left(2k+1\right)^2+4\left(2k+1\right)\lambda-2\lambda\right]\pi^2\hbar^2\left/2\mu a^2\right..$$

Аналогічний розгляд виразу для u_2 показує, що рівні енергії визначаються умовою $\nu-\lambda=l$ $\left(l=1,2,...\right)$. Очевидно, що ці спектри можна об'єднати

$$E_n=\left[n^2+4n\lambda-2\lambda\right]\pi^2\hbar^2\left/2\mu a^2\right.\quad\left(n=1,2,...\right).$$

При цьому непарним значенням n відповідають хвильові функції $\psi_n=C_n\left[\sin\left(\pi x/a\right)\right]^{-2\lambda}\,{}_2F_1\left[-n/2-2\lambda,n/2,1/2;\cos^2\left(\pi x/a\right)\right]$, а парним n відповідають

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\psi_n = C_n\left[\sin\left(\pi x/a\right)\right]^{-2\lambda}\cos\left(\pi x/a\right)\cdot$$
$$\cdot\,{}_2F_1\left[-n/2-2\lambda+1/2, n/2+1/2, 3/2; \cos^2\left(\pi x/a\right)\right].$$

Нормована хвильова функція основного стану

$$\psi_0(x) = \left[\sqrt{\pi}\,\Gamma\left(2\lambda+1\right)/a\Gamma\left(2\lambda+3/2\right)\right]^{1/2}\left[\sin\left(\pi x/a\right)\right]^{2\lambda+1}.$$

Розглянемо граничний випадок $U_0 \to 0$. При цьому задача зводиться до задачі з частинкою в прямокутній нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a. Величина λ перетворюється на нуль і для рівнів енергії одержимо, як і очікувалось, значення $E_n = \pi^2\hbar^2 n^2/2\mu a^2$. У протилежному випадку $\lambda >> 1$ для рівнів із $n << \lambda$ маємо $E_n = \hbar\omega\left(n+1/2\right)$ $\left(n = 1,2,...\right)$, де $\omega = \pi\sqrt{2U_0/\mu}/a$. Цей самий результат можна одержати, розкладаючи потенціальну енергію в околі точки $x = a/2$ та обмежуючись квадратичними членами.

9. Знайти хвильові функції і рівні енергії частинки в полі вигляду $U(x) = U_0\left(a/x - x/a\right)^2$ $\left(x > 0\right)$ (рис. 2.12) та показати, що енергетичний спектр збігається зі спектром осцилятора.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

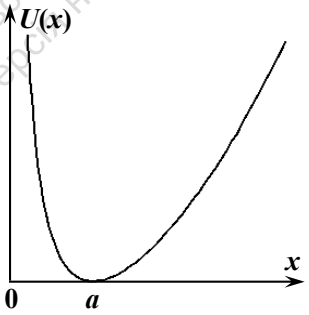


Рис. 2.12. Графік потенціалу $U(x) = U_0\left(a/x - x/a\right)^2$, $\left(x > 0\right)$

Розв'язання: дослідження поведінки при $x \to \infty$ розв'язку рівняння Шредінгера

$$-\left(\hbar^2/2\mu\right)d^2\psi/dx^2-\left[E-U_0\left(a/x-x/a\right)^2\right]\psi=0$$

показує, що ψ має асимптотичний вигляд $\psi \sim \exp(-\xi)$, де ξ – нова незалежна змінна $\xi=\sqrt{2\mu U_0}x^2/\hbar a$. При $x\to 0$ ψ пропорційна ξ^{ν}, де $\nu=\left(\sqrt{8\mu U_0a^2/\hbar^2+1}+1\right)/2$. Далі робимо підстановку $\psi(\xi)=\xi^{\nu/2}\exp(-\xi/2)u(\xi)$ і одержуємо для $u(\xi)$ рівняння для виродженої гіпергеометричної функції

$$\xi u''+\left(\nu+1/2-\xi\right)u'+\left[\nu/2+1/4-\mu a\left(E+2U_0\right)/2\hbar\sqrt{2\mu U_0}\right]u=0.$$

Його загальний розв'язок має вигляд

$$u(\xi)=C_1F_1\left(\alpha;\nu+1/2;\xi\right)+C_2F_1\left(\alpha-\nu+1/2;3/2-\nu;\xi\right)\xi^{1/2-\nu},$$

де $\alpha=\nu/2+1/4-\mu a\left(E+2U_0\right)/2\hbar\sqrt{2\mu U_0}$. З обмеженості $\psi(0)$ випливає $C_2=0$. Окрім того, необхідно вимагати, щоб хвильова функція при $x\to\infty$ спадала, тобто, щоб функція $u(\xi)$ зводилась до полінома. Цього можна досягнути при $\alpha=-n$ $(n=0,1,...)$, звідки знаходимо рівні енергії

$$E_n=\frac{2\hbar}{a}\sqrt{2U_0/\mu}\left[n+1/2+\frac{1}{4}\left(\sqrt{8\mu U_0a^2/\hbar^2+1}-\sqrt{8\mu U_0a^2/\hbar^2}\right)\right].$$

Таким чином, енергетичний спектр (при відповідному виборі початку відліку енергії) такий самий, як і в осцилятора із циклічною частотою $\omega=\sqrt{8U_0/\mu a^2}$. Цікаво зауважити, що нульова енергія частинки для потенціалу $U(x)=U_0\left(a/x-x/a\right)^2$ завжди перевищує нульову енергію відповідного осцилятора. Хвильові функції мають вигляд

$$\psi_n(x)=C_nx^{\nu}\exp\left(-x^2\sqrt{\mu U_0/\hbar^2a^2}\right)_1F_1\left(-n;\nu+1/2;x^2\sqrt{\mu U_0/\hbar^2a^2}\right).$$

Сталі C_n можуть бути знайдені з умови нормування.

10. Знайти дискретний спектр частинки в потенціальному полі $U(x)=-U_0\exp(-\alpha x)$ при $x>0$ і $U(x)=\infty$ при $x\le 0$ (рис. 2.13).

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

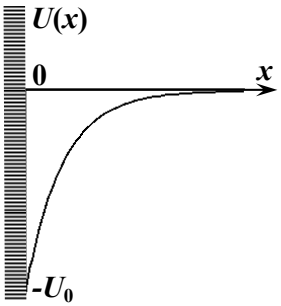


Рис. 2.13. Потенціальна яма вигляду
$U(x) = -U_0 \exp(-\alpha x)$ за $x > 0$ і $U(x) = \infty$ за $x \le 0$

Розв'язання: вводячи позначення $\kappa^2 = 2\mu|E|/\hbar^2$ і $k^2 = 2\mu U_0/\hbar^2$, рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} - U_0 \exp(-\alpha x)\psi = -|E|\psi$$

перепишемо у вигляді $\psi'' - \left[\kappa^2 - k^2 \exp(-\alpha x)\right]\psi = 0$. Далі, переходячи до нової змінної $y = \exp(-\alpha x/2)$, останнє рівняння перетвориться на рівняння для функцій Бесселя

$$d^2\psi/dy^2 + y^{-1}\, d\psi/dy + \left(4k^2/\alpha^2 - 4\kappa^2/\alpha^2\, y^2\right)\psi = 0.$$

Загальний розв'язок цього рівняння записується у вигляді $\psi(y) = AJ_{2\kappa/\alpha}(2ky/\alpha) + BJ_{-2\kappa/\alpha}(2ky/\alpha)$. Із регулярності хвильової функції $\psi(y)$ при $y \to 0$ $(x \to \infty)$ необхідно покласти $B = 0$. Таким чином, хвильова функція як функція змінної x записується у вигляді $\psi(x) = AJ_{2\kappa/\alpha}\left[(2k/\alpha)\exp(-\alpha x/2)\right]$. Нарешті, з умови $\psi(0) = 0$ одержуємо трансцендентне рівняння $J_{2\kappa/\alpha}(2k/\alpha) = 0$ для відшукання скінченної кількості чисел $2\kappa/\alpha$, а відповідно і спектра енергетичних рівнів. Бачимо, що в ямі досить

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
(версія не для друку)

малої глибини (такій, що $2\kappa/\alpha$ не перевищує першого кореня функції Бесселя $J_0(x)$) взагалі не існуватимуть дискретні рівні.

Сталу A необхідно шукати з умови нормування

$$A^2\int_0^\infty J_{2\kappa/\alpha}^2\left[(2k/\alpha)\exp(-\alpha x/2)\right]dx = 1.$$

2.3. Характеристики і стани неперервного спектра. Проходження крізь потенціальні бар'єри

1. Для вільної частинки, рух якої обмежений непроникною стінкою (тобто $U=0$ при $x>0$ і $U=\infty$ при $x<0$), знайти хвильові функції стаціонарних станів. Нормувати їх на δ-функцію за енергіями. Переконатись у повноті одержаної системи функцій (на інтервалі $0<x<\infty$).

Розв'язання: $\Psi_E(x) = A(E)\sin\left(\sqrt{2\mu E/\hbar^2}\,x\right)$ (ураховано, що $\Psi_E(0)=0$). Для нормування цих функцій на $\delta(E-E')$ необхідно вибрати $A(E) = \left(2\mu/\pi^2\hbar^2 E\right)^{1/4}$. Умову повноти цієї системи функцій $\int_0^\infty \Psi_E^*(x)\Psi_E(x)\,dE = \delta(x-x')$ легко встановити, якщо скористатися співвідношенням

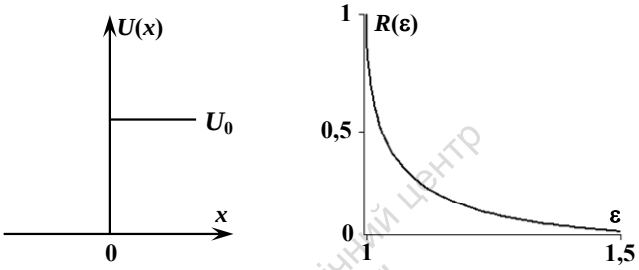
$$\delta(x) = (1/2\pi)\int_{-\infty}^{\infty}\exp(ikx)\,dk = (1/\pi)\int_0^\infty \cos(kx)dk.$$

2. Знайти коефіцієнт відбиття частинки з енергією від потенціальної стінки, зображеної на рис. 2.14, *а*. Розглянути граничні випадки $E\to U_0$ і $E\to\infty$.

Розв'язання: в області $x>0$ хвильова функція $\psi = A\exp(ik_2x)$, де $k_2 = \sqrt{2\mu(E-U_0)}/\hbar$, а в області $x<0$ має вигляд $\psi = \exp(ik_1x) + B\exp(-ik_1x)$, де $k_1 = \sqrt{2\mu E}/\hbar$. Сталі A і B визначаються з умов неперервності ψ та ψ' при $x=0$: $1+B=A$, $k_1(1-B)=k_2A$, звідки $A = 2k_1/(k_1+k_2)$, $B=(k_1-k_2)/(k_1+k_2)$. Коефіцієнт відбиття дорівнює

$$R=\left[\left(k_1-k_2\right)/\left(k_1+k_2\right)\right]^2=\left[\left(\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0}\right)\Big/\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}\right)\right]^2.$$

Звідси видно, що при $E=U_0$ він перетворюється на одиницю, а при $E\to\infty$ прямує до нуля як $R=\left(U_0/4E\right)^2$. Залежність R від відношення $E/U_0=\varepsilon$ показано на рис. 2.14, *б*.

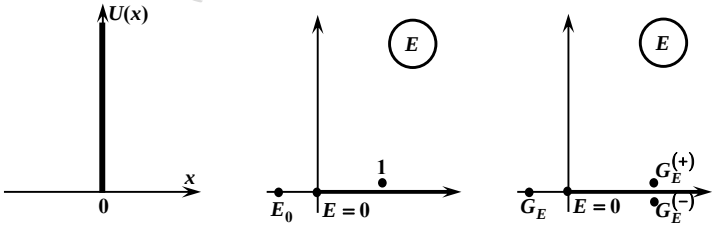


а) б)

Рис. 2.14: а) графік потенціальної стінки вигляду $U\left(x\right)=0$, якщо $x<0$ і $U\left(x\right)=U_0$, якщо $x\geq 0$; б) залежність коефіцієнта відбиття R від величини $\varepsilon=E/U_0$

Виправничо-поліграфічний центр "Київський університет" (верстка не для друку)

3. Визначити коефіцієнти відбиття і проходження частинки у випадку потенціалу $U\left(x\right)=\alpha\delta\left(x\right)$ (рис. 2.15, *а*).



а) б) в)

Рис. 2.15: а) графік потенціального бар'єра вигляду $U\left(x\right)=\alpha\delta\left(x\right)$; б), в) комплекні площини з розрізами вздовж дійсних півосей $E>0$

Проаналізувати аналітичні властивості амплітуд $A(E)$ та $B(E)$ відповідно відбитої хвилі та хвилі, що проходить, як функцій комплексної змінної E. Переконатися, що точки $E=0$ і $E=\infty$ є точками розгалуження цих функцій. Зробивши у площині комплексної змінної E розріз від точки $E=0$ уздовж дійсної півосі $E>0$, знайти особливості функцій $A(E)$ і $B(E)$ на першому, т. зв. фізичному та інших листах їхньої ріманової поверхні (фізичний лист зафіксований умовою, що фаза точок E на дійсній півосі $E>0$ зверху дорівнює нулю). Показати, що такими особливостями є полюси, і встановити зв'язок між положеннями полюсів і рівнями дискретного спектра.

Розв'язання: хвильова функція при $x<0$ має вигляд $\Psi_k^{(+)}(x)=\exp(ikx)+A(k)\exp(-ikx)$, а при $x>0$ має відповідно вигляд $\Psi_k^{(+)}(x)=B(k)\exp(ikx)$ (тут $k=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}>0$, падаючі частинки рухаються зліва направо). Зшиваючи $\Psi_k^{(+)}$ і $\Psi_k^{(+)\prime}$ у точці $x=0$, тобто застосовуючи умови неперервності $\Psi_k^{(+)}(+0)=\Psi_k^{(+)}(-0)$ і $\Psi_k^{(+)\prime}(+0)-\Psi_k^{(+)\prime}(-0)=2\mu\alpha\Psi_k^{(+)}(0)/\hbar^2$, одержуємо $1+A=B$, $ik(B-1+A)=2\mu\alpha B/\hbar^2$, звідки

$$A(k)=\mu\alpha/(ik\hbar^2-\mu\alpha),\ B(k)=ik\hbar^2/(ik\hbar^2-\mu\alpha).$$

Коефіцієнти відбиття $R(E)=|A|^2$ і проходження $D(E)=|B|^2$ задовольняють, як і має бути, співвідношення $R+B=1$, при цьому:

а) $R(E)\approx\mu\alpha^2/2E\hbar^2\to 0$ при $E\to\infty$;

б) $D(E)\approx 2E\hbar^2/\mu\alpha^2\to 0$ при $E\to 0$.

Оскільки $k=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}$, то $A(E)$ і $B(E)$ є аналітичними функціями E, які мають такі особливі точки: а) точки $E=0$ і $E=\infty$ – кореневі точки розгалуження; б) полюс у точці E_0, яка визначається умовою $i\sqrt{2\mu E}=\mu\alpha/\hbar$. Через наявність точок розгалу-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

ження функції $A(E)$ і $B(E)$ є багатолистими (у даному випадку – дволистими). Для їхнього однозначного визначення зробимо у площині комплексної змінної E розріз уздовж дійсної півосі $E>0$ (рис. 2.15, *б*). Оскільки на фізичному листі фаза точок, які безпосередньо прилягають до верхнього берегу розрізу (точки типу 1 на рис. 2.15, *б*), дорівнює нулю і при цьому $k=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}>0$, то в цих точках значення аналітичних функцій $A(E)$ і $B(E)$ збігаються зі значеннями фізичних амплітуд $A(E)$ і $B(E)$. Фаза точок E на від'ємній півосі $E<0$ фізичного листа дорівнює π і для них $\sqrt{E}=i\left|\sqrt{E}\right|$. Відповідно полюс E_0 амплітуд при $\alpha<0$ (δ-яма) розташований на фізичному листі, а значення E_0 збігається з енергією єдиного енергетичного рівня. У випадку бар'єра $\alpha>0$, тому зв'язані стани відсутні, а полюс амплітуд при цьому розташований на нефізичному листі (фаза E_0 дорівнює 3π). Такі полюси зазвичай відповідають віртуальним рівням.

4. Знайти коефіцієнт проходження частинки крізь прямокутний потенціальний бар'єр (рис. 2.16, *а*). Як зміниться одержаний вираз при переході до потенціальної ями $(U_0<0)$?

Розв'язання: вважаючи, що частинка з енергією $E>U_0$ рухається зліва направо, розв'язки в різних областях записуються таким чином:

$$x<0:\psi_1(x)=\exp(ikx)+A\exp(-ikx),$$

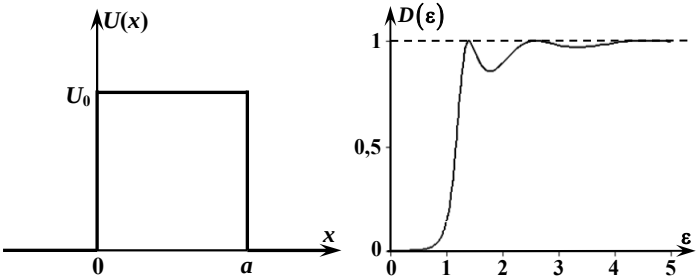
$$0<x<a:\psi_2(x)=B_1\exp(iqx)+B_2\exp(-iqx),$$

$$x>a:\psi_3(x)=C\exp(ikx),$$

де $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$, $q=\sqrt{2\mu(E-U_0)}/\hbar$.

Коефіцієнт проходження крізь бар'єр дорівнює $D=|C|^2$. З умов неперервності ψ і ψ' у точці $x=0$ випливає система рівнянь для A, B_1 і B_2:

$$1+A=B_1+B_2,\ k(1-A)=q(B_1-B_2).$$



а) б)

Рис. 2.16: а) прямокутний потенціальний бар'єр шириною a та висотою U_0 ; б) залежність коефіцієнта проходження D від величини $\varepsilon = E/U_0$

З умов неперервності у точці $x = a$ аналогічно одержуємо для B_1, B_2 і C:

$$B_1 \exp(iqa) + B_2 \exp(-iqa) = C \exp(ika),$$

$$q\left[B_1 \exp(iqa) - B_2 \exp(-iqa)\right] = kC \exp(ika).$$

Розв'язуючи ці рівняння щодо C, знаходимо коефіцієнт проходження

$$D = \frac{4k^2q^2}{\left(k^2 - q^2\right)^2 \sin^2 qa + 4k^2q^2} = \left\{1 + \left[\frac{\left(k^2 - q^2\right)\sin qa}{2kq}\right]^2\right\}^{-1}.$$

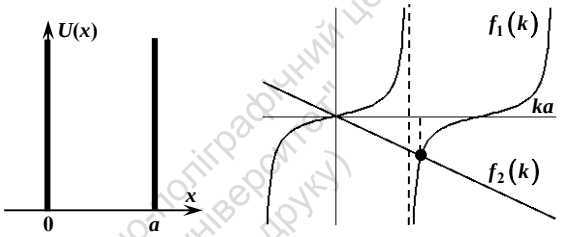
Вираз у квадратних дужках невід'ємний і перетворюється на нуль при виконанні умови $\sin qa = 0$. Таким чином, при енергіях $E_n = U_0 + n^2\left(\pi\hbar/a\sqrt{2\mu}\right)^2$ коефіцієнт проходження перетворюється на одиницю, тобто бар'єр стає прозорим. Перетворення коефіцієнта відбиття на нуль при нескінченному дискретному наборі значень E_n є специфічною властивістю прямокутного бар'єра. Якщо ж $E < U_0$, то q – суто уявне і коефіцієнт проходження

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" Версія не для друку

$$D=\left\{1+\left[\left(k^2+\gamma^2\right)\operatorname{sh}\gamma a\Big/2k\gamma\right]^2\right\}^{-1},$$

де $\gamma=\operatorname{Im}q>0$, монотонно зменшується зі зростанням ширини бар'єра, не перетворюючись на нуль при скінченних a, тобто частинка проходить за бар'єр і при енергіях менших, ніж його висота. Залежність D від відношення $E/U_0=\varepsilon$ показана на рис. 2.16, *б*.

5. Знайти значення енергій, за яких частинка не відбивається від потенціального бар'єра вигляду $U(x)=\alpha\left[\delta(x)+\delta(x-a)\right]$ (рис. 2.17, *а*).



а) б)

Рис. 2.17: а) потенціальний бар'єр вигляду $U(x)=\alpha\left[\delta(x)+\delta(x-a)\right]$, б) ілюстрація графічного розв'язання рівняння $\operatorname{tg}ka=-k\hbar^2/\mu\alpha$

Розв'язання: вважаючи, що частинка рухається зліва направо, розв'язки в різних областях записуються таким чином:

$$x<0:\psi_1(x)=\exp(ikx)+A(k)\exp(-ikx),$$

$$0<x<a:\psi_2(x)=B_1(k)\exp(ikx)+B_2(k)\exp(-ikx),$$

$$x>a:\psi_3(x)=C(k)\exp(ikx),$$

де $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$. Нехай $A(k)=0$. Тоді з умов $\psi_1(0)=\psi_2(0)$, $\psi_2'(+0)-\psi_1'(-0)=2\mu\alpha\psi_1(0)/\hbar^2$ у точці $x=0$, а також із умов

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

$\psi_2(a)=\psi_3(a)$, $\psi_3'(a+0)-\psi_2'(a-0)=2\mu\alpha\psi_3(a)/\hbar^2$ випливає система рівнянь щодо $B_1(k)$, $B_2(k)$ і $C(k)$:

$$B_1+B_2=1,\ B_1+B_2\exp(-2ika)-C=0,\ B_1-B_2=1-2i\mu\alpha/k\hbar^2,$$

$$B_1-B_2\exp(-2ika)+C\left(1+2i\mu\alpha/k\hbar^2\right)=0.$$

Звідси значення E, за яких частинка не відбивається від бар'єра, відшукуються в результаті розв'язування такого трансцендентного рівняння: $\operatorname{tg} ka=-k\hbar^2/\mu\alpha$. На рис. 2.17, *б* проілюстровано графічне розв'язування цього рівняння, тобто розв'язками будуть абсциси точок перетину функцій $f_1(k)=\operatorname{tg} ka$ та $f_2(k)=-k\hbar^2/\mu\alpha$.

Нарешті, із виразу для $C(k)=-\cos 2ka+i\sin 2ka$ знаходимо фазові зсуви за цих енергій $\varphi(k)=\pi-2ka$.

6. Довести незалежність значення коефіцієнта відбиття за даної енергії від напрямку падіння частинок на потенціал.

Розв'язання: розглянемо випадок, коли $U(x)\to 0$ при $x\to-\infty$ і $U(x)\to U_0$ при $x\to+\infty$. Позначимо $\psi_-(x)$ і $\psi_+(x)$ хвильові функції стаціонарних станів з однаковою енергією, але з протилежними напрямками руху падаючих частинок в область дії потенціалу. Вони мають такі асимптотики:

$$\psi_+\approx\begin{cases}\exp(ikx)+A(k)\exp(-ikx), x\to-\infty,\\ B(k)\exp(ik_1x), x\to+\infty,\end{cases}$$

$$\psi_-\approx\begin{cases}\overline{B}(k)\exp(-ikx), x\to-\infty,\\ \exp(-ik_1x)+\overline{A}(k)\exp(ik_1x), x\to+\infty,\end{cases}$$

де $k=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}$, $k_1=\sqrt{2\mu(E-U_0)/\hbar^2}$. Вони задовольняють рівняння Шредінгера $-\left(\hbar^2/2\mu\right)\psi_\pm''+U(x)\psi_\pm=E\psi_\pm$.

Видання підготовлено кафедрою фізики Київського університету імені Бориса Грінченка (електронне видання)

Помножаючи зліва рівняння для $\psi_+(x)$ на $\psi_-(x)$, а рівняння для $\psi_-(x)$ відповідно на $\psi_+(x)$ і віднімаючи їх почленно, знаходимо після простих перетворень

$$\psi_-(x)\psi'_+(x)-\psi_+(x)\psi'_-(x)=\text{const}\,.$$

Обчислюючи ліву частину при $x\to\pm\infty$ за допомогою асимптотик і прирівнюючи результати, одержуємо $k\overline{B}=k_1B$. Звідси й випливає $D_+(E)=(k_1/k)|B|^2=(k/k_1)|\overline{B}|^2=D_-(E)$.

7. Знайти коефіцієнт проходження частинок крізь потенціальний бар'єр (рис. 2.18). Розглянути різні граничні випадки, що допускають наочне сприйняття одержаного виразу $D(E)$.

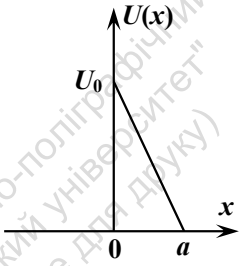


Рис. 2.18. Потенціальний бар'єр вигляду $U(x)=0$, якщо $x<0$ і $U(x)=U_0(1-x/a)$, якщо $x\ge 0$

Розв'язання: хвильова функція при $x<0$ має вигляд $\Psi_k^+=\exp(ikx)+A(k)\exp(-ikx)$ (падаючі частинки рухаються зліва направо, $k=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}>0$). При $x>0$ заміною змінної $z=\xi(x/a-1+E/U_0)$, де $\xi=\left(2\mu a^2U_0/\hbar^2\right)^{1/3}$, рівняння Шредінгера зводиться до рівняння $\Psi_k^{+\prime\prime}+z\Psi_k^+=0$. Розв'язок цього рівняння, який при $x\to+\infty$ має вигляд хвилі, що рухається направо, необхідно вибрати у вигляді

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (вибіркове для друку)

$$\Psi_k^+ = C(E)\left[\mathrm{Bi}(-z) + i\,\mathrm{Ai}(-z)\right] \approx C(E)\frac{1}{\pi^{1/2} z^{1/4}} \exp\left(\frac{2i}{3} z^{3/2} + \frac{i\pi}{4}\right),$$

де $\mathrm{Ai}(z)$ і $\mathrm{Bi}(z)$ – функції Ейрі першого і другого родів, відповідно. Тут враховано, що при $z(x) \to +\infty$ виконуються такі асимптотики:

$$\mathrm{Ai}(-z) \sim \sin\left(2z^{3/2}/3 + \pi/4\right)\Big/\sqrt{\pi}\, z^{1/4},$$

$$\mathrm{Bi}(-z) \sim \cos\left(2z^{3/2}/3 + \pi/4\right)\Big/\sqrt{\pi}\, z^{1/4}).$$

З умов неперервності хвильової функції та її похідної в точці $x = 0$ знаходимо C:

$$C(E) = 2\left\{\mathrm{Bi}(-z_0) + i\,\mathrm{Ai}(-z_0) + i(\xi/ka)\left[\mathrm{Bi}'(-z_0) + i\,\mathrm{Ai}'(-z_0)\right]\right\}^{-1},$$

де $z_0 = \xi(E/U_0 - 1)$.

Обчислюючи за формулою $j = (i\hbar/2\mu)\left(\Psi\Psi^{*\prime} - \Psi^*\Psi'\right)$ густину потоку частинок при $x \to +\infty$: $j_{\text{прох}} = \hbar\xi |C|^2 / \pi\mu a$, і враховуючи, що для падаючих частинок $j_{\text{пад}} = \hbar k/\mu$, знаходимо коефіцієнт проходження

$$D = j_{\text{прох}} / j_{\text{пад}} = \xi |C(E)|^2 / \pi ka.$$

Розглянемо деякі частинні випадки.

1) $E < U_0$, причому $\xi(1 - E/U_0) >> 1$ (і $\xi >> 1$):

$$D(E) \approx \left(4\sqrt{E(U_0 - E)}/U_0\right) \exp\left[-4a\sqrt{2\mu(U_0 - E)^3}/3\hbar U_0\right] << 1;$$

2) $E > U_0$, причому $\xi(E/U_0 - 1) >> 1$ (при цьому $ka >> \xi$):

$$D(E) \approx 4\sqrt{E(E - U_0)}\Big/\left(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}\right)^2.$$

3) при $E \to 0$:

$$D(E) \approx 4ka\left\{\pi\xi\left[\left(\mathrm{Bi}'(\xi)\right)^2 + \left(\mathrm{Ai}'(\xi)\right)^2\right]\right\}^{-1} \propto \sqrt{E} \to 0.$$

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

8. Те ж саме, що й у попередній задачі, але у випадку потенціального бар'єра $U(x) = -F_0|x|$ (рис. 2.19).

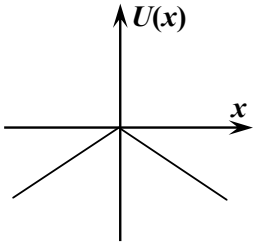


Рис. 2.19. Потенціальний бар'єр вигляду $U(x) = -F_0|x|$

Розв'язання: хвильова функція має вигляд

$$\Psi^+(x) = \begin{cases} \left[\mathrm{Bi}(z_1) - i\,\mathrm{Ai}(z_1)\right] + a(E)\left[\mathrm{Bi}(z_1) + i\,\mathrm{Ai}(z_1)\right], x < 0, \\ b(E)\left[\mathrm{Bi}(-z_2) + i\,\mathrm{Ai}(-z_2)\right], x > 0, \end{cases}$$

де $z_{1,2} = \xi\left(x \mp E/F_0\right)$, $\xi = \left(2\mu F_0/\hbar^2\right)^{1/3}$. Вона записана в такому вигляді, де кожний доданок у квадратних дужках на великих відстанях описує хвилю, яка поширюється у відповідному напрямку. При цьому $a(E)$ і $b(E)$ є амплітудами відбиття і проходження хвиль, тому $R = |a(E)|^2$, $D = |b(E)|^2$ (порівняти з попередньою задачею). Умови неперервності Ψ^+ і $d\Psi^+/dx$ дозволяють знайти $a(E)$ і $b(E)$. Зокрема,

$$b(E) = -i\left\{\pi\left[\mathrm{Bi}(\eta) + i\,\mathrm{Ai}(\eta)\right]\left[\mathrm{Bi}'(\eta) + i\,\mathrm{Ai}'(\eta)\right]\right\}^{-1},$$

де $\eta = -\xi E/F_0$ (при цьому враховано значення вронскіана $W\left[\mathrm{Ai}(z), \mathrm{Bi}(z)\right] = 1/\pi$).

Використовуючи асимптотики функцій Ейрі (див. попередню задачу), можна одержати такі вирази для $D = |b(E)|^2$:

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

1) при $E<0$, коли $\xi|E|/F_0 >> 1$:

$$D(E) \approx \exp\left[-8\left(2\mu|E|^3/F_0^2\hbar^2\right)^{1/2}/3\right];$$

2) при $E>0$, коли $\xi E/F_0 >> 1$:

$$D(E) \approx 1 - F_0^2\hbar^2/32\mu E^3;$$

3) $D(E=0)=3/4$, $R(E=0)=1/4$.

9. Знайти коефіцієнт відбиття частинки від потенціальної сходинки $U(x)=U_0/\left[1+\exp(-\alpha x)\right]$ (рис. 2.20). Енергія частинки $E>U_0$.

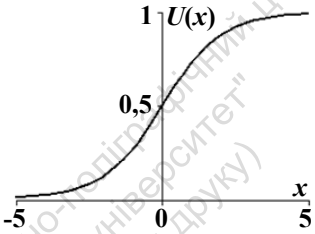


Рис. 2.20. Потенціальна сходинка $U(x)=U_0/\left[1+\exp(-\alpha x)\right]$

Розв'язання: необхідно знайти розв'язок, який при $x \to +\infty$ має вигляд $\psi = \text{const}\exp(ik_2 x)$, де $k_2 = \sqrt{2\mu(E-U_0)}/\hbar$. Введемо нову змінну $\xi = -\exp(-\alpha x)$, яка пробігає значення від $-\infty$ до 0, і шукатимемо розв'язок у вигляді $\psi(\xi) = \xi^{-ik_2/\alpha} w(\xi)$, де $w(\xi)$ прямує до сталої при $\xi \to 0$. Для $w(\xi)$ одержуємо рівняння гіпергеометричного типу:

$$\xi(1-\xi)w'' + (1-2ik_2/\alpha)(1-\xi)w' + \left(k_2^2 - k_1^2\right)w/\alpha^2 = 0,$$

де $k_1 = \sqrt{2\mu E}/\hbar$. Розв'язком цього рівняння є така гіпергеометрична функція:

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$w(\xi) = C\,{}_2F_1\left[i(k_1-k_2)/\alpha, -i(k_1+k_2)/\alpha; -2ik_2/\alpha+1; \xi\right].$$

При $\xi \to 0$ ця функція прямує до 1, тобто задовольняє задану умову. Скориставшись формулою

$${}_2F_1(a,b;c;\xi) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)}(-\xi)^{-a}\,{}_2F_1(a,a+1-c;a+1-b;1/\xi) +$$

$$+\frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}(-\xi)^{-b}\,{}_2F_1(b,b+1-c;b+1-a;1/\xi),$$

знайдемо асимптотичний вигляд функції $\psi(\xi)$ при $\xi \to -\infty$:

$$\psi(\xi) \approx \xi^{-ik_2/\alpha}\left[C_1(-\xi)^{i(k_2-k_1)/\alpha} + C_2(-\xi)^{i(k_2+k_1)/\alpha}\right] =$$

$$= (-1)^{-ik_2/\alpha}\left[C_1\exp(ik_1x) + C_2\exp(-ik_1x)\right],$$

де

$$C_1 = \frac{\Gamma(-2ik_1/\alpha)\Gamma(-2ik_2/\alpha+1)}{\Gamma\left[-i(k_1+k_2)/\alpha\right]\Gamma\left[-i(k_1+k_2)/\alpha+1\right]},$$

$$C_2 = \frac{\Gamma(2ik_1/\alpha)\Gamma(-2ik_2/\alpha+1)}{\Gamma\left[i(k_1-k_2)/\alpha\right]\Gamma\left[i(k_1-k_2)/\alpha+1\right]}.$$

Шуканим коефіцієнтом відбиття є $R = |C_2/C_1|^2$. Розрахунок за допомогою формули $\Gamma(x)\Gamma(1-x) = \pi/\sin\pi x$ приводить до такого результату:

$$R = \left\{\mathrm{sh}\left[\pi(k_1-k_2)/\alpha\right]/\mathrm{sh}\left[\pi(k_1+k_2)/\alpha\right]\right\}^2.$$

При $E = U_0$ $(k_2 = 0)$ R перетворюється на одиницю, а при $E \to \infty$ прямує до нуля за формулою

$$R = (\pi U_0/\alpha\hbar)^2\,(2\mu/E)\exp\left(-4\pi\sqrt{2\mu E}/\alpha\hbar\right).$$

При переході до класичної механіки (при $\hbar \to 0$) $R = 0$.

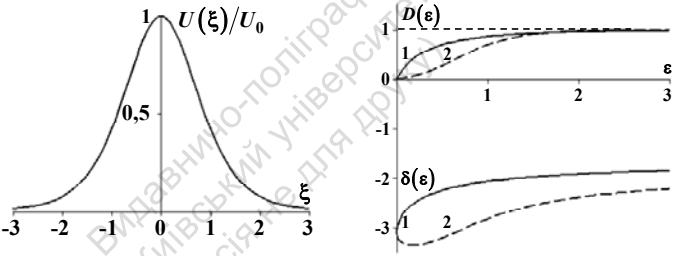
Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(вовсія Тедія Дуки)

10. Визначити коефіцієнт проходження частинки в полі гладкого потенціального бар'єра, який визначається формулою $U(x)=U_0/\mathrm{ch}^2(x/b)$, а також обчислити фазовий зсув.

Розв'язання: для визначення коефіцієнта проходження $D(\varepsilon=E/U_0)$ крізь потенціальний бар'єр (рис. 2.21, *а*) необхідно скористатись розв'язком рівняння Шредінгера з $E>0$, асимптотиками якого є хвильові функції вільного руху $A\exp(ikx)$ при $x\to\infty$ і $B_1\exp(ikx)+B_2\exp(-ikx)$ при $x\to-\infty$:

$$\psi(\xi)=\left(1-\xi^2\right)^{-ikb/2}\,{}_2F_1\left[-ikb-s,-ikb+s+1;-ikb+1;(1-\xi)/2\right],$$

де $\xi=\mathrm{th}(x/b)$, $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$, $s=\left(-1+\sqrt{1-8\mu U_0b^2/\hbar^2}\right)\Big/2$.



а) б)

Рис. 2.21: а) зображення потенціального бар'єра вигляду $U(x)=U_0/\mathrm{ch}^2(x/b)$; б) графіки коефіцієнта проходження $D(\varepsilon)$ і фазового зсуву $\delta(\varepsilon)$ для випадків $4\eta<1$ (криві 1) і $4\eta>1$ (криві 2)

Оскільки для гіпергеометричної функції справедлива формула

$${}_2F_1\left[-ikb-s,-ikb+s+1;-ikb+1;(1-\xi)/2\right]=\frac{\Gamma(ikb)\Gamma(1-ikb)}{\Gamma(-s)\Gamma(1+s)}\cdot$$

$$\cdot\,{}_2F_1\left(-ikb-s,-ikb+s+1;1-ikb;(1+\xi)/2\right)+\left[(1+\xi)/2\right]^{ikb}\cdot$$

Видавничо-поліграфічний відділ
"Київський університет"
(версія не для друку)

$$\cdot\frac{\Gamma(-ikb)\Gamma(1-ikb)}{\Gamma(-ikb-s)\Gamma(-ikb+s+1)}\,{}_2F_1\left[s+1,-s;1+ikb;(1+\xi)/2\right],$$

то асимптотичний вираз для функції $\psi(\xi)$ при $\xi\to-1$ $(x\to-\infty)$ буде таким:

$$\psi(\xi)\sim\frac{\exp(ikx)\Gamma(-ikb)\Gamma(1-ikb)}{\Gamma(-ikb-s)\Gamma(-ikb+s+1)}+\frac{\exp(-ikx)\Gamma(ikb)\Gamma(1-ikb)}{\Gamma(-s)\Gamma(1+s)}=$$

$$=B_1\exp(ikx)+B_2\exp(-ikx).$$

Це й очевидно, оскільки при $\xi\to-1$ $(x\to-\infty)$ одержуємо

$$\left(1-\xi^2\right)^{-ikb/2}=\left[\mathrm{ch}(x/b)\right]^{ikb}\to 2^{-ikb}\exp(-ikx),$$

$$\left(1-\xi^2\right)^{-ikb/2}\left[(1+\xi)/2\right]^{ikb}=$$

$$=\left\{\left[1+\mathrm{th}(x/b)\right]/\left[1-\mathrm{th}(x/b)\right]\right\}^{ikb/2}2^{-ikb}\to 2^{-ikb}\exp(ikx).$$

Для розрахунку коефіцієнта проходження $D=1-\left|B_2/B_1\right|^2$ і фазового зсуву $\delta=\arg(B_2/B_1)$ необхідно скористатись формулою з теорії функцій комплексної змінної:

$$\ln\Gamma(z)=-C(z-1)-\sum\nolimits_{n=1}^{\infty}\left\{\ln\left[1+(z-1)/n\right]-(z-1)/n\right\},$$

де $z=x+iy$, $C=0{,}577215...$ – постійна Ейлера.

Таким чином, на основі формули $\Gamma(z)\Gamma(1-z)=\pi/\sin\pi z$ і формул

$$\left|\Gamma(z)\right|=\exp\left\{-C(x-1)-\sum\nolimits_{n=1}^{\infty}\left\{\frac{1}{2}\ln\left[\left(1+\frac{x-1}{n}\right)^2+\frac{y^2}{n^2}\right]-\frac{(x-1)}{n}\right\}\right\},$$

$$\arg\Gamma(z)=y\left\{-C+\sum\nolimits_{n=1}^{\infty}\left[\frac{1}{n}-\frac{1}{y}\mathrm{arctg}\left(\frac{y}{x+n-1}\right)\right]\right\}$$

знаходимо вираз для коефіцієнта проходження

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

$$D(\varepsilon)=\begin{cases}\mathrm{sh}^2\left(\pi\sqrt{\eta\varepsilon}\right)\Big/\left[\mathrm{sh}^2\left(\pi\sqrt{\eta\varepsilon}\right)+\cos^2\left(\pi\sqrt{1-4\eta}/2\right)\right], & 4\eta<1,\\ \mathrm{sh}^2\left(\pi\sqrt{\eta\varepsilon}\right)\Big/\left[\mathrm{sh}^2\left(\pi\sqrt{\eta\varepsilon}\right)+\mathrm{ch}^2\left(\pi\sqrt{4\eta-1}/2\right)\right], & 4\eta>1,\end{cases}$$

а також формулу для фазового зсуву:

$$\delta(\varepsilon)=\begin{cases}2\sum_{n=0}^{\infty}\left[\mathrm{arctg}\left(\dfrac{2\sqrt{\eta\varepsilon}}{2n+1-\sqrt{1-4\eta}}\right)-2\,\mathrm{arctg}\left(\dfrac{\sqrt{\eta\varepsilon}}{n+1}\right)\right]-\pi- \\ \qquad -\mathrm{arctg}\left[\mathrm{th}\left(\pi\sqrt{\eta\varepsilon}\right)\mathrm{tg}\left(\pi\sqrt{1-4\eta}/2\right)\right], & 4\eta<1,\\ \sum_{n=0}^{\infty}\left[\mathrm{arctg}\left(\dfrac{2\sqrt{\eta\varepsilon}+\sqrt{4\eta-1}}{2n+1}\right)+\mathrm{arctg}\left(\dfrac{2\sqrt{\eta\varepsilon}-\sqrt{4\eta-1}}{2n+1}\right)-\right. \\ \qquad \left.-2\,\mathrm{arctg}\left(\dfrac{\sqrt{\eta\varepsilon}}{n+1}\right)\right]-\pi, & 4\eta>1.\end{cases}$$

Тут $\eta=2\mu U_0 b^2/\hbar^2$. На рис. 2.21, *б* показано функції $D(\varepsilon)$ і $\delta(\varepsilon)$ (криві 1 для випадку $4\eta<1$, а криві 2 для випадку $4\eta>1$).

Зауважимо, що перша із формул для коефіцієнта проникності відповідає випадку $U_0<0$, тобто при проходженні частинки над потенціальною ямою. При цьому $D=1$, якщо $1+8\mu|U_0|b^2/\hbar^2=(2n+1)^2$, тобто за деяких значень глибини ями $|U_0|$ пролітаюча над нею частинка не відбивається.

Видавничо-поліграфічний центр Київського університету (Взірець не для друку)

2.4. Функція Гріна рівняння Шредінгера. Інтегральна форма рівняння Шредінгера

1. Знайти функцію Гріна $G_E(x,x')$ рівняння Шредінгера для вільної частинки при $E<0$, яка згасає при $|x-x'|\to\infty$. Функція Гріна задовольняє рівняння

$$\left(\hat{H}-E\right)G_E \equiv -\left(\hbar^2/2\mu\right)\left(\partial^2/\partial x^2\right)G_E - EG_E = \delta\left(x-x'\right).$$

Який вигляд має функція Гріна в імпульсному представленні? За допомогою функції Гріна записати рівняння Шредінгера для станів дискретного спектра в потенціалі $U(x)$ ($U(x)\to 0$ при $x\to\pm\infty$) у вигляді інтегрального рівняння. На основі цього рівняння розглянути зв'язані стани частинки в δ-ямі.

Розв'язання: розв'язок рівняння для функції Гріна G_E при $x<x'$ має вигляд

$$G_E = A(x')\exp\left[\kappa\left(x-x'\right)\right] + B(x')\exp\left[-\kappa\left(x-x'\right)\right],$$

де $\kappa = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2} > 0$. Умова згасання G_E при $x\to-\infty$ вимагає вибору $B(x')=0$. Аналогічно при $x>x'$ маємо $G_E = C(x')\exp\left[-\kappa\left(x-x'\right)\right]$. У точці $x=x'$ функція G_E неперервна, а похідна G_E' має скачок, що дорівнює

$$G_E'\left(x=x'+0,x'\right) - G_E'\left(x=x'-0,x'\right) = -2\mu/\hbar^2 .$$

З урахуванням цих умов знаходимо

$$G_E\left(x,x'\right) = \left(\mu/\kappa\hbar^2\right)\exp\left(-\kappa\left|x-x'\right|\right).$$

За допомогою функції Гріна загальний розв'язок рівняння $-\left(\hbar^2/2\mu\right)\Psi''(x) - E\Psi(x) = f(x)$ для $E<0$ можна записати у вигляді $\Psi(x) = A\exp(-\kappa x) + B\exp(\kappa x) + \int_{-\infty}^{\infty} G_E\left(x,x'\right)f\left(x'\right)dx'$.

Якщо покласти $f = -U(x)\Psi(x)$, а також на основі фізичних застосувань покласти $A=B=0$, рівняння Шредінгера в інтегральній формі набуває вигляду

$$\Psi_E(x) = -\left(\mu/\kappa\hbar^2\right)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\kappa\left|x-x'\right|\right)U\left(x'\right)\Psi_E\left(x'\right)dx' .$$

Воно еквівалентне диференціальному рівнянню Шредінгера з урахуванням граничних умов – згасання $\Psi(x)$ при $x\to\pm\infty$, і має розв'язок лише при значеннях $E<0$, що належать енергетичному спектру.

Оригінал-макет поліграфічний центр Київський університет (версія для друку)

Для $U(x) = -\alpha\delta(x)$ інтегральне рівняння Шредінгера набуває вигляду $\Psi_E(x) = \left(\alpha\mu/\kappa\hbar^2\right)\Psi_E(0)\exp\left(-\kappa|x|\right)$, за допомогою якого безпосередньо визначається хвильова функція й енергія $E_0 = -\mu\alpha^2/2\hbar^2$ єдиного дискретного рівня в δ-потенціалі.

Зауважимо, що функцію Гріна можна розглядати як лінійний оператор G_E, ядро якого в координатному представленні має вигляд $G_E(x,x')$. При цьому із рівняння для $G_E(x,x')$ випливає $\left(\hat{H} - E\right)\hat{G}_E = \hat{1}$, $\hat{H} = \hat{p}^2/2\mu$. Це операторне рівняння справедливе в довільному представленні. Його формальний розв'язок має вигляд $G_E = \left(p^2/2\mu - E\right)^{-1}$. Використовуючи результат задачі 12 із підрозд. 1.5 (розд. 1), а також значення інтеграла $\int_{-\infty}^{\infty}\left[\exp ikx/\left(k^2+\kappa^2\right)\right]dk = \pi\exp\left(-\kappa|x|\right)/\kappa$, знаходимо його ядро в координатному представленні

$$G_E(x,x') = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left[ip(x-x')/\hbar\right]dp}{2\pi\hbar\left(p^2/2\mu + |E|\right)} = \frac{\mu}{\kappa\hbar^2}\exp\left(-\kappa|x-x'|\right),$$

що збігається з уже одержаним виразом.

2. Знайти функцію Гріна вільної частинки, рух якої обмежений непроникною стінкою для $E < 0$. Функція Гріна задовольняє граничну умову $G_E(x=0,x') = 0$ і згасає при $|x-x'| \to \infty$. За допомогою функції Гріна записати рівняння Шредінгера в інтегральній формі для зв'язаних станів частинки $(E_n < 0)$ у потенціалі вигляду $U = \tilde{U}(x)$ при $x > 0$ і $U = \infty$ при $x < 0$.

Відповідь: використовуючи метод зображень, функцію Гріна можна записати у вигляді

$$G_E(x,x') = \left(\alpha\mu/\kappa\hbar^2\right)\left[\exp\left(-\kappa|x-x'|\right) - \exp\left(-\kappa|x+x'|\right)\right].$$

Рівняння Шредінгера в інтегральній формі, яке враховує граничні умови $\Psi(0) = \Psi(\infty) = 0$, має вигляд

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\Psi(x) = -\int_0^\infty G_E(x,x')\tilde{U}(x')\Psi(x')dx'.$$

3. Знайти функцію Гріна $G_E(x,x')$ частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a. Розглянути аналітичні властивості G_E як функції змінної E та показати, що вона має полюси. Встановити зв'язок положення цих полюсів у площині комплексної змінної E зі значеннями енергетичних рівнів E_n частинки.

Розв'язання: рівняння для $G_E(x,x')$ і його розв'язок мають вигляд

$$-\left(\hbar^2/2\mu\right)\left(d^2/dx^2\right)G_E(x,x') - EG_E(x,x') = \delta(x-x'),$$

$$G_E(x,x') = \begin{cases} A(x')\sin\kappa x, 0 \le x < x', \\ B(x')\sin\kappa(x-a), x' < x \le a. \end{cases}$$

Тут враховані граничні умови $G_E = 0$ при $x = 0$ і $x = a$. Умови зшивання $G_E(x,x')$ у точці $x = x'$, які аналогічні зазначеним у задачі 1, дозволяють знайти A і B та кінцевий вираз для функції Гріна

$$G_E(x,x') = -2\mu\sin\left[\kappa\left(x+x'-|x'-x|\right)/2\right]\cdot$$

$$\cdot\left\{\sin\left[\kappa\left(x+x'+|x'-x|-2a\right)/2\right]/\kappa\hbar^2\sin\kappa a\right\}.$$

Звідси видно, що $G_E(x,x')$ є аналітичною функцією E $\left(\kappa = \sqrt{2\mu E/\hbar^2}\right)$, яка має такі особливі точки:

а) точка $E = \infty$ – суттєво особлива точка;

б) точки $E_n = \hbar^2\kappa_n^2/2\mu$, де $\kappa_n a = (n+1)\pi$, $n = 0,1,\ldots$, які є полюсами G_E, при цьому положення полюсів збігаються з рівнями частинки в ямі (точка $E = 0$ є усувною особливою точкою).

4. Знайти функцію Гріна $G_E^{(\pm)}(x,x')$ вільної частинки при $E > 0$; індекси $(\pm)$ вказують на характер асимптотики:

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$G_E^{(\pm)}(x,x') \propto \exp\left(\pm i\sqrt{2\mu E/\hbar^2}\,|x-x'|\right)$ при $|x-x'| \to \infty$. Записати рівняння Шредінгера у вигляді інтегрального рівняння, розв'язки якого описують процеси відбиття та проходження частинок з імпульсом p $(-\infty < p < +\infty)$ у потенціалі $U(x)$, що прямує до нуля при $x \to \pm\infty$. На основі одержаного рівняння розглянути випадок δ-потенціалу.

Розв'язання: якщо зважити на результат задачі 1, в якій була знайдена функція Гріна $G_E(x,x')$ при $E<0$, зазначимо, що шукані функції $G_E^{(\pm)}(x,x')$ при $E>0$ можна одержати безпосередньо із виразу $G_E(x,x')$, якщо в ньому покласти $\kappa = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2} = \mp ik$, де $k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2} > 0$, тобто

$$G_E^{(\pm)}(x,x') = \pm\left(i\mu/\hbar^2 k\right)\exp\left(\pm ik|x-x'|\right).$$

Зауважимо, що функції Гріна $G_E^{(\pm)}(x,x')$ при $E>0$ і $G_E(x,x')$ при $E<0$ можна розглядати як різні граничні значення єдиної аналітичної функції комплексної змінної E:

$$\tilde{G}_E(x,x') = i\sqrt{\mu/2\hbar^2 E}\,\exp\left[i\sqrt{2\mu E/\hbar^2}\,|x-x'|\right].$$

Точка $E=0$ для неї є точкою розгалуження. Виконавши розріз уздовж дійсної півосі площини E від $E=0$ направо (як на рис. 2.15, *в* у задачі 3 із підрозд. 2.3), зазначаємо, що на верхньому березі розрізу на фізичному листі функція $\tilde{G}_E(x,x')$ збігається з $G_E^{(+)}(x,x')$, на нижньому березі – з $G_E^{(-)}(x,x')$, а на півосі дійсних від'ємних значень – з $G_E(x,x')$ із задачі 1. Зазначимо також, що на фізичному листі $\left|\tilde{G}_E(x,x')\right| \to 0$ при $|E| \to \infty$ уздовж довільного напрямку.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Функція Гріна $G_E^{(\pm)}(p,p')$ в імпульсному представленні має вигляд $G_E^{(\pm)}(p,p')=\delta(p-p')\Big/\left(p^2/2\mu-E\mp i\varepsilon\right)$, де $\varepsilon>0$ – нескінченно мала величина. Диференціальне рівняння Шредінгера з граничними умовами вигляду

$$\Psi_k^{(+)}(x)\approx\begin{cases}\exp(ikx)+A(E)\exp(-ikx), x\to-\infty,\\ B(E)\exp(ikx), x\to+\infty,\end{cases}$$

що відповідають процесу проходження крізь потенціал та відбиттю від нього частинок з імпульсом p, еквівалентне інтегральному рівнянню

$$\Psi_p^{(+)}(x)=\exp(ipx/\hbar)-\int G_E^{(+)}(x,x')U(x')\Psi_p^{(+)}(x')dx'.$$

Перший доданок у правій частині цього рівняння описує падаючу частинку, а другий інтегральний доданок на великих відстанях $x\to\pm\infty$ описує як відбиті частинки, так і зміни під дією потенціалу хвильової функції частинок, що пройшли (щоб у цьому переконатися, необхідно розглянути асимптотику другого доданка при $x\to\pm\infty$ і врахувати, що $k=|p|/\hbar$).

Для потенціалу $U(x)=\alpha\delta(x)$ інтегральне рівняння набуває такого вигляду:

$$\Psi_p^{(+)}(x)=\exp(ipx/\hbar)-\left(i\mu\alpha/\hbar^2k\right)\exp(ik|x|)\Psi_p^{(+)}(0).$$

Звідси знаходимо $\Psi_p^{(+)}(0)=\left(1+i\mu\alpha/\hbar^2k\right)^{-1}$ (а тим самим і $\Psi_p^{(+)}(x)$). Очевидно, що значення $D(E)$ і $R(E)$ збігаються з одержаними в задачі 3 із підрозд. 2.3.

5. Знайти функцію Гріна $G_E(x,x')$ при $E<0$ і $G_E^{(\pm)}(x,x')$ при $E>0$ для частинки в δ-потенціалі відштовхування $U(x)=\alpha\delta(x)$, $\alpha>0$. Розглянути їхні аналітичні властивості як функції комплексної змінної E. Порівняти з випадком вільної частинки, яка розглядалась у попередній задачі. Розглянути також δ-яму.

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

Розв'язання: шукані функції Гріна задовольняють рівняння

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\alpha\delta(x)-E\right]G_E(x,x')=\delta(x-x')$$

і відповідні граничні умови. Використовуючи загальний метод їх побудови (якщо для деякого диференціального оператора $\hat{L}$ функції $\varphi_\varepsilon(x)$, які задовольняють граничні умови, утворюють повну систему функцій:

$$\hat{L}\varphi_\varepsilon(x)=\varepsilon\varphi_\varepsilon(x),\qquad \sum\nolimits_\varepsilon \varphi_\varepsilon(x)\varphi_\varepsilon^*(x')=\delta(x-x'),$$

то функція $G_E(x,x')=\sum\nolimits_\varepsilon\left(\varphi_\varepsilon(x)\varphi_\varepsilon^*(x')/\varepsilon\right)$ є функцією Гріна

$$\hat{L}G_E(x,x')=\sum\nolimits_\varepsilon\left(\hat{L}\varphi_\varepsilon(x)\varphi_\varepsilon^*(x')/\varepsilon\right)=\sum\nolimits_\varepsilon\varphi_\varepsilon(x)\varphi_\varepsilon^*(x')=\delta(x-x'),$$

а враховуючи, що в полі відштовхування відсутні стани дискретного спектра, маємо

$$G_E^{(\pm)}(x,x')=\int_{-\infty}^{\infty}\left\{2\mu\Psi_p^{(+)*}(x')\Psi_p^{(+)}(x)\Big/\left[p^2-2\mu\left(E\pm i\gamma\right)\right]\right\}dp$$

($\gamma>0$ – нескінченно мале). Тут $\Psi_p^{(+)}(x)$ – нормовані на $\delta(p-p')$ хвильові функції, які описують процес відбиття. Підставляючи їхній явний вираз (вони без множника $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ наведені в попередній задачі), маємо

$$G_E^{(\pm)}(x,x')=\left(\mu/\pi\hbar^2\right)\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\exp\left[ik(x-x')\right]\Big/\left[k^2-\left(k_0^2\pm i\gamma\right)\right]\right\}dk-$$

$$-\frac{i\mu\tilde{\alpha}}{\pi\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{k^2-\left(k_0^2\pm i\gamma\right)}\left\{\frac{\exp\left[-i\left(kx'-|kx|\right)\right]}{|k|+i\tilde{\alpha}}-\frac{\exp\left[i\left(kx-|kx'|\right)\right]}{|k|-i\tilde{\alpha}}+\right.$$

$$\left.+\exp\left[-i\left(|kx'|-|kx|\right)\right]/2\left(|k|-i\tilde{\alpha}\right)-\exp\left[-i\left(|kx'|-|kx|\right)\right]/2\left(|k|+i\tilde{\alpha}\right)\right\},$$

де $\tilde{\alpha}=\mu\alpha/\hbar^2$, $k_0^2=2\mu E/\hbar^2$. Перший інтеграл тут являє собою функцію Гріна вільної частинки (див. задачу 4) $G_{E,в}^{(\pm)}(x,x')=\pm i\sqrt{\mu/2\hbar^2\,E}\exp\left(\pm i\sqrt{2\mu E/\hbar^2}\,|x-x'|\right)$ (зазначимо, що

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
Версія не для друку

$\pm\sqrt{E} = \sqrt{E \pm i\gamma}$ і для переходу від значень $E > 0$, для яких і наведено цей вираз, до $E < 0$ необхідно замінити $\pm i\sqrt{E}$ на $-\sqrt{-E}$).

Другий інтеграл (фактично сума чотирьох інтегралів) можна спростити, якщо помічаємо, що він є парною функцією щодо x і x', замінити їх на $|x|$ і $|x'|$, а потім розбити область інтегрування на дві: $(-\infty, 0)$ і $(0, \infty)$. При цьому більшість доданків скорочуються, тому другий інтеграл зводиться до вигляду

$$-\left(i\mu\tilde{\alpha}/\pi\hbar^2\right)\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\exp\left[-ik\left(|x|+|x'|\right)\right]\Big/\left[k^2-\left(k_0^2 \pm i\gamma\right)\right](k+i\tilde{\alpha})\right\}dk .$$

Цей інтеграл легко обчислюється за допомогою теорії лишків, замикаючи контур інтегрування у верхню півплощину. При цьому всередині контуру існує лише один полюс у точці $k = \pm k_0 + i\gamma$ (при $E < 0$ полюс у точці $k = i|k_0|$) і ми одержуємо $\pm\left(\mu\tilde{\alpha}/\hbar^2 k_0\right)\left\{\exp\left[\pm ik_0\left(|x|+|x'|\right)\right]\Big/\left(\pm k_0 + i\tilde{\alpha}\right)\right\}$. Кінцевий вираз для функції Гріна має вигляд

$$G_E^{(\pm)}(x,x') = \pm\sqrt{\mu/2\hbar^2 E}\left\{i\exp\left(\pm i\sqrt{2\mu E/\hbar^2}\,|x-x'|\right)+\right.$$

$$\left.+\mu\alpha\exp\left[\pm i\sqrt{2\mu E/\hbar^2}\left(|x|+|x'|\right)\right]\Big/\left(\pm\sqrt{2\mu E/\hbar^2}+i\mu\alpha\right)\right\}.$$

Як і у випадку вільної частинки, знайдені функції Гріна можна розглядати як граничні значення єдиної функції Гріна $\tilde{G}_E(x,x')$, яка є функцією комплексної змінної E і одержується з останнього виразу опусканням знакових індексів $(\pm)$. Аналітичні властивості $\tilde{G}_E(x,x')$ у даній задачі відрізняються від випадку вільної частинки за наявності в неї полюсу в точці $\sqrt{E_0} = -i\alpha\sqrt{\mu/2\hbar^2}$, тобто $E_0 = -\mu\alpha^2/2\hbar^2$, причому, оскільки $\alpha > 0$, то цей полюс розташований на нефізичному листі і відповідає віртуальному рівню.

Із рівняння для функції Гріна частинки в δ-потенціалі та граничних умов випливає, що $G_E^{(\pm)}(x,x')$ справедлива і при

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет імені Бориса Грінченка (Відділ наукової літератури)

$\alpha < 0$, тобто і для потенціальної ями. При цьому полюс $\tilde{G}_E(x,x')$ розташований уже на фізичному листі і E_0 збігається зі значенням енергії рівня, який існує в δ-ямі.

Зауважимо, що при переході від бар'єра до ями необхідно замінювати не тільки α на $-\alpha$, але й для знаходження $G_E^{(\pm)}(x,x')$ необхідно використовувати таку формулу:

$$G_E^{(\pm)}(x,x') = \frac{\Psi_0^*(x')\Psi_0(x)}{E-E_0} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\mu\Psi_p^{(+)*}(x')\Psi_p^{(+)}(x)dp}{p^2 - 2\mu(E \pm i\gamma)}.$$

Проте тепер при обчисленні інтеграла в цій формулі з $\alpha < 0$ всередині контуру є ще один полюс: у точці $k_1 = i|\tilde{\alpha}|$. Внесок від цього полюсу компенсує перший доданок у цій формулі, що й забезпечує справедливість формули для функції Гріна при довільному знаку α.

(видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку))

2.5. Частинки в періодичних потенціалах

1. Розрахувати значення енергії, яких може набувати частинка в періодичному потенціалі Кроніга і Пенні: $V(x) = 0$, якщо $nl \le x \le nl + a$ і $V(x) = V_0$, якщо $nl - b \le x \le nl$ (рис. 2.22). Тут $l = a + b$ – період потенціалу, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.

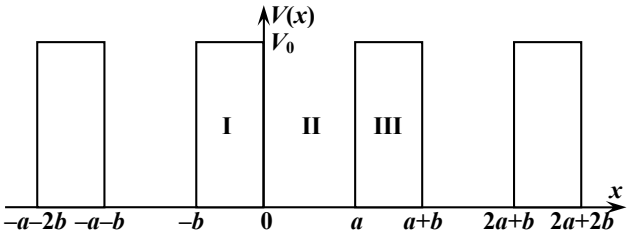


Рис. 2.22. Періодичний потенціал Кроніга–Пенні

Розв'язання: як випливає із коротких теоретичних відомостей, розв'язки рівняння Шредінгера з даним періодичним потенціалом мають задовольняти умову $\psi(x+l)=\exp(iKl)\psi(x)$. Користуючись цією умовою, а також розв'язуючи рівняння Шредінгера при $-b\le x\le 0$ (область I), при $0\le x\le a$ (область II) і при $a\le x\le a+b$ (область III), одержимо розв'язок при всіх x.

I область ($V=V_0$). Рівняння Шредінгера має вигляд

$$-\left(\hbar^2/2\mu\right)\left(\mathrm{d}^2\psi_{\mathrm{I}}/\mathrm{dx}^2\right)+\mathrm{V}_0\psi_{\mathrm{I}}=\mathrm{E}\psi_{\mathrm{I}}.$$

Позначимо $2\mu(V_0-E)/\hbar^2=\lambda^2$ і запишемо його розв'язок у вигляді $\psi_{\mathrm{I}}=C_1\exp(\lambda x)+C_2\exp(-\lambda x)$.

II область ($V=0$). Рівняння $-\left(\hbar^2/2\mu\right)\left(\mathrm{d}^2\psi_{\mathrm{II}}/\mathrm{dx}^2\right)=\mathrm{E}\psi_{\mathrm{II}}$ має розв'язок $\psi_{\mathrm{II}}=C_3\exp(\kappa x)+C_4\exp(-\kappa x)$, де $2\mu E/\hbar^2=\kappa^2$.

III область ($V=V_0$). Рівняння таке ж, як в області I, тобто $-\left(\hbar^2/2\mu\right)\left(\mathrm{d}^2\psi_{\mathrm{III}}/\mathrm{dx}^2\right)+\mathrm{V}_0\psi_{\mathrm{III}}=\mathrm{E}\psi_{\mathrm{III}}$, його розв'язок

$$\psi_{\mathrm{III}}=C_5\exp(\lambda x)+C_6\exp(-\lambda x).$$

Якщо x лежить в області I, то $x+l$ припадає на III і розв'язки пов'язані умовою $\psi_{\mathrm{III}}(x+l)=\exp(iKl)\psi_{\mathrm{I}}(x)$. Отже, $C_5=C_1\exp(iKl-\lambda l)$, $C_6=C_2\exp(iKl+\lambda l)$, тобто маємо

$$\psi_{\mathrm{III}}=\exp(iKl)\left[C_1\exp(\lambda(x-l))+C_2\exp(-\lambda(x-l))\right].$$

Розв'язки ψ_{I}, ψ_{II}, ψ_{III} мають бути неперервними при переході з області I в область II ($x=0$) і з області II в область III ($x=a$) разом з їхніми першими похідними, тобто $\psi_{\mathrm{I}}(0)=\psi_{\mathrm{II}}(0)$, $\psi'_{\mathrm{I}}(0)=\psi'_{\mathrm{II}}(0)$, $\psi_{\mathrm{II}}(a)=\psi_{\mathrm{III}}(a)$, $\psi'_{\mathrm{II}}(a)=\psi'_{\mathrm{III}}(a)$. У результаті приходимо до системи чотирьох однорідних рівнянь щодо коефіцієнтів C_1,C_2,C_3,C_4:

$$C_1+C_2=C_3+C_4,\ \lambda(C_1-C_2)=i\kappa(C_3-C_4),$$

$$C_3\exp(i\kappa a)+C_2\exp(-i\kappa a)=\exp(ikl)\left[C_1\exp(-\lambda b)-C_2\exp(\lambda b)\right],$$

Видавничо-поліграфічний центр Київського університету (версія не для друку)

$$i\kappa\left[C_3\exp(i\kappa a)-C_2\exp(-i\kappa a)\right]=$$
$$=\lambda\exp(iKl)\left[C_1\exp(-\lambda b)-C_2\exp(\lambda b)\right].$$

Для існування розв'язку, відмінного від нуля, необхідно, як відомо, щоб визначник цієї системи дорівнював нулю:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \lambda & -\lambda & -i\kappa & i\kappa \\ -\exp(iKl-\lambda b) & -\exp(iKl+\lambda b) & \exp(i\kappa a) & \exp(-i\kappa a) \\ -\lambda\exp(iKl-\lambda b) & \lambda\exp(iKl+\lambda b) & i\kappa\exp(i\kappa a) & -i\kappa\exp(i\kappa a) \end{vmatrix}=0.$$

Обчислюючи цей визначник, приходимо до рівняння, за допомогою якого можна знайти енергію частинки, що перебуває в періодичному полі

$$f(E)\equiv \operatorname{ch}(\lambda b)\cos(\kappa a)+\left[\left(\lambda^2-\kappa^2\right)\Big/2\lambda\kappa\right]\operatorname{sh}(\lambda b)\sin(\kappa a)=\cos(Kl).$$

Зліва у рівнянні бачимо, що енергія входить через величини κ і λ. Ця рівність можлива, якщо $\left|f(E)\right|\le 1$. Можна переконатися, що при $\kappa a=n\pi$ вона порушується, тому що $f(E)=\pm\operatorname{ch}\lambda b$ і $\left|f(E)\right|>1$.

Таким чином, енергії $E_n=\pi^2\hbar^2n^2\big/2\mu a^2$ будуть забороненими для електрона в періодичному полі (напр., кристала).

2. Для частинки в періодичному потенціалі вигляду $U(x)=\alpha\sum_{-\infty}^{\infty}\delta(x-na)$ (діраківська потенціальна гребінка, або ідеальний нескінченний "кристал") знайти систему незалежних розв'язків рівняння Шредінгера для довільного значення E.

Розв'язання: розпочнемо із фундаментальних розв'язків рівняння Шредінгера: $u_1(x)=\exp(ikx)$, $u_2(x)=\exp(-ikx)$. якщо $\psi(x)=Au_1(x)+Bu_2(x)$ – розв'язок в інтервалі $0\le x\le a$, який обмежений в сенсі задачі 1, то в сусідньому інтервалі $a\le x\le 2a$ будемо мати $\psi(x)=\exp(iKa)\left[Au_1(x-a)+Bu_2(x-a)\right]$. Далі при $x=a$ мають виконуватися граничні умови

Друкується за рішенням науково-методичної ради Київського університету (протокол № 1 від 2011 р.)

$$\psi(x+0)=\psi(x-0),\ \psi'(x+0)-\psi'(x-0)=2\mu\alpha\psi(a)/\hbar^2 .$$

Застосовуючи їх, приходимо до такої системи однорідних рівнянь щодо A і B:

$$A\left[\exp(iKa)-\exp(ika)\right]+B\left[\exp(iKa)-\exp(-ika)\right]=0,$$

$$A\left[ik\exp(iKa)-ik\exp(ika)-2\mu\alpha\exp(ika)/\hbar^2\right]+$$

$$+B\left[-ik\exp(iKa)+ik\exp(-ika)-2\mu\alpha\exp(-ika)/\hbar^2\right]=0.$$

З умови рівності нулю визначника цієї системи приходимо до рівності $\cos Ka=\cos ka+\mu\alpha\sin ka/k\hbar^2$.

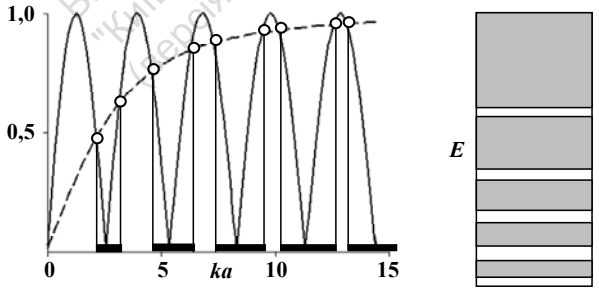
Таким чином, зони дозволених значень енергії визначаються нерівністю $\left|\cos ka+\mu\alpha\sin ka/k\hbar^2\right|\le 1$, або

$$\left|\cos\left[ka-\operatorname{arctg}\left(\mu\alpha a/\hbar^2 ka\right)\right]\right|\le 1\Big/\sqrt{1+\left(\mu\alpha a/\hbar^2 ka\right)^2},$$

а власні значення енергії дорівнюють $E=\hbar^2(ka)^2/2\mu a^2$.

На рис. 2.23, *а* наведено результат розрахунку для випадку $\mu\alpha a/\hbar^2=4$.

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
(версія не для друку)



а) б)

Рис. 2.23: а) графічне визначення зонної структури;
б) зонна структура у випадку дираківської потенціальної гребінки

Точки перетину кривих, які зображують функції змінної ka, що входять до нерівності, відмічені кружками, а інтервали, у яких виконується ця нерівність, – жирними відрізками. Верхні межі зон відповідають точкам, кратним π; у цих точках $\cos Ka = \cos ka$. Положення зон на енергетичній шкалі схематично показано на рис. 2.23, *б*, де дозволені енергетичні зони затемнені. У міру зростання енергії дозволені зони розширюються, тому енергетичний спектр наближається до неперервного, але ніколи з ним повністю не збігається, оскільки навіть за надвисоких енергій завжди існують заборонені зони, які зверху обмежуються точками $ka = n\pi$.

3. Знайти енергетичний спектр і вказати кратність виродження рівнів частинки у потенціалі вигляду

$$U(x) = \alpha \sum_{-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \text{ при } x > 0 \text{ і } U = U_0 > 0 \text{ при } x \le 0$$

(частинка в напівнескінченному "кристалі", рис. 2.24). Порівняти з випадком нескінченного "кристала" (див. попередню задачу). Звернути увагу на можливість існування станів частинки, локалізованих поблизу поверхні "кристала" (т. зв. поверхневі, або таммівські стани, на можливість існування яких уперше вказав І. Є. Тамм).

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
(версія не для друку)

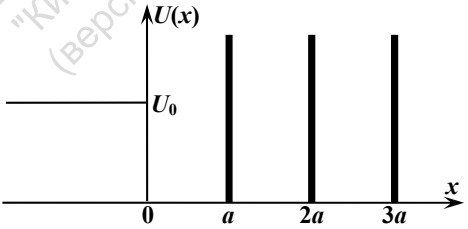


Рис. 2.24. Потенціал вигляду $U(x) = \alpha \sum_{-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$ при $x > 0$ і $U = U_0 > 0$ при $x \le 0$

Розв'язання: незалежні розв'язки рівняння Шредінгера при $x < 0$, де частинка вільна, відомі. В області ж $x > 0$ два неза-

лежних розв'язки рівняння Шредінгера для довільного значення E мають властивість $\Psi_{1,2}(x+a)=\lambda_{1,2}\Psi_{1,2}(x)$, $\lambda_1\lambda_2=1$. При цьому для значень енергії $E_n(q)$ із дозволених зон у нескінченному кристалі обидва ці розв'язки не зростають при $x\to+\infty$, а для інших значень E незростаючим є тільки один: з $\lambda_1<1$ (він спадає при $x\to+\infty$). На основі цього можна судити про характер спектра частинки, а саме:

1) при $E>U_0$ спектр неперервний. При цьому значення енергії, які належать дозволеним зонам, двократно вироджені. Інші значення невироджені і при цьому хвильова функція згасає в глибину кристала (частинка з такою енергією повністю відбивається від кристала);

2) при $E<U_0$ спектр має таку ж зонну структуру, як і у випадку нескінченного кристала. При цьому рівні вже невироджені; хвильова функція згасає зі збільшенням відстані від кристала, а при $x>0$ представляє собою суперпозицію станів зі значеннями квазіімпульсу $\pm\hbar q$ (частинка з такою енергією рухається всередині кристала, відбиваючись від його меж).

3) окрім того, при $E<U_0$ можуть існувати ізольовані рівні, яким відповідають стани частинки, яким відповідають стани частинки, що локалізовані поблизу межі кристала. Для їх знаходження розглянемо розв'язок рівняння Шредінгера, що згасає при $x\to\pm\infty$. При $x<0$ воно має вигляд $\Psi=C\exp(\kappa x)$, де $\kappa=\sqrt{2\mu(U_0-E)}/\hbar$, а при $x>0$ для значень $n<x/a<(n+1)$ його можна записати у вигляді

$$\Psi=A\lambda^n\sin\left[k(x-na)+\delta\right],\ k=\sqrt{2\mu E}/\hbar,\ |\lambda|<1.$$

Зшивка розв'язку в точках $x=0$ і $x=a$ приводить до співвідношень

$$A\sin\delta=1,\ kA\cos\delta=\kappa,\ \sin(ka+\delta)=\lambda\sin\delta,$$

$$\lambda k\cos\delta-k\cos(ka+\delta)=\left(2\mu\alpha/\hbar^2\right)\lambda\sin\delta$$

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
(Вторинне передрукування)

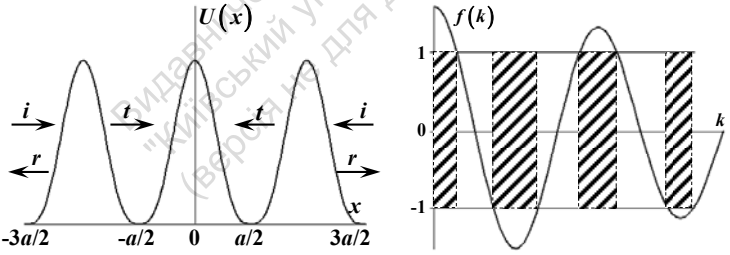
(для зручності вибираємо $C=1$). Звідси одержуємо

$$ka\cos ka=(\sin ka)\left[U_0 a/\alpha-a\sqrt{2\mu(U_0-E)}/\hbar\right],$$

$\lambda=(U_0/\alpha k)\sin ka$. Це рівняння визначає спектр розглядуваних станів, кількість яких залежить від параметрів потенціалу (їх може не бути взагалі). Вони розташовані між зонами дозволених енергій для нескінченного кристала. При зміні параметрів потенціалу положення таких рівнів також змінюється. При цьому може відбуватися як поява нових зв'язаних станів, так і зникнення вже існуючих за рахунок переходу в ближню зону (стан делокалізується).

4. Розрахувати зонну структуру в одновимірному періодичному потенціалі вигляду $U(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}v(x-na)$, який представляє собою суперпозицію симетричних потенціальних бар'єрів $v(x)=v(-x)$ із шириною a, центри яких розташовані в точках $x_n=\pm na$ (рис. 2.25, *а*).

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)



а) б)

Рис. 2.25: а) одновимірний періодичний потенціал;
б) характерний вигляд функції $f(k)=\cos\left[ka+\delta(k)\right]/\left|t(k)\right|$

Розв'язання: зонну структуру найпростіше виразити через характеристики частинки, яка перебуває в потенціалі окремого бар'єра $v(x)$. Розглянемо частинку, яка падає на потенціальний

бар'єр зліва направо і має енергію $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$. Оскільки $v(x) = 0$ при $|x| \geq a/2$, то у цих областях хвильова функція $\psi_l(x)$ матиме вигляд

$$\psi_l(x) = \begin{cases} \exp(ikx) + r\exp(-ikx), & x \leq -a/2, \\ t\exp(ikx), & x \geq a/2. \end{cases}$$

Схематично цей процес зображено на рис. 2.25, *а* на бар'єрі, розташованому ліворуч.

Коефіцієнти проходження (t) і відбиття (r) дають амплітуди ймовірностей того, що частинка протунелює крізь бар'єр або відіб'ється від нього; залежність їх від хвильового числа k падаючої хвилі визначається детальними властивостями потенціалу $v(x)$. Однак багато характерних рис зонної структури, яка відповідає періодичному потенціалу $U(x)$, можна визначити, використовуючи лише найбільш загальні властивості коефіцієнтів t і r. Унаслідок парності потенціалу $v(x)$ функція $\psi_r(x) = \psi_l(-x)$ також буде розв'язком рівняння Шредінгера з енергією E. Ця функція має вигляд

$$\psi_r(x) = \begin{cases} t\exp(-ikx), & x \leq -a/2, \\ \exp(-ikx) + r\exp(ikx), & x \geq a/2. \end{cases}$$

Очевидно, що вона описує частинку, яка падає на бар'єр справа наліво, як показано на рис. 2.25, *а* на бар'єрі, розташованому праворуч.

Оскільки $\psi_l(x)$ і $\psi_r(x)$ є двома незалежними розв'язками рівняння Шредінгера для випадку одного бар'єра, які відповідають однаковій енергії, то довільний інший розв'язок для цієї ж енергії буде їхньою лінійною комбінацією $\psi(x) = A\psi_l(x) + B\psi_r(x)$. Ураховуємо також, що відповідно до теореми Блоха цю функцію можна вибрати таким чином, щоб для деякого к виконувалось співвідношення $\psi(x + a) = \exp(i\kappa a)\psi(x)$. Для похідної також

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

виконується співвідношення $\psi'(x+a)=\exp(i\kappa a)\psi'(x)$. Застосовуючи ці співвідношення при $x=-a/2$ з урахуванням явних виразів для $\psi_l(x)$ і $\psi_r(x)$, таким чином зв'язуємо енергію частинки з її хвильовим числом κ:

$$\cos\kappa a=\frac{t^2-r^2}{2t}\exp(ika)+\frac{1}{2t}\exp(-ika),\ E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}.$$

Це рівняння стає більш змістовним, якщо скористатись деякою додатковою інформацією про коефіцієнти проходження та відбиття. Запишемо для цього комплексне число t через його амплітуду і фазу $t=|t|\exp(i\delta)$. Дійсне число δ називають фазовим зсувом, оскільки воно характеризує зміну фази хвилі, що пройшла, щодо падаючої хвилі. З умови збереження частинок випливає, що сума ймовірностей проходження і відбиття має дорівнювати одиниці: $|t|^2+|r|^2=1$. Це твердження можна довести за допомогою визначника Вронського $w(\psi_l,\psi_l^*)$ і на основі теореми Гріна, прирівнюючи його значення $2ik\left(1-|r|^2\right)$, розраховане при $x\le -a/2$, до значення $2ik|t|^2$, одержаного при $x\ge a/2$. Аналогічним чином, але з використанням визначника Вронського $w(\psi_l,\psi_r^*)$, доводиться, що величина r повинна мати вигляд $r=\pm i|r|\exp(i\delta)$. Тепер, використовуючи ці твердження, легко знайти такий зв'язок між енергією і хвильовим вектором частинки:

$$\frac{\cos(ka+\delta)}{|t(k)|}=\cos\kappa a,\ E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}.$$

На рис. 2.25, *б* показано характерний графік лівої сторони цієї рівності, який не залежить від конкретних функціональних залежностей $|t|$ і δ від k. Зауважимо, що значення k, які приво-

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

дять до нерівності $\left|\cos\left[ka+\delta(k)\right]\right|/\left|t(k)\right|>1$, стосуються заборонених значень (на рис. 2.25, *б* ці області заштриховані).

5. Знайти рівняння Шредінгера в імпульсному представленні для частинки, яка рухається в періодичному потенціальному полі $V(x)=V_0\cos bx$.

Розв'язання: оператор Гамільтона при даному потенціалі має вигляд

$$\hat{H}=\hat{p}^2/2\mu+V_0\exp\left(b\hbar\partial/\partial p\right)/2+V_0\exp\left(-b\hbar\partial/\partial p\right)/2.$$

Оскільки $\exp\left(b\hbar\partial/\partial p\right)a(p)=a(p+b\hbar)$, то рівняння Шредінгера буде представлене у вигляді рівняння в скінченних різницях

$$\frac{1}{2\mu}p^2a(p)+\frac{1}{2}V_0a(p+b\hbar)+\frac{1}{2}V_0a(p-b\hbar)=Ea(p).$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Розділ 3

РУХ У ДВОВИМІРНИХ І ТРИВИМІРНИХ СИСТЕМАХ

Короткі теоретичні відомості

1. Якщо потенціальна енергія частинки залежить лише від однієї координати x, то хвильову функцію $\psi(\vec{r})$ рівняння Шредінгера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U(x)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

можна шукати у вигляді добутку $\psi(\vec{r}) = \varphi(y,z)\psi(x)$. Тоді перша функція $\varphi(y,z)$ визначається рівнянням Шредінгера для вільного руху (за відсутності потенціальної енергії), а друга – одновимірним рівнянням Шредінгера з потенціальною енергією $U(x)$.

До одновимірних рівнянь Шредінгера приходимо й у випадку руху в потенціальному полі $U(x,y,z) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z)$.

2. Оператори компонентів моменту імпульсу частинки $\hat{\vec{L}} = \hbar\hat{\vec{l}} = \left[\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}\right]$ у декартовій системі координат записуються таким чином:

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

У сферичних координатах оператори $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ і $\hat{L}_z$, а також їхні власні функції залежать тільки від кутових змінних θ і φ. Наприклад, для оператора $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$, його власні функції та власні значення мають вигляд

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi),\ L_z = m\hbar,\ m = 0,\pm1,\ldots.$$

Оператор квадрата моменту імпульсу $\hat{\vec{L}}^2$ виражається через кутову частину оператора Лапласа. Його власні значення дорівнюють $\hbar^2 l(l+1)$, причому $l = 0,1,\ldots$. При дослідженні лише кутової залежності хвильових функцій частинки оператори $\hat{\vec{L}}^2$ і $\hat{L}_z$ утворюють повний набір. Сферичні функції $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ є нормованими власними функціями цих операторів:

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_{lm} \equiv -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm},$$

$$\hat{L}_z Y_{lm} \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm} = \hbar m Y_{lm};$$

мають такий вигляд ($|m| \le l$):

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} i^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta)\exp(im\varphi)$$

і задовольняють умову $Y_{lm}^*(\theta,\varphi) = (-1)^{l-m} Y_{l,-m}(\theta,\varphi)$. Тут $P_l^{|m|}(z)$ – приєднані поліноми Лежандра, які визначаються за допомогою формули Родріго $P_l^{|m|}(z) = \left(1-z^2\right)^{|m|/2} d^{|m|}P_l(z)/dz^{|m|}$, причому $P_l(z)$ є так званим поліномом Лежандра, який, у свою чергу, визначається за такою формулою Родріго:

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$P_l(z)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dz^l}\left[\left(z^2-1\right)^l\right].$$

Сферичні функції характеризуються парністю I, що дорівнює $(-1)^l$. Для них справедлива така "теорема додавання":

$$P_l(\vec{n}\cdot\vec{n}')=\frac{4\pi}{2l+1}\sum\nolimits_{m=-l}^{l}Y_{lm}(\vec{n})Y_{lm}^*(\vec{n}'),$$

де $\vec{n},\vec{n}'$ – орти вздовж відповідних напрямків, при цьому $Y_{lm}(\vec{n})=Y_{lm}(\theta,\varphi)$ і $\vec{n}\cdot\vec{n}'=\cos\theta\cos\theta'+\sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi-\varphi')$.

Наведемо сферичні функції для моментів з малими квантовими числами:

$$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},\ Y_{10}=i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\ Y_{20}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(1-3\cos^2\theta\right),$$

$$Y_{1,\pm1}=\mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(\pm i\varphi),\ Y_{2,\pm1}=\pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\exp(\pm i\varphi),$$

$$Y_{2,\pm2}=-\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\exp(\pm2i\varphi),\ Y_{30}=-i\sqrt{\frac{7}{16\pi}}\cos\theta\left(5\cos^2\theta-3\right),$$

$$Y_{3,\pm1}=\pm i\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta\left(5\cos^2\theta-1\right)\exp(\pm i\varphi),$$

$$Y_{3,\pm2}=-i\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\cos\theta\sin^2\theta\exp(\pm2i\varphi),$$

$$Y_{3,\pm3}=\pm i\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta\exp(\pm3i\varphi).$$

"Підвищувальний" (збільшується значення проекції моменту імпульсу на вісь z) $\hat{L}_+$ і "знижувальний" $\hat{L}_-$ оператори $\hat{L}_\pm=\hat{L}_x\pm i\hat{L}_y$ задовольняють співвідношення комутації $\left[\hat{L}_z,\hat{L}_\pm\right]=\pm\hat{L}_\pm$. Звідси випливає, що з усіх можливих матрич-

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (вер. не для друку)

них елементів $\left\langle lm'\left|\hat{L}_{\pm}\right|lm\right\rangle$ і $\left\langle lm'\left|\hat{L}_{x,y}\right|lm\right\rangle$ відмінні від нуля тільки такі:

$$\left(\hat{L}_{+}\right)_{m,m-1}=\left(\hat{L}_{-}\right)_{m-1,m}=\sqrt{(l+m)(l-m+1)},$$

$$\left(\hat{L}_{x}\right)_{m,m-1}=\left(\hat{L}_{x}\right)_{m-1,m}=\sqrt{(l+m)(l-m+1)}/2,$$

$$\left(\hat{L}_{y}\right)_{m,m-1}=-\left(\hat{L}_{y}\right)_{m-1,m}=-i\sqrt{(l+m)(l-m+1)}/2,$$

чим і визначається вигляд цих операторів у $\hat{L}_z$ -представленні, у якому $\left(\hat{L}_z\right)_{mm'}=m\delta_{mm'}$.

3. Розв'язок рівняння Шредінгера для центрального потенціалу

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+U(r)\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

з урахуванням взаємної комутативності операторів $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$, $\hat{L}_z$ можна шукати у вигляді $\psi\equiv\psi_{n_r lm}(\vec{r})=R_{n_r l}(r)Y_{lm}(\vec{n})$. Із цього рівняння випливає одновимірне радіальне рівняння Шредінгера

$$\left\{\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E_{n_r l}-U(r)\right]\right\}R_{n_r l}(r)=0.$$

Гранична умова при $r\to 0$ має вигляд $R_{n_r 0}(0)=\text{const}<\infty$ для $l=0$ і $R_{n_r l}(0)=0$ для $l\neq 0$.

Для частинки в кулонівському полі $U(r)=-e^2/r$ рівні енергії та радіальні функції для станів дискретного спектра мають вигляд $E_n=-\mu e^4/2\hbar^2 n^2$ і

$$R_{n_r l}(r)=-\frac{2}{a_0^{3/2}n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{\left[(n+l)!\right]^3}}\exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right),$$

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

де $n = n_r + l + 1$ – головне квантове число, $a_0 = \hbar^2 / \mu e^2$ (для атома водню визначає радіус Бора), $L_n^k(z) = d^k L_n(z) / dz^k$ – узагальнений поліном Лаґерра, у якому поліном Лаґерра $L_n(z)$ визначається за допомогою такої формули Родріго:

$$L_n(z) = \exp(z) d^n \left[\exp(-z) z^n \right] / dz^n .$$

Зокрема, для нижніх станів маємо

$$R_{10} = 2a_0^{-3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0} \right), \; R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0} \right),$$

$$R_{21} = \frac{r}{\sqrt{24 a_0^5}} \exp\left(-\frac{r}{2a_0} \right).$$

Для розв'язання радіального рівняння зазвичай зручно переходити до нової функції $\chi_{n_r l}(r) = r R_{n_r l}(r)$, для якої

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r) \right\} \chi_{n_r l}(r) = E_{n_r l} \chi_{n_r l}(r)$$

і $\chi_{n_r l}(0) = 0$. Це рівняння за формою збігається зі звичайним рівнянням Шредінгера в одновимірному випадку з ефективним центральним потенціалом $U_{\text{еф}}(r) = \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r)$.

Для практичних задач використовують також підстановку $u_{n_r l} = \sqrt{r} R_{n_r l}$; тоді рівняння набуває вигляду

$$u''_{n_r l} + \frac{1}{r} u'_{n_r l} - \left\{ \frac{(l+1/2)^2}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[U(r) - E_{n_r l} \right] \right\} u_{n_r l} = 0 ,$$

а гранична умова в нулі відповідає умові $u_{n_r l}(0) = 0$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

4. Розв'язок рівняння Шредінгера для потенціалу $V(\rho)$ з аксіальною симетрією $\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\rho)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ з урахуванням взаємної комутативності операторів $\hat{H}$, $\hat{L}_z$ і $\hat{p}_z$ необхідно шукати у вигляді

$$\psi \equiv \psi_{n_\rho m p_z}(\vec{r}) = R_{n_\rho|m|}(\rho)\exp(im\varphi)\exp(ip_z z/\hbar).$$

Оскільки оператор Лапласа в циліндричній системі координат записується у вигляді

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

то для функції $R_{n_\rho|m|}(\rho)$ одержуємо таке одновимірне радіальне рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{m^2}{\rho^2}\right]R_{n_\rho|m|} - V(\rho)R_{n_\rho|m|} = \varepsilon_{n_\rho|m|}R_{n_\rho|m|},$$

де $\varepsilon_{n_\rho|m|} = E_{n_\rho|m|p_z} - \hbar^2 p_z^2/2\mu$. Залежно від вигляду потенціалу $V(\rho)$ це рівняння можна звести до диференціальних рівнянь для функції Бесселя або для виродженої гіпергеометричної функції.

5. Імовірність того, що електрон в атомі водню, перебуваючи у стані $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$, буде розташований в околі точки r,θ,φ, визначається як $w_{nlm}(r,\theta)r^2 dr d\Omega = R_{nl}^2(r)r^2 dr\left[P_l^{|m|}(\cos\theta)\right]^2 d\Omega$, де $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ – елемент тілесного кута в області θ,φ. Якщо виконати інтегрування за всіма кутовими змінними $d\Omega$, то одержимо ймовірність знайти електрон у сферичному шарі між двома коаксіальними сферами радіусів r і $r+dr$. Позначимо цю ймовірність через $w_{nl}(r)dr = R_{nl}^2(r)r^2 dr$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Для середніх значень степеня радіуса $\left\langle r^s \right\rangle = \left\langle nlm \middle| r^s \middle| nlm \right\rangle$ справедливе таке рекурентне співвідношення Крамерса:

$$(s+1)\left\langle r^s \right\rangle / n^2 - a_0 (2s+1)\left\langle r^{s-1} \right\rangle + s a_0^2 \left\langle r^{s-2} \right\rangle \left[(2l+1)^2 - s^2 \right] / 4 = 0,$$

причому $s > -2l - 1$.

Густина електричного струму в стані $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ буде виражатися формулою $\vec{j} = -\left(e\hbar m / \mu r \sin\theta\right) \left|\psi_{nlm}\right|^2 \vec{e}_\varphi$.

3.1. Системи з декількома ступенями вільності, що зводяться до одновимірного руху

1. Знайти хвильові функції та дозволені рівні енергії для частинки, що перебуває в тривимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі:

$$V(x, y, z) = 0, \text{ якщо } 0 \le x \le a, \quad 0 \le y \le b, \ 0 \le z \le c;$$

$$V(x, y, z) = \infty, \text{ якщо } (x < 0) \cup (x > a), \ (y < 0) \cup (y > b), \ (z < 0) \cup (z > c).$$

Видавничо-поліграфічний відділ "Київський університет" (версія не для друку)

Відповідь:

$$\psi_{mnp}(x, y, z) = \sqrt{8/abc} \sin(m\pi x/a) \sin(n\pi x/a) \sin(p\pi x/a)$$

при $0 \le x \le a$, $0 \le y \le b$, $0 \le z \le c$; $\psi_{mnp}(x, y, z) = 0$ зовні потенціальної ями;

$$E_{mnp} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu} \left(\frac{m^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2} + \frac{p^2}{c^2} \right), \text{ де } m, n, p = 1, 2, \ldots.$$

2. Частинка рухається у площині yz у межах прямокутника $0 \le y \le b$ та $0 \le z \le c$. Область за межами цього прямокутника недоступна. При русі вздовж осі x на частинку діє сила $F = -kx$. Знайти хвильові функції та відповідні рівні енергії.

Відповідь: при $-\infty \le x \le \infty$ і $0 \le y \le b$, $0 \le z \le c$ маємо

$$\psi_{mnp}(x,y,z) = \sqrt{\frac{4}{2^m m! bc}\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar\pi}}}\exp\left(-\xi^2/2\right)H_m(\xi)\sin\frac{n\pi y}{b}\sin\frac{p\pi z}{c},$$

де $\xi = x\sqrt{\mu\omega/\hbar}$, $H_m(\xi)$ – поліном Ерміта, $m = 0,1,\ldots$, $n, p = 1,2,\ldots$. Зовні від вказаних границь $\psi_{mnp}(x,y,z) = 0$.

$E_{mnp} = \hbar\omega\left(m + 1/2\right) + \pi^2\hbar^2\left(n^2/b^2 + p^2/c^2\right)\Big/2\mu$, де $\omega = \sqrt{k/\mu}$.

3. Знайти хвильові функції та рівні енергії у двовимірному гармонічному осциляторі з $V(x,y) = \frac{k_1 x^2}{2} + \frac{k_2 y^2}{2}$ (це поверхня еліптичного параболоїда).

Розв'язання: рівняння Шредінгера для двовимірного гармонічного осцилятора має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x,y) + \left(\frac{k_1 x^2}{2} + \frac{k_2 y^2}{2}\right)\psi(x,y) = E\psi(x,y).$$

Оскільки це рівняння лінійне, то можна відокремити змінні $\psi(x,y) = \psi_1(x)\psi_2(y)$. Підставивши $\psi(x,y)$ у рівняння та розділивши на $\psi_1(x)\psi_2(y)$, маємо

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu\psi_1(x)}\frac{\partial^2\psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{k_1 x^2}{2}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu\psi_2(y)}\frac{\partial^2\psi_2(y)}{\partial x^2} + \frac{k_2 y^2}{2}\right) = E.$$

Оскільки перша дужка залежить лише від x, а друга лише від y, то їхня сума може дорівнювати константі E лише у випадку, коли кожна з дужок дорівнюватиме відповідній константі:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu\psi_1(x)}\frac{\partial^2\psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{k_1 x^2}{2} = E_1,\ -\frac{\hbar^2}{2\mu\psi_2(y)}\frac{\partial^2\psi_2(y)}{\partial x^2} + \frac{k_2 y^2}{2} = E_2.$$

Таким чином, двовимірна задача зводиться до двох одновимірних задач, що описують осцилятори з енергіями E_1 та E_2,

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

причому $E = E_1 + E_2$. Використовуючи результати для одновимірного осцилятора, маємо

$$\psi_{n_1 n_2}(\xi,\eta) = C_{n_1 n_2} \exp\left[-\left(\xi^2+\eta^2\right)/2\right] H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta),$$

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega_1\left(n_1 + 1/2\right) + \hbar\omega_2\left(n_2 + 1/2\right),$$

де $\xi = x\sqrt{\mu\omega_1/\hbar}$ і $\eta = y\sqrt{\mu\omega_2/\hbar}$ – безрозмірні змінні, $\omega_{1,2} = \sqrt{k_{1,2}/\mu}$, $H_{n_1}(\xi)$, $H_{n_2}(\eta)$ – поліноми Ерміта, $n_1, n_2 = 0,1,\ldots$. Константа нормування дорівнює добутку відповідних констант нормування для одновимірних осциляторів, а саме: $C_{n_1 n_2} = \sqrt[4]{\mu^2\omega_1\omega_2} \Big/ \sqrt{\pi\hbar 2^{n_1+n_2} n_1! n_2!}$.

Зазначимо, що при $k = k_1 = k_2$ енергія $E_n = \hbar\omega(n+1)$, де $\omega = \sqrt{k/\mu}$, $n = n_1 + n_2$, $n_1, n_2 = 0,1,\ldots$. Оскільки рівню з енергією E_n відповідають $(n+1)$ незалежних хвильових функцій (за фіксованого n $n_1 = 0,1,\ldots,n$, а $n_2 = n - n_1$), кратність виродження цього рівня дорівнює $g(n) = n+1$.

4. Знайти енергетичні рівні та хвильові функції для тривимірного гармонічного осцилятора з потенціальною енергією $V(x,y,z) = \frac{1}{2}\left(\alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2\right)$ (еквіпотенціальними поверхнями у цьому потенціалі є тривісні еліпсоїди).

Відповідь: $E_{mnp} = (m+1/2)\hbar\omega_\alpha + (n+1/2)\hbar\omega_\beta + (p+1/2)\hbar\omega_\gamma$, де $\omega_{\alpha,\beta,\gamma} = \sqrt{(\alpha,\beta,\gamma)/\mu}$, $m,n,p = 0,1,\ldots$. Хвильові функції

$$\psi_{mnp}(\xi,\eta,\zeta) = C_{mnp} \exp\left[-\left(\xi^2+\eta^2+\zeta^2\right)/2\right] H_m(\xi) H_n(\eta) H_p(\zeta),$$

де $\xi = x\sqrt{\mu\omega_\alpha/\hbar}$, $\eta = y\sqrt{\mu\omega_\beta/\hbar}$, $\zeta = z\sqrt{\mu\omega_\gamma/\hbar}$ – безрозмірні змінні, $H_{m,n,p}$ – поліноми Ерміта. Константа нормування до-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

рівнює добутку констант нормування для одновимірних осциляторів

$$C_{mnp} = \sqrt[4]{\mu^3 \omega_\alpha \omega_\beta \omega_\gamma} \Big/ \left(\hbar\pi\right)^{3/4} \sqrt{2^{m+n+p}\, m!n!p!}\,.$$

Якщо $\alpha = \beta = \gamma$, то $E_N = \hbar\omega\left(N + 3/2\right)$, де $N = m + n + p$. При цьому кратність виродження цього рівня дорівнює $g\left(N\right) = \sum_{p=0}^{N}\left(N - p + 1\right) = \left(N+1\right)\left(N+2\right)/2$.

5. Знайти енергетичний спектр частинки в потенціалі

$$U\left(x,y\right) = \frac{k}{2}\left(x^2 + y^2\right) + \alpha xy\,,\ \left|\alpha\right| < k\,.$$

Розв'язання: запишемо потенціал у вигляді

$$U\left(x,y\right) = \frac{k_1}{4}\left(x+y\right)^2 + \frac{k_2}{4}\left(x-y\right)^2,$$

де $k_{1,2} = k \pm \alpha > 0$. Якщо перейти до змінних $x_1 = \left(x+y\right)\big/\sqrt{2}$ і $y_1 = \left(-x+y\right)\big/\sqrt{2}$ (це відповідає повороту на $\pi/4$ у площині xy), то гамільтоніан набуває вигляду суми гамільтоніанів двох незалежних осциляторів

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{k_1 x_1^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{k_2 y_1^2}{2}\,.$$

Відповідний енергетичний спектр системи має такий вигляд:

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\sqrt{\frac{k+\alpha}{\mu}}\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\sqrt{\frac{k-\alpha}{\mu}}\left(n_2 + \frac{1}{2}\right),$$

де $n_1, n_2 = 0,1,\ldots$, а власні функції, які відповідають цим рівням, очевидним чином виражаються через власні функції лінійного осцилятора (див. попередні задачі).

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (верстання для друку)

3.2. Момент кількості руху

1. Довести справедливість перестановочного співвідношення $\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar\hat{\vec{L}}$ для моменту кількості руху.

Розв'язання: скориставшись тим, що $\hat{x}\hat{y} = \hat{y}\hat{x}$, $\hat{p}_x\hat{p}_y = \hat{p}_y\hat{p}_x$, а $\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar$, доведемо справедливість x-складової вказаного в умові співвідношення, а саме:

$$\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = \left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right)\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) - \left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right)\left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right) =$$

$$= \left(\hat{z}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_z\right)\left(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x\right) = i\hbar\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) = i\hbar\hat{L}_x .$$

Застосовуючи циклічну перестановку індексів, одержуємо інші складові рівності $\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar\hat{\vec{L}}$.

2. Довести, що оператор квадрата моменту кількості руху $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ комутує з його складовими (скористатися результатами попередньої задачі).

Розв'язання: для доведення комутативності $\hat{L}^2$ і $\hat{L}_x$ запишемо $\hat{L}^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}^2 = \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z^2$. Додаючи й віднімаючи сюди вирази $\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y$ та $\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z$ і виносячи за дужки спільні множники, що розташовані з одного й того самого боку, та користуючись результатами попередньої задачі, одержимо необхідне.

3. Показати, що результат перетворення скалярної функції $f\left(\vec{r}\right)$ при нескінченно малому обертанні системи координат виражається через оператори моменту кількості руху.

Розв'язання: нехай поворот системи координат описується формулами $\vec{r}' = R\vec{r}$, $R = 1 + A$, де R і A – трирядні матриці, причому

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_z & -\varepsilon_y \\ -\varepsilon_z & 0 & \varepsilon_x \\ \varepsilon_y & -\varepsilon_x & 0 \end{pmatrix},$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

де $\varepsilon_{x,y,z}$ – нескінченно малі кути повороту навколо осей x, y, z.

Зазначимо, що обернене перетворення можна одержати або зміною знаків кутів, або переходячи до транспонованої матриці $\tilde{A}$. Таким чином, $\tilde{A} = -A$. При такому повороті функція $f(\vec{r})$ перейде у функцію $f'(\vec{r}')$ від нових координат, яку можна виразити через старі координати $\vec{r}$, скориставшись розкладом у ряд Тейлора $f'(\vec{r}') = f'(\vec{r}) + (\delta\vec{r}\cdot\nabla) f'(\vec{r})$, де $\delta\vec{r} = \vec{r}' - \vec{r} = A\vec{r}$ (тут члени, які містять більш високі похідні, відкинуті). З урахуванням

$$A\vec{r} = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_z & -\varepsilon_y \\ -\varepsilon_z & 0 & \varepsilon_x \\ \varepsilon_y & -\varepsilon_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_z y - \varepsilon_y z \\ -\varepsilon_z x - \varepsilon_x z \\ \varepsilon_y x - \varepsilon_x y \end{pmatrix}$$

функцію $f'(\vec{r}')$ можна записати у вигляді

$$f'(\vec{r}') = f'(\vec{r}) + \left[(\varepsilon_z y - \varepsilon_y z)\frac{\partial}{\partial x} + (-\varepsilon_z x - \varepsilon_x z)\frac{\partial}{\partial y} + (\varepsilon_y x - \varepsilon_x y)\frac{\partial}{\partial z} \right] f'(\vec{r}).$$

Збираючи тут члени з однаковими ε_i і вводячи оператори моменту кількості руху $\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right)$ і т. д. (циклічні перестановки), одержуємо $f'(\vec{r}') = f'(\vec{r}) - \frac{i}{\hbar}\left(\vec{\varepsilon}\cdot\hat{\vec{L}}\right) f'(\vec{r})$, де через $\vec{\varepsilon}$ позначений вектор з компонентами ε_x, ε_y, ε_z. Оскільки другий член у виразі для $f'(\vec{r}')$ є нескінченно малою величиною, можна знехтувати різницею між $f(\vec{r}')$ і $f'(\vec{r}')$. Тому функцію $f'(\vec{r})$ можна записати так: $f'(\vec{r}) = \left[1 + \frac{i}{\hbar}\left(\vec{\varepsilon}\cdot\hat{\vec{L}}\right) \right] f'(\vec{r}')$.

Досі ми скористались тим, що функція $f(\vec{r})$ є скаляром, тобто вона інваріантна щодо обертань $f'(\vec{r}') = f(\vec{r})$. Це дозво-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія сайту для друку)

ляє всі величини виразити через старі координати $\vec{r}$. Таким чином, кінцевий вираз набуває вигляду $f'(\vec{r}) = \left[1 + \frac{i}{\hbar}\left(\vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{L}}\right)\right] f(\vec{r})$.

4. Скориставшись результатами попередньої задачі, виразити компоненти оператора моменту кількості руху через сферичні координати.

Розв'язання: у рівності $f'(\vec{r}') = f'(\vec{r}) - \frac{i}{\hbar}\left(\vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{L}}\right) f'(\vec{r})$ замінюємо f' на ψ, тоді вона запишеться у вигляді

$$\psi(\vec{r}') = \left[1 - \frac{i}{\hbar}\left(\vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{L}}\right)\right] \psi(\vec{r}).$$

Спочатку виконаємо поворот навколо осі z. Цьому повороту відповідає перетворення $r' = r$, $\theta' = \theta$, $\varphi' = \varphi - \varepsilon_z$. Звідси за допомогою розкладу в ряд Тейлора одержуємо

$$\psi(\vec{r}') = \psi(\vec{r}) + (\varphi' - \varphi)\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \left(1 - \varepsilon_z \frac{\partial}{\partial \varphi}\right)\psi(\vec{r}).$$

З іншого боку, згідно з попередньою формулою маємо

$$\psi(\vec{r}') = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon_z \hat{L}_z\right)\psi(\vec{r}).$$

Порівняння цих виразів приводить до формули $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$.

Розглянемо тепер поворот системи координат на кут ε_x навколо осі x. У цьому випадку так само буде $r' = r$, але сферичні кути θ і φ змінюються: $\theta' = \theta + \delta\theta$, $\varphi' = \varphi + \delta\varphi$. У прямокутній системі координат розглядуваний поворот описується формулами

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \varepsilon_x \\ 0 & -\varepsilon_x & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y + \varepsilon_x z \\ z - \varepsilon_x y \end{pmatrix}.$$

Оскільки, з одного боку, $z = r\cos\theta$, $y = r\sin\theta\sin\varphi$ і $z' = r\cos\theta' = r(\cos\theta - \delta\theta\sin\theta)$, а з другого боку, $z' = z - \varepsilon_x y = r(\cos\theta - \varepsilon_x \sin\theta\sin\varphi)$, то з порівняння цих виразів випливає $\delta\theta = \varepsilon_x \sin\varphi$. Аналогічним чином, порівнюючи вирази

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$y' = r\sin\theta'\sin\varphi' = r\left(\sin\theta\sin\varphi + \delta\theta\cos\theta\sin\varphi + \delta\varphi\sin\theta\cos\varphi\right),$$

$$y' = y + \varepsilon_x z = r\left(\sin\theta\sin\varphi + \varepsilon_x\cos\theta\right),$$

одержуємо $\delta\theta\cos\theta\sin\varphi + \delta\varphi\sin\theta\cos\varphi = \varepsilon_x\cos\theta$, що з урахуванням $\delta\theta = \varepsilon_x\sin\varphi$ дає $\delta\varphi = \varepsilon_x\cos\varphi\operatorname{ctg}\theta$. Користуючись цими формулами, запишемо розклад у ряд Тейлора у вигляді

$$\psi\left(\vec{r}'\right) = \psi\left(\vec{r}\right) + \frac{\partial\psi}{\partial\theta}\delta\theta + \frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\delta\varphi =$$

$$= \left[1 + \varepsilon_x\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]\psi\left(\vec{r}\right).$$

Порівнюючи цей вираз з виразом $\psi\left(\vec{r}'\right) = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon_x\hat{L}_x\right)\psi\left(\vec{r}\right)$, одержуємо

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

Розглянемо, нарешті, поворот системи координат на кут ε_y навколо осі y, знову позначаючи прирости кутів θ і φ через $\delta\theta$ і $\delta\varphi$, які тепер мають інші значення, що визначаються такими співвідношеннями:

$$x' = r\sin\theta'\cos\varphi' = r\left(\sin\theta\cos\varphi + \delta\theta\cos\theta\cos\varphi - \delta\varphi\sin\theta\sin\varphi\right) =$$

$$= x - \varepsilon_y z = r\left(\sin\theta\cos\varphi - \varepsilon_y\cos\theta\right),$$

$$z' = r\cos\theta' = r\left(\cos\theta - \delta\theta\sin\theta\right) = z + \varepsilon_y x = r\left(\cos\theta + \varepsilon_y\sin\theta\cos\varphi\right).$$

Звідси з першої формули випливає $\delta\varphi = \varepsilon_y\sin\varphi\operatorname{ctg}\theta$, а з другої відповідно $\delta\theta = -\varepsilon_y\cos\varphi$.

Таким чином, розклад у ряд Тейлора функції $\psi\left(\vec{r}'\right)$ записується у вигляді

$$\psi\left(\vec{r}'\right) = \psi\left(\vec{r}\right) + \varepsilon_y\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \sin\varphi\operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi\left(\vec{r}\right).$$

Архів навчально-методичного центру "Київський університет" (версія не для друку)

Щоб цей вираз узгоджувався зі співвідношенням

$$\psi(\vec{r}\,') = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\varepsilon_y \hat{L}_y\right)\psi(\vec{r}\,),$$

необхідне виконання формули

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \sin\varphi\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

Зауважимо, що зазвичай зручно користуватися такими комбінаціями:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y = i\hbar\exp(i\varphi)\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = i\hbar\exp(-i\varphi)\left(i\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

5. Записати оператор $\hat{L}^2$ у сферичних координатах. Одержаний вираз порівняти з оператором Лапласа та оператором кінетичної енергії.

Розв'язання: використовуючи оператори $\hat{L}_+$ і $\hat{L}_-$ із попередньої задачі, можна написати $\hat{L}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+\right) + \hat{L}_z^2$. Добуток $\hat{L}_+\hat{L}_-$ дорівнює

$$-\hbar^2\exp(i\varphi)\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\exp(-i\varphi)\left(i\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

Ураховуючи перестановочне співвідношення

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}\exp(-i\varphi) = \exp(-i\varphi)\left(-i + \frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

яке дозволяє виключити експоненту, і беручи до уваги, що $\frac{\partial}{\partial\theta}\mathrm{ctg}\,\theta = -\frac{1}{\sin^2\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}$, приходимо до виразу

$$\hat{L}^+\hat{L}^- = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}^2\,\theta\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + i\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

Видавничо-поліграфічний центр Київського університету (вісія не для друку)

Аналогічним чином можна знайти й оператор $\hat{L}_-\hat{L}_+$, який відрізняється від $\hat{L}_+\hat{L}_-$ знаком останнього члена. Таким чином, для $\hat{L}^2$ одержуємо

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \left(1+\operatorname{ctg}^2\theta\right)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right],$$

або

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

У цьому записі вираз, який стоїть у дужках, збігається з виразом для кутової частини оператора Лапласа, тому можна записати

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{L}^2.$$

Як відомо з класичної механіки, кінетичну енергію частинки можна представити у вигляді $\frac{p^2}{2\mu} = \frac{1}{2\mu}\left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}\right)$. Оскільки цій енергії відповідає квантово-механічний оператор $\left(-\hbar^2/2\mu\right)\nabla^2$, можна дійти до співвідношення

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\nabla^2 - \frac{\hat{L}^2}{r^2} = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right),$$

яке показує, що оператор $\hat{p}_r^2$ з точністю до множника збігається з радіальною частиною оператора Лапласа.

З іншого боку, оператор, що відповідає класичному радіальному імпульсу p_r, можна одержати шляхом факторизації з $\hat{p}_r^2$: $\hat{p}_r = -i\hbar\left(\partial/\partial r + 1/r\right)$. У цьому легко переконатись, якщо його застосувати два рази. Можна також показати, що оператор $\hat{p}_r$ є ермітовим, а також він і координата r задовольняють канонічним перестановочним співвідношенням.

Видавничо-поліграфічний центр
київського університету
(версія тільки для друку)

6. Довести такі комутаційні співвідношення:

а) $\left[\hat{L}_i, \hat{x}_k\right] = i\hbar \sum_l e_{ikl} \hat{x}_l$; б) $\left[\hat{L}_i, \hat{p}_k\right] = i\hbar \sum_l e_{ikl} \hat{p}_l$;

в) $\left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{x}_i\right] = 2i\hbar\left[\left(\hat{\vec{r}}\hat{\vec{p}}\right)\hat{x}_i - \hat{\vec{r}}^2 \hat{p}_i\right]$;

г) $\left[\hat{\vec{L}}^2, \hat{p}_i\right] = 2i\hbar\left[\hat{\vec{p}}^2 \hat{x}_i - \left(\hat{\vec{p}}\hat{\vec{r}}\right)\hat{p}_i\right]$.

7. Довести рівність $\left[\vec{A}(\vec{r}), \hat{\vec{L}}\right] = i\hbar\vec{r} \cdot \operatorname{rot} \vec{A}(\vec{r})$.

8. Знайти хвильові функції стаціонарних станів і рівні енергії плоского ротатора з моментом інерції I. Яка кратність виродження рівнів? У стані, який описується хвильовою функцією $\psi = C\cos^2\varphi$, знайти ймовірність різних значень енергії, моменту та його проекції на вісь z, а також середні значення та флуктуації цих величин.

Розв'язання: функція Гамільтона ротатора $H = L_z^2 / 2I$ (тут $L_z \equiv p_\varphi$ – проекція моменту ротатора на вісь z, перпендикулярну площині обертання); відповідний оператор Гамільтона має вигляд $\hat{H} = \hat{L}_z^2 / 2I$. Оскільки $\hat{H}$ комутує з $\hat{L}_z$, то власні функції $\hat{H}$ можуть бути вибрані одночасно і власними функціями оператора $\hat{L}_z$, що дозволяє одразу вказати спектр і власні функції Гамільтоніана

$$E_m = \hbar^2 m^2 / 2I, \ \Psi_m = \exp(im\varphi) / \sqrt{2\pi}, \ m = 0, \pm 1, \ldots .$$

Звідси видно, що всі рівні, окрім основного, двократно вироджені.

З умови нормування знаходимо $C = 2/\sqrt{3\pi}$. Тоді маємо

$$\Psi(\varphi) = \left[\exp(2i\varphi) + 2 + \exp(-2i\varphi)\right] / 2\sqrt{3\pi} = \sum_m c_m \exp(im\varphi) / \sqrt{2\pi}.$$

Звідси безпосередньо випливають розподіли ймовірностей різних значень проекції моменту $w(m) = |c_m|^2$ та енергії $w(E_m) = w(m) + w(-m)$ (при $m \neq 0$) ротатора:

$$w(E_0) = w(0) = 2/3, \ w(E_2) = 2w(2) = 2w(-2) = 1/3,$$

імовірності інших значень дорівнюють нулю. Тепер маємо

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

$$\langle m\rangle=\sum_m mw(m)=0\,,\ \langle m^2\rangle=\sum_m m^2w(m)=4/3\,,\ \left\langle(\Delta m)^2\right\rangle=4/3\,,$$

$$\langle E\rangle=\hbar^2\langle m^2\rangle/2I=2\hbar^2/3I\,,\ \left\langle(\Delta E)^2\right\rangle=8\hbar^4/9I^2\,.$$

9. Знайти хвильові функції стаціонарних станів та рівні енергії просторового (сферичного) ротатора з моментом інерції I. Яка кратність виродження рівнів?

У стані, який описується хвильовою функцією $\psi=C\cos^2\theta$, знайти ймовірність різних значень енергії, моменту та його проекції на вісь z, а також середні значення та флуктуації цих величин.

Розв'язання: функція Гамільтона ротатора $H=\vec{L}^2/2I$; відповідний оператор Гамільтона має вигляд $\hat{H}=\hat{\vec{L}}^2/2I$, а його власні значення і власні функції $E_l=\hbar^2l(l+1)/2I$, $\Psi_{lm}=Y_{lm}(\theta,\varphi)$, де $l=0,1,...$, $m=-l,-l+1,...,l-1,l$, Y_{lm} – сферичні функції, θ,φ – полярний і азимутальний кути осі ротатора. Рівні енергії $(2l+1)$-кратно вироджені і мають парність $(-1)^l$.

Наведена в умові задачі хвильова функція описує стан ротатора зі значенням $L_z=0$. Записавши її у вигляді

$$\Psi=C\cos^2\theta=\frac{\sqrt{4\pi}C}{3}\left[\frac{1}{\sqrt{4\pi}}-\frac{\left(1-3\cos^2\theta\right)}{\sqrt{4\pi}}\right]\equiv\sum_l c_lY_{l0}$$

і врахувавши функції $Y_{00}=1/\sqrt{4\pi}$, $Y_{20}=\sqrt{5/16\pi}\left(1-3\cos^2\theta\right)$, знаходимо, що момент ротатора може набувати лише двох значень: $l=0$ і $l=2$ з імовірностями $w(0)=5/9$ і $w(2)=4/9$. При цьому $\langle E\rangle=4\hbar^2/3I$, $\left\langle(\Delta E)^2\right\rangle=8\hbar^4/3I^2$, $|C|^2=5/4\pi$.

10. Показати, що рівність $\vec{L}^2=l(l+1)$ можна одержати за допомогою елементарних формул теорії ймовірностей, а проекція моменту на довільну вісь може набувати лише значень

Видавництво «Графічний центр» (версія не для друку)
Київський університет ім. Т.Г. Шевченка

$m=-l,-l+1,...,l$, вважаючи при цьому, що всі вони рівноймовірні, а осі рівноправні.

Розв'язання: унаслідок рівноймовірності різних значень L_z маємо

$$\left\langle L_z^2\right\rangle=\left(2l+1\right)^{-1}\sum_{m=-l}^{l}m^2=2\left(2l+1\right)^{-1}\left[\frac{d^2}{d\alpha^2}\sum_{m=0}^{l}\exp\left(\alpha m\right)\right]_{\alpha=0}=$$

$$=2\left(2l+1\right)^{-1}\left\{\frac{d^2}{d\alpha^2}\left[\frac{1-\exp\left[\alpha\left(l+1\right)\right]}{1-\exp\alpha}\right]\right\}_{\alpha=0}=\frac{l\left(l+1\right)}{3}.$$

Звідси внаслідок рівноправності осей x,y,z випливає

$$\vec{L}^2\equiv\left\langle\vec{L}^2\right\rangle=\left\langle L_x^2\right\rangle+\left\langle L_y^2\right\rangle+\left\langle L_z^2\right\rangle=3\left\langle L_z^2\right\rangle=l\left(l+1\right).$$

11. Знайти нормовані відповідним чином хвильові функції $\Psi_{r_0lm}\left(r,\theta,\varphi\right)$, що описують стан частинки, яка перебуває на відстані r_0 від початку координат, має момент l і його проекцію m на вісь z.

Відповідь: $\Psi_{r_0lm}\left(r,\theta,\varphi\right)=\delta\left(r-r_0\right)Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right)/r_0$.

12. Знайти загальні власні функції операторів проекцій на вісь z імпульсу та моменту імпульсу частинки.

Відповідь:

$$\Psi_{p_zm}\left(\vec{r}\right)=\left(2\pi\hbar\right)^{-1/2}\exp\left(ip_zz/\hbar\right)\left(2\pi\right)^{-1/2}\exp\left(im\varphi\right)f\left(\rho\right),$$

де $f\left(\rho\right)$ – довільна функція змінної ρ циліндричної системи координат.

13. Показати, що середні значення векторів $\vec{L}$, $\vec{r}$, $\vec{p}$ у стані частинки із хвильовою функцією $\Psi\left(\vec{r}\right)=\exp\left(i\vec{p}_0\vec{r}/\hbar\right)\varphi\left(\vec{r}\right)$, де $\vec{p}_0$ – дійсний вектор, а $\varphi\left(\vec{r}\right)$ – дійсна функція, зв'язані класичним співвідношенням $\left\langle\vec{L}\right\rangle=\left\langle\vec{r}\right\rangle\times\left\langle\vec{p}\right\rangle$.

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

Розв'язання: оскільки хвильова функція нормована на одиницю (при цьому $\int \varphi^2(r)dV = 1$), то маємо: $\langle \vec{r} \rangle = \int \vec{r}\varphi^2(r)dV$, $\langle \vec{p} \rangle = \vec{p}_0$. А оскільки $\hat{L}_i = \varepsilon_{ikl}\hat{x}_k\hat{p}_l$, то

$$\langle L_i \rangle = \varepsilon_{ikl}\int \varphi(\vec{r})\left[x_k p_{0l} + x_k\hat{p}_l\right]\varphi(\vec{r})dV .$$

Перетворюючи другий доданок під інтегралом до вигляду

$$\varphi(\vec{r})x_k\hat{p}_l\varphi(\vec{r}) = -\frac{i}{2}\hbar\frac{\partial}{\partial x_l}\left[\varphi^2(\vec{r})x_k\right] + \frac{i}{2}\hbar\delta_{kl}\varphi^2(\vec{r}),$$

помічаємо, що його внесок у $\langle L_i \rangle$ дорівнює нулю: рівність нулю інтеграла від першого доданка в цьому виразі очевидна після перетворення його з використанням теореми Остроградського–Гаусса. А другий доданок у цьому виразі перетворюється на нуль після згортки δ_{kl} з ε_{ikl}.

Таким чином, маємо $\langle L_i \rangle = \varepsilon_{ikl}\langle x_k \rangle p_{0l}$, або $\langle \vec{L} \rangle = \left[\langle \vec{r} \rangle, \langle \vec{p} \rangle\right]$.

14. Показати, що функції, одержані в результаті дії операторів $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ на власні функції $\psi_m(\varphi)$ оператора $\hat{L}_z$, також є власними функціями $\hat{L}_z$, які вже відповідають власним значенням $m \pm 1$. Показати, що у стані з хвильовою функцією $\psi_m(\varphi)$: а) $\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0$; б) $\langle \hat{L}_x^2 \rangle = \langle \hat{L}_y^2 \rangle$; в) $\langle \hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x \rangle = 0$.

Розв'язання: із комутаційних співвідношень для складових моменту випливає, що $\hat{L}_z\hat{L}_\pm = \hat{L}_\pm\left(\hat{L}_z \pm 1\right)$. Застосовуючи цю операторну рівність до власних функцій $\psi_m(\varphi)$, одержуємо $\hat{L}_z\left(\hat{L}_\pm\psi_m\right) = (m \pm 1)\left(\hat{L}_\pm\psi_m\right)$, тобто функції $\hat{L}_\pm\psi_m$ також є власними функціями оператора $\hat{L}_z$ (у частинному випадку, коли $m = \pm l$, де l – момент частинки, одна із цих функцій дорівнює нулю тотожно).

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" Версія не для друку

З ортогональності власних функцій випливають співвідношення $\left\langle m\left|\hat{L}_{\pm}\right|m\right\rangle \propto \left\langle m|m\pm 1\right\rangle = 0$, $\left\langle m\left|\hat{L}_{\pm}^2\right|m\right\rangle = 0$. Звідси з першого співвідношення маємо $\left\langle \hat{L}_x\right\rangle \pm i\left\langle \hat{L}_y\right\rangle = 0$, або $\left\langle \hat{L}_x\right\rangle = \left\langle \hat{L}_y\right\rangle = 0$, а друге еквівалентне рівностям $\left\langle \hat{L}_x^2 - \hat{L}_y^2\right\rangle \pm i\left\langle \hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x\right\rangle = 0$, із яких випливають, зокрема, рівності $\left\langle \hat{L}_x^2\right\rangle = \left\langle \hat{L}_y^2\right\rangle$ і $\left\langle \hat{L}_x\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_x\right\rangle = 0$.

15. У стані $\Psi_{lm}(\theta,\varphi)$ з визначеним значенням моменту l і його проекції m на вісь z знайти середні значення $\left\langle \hat{L}_x^2\right\rangle$, $\left\langle \hat{L}_y^2\right\rangle$, а також середнє значення та флуктуацію проекції моменту на вісь $\tilde{z}$, яка орієнтована під кутом α щодо осі z.

Розв'язання: оскільки $\left\langle \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2\right\rangle \equiv \left\langle \hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z^2\right\rangle = l(l+1) - m^2$, то з урахуванням результату попередньої задачі приходимо до співвідношення $\left\langle \hat{L}_x^2\right\rangle = \left\langle \hat{L}_y^2\right\rangle = \left[l(l+1) - m^2\right]/2$. Оператор проекції моменту на вісь $\tilde{z}$ має вигляд

$$\hat{L}_{\tilde{z}} = \cos\alpha\cdot\hat{L}_z + \sin\alpha\cos\beta\cdot\hat{L}_x + \sin\alpha\sin\beta\cdot\hat{L}_y,$$

де α,β – полярний і азимутальний кути напрямку осі $\tilde{z}$. Усереднюючи оператор $\hat{L}_{\tilde{z}}$ за станом $\Psi_{lm}(\theta,\varphi)$, знаходимо $\left\langle \hat{L}_{\tilde{z}}\right\rangle = m\cos\alpha$ (із попередньої задачі маємо $\left\langle \hat{L}_x\right\rangle = \left\langle \hat{L}_y\right\rangle = 0$). Зазначимо, що для справедливості цього співвідношення припущення про цілком визначене значення l не обов'язкове. Нарешті, ураховуючи при усередненні оператора $\hat{L}_{\tilde{z}}^2$ результат попередньої задачі, знаходимо $\left\langle \hat{L}_{\tilde{z}}^2\right\rangle$, а з ним і

$$\left\langle \left(\Delta\hat{L}_{\tilde{z}}\right)^2\right\rangle = \left\langle \hat{L}_{\tilde{z}}^2\right\rangle - \left\langle \hat{L}_{\tilde{z}}\right\rangle^2 = \frac{1}{2}\left[l(l+1) - m^2\right]\sin^2\alpha.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

3.3. Рух частинок у сферично-симетричних потенціалах

1. Знайти рівні енергії та хвильові функції для сферично-симетричного тривимірного гармонічного осцилятора з потенціальною енергією $V(r) = m\omega^2 r^2/2$.

Розв'язання: хвильову функцію для сферично-симетричного осцилятора, як і для довільної центрально-симетричної задачі, необхідно шукати у такому вигляді:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = f(r) P_{lm}(\cos\theta)\exp(im\varphi),$$

де $P_{lm}(x)$ – поліном Лежандра, $l = 0,1,...$, $m = 0,\pm1,...,\pm l$. Тоді $f(r)$ має задовольняти рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{df}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} f\right] + \frac{\mu\omega^2 r^2}{2} f = Ef.$$

Якщо ввести нову функцію $u = rf$ і перейти до $\xi = r\sqrt{\mu\omega/\hbar}$ і $\lambda = E/\hbar\omega$, то рівняння набуває вигляду

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left(2\lambda - \frac{l(l+1)}{r^2} - \xi^2\right) u = 0.$$

Очевидно, що при $\xi \to \infty$ $u_\infty = \exp\left(-\xi^2/2\right)$, а при $\xi \to 0$, якщо підставити $u_0 = \xi^\alpha$, то для α одержимо рівняння $\alpha(\alpha-1) = l(l+1)$.

Таким чином, $\alpha_1 = l+1$, $\alpha_2 = -l$. Скінченну при $\xi \to 0$ функцію дає тільки α_1, тобто $u_0 = \xi^{l+1}$. На основі цих результатів функцію $u(\xi)$ шукаємо у вигляді $u(\xi) = \exp\left(-\xi^2/2\right)\xi^{l+1} v(\xi)$. Рівняння для функції $v(\xi)$ має вигляд

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для продажу)

$$\frac{d^2v}{d\xi^2}+2\frac{dv}{d\xi}\left[\frac{(l+1)}{\xi}-\xi\right]+2\left(\lambda-l-\frac{3}{2}\right)v=0.$$

Розв'язок цього рівняння будемо шукати у вигляді степеневого ряду $v(\xi)=\sum_{k=k_0}^{\infty}a_k\xi^k$. Прирівнюючи до нуля коефіцієнти при кожному степені ξ, одержуємо рекурентне співвідношення

$$a_{\substack{k+2\\(k\geq k_0)}}=a_k\frac{2(k+l+3/2-\lambda)}{(k+2)(k+2l+3)}\approx\frac{2a_k}{k}\quad(k\to\infty)$$

і визначаємо найменший показник степеня k_0: із $k_0(k_0+1)-2(l+1)k_0=0$ випливає, що скінченні в нулі залишаються тільки розв'язки з $k_0=0$. Із рекурентного співвідношення випливає, що при $\xi\to\infty$ степеневий ряд перетворюється на $\exp(\xi^2)$ і $u\to\exp(\xi^2/2)$. Для уникнення цього ряд необхідно обірвати, що можливо тільки за умови $\lambda=p+l+3/2$. Якщо врахувати те, що ряд може починатися тільки з $k_0=0$, то $p=2n_r$, де $n_r=0,1,...$, і тоді

$$\lambda=2n_r+l+3/2\ \text{ і }\ E_{n_r l}=\hbar\omega(2n_r+l+3/2).$$

Цьому рівню енергії відповідає хвильова функція

$$\psi_{n_r lm}(r,\theta,\varphi)=C_{n_r lm}\exp(-\xi^2/2)\xi^l v_{n_r}(\xi)P_{lm}(\cos\theta)\exp(im\varphi).$$

Очевидно, що рівень вироджений: за заданого парного $N=2n_r+l$ маємо $l=0,2,...,N$, при N непарному маємо $l=1,3,...,N$. Окрім того, за заданих n_r і l існує ще $(2l+1)$-кратне виродження за числом m, тобто кратність виродження дорівнює $g(N)=\sum(2l+1)=(N+1)(N+2)/2$.

2. Розв'язати рівняння Шредінгера для частинки, що перебуває у сферично-симетричній, нескінченно глибокій потенціальній ямі $V(r)=0$ при $r<a$ і $V(r)=\infty$ при $r>a$.

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія для друку)

Розв'язання: для частинки в центральному полі маємо

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\exp(im\varphi)P_{lm}(\cos\theta)f(r).$$

Її радіальна частина $f(r)$ задовольняє рівняння

$$\frac{d^2f}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{df}{dr}+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)f=0$$

при $r<R$ та $f=0$ при $r>R$. Таким чином, граничні умови для f такі: $f(R)=0$.

Введемо позначення $k^2=2\mu E/\hbar^2$ і $f(r)=\chi(r)/\sqrt{r}$. Тоді для $\chi(r)$ виникає рівняння Бесселя

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d\chi}{dr}+\left[k^2-\frac{(l+1/2)^2}{r^2}\right]\chi=0.$$

Оскільки при $r\to 0$ одержуємо $\chi=J_{\pm(l+1/2)}(kr)\to r^{\pm(l+1/2)}$, то задовольнити вимогу скінченності може лише функція $J_{l+1/2}(kr)\to r\,a\sin kr/\sqrt{r}$ (якщо $l=0$). Рівні енергії, що відповідають цим функціям, можна одержати з умови неперервності функції при $r=R$, тобто з умови $J_{l+1/2}(kR)=0$. Позначаючи корені цієї функції Бесселя через $b_n^{(l)}$, маємо рівні енергії: $E_n^{(l)}=\hbar^2\left(b_n^{(l)}\right)^2/2\mu R^2$. Очевидно, що при $l=0$ маємо $b_n^{(0)}=n\pi$ і $E_n^{(0)}=\pi^2\hbar^2n^2/2\mu R^2$.

3. Знайти рівні енергії зв'язаних станів у центральному потенціалі $V(r)=-A/r-B/r^2$ і кратність їхнього виродження.

Розв'язання: оскільки потенціальна енергія не залежить від кутів, то це відповідає полю центральної сили і загальному ви-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

гляду хвильової функції $\psi(r,\theta,\varphi)=u(r)P_{lm}(\cos\theta)\exp(im\varphi)$, радіальна частина якої $U(r)$ задовольняє рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2u}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{du}{dr}-\frac{l(l+1)u}{r^2}\right)-\left(\frac{A}{r}-\frac{B}{r^2}\right)u=Eu\,.$$

Введемо безрозмірні координату $\rho=\mu e^2 r/\hbar^2$ та енергію $\varepsilon=2E\hbar^2/\mu e^4=-\gamma^2$. Дослідимо лише дискретний спектр енергії ($E<0$). Об'єднуючи в рівнянні члени вигляду $1/r^2$ і позначаючи $l(l+1)+2\mu B/\hbar^2$ через $s(s+1)$, можемо переписати його у вигляді

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{du}{d\rho}-\frac{s(s+1)u}{\rho^2}+\left(\frac{2A}{\rho e^2}-\gamma^2\right)u=0\,.$$

Введемо функцію $\chi=\rho u$, для якої одержуємо рівняння

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2}+\left[\frac{2A}{\rho e^2}-\gamma^2-\frac{s(s+1)}{\rho^2}\right]\chi=0\,.$$

Звичайним методом знаходимо $\chi_\infty=\exp(-\gamma\rho)$ та $\chi_0=\rho^{s+1}$ (другий розв'язок $\chi_0\sim\rho^{-s}$ при $s>0$ унаслідок розбіжності не влаштовує). Підстановка $\chi(\rho)=\exp(-\gamma\rho)\rho^{s+1}f(\rho)$ приводить до такого рівняння для функції $f(\rho)$:

$$\rho\frac{d^2f}{d\rho^2}+\left[2(s+1)-2\gamma\rho\right]\frac{df}{d\rho}-2\left[\gamma(s+1)-\frac{A}{e^2}\right]f=0\,.$$

Розв'язок цього рівняння шукаємо у вигляді степеневого ряду $f(\rho)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k\rho^k$. Прирівнявши до нуля коефіцієнти при ρ^k, одержуємо

Видавництво поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

$$a_{k+1} = a_k \frac{2[\gamma(k+s+1) - A/e^2]}{(k+1)(k+2s+2)}, (k = 0,1,2,\ldots).$$

Щоб функція f при $\rho \to \infty$ не перетворювалась на розбіжну функцію $\exp(2\gamma\rho)$ (що видно з граничного відношення $a_{k+1}/a_k = 2\gamma/k$ при $k >> 1$), необхідно обірвати ряд, тобто треба, щоб виконувалась рівність $\gamma = \sqrt{-2\hbar^2 E/\mu e^4} = A/e^2(k+s+1)$. Таким чином, рівні енергії частинки відшукуються за формулою

$$E_{ks} = -\mu A^2 / 2\hbar^2 (k+s+1)^2,$$

де $s = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + 2\mu B/\hbar^2} \approx l - \mu B/\hbar^2 (l+1/2)$, якщо $2\mu B/\hbar^2 << l+1/2$, $k = 0,1,\ldots$. Якщо ввести головне квантове число $n = k + l + 1$, то енергія

$$E_{nl} = -\mu A^2 \Big/ 2\hbar^2 \left[n + \mu B/\hbar^2 (l+1/2) \right]^2$$

залежатиме від квантових чисел n і l, а власні хвильові функції $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = e^{-\gamma\rho}\rho^s \sum_{p=0}^{k} a_p \rho^p P_{lm}(\cos\theta)\exp(im\varphi)$, які відповідають цим рівням, залежатимуть від квантових чисел n, l та m. Таким чином, енергетичний рівень E_{nl} вироджений $(2l+1)$ разів, оскільки $m = 0, \pm 1, \ldots, \pm l$.

4. Знайти рівні енергії та хвильові функції для центрального потенціалу $V(r) = Ar^2 + B/r^2$.

Розв'язання: на основі $\psi(r,\theta,\varphi) = u(r) P_{lm}(\cos\theta)\exp(im\varphi)$, де $l = 0,1,\ldots$, $m = 0, \pm 1, \ldots, \pm l$, для функції $f = ru$ одержуємо задачу, розв'язок якої дає

$$E_{nl} = \hbar\sqrt{B/2\mu}\left[4n + 2 + \sqrt{(2l+1)^2 + 8\mu A/\hbar^2} \right],$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія для друку)

$$f_{nl}(\xi)=\left[\xi^{\alpha}\exp\left(-\xi^2/2\right)\Big/\sqrt{\xi}\right]\sum_{k=1}^{n}a_k\xi^k\ ,$$

де $\xi=r^2\sqrt{2\mu B}\big/\hbar$, $\alpha=1/4+\sqrt{(2l+1)^2+8\mu A/\hbar^2}\Big/4$, $n=0,1,\ldots$. Тут $a_{k+1}=(k-n)a_k\big/(k+1)(k+2\alpha+1/2)$ $(k=0,1,\ldots)$ – рекурентне співвідношення.

5. Розв'язати рівняння Шредінгера для частинки з нульовим моментом кількості руху $(l=0)$ у потенціалі $V(r)=-V_0\exp(-r/a)$.

Розв'язання: при $l=0$ хвильова функція частинки в полі центральної сили зводиться до її радіальної частини $\psi=R(r)$, яка задовольняє рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(Rr)-V_0\exp(-r/a)R=ER\,.$$

Обмежимось значеннями $E<0$. Вводимо нову функцію $\chi=Rr$ і переходимо до змінної $y=\exp(-r/2a)$. Тоді функція χ буде задовольняти рівняння

$$\frac{d^2\chi}{dy^2}+\frac{1}{y}\frac{d\chi}{dy}+\left(C^2+\frac{q^2}{y^2}\right)\chi=0\,,$$

де $C^2=8\mu V_0a^2\big/\hbar^2$, $q^2=-8\mu Ea^2\big/\hbar^2>0$. Це є рівнянням Бесселя, загальний розв'язок якого записується у вигляді

$$\chi(r)=C_1J_q(Cy)+C_2J_{-q}(Cy)\,.$$

При $y\to 0$, тобто при $r\to\infty$, функція χ має залишатись скінченною, але при цьому $J_{-q}\sim y^{-q}$ перетворюється на нескінченність, тому $C_2=0$. При $y\to 1$ $(r\to 0)$ функція χ прямує до нуля, тому $J_q(C)=0$, а параметр C має відповідати кореням цього трансцендентного рівняння. Перший корінь приблизно дорівнює 2,4, звідки $a^2V_0>0{,}72\hbar^2\big/\mu$. Це умова того, щоб у по-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

тенціальній ямі глибиною порядку V_0 і шириною порядку a існував хоча б один рівень енергії. При $r > a$, коли $y \to 0$, можна одержати більш простий вигляд хвильової функції:

$$J_q(Cy) = Ay^q = A\exp(-rq/2a) = A\exp\left(-r\sqrt{-2\mu E/\hbar}\right).$$

6. Розв'язати рівняння Шредінгера для частинки з нульовим моментом кількості руху $(l = 0)$ у потенціалі $U(r) = -\alpha\delta(r-a)$.

Розв'язання: радіальне рівняння Шредінгера для частинки з $l = 0$ у цьому потенціалі можна записати у вигляді

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2\mu\alpha\delta(r-a)}{\hbar^2}\right]\chi_{n_r 0} = \kappa^2\chi_{n_r 0},$$

де $\kappa = \sqrt{-2\mu E_{n_r 0}/\hbar^2}$. З урахуванням граничних умов при $r = 0$ і $r = \infty$ його розв'язок має вигляд

$$\chi_{n_r 0}(r) = \begin{cases} A\,\mathrm{sh}\,\kappa r, r < a, \\ B\exp(-\kappa r), r > a. \end{cases}$$

Використовуючи умови зшивки $\chi_{n_r 0}(a+0) = \chi_{n_r 0}(a-0)$ і $\chi'_{n_r 0}(a+0) - \chi'_{n_r 0}(a-0) = -2\mu\alpha\chi_{n_r 0}(a)/\hbar^2$ для цієї хвильової функції в точці $r = a$, приходимо до такої системи однорідних рівнянь щодо невідомих A і B:

$$\begin{cases} A\,\mathrm{sh}\,\kappa a - B\exp(-\kappa a) = 0, \\ -A\kappa\,\mathrm{ch}\,\kappa a + B\exp(-\kappa a)\left(2\mu\alpha/\hbar^2 - \kappa\right) = 0. \end{cases}$$

Звідси одержуємо дисперсійне рівняння для s-рівнів: $\hbar^2\kappa/\mu\alpha = 1 - \exp(-2\kappa a)$. При $\xi \equiv \mu\alpha a/\hbar^2 < 1/2$ це рівняння не має коренів, тому зв'язні стани відсутні. При $\xi > 1/2$ існує тільки один s-рівень з такою енергією:

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

$$\begin{cases} E_0 \approx -\left(\hbar^2/2\mu a^2\right)\left(2\mu\alpha a/\hbar^2 - 1\right)^2, \xi - 1/2 << 1, \\ E_0 \approx -\mu\alpha^2/2\hbar^2, \xi >> 1. \end{cases}$$

7. Розв'язати рівняння Шредінгера для частинки з нульовим моментом кількості руху $(l=0)$ у потенціалі $U(r) = -U_0/\left[\exp(r/a) - 1\right]$ (це т. зв. потенціал Хюльтена).

Розв'язання: радіальне рівняння Шредінгера (див. попередню задачу) заміною $x = \exp(-r/a)$ (при цьому $U(x) = -U_0 x/(1-x)$) і підстановкою $\chi_{n_r 0} = x^{\varepsilon} y$, де $\varepsilon = a\sqrt{-2\mu E_{n_r 0}/\hbar^2}$, зводиться до рівняння для гіпергеометричної функції ${}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma;x)$:

$$(1-x)xy'' + (2\varepsilon+1)(1-x)y' + \lambda^2 y = 0$$

з параметрами $\lambda = \sqrt{2\mu a^2 U_0/\hbar^2}$, $\gamma = 2\varepsilon + 1$, $\alpha = \varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + \lambda^2}$, $\beta = \varepsilon - \sqrt{\varepsilon^2 + \lambda^2}$. Умова перетворення хвильової функції на нуль при $r \to \infty$ $(x \to 0)$ вимагає шукати розв'язок цього рівняння у вигляді $y(x) = C\,{}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma;x)$. При цьому умова $y(x=1) = 0$ з використанням співвідношення

$${}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma;x) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-a)\Gamma(\gamma-\beta)}\,{}_2F_1(\alpha,\beta;\alpha+\beta-\gamma+1;1-x) +$$

$$+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha+\beta-\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}(1-x)^{\gamma-\alpha-\beta}\,{}_2F_1(\gamma-\alpha,\gamma-\beta;\gamma-\alpha-\beta+1;1-x)$$

дає ${}_2F_1(\alpha,\beta;\gamma;x=1) = \Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)/\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta) = 0,$ що визначає спектр s-рівнів. Звідси випливає, що $\gamma - \alpha = -n$, де $n \equiv n_r = 0,1,\ldots$, і кінцевий вираз для енергії s-рівнів набуває вигляду $E_{n_r 0} = -\hbar^2\left[\lambda^2 - (n_r+1)^2\right]^2 \Big/ 8\mu a^2 (n_r+1)^2$, причому $n_r < \lambda - 1$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

При такому співвідношенні умова $\lambda = N$ визначає значення параметрів потенціалу, які відповідають появі N-го рівня з $l = 0$ при поглибленні потенціальної ями. При $a \to \infty$ потенціал $U(r)$ прямує до кулонівського $U_0 a/r$, а енергія переходить в $E_{n_r 0} = -\mu a^2 U_0^2 \big/ 2\hbar^2 (n_r + 1)^2$.

8. Сферично-симетрична потенціальна яма описується потенціалом $V(r) = -V_0 \big/ \{1 + \exp[(r - R)/a]\}$ (т. зв. потенціалом Вуда–Саксона), де $a << R$. Обчислити енергії зв'язаних станів з $l = 0$.

Розв'язання: після введення позначень $u(r) = \chi(r)/r$, $2\mu E a^2/\hbar^2 = -\varepsilon^2$, $2\mu V_0 a^2/\hbar^2 = \gamma^2$ рівняння Шредінгера $\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{du}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V)u = 0$ шляхом заміни незалежної змінної $y = 1 \big/ \{1 + \exp[(r - R)/a]\}$ зводиться до вигляду

$$y(1-y)\,d^2\chi/dy^2 + (1-2y)\,d\chi/dy + \left(\gamma^2 y - \varepsilon^2\right)\Big/ y(1-y) = 0.$$

До цього рівняння необхідно приєднати граничні умови $\chi = 0$ при $y = 0$ $(r = \infty)$, $\chi = 0$ при $y \approx 1 - \exp(-R/a) \approx 1$ $(r = 0)$. Покладаючи далі $\chi(y) = y^{\alpha}(1-y)^{\beta} f(y)$, одержуємо

$$y(1-y)f'' + \left[(2\alpha+1) - 2y(\alpha+\beta+1)\right]f' + \Big[\alpha(\alpha-1)(1-y)/y +$$

$$+ \frac{\beta(\beta-1)y}{(1-y)} - 2\alpha\beta + \frac{\alpha(1-2y)}{y} - \beta\frac{1-2y}{1-y} + \frac{\gamma^2 y - \varepsilon^2}{y(1-y)}\Big] f = 0.$$

Якщо параметри α і β вибрані таким чином, що $\alpha = \varepsilon$, $\beta^2 = \varepsilon^2 - \gamma^2$, то множник при f у рівнянні не залежатиме від y, і воно перейде в гіпергеометричне рівняння

$$y(1-y)f'' + \left[(2\alpha+1) - 2y(\alpha+\beta+1)\right]f' - (\alpha+\beta)(\alpha+\beta+1)f = 0.$$

Відповідний (ненормований) розв'язок має вигляд

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія на для друку)

$$\chi(y) = y^{\alpha}(1-y)^{\beta}\,{}_2F_1\left(\alpha+\beta,\quad \alpha+\beta+1;\quad 2\alpha+1;\quad y\right).$$

У випадку великих значень r $\left(y \to 0\right)$ ця рівність дає $\chi \approx y^{\alpha}$, $y \sim \exp\left[-(r-R)/a\right]$, $\chi \sim \exp(\varepsilon R/a)\exp\left[-\sqrt{2\mu|E|/\hbar^2}\,r\right]$. Це означає, що цей розв'язок має правильну асимптотичну поведінку. Другий незалежний розв'язок можна одержати, замінюючи α на $-\alpha$, але він не задовольняє граничну умову $\chi = 0$ при $y = 0$.

Другу граничну умову при $y \to 1$ задовольнити не так просто. Скористаємось співвідношенням

$$\begin{aligned}{}_2F_1\left(\alpha+\beta,\alpha+\beta+1;2\alpha+1;y\right) &= \frac{\Gamma(2\alpha+1)\Gamma(-2\beta)}{\Gamma(\alpha-\beta+1)\Gamma(\alpha-\beta)}\cdot\\ \cdot{}_2F_1\left(\alpha+\beta,\alpha+\beta+1;2\beta+1;1-y\right)&+\\ +\frac{\Gamma(2\alpha+1)\Gamma(2\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta+1)\Gamma(\alpha+\beta)}(1-y)^{-2\beta}\,{}_2F_1\left(\alpha-\beta,\alpha-\beta+1;-2\beta+1;1-y\right),&\end{aligned}$$

із якого випливає

$$\chi \approx \frac{\Gamma(2\alpha+1)\Gamma(-2\beta)}{\Gamma(\alpha-\beta+1)\Gamma(\alpha-\beta)}(1-y)^{\beta} + \frac{\Gamma(2\alpha+1)\Gamma(2\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta+1)\Gamma(\alpha+\beta)}(1-y)^{-\beta}.$$

Щоб проаналізувати цей вираз, насамперед зазначимо, що $\gamma > \varepsilon$, і тому величина β відповідно до рівності $\beta^2 = \varepsilon^2 - \gamma^2$ є суто уявною $\beta = i\lambda$, $\lambda = \sqrt{\gamma^2 - \varepsilon^2}$. Таким чином, маємо

$$\begin{aligned}\chi \approx \frac{\Gamma(2\varepsilon+1)\Gamma(-2i\lambda)}{\Gamma(\varepsilon+1-i\lambda)\Gamma(\varepsilon-i\lambda)}&\left[(1-y)^{i\lambda} + \right.\\ +\frac{\Gamma(2i\lambda)\Gamma(\varepsilon+1-i\lambda)\Gamma(\varepsilon-i\lambda)}{\Gamma(-2i\lambda)\Gamma(\varepsilon+1+i\lambda)\Gamma(\varepsilon+i\lambda)}&\left.(1-y)^{-i\lambda}\right].\end{aligned}$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Електронне для друку)

Поблизу точки $r=0$ експонента у правій частині рівності $y=1\Big/\left\{1+\exp\left[\left(r-R\right)/a\right]\right\}$ дуже мала, тому можна наближено покласти $1-y\approx\exp\left(-R/a\right)$. Нехай далі за означенням $\varphi=\arg\Gamma\left(\varepsilon+i\lambda\right)$, $\psi=\arg\Gamma\left(2i\lambda\right)$. Якщо тепер опустити множник, що стоїть перед квадратними дужками у виразі для χ, що цілком можна зробити, тому що ця функція ненормована, а потім підставити туди замість $1-y$ вираз $\exp\left(-R/a\right)$, то гранична умова дасть

$$\exp\left(-i\lambda R/a\right)+\exp\left\{2i\left[\psi-2\varphi-\operatorname{arctg}\left(\lambda/\varepsilon\right)\right]\right\}\exp\left(i\lambda R/a\right)=0.$$

Звідси для відшукання власних значень приходимо до рівняння $\exp\left\{i\left[\psi-2\varphi-\operatorname{arctg}\left(\lambda/\varepsilon\right)\right]\right\}\cos\left\{i\left[\lambda R/a+\psi-2\varphi-\operatorname{arctg}\left(\lambda/\varepsilon\right)\right]\right\}=0,$ з якого одержуємо $\lambda R/a+\psi-2\varphi-\operatorname{arctg}\left(\lambda/\varepsilon\right)=\left(2n-1\right)\pi/2$, де $n=0,\pm1,\ldots$. Це рівняння встановлює зв'язок між ε і λ, а відповідно і між E і V_0 за даних значень параметрів R і a.

Остання формула не дуже зручна для практичного застосування. За допомогою розкладу

$$\Gamma\left(x+iy\right)=\xi\exp\left(i\eta\right),$$

$$\eta=y\left\{-C+\sum\nolimits_{n=1}^{\infty}\left[\frac{1}{n}-\frac{1}{y}\operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x+n-1}\right)\right]\right\},$$

де $C=0,5772...$ – стала Ейлера, можна одержати для аргументів φ і ψ Г-функцій зручні для практичних цілей явні вирази:

$$\psi=-\frac{\pi}{2}+2\lambda\left\{-C+\sum\nolimits_{n=1}^{\infty}\left[\frac{1}{n}-\frac{1}{2\lambda}\operatorname{arctg}\left(\frac{2\lambda}{n}\right)\right]\right\},$$

$$\varphi=-\operatorname{arctg}\left(\frac{\lambda}{\varepsilon}\right)+\lambda\left\{-C+\sum\nolimits_{n=1}^{\infty}\left[\frac{1}{n}-\frac{1}{\lambda}\operatorname{arctg}\left(\frac{\lambda}{n+\varepsilon}\right)\right]\right\}.$$

Підставляючи ці вирази в рівняння зв'язку між ε і λ, одержуємо

Видавничо-поліграфічний центр
(версія не для друку)

$$\frac{\lambda R}{a}-\sum_{n=1}^{\infty}\left[\operatorname{arctg}\left(\frac{2\lambda}{n}\right)-2\operatorname{arctg}\left(\frac{\lambda}{n+\varepsilon}\right)\right]+\operatorname{arctg}\left(\frac{\lambda}{\varepsilon}\right)=n\pi\,.$$

Для подальшого аналізу зручно ввести нові параметри:

$$k=\frac{\lambda}{a}=\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(V_0-|E|\right)\right]^{1/2},\ \kappa=\frac{\varepsilon}{a}=\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}|E|\right)^{1/2},\ k_0=\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0\right)^{1/2}.$$

Вони не залежать від товщини поверхневого шару a, і тому зберігають сенс у граничному випадку простої потенціальної ями, коли $a\to 0$. Використовуючи введені параметри, останнє рівняння можна переписати у вигляді

$$\frac{kR}{\kappa R}=-\operatorname{tg}\left\{kR-\sum_{n=1}^{\infty}\left[\operatorname{arctg}\left(\frac{2ka}{n}\right)-2\operatorname{arctg}\left(\frac{ka}{n+\kappa a}\right)\right]\right\}.$$

Виконуючи в цьому рівнянні розклад у ряд за степенями малого параметра $\sigma=a/R$, знаходимо

$$-x/y=\operatorname{tg}\left\{x-2\sigma^2x\left[\zeta(2)y-\sigma\zeta(3)\left(x^2+y^2\right)+\sigma^2\zeta(4)\left(y^3-x^2y\right)-\right.\right.$$

$$-\sigma^3\zeta(5)\left(y^4-2x^2y^2-3x^4\right)+\sigma^4\zeta(6)\left(y^5-10x^3y^2/3+x^4y\right)-$$

$$\left.\left.-\sigma^5\zeta(7)\left(y^6-5x^2y^4+3x^4y^2+9x^6\right)\ldots\right]\right\},$$

де з метою скорочення ми поклали $x=kR$ і $y=\kappa R$.

Зауважимо, що при $a\to 0$ повертаємось до рівняння для рівнів енергії в простій потенціальній ямі $kR/\kappa R=-\operatorname{tg}kR$.

9. Знайти рівні з довільним моментом l у потенціалі $U(r)=-\alpha\delta(r-a)$.

Розв'язання: радіальне рівняння Шредінгера для довільного l і з довільним потенціалом $U(r)$ можна записати у вигляді

$$u''_{n_r l}+\frac{u'_{n_r l}}{r}-\left[\frac{(l+1/2)^2}{r^2}+\frac{2\mu U(r)}{\hbar^2}+\kappa^2\right]u_{n_r l}=0\,,$$

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

де $\kappa = \sqrt{-2\mu E_{n_r l}/\hbar^2}$. Його розв'язок при врахуванні граничних умов $u(0) = u(\infty) = 0$ для $U(r) = -\alpha\delta(r-a)$ має вигляд $u_{n_r l}(r) = AI_{l+1/2}(\kappa r)$ при $r < a$ і $u_{n_r l}(r) = BK_{l+1/2}(\kappa r)$ при $r > a$, де I_ν, K_ν – функції Бесселя уявного аргументу. Умови зшивки для цієї хвильової функції в точці $r = a$ (див. задачу 6) приводять до системи однорідних рівнянь щодо невідомих A і B:

$$\begin{cases} AI_{l+1/2}(\kappa a) - BK_{l+1/2}(\kappa a) = 0, \\ A\left[I_{l+1/2}(\kappa a) - \kappa I'_{l+1/2}(\kappa a)\right] + B\kappa K'_{l+1/2}(\kappa a) = 0. \end{cases}$$

Скориставшись тотожністю

$$I_\nu(z)K_{\nu+1}(z) + I_{\nu+1}(z)K_\nu(z) = 1/z$$

і такими виразами для похідних від функцій Бесселя:

$$I'_\nu(z) = \nu I_\nu(z)/z + I_{\nu+1}(z),\ K_\nu(z) = \nu K_\nu(z)/z - K_{\nu+1}(z),$$

які випливають із рекурентних співвідношень для цих функцій, прийдемо до дисперсійного рівняння

$$I_{l+1/2}(\kappa a)K_{l+1/2}(\kappa a) = \hbar^2/2\mu\alpha a \equiv \xi^{-1},$$

з якого визначається енергетичний спектр частинки. Ліва частина цього співвідношення при $\kappa \to 0$, коли рівень має як завгодно малу енергію, набуває цілком конкретного значення: $(2l+1)^{-1}$. Це означає (як і при $l = 0$, див. задачу 6), що при $\xi \geq \xi_l^{(0)} = (2l+1)$ існує лише один дискретний рівень (з даним l). Використовуючи формулу

$$I_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2k+\nu}}{k!\Gamma(k+\nu+1)}$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Серія навчальних видань)

для функції Бесселя $I_\nu(z)$, а також формулу

$$K_\nu(z)=\frac{\pi}{2\sin\nu\pi}\left[I_{-\nu}(z)-I_\nu(z)\right]$$

для функції $K_\nu(z)$, дисперсійне рівняння при $z\to 0$ набуває вигляду

$$1/(2l+1)-2\kappa^2a^2/(2l+1)(2l+3)(2l-1)=1/\xi,$$

з якого знаходимо

$$\kappa^2\approx\left[\xi-(2l+1)\right](2l+3)(2l-1)/2(2l+1)a^2.$$

Тепер скористаємось асимптотиками при $z\to\infty$, а саме:

$$I_{l+1/2}(z)\approx\frac{\exp(z)}{\sqrt{2\pi z}}\left[1-l(l+1)/2z+(l-1)l(l+1)(l+2)/8z^2\right],$$

$$K_{l+1/2}(z)\approx\sqrt{\frac{\pi}{2z}}\exp(-z)\left[1+l(l+1)/2z+(l-1)l(l+1)(l+2)/8z^2\right].$$

Тоді з дисперсійного рівняння $\left[1-l(l+1)/2\kappa^2a^2\right]/2\kappa a=1/\xi$, яке еквівалентне рівнянню $4\kappa^4a^4-\kappa^2a^2\xi^2+l(l+1)\xi^2=0$, знаходимо $\kappa^2\approx\left[\xi^2/4-l(l+1)\right]/a^2$.

Таким чином, одержуємо узагальнення результату із задачі 6 на випадок станів з $l\neq 0$:

$$E_{0l}\approx-\hbar^2(2l-1)(2l+3)\left(\xi-\xi_l^{(0)}\right)/4(2l+1)\mu a^2,\ \xi\to\xi_l^{(0)};$$

$$E_{0l}\approx-\mu\alpha^2/2\hbar^2+\hbar^2l(l+1)/2\mu a^2,\ \xi\to\infty.$$

10. Знайти функцію Гріна $G_E(\vec{r},\vec{r}')$ вільної частинки для значень $E<0$, яка спадає при $r\to\infty$. За допомогою функції Гріна записати рівняння Шредінгера у вигляді інтегрального рівняння для станів дискретного спектра в потенціалі $U(r)$, який перетворюється на нуль при $r\to\infty$.

Навчально-методичний інформаційний центр Київський університет "Відповідає для Дунаю"

Розв'язання: функція Гріна задовольняє рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\Delta-\kappa^2\right)G_E\left(\vec{r},\vec{r}'\right)=\delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right),$$

де $\kappa=\sqrt{-2\mu E/\hbar^2}>0$. Із міркувань симетрії представляється очевидним, що вона має вигляд $G_E\left(\vec{r},\vec{r}'\right)=f\left(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|\right)$. Це рівняння при $\vec{r}\neq\vec{r}'$ і його розв'язок мають вигляд

$$\frac{d^2}{dr^2}\left[rf\left(r\right)\right]-\kappa^2\left[rf\left(r\right)\right]=0,\ f\left(r\right)=\frac{C\exp\left(-\kappa r\right)}{r}$$

(член з експоненціальним зростанням в $f\left(r\right)$ не враховується). Співвідношення $\Delta\left(1/r\right)=-4\pi\delta\left(r\right)$ дозволяє визначити константу C і кінцевий вигляд $G_E\left(\vec{r},\vec{r}'\right)$:

$$G_E\left(\vec{r},\vec{r}'\right)=\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\exp\left[-\kappa\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|\right]}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}.$$

За допомогою функції Гріна рівняння Шредінгера для станів дискретного спектра можна записати у вигляді інтегрального рівняння

$$\Psi_E\left(\vec{r}\right)=-\int G_E\left(\vec{r},\vec{r}'\right)\Psi_E\left(\vec{r}'\right)dV'=$$

$$=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\exp\left[-\kappa\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|\right]}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}U\left(\vec{r}'\right)\Psi_E\left(\vec{r}'\right)dV'.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

3.4. Системи з аксіальною симетрією

1. Знайти рівні енергії та хвильові функції для потенціалу $V\left(\rho\right)=-Ze^2/\rho$, де $\rho=\sqrt{x^2+y^2}$ (двовимірна задача Кеплера).

Розв'язання: у двовимірній задачі оператор Лапласа має вигляд $\Delta=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$, і оскільки потенціал не залежить

від кута φ, то змінні відокремлюються. Хвильову функцію можна шукати у вигляді $\psi(\rho,\varphi)=R(\rho)\exp(im\varphi)$ ($\hat{H}$ і $\hat{L}_z$ комутують у такому полі). Для $R(\rho)$ одержуємо рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2 R}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial R}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}R\right)-\frac{Ze^2}{\rho}R=ER\,.$$

Розглянемо випадок $E<0$ (для $E>0$ одержуємо неперервний спектр). Введемо нову функцію $f=\sqrt{\rho}R$, якій відповідає рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{d\rho^2}-\frac{m^2-1/4}{\rho^2}\right)f-\frac{Ze^2}{\rho}f=Ef\,.$$

Замінюючи ρ на $a_0 t$, де $a_0=\hbar^2/\mu e^2$, і позначаючи $2\mu Ea^2/\hbar^2=-\gamma^2$ і $l=|m|-1/2$, спрощуємо це рівняння:

$$\frac{d^2 f}{dt^2}+\left(\frac{2Z}{t}-\gamma^2-\frac{l(l+1)}{t^2}\right)f=0\,,\ 0\le t\le\infty\,.$$

При $t\to\infty$ одержуємо $f_\infty=\exp(-\gamma t)$, відкидаючи розв'язок $\exp(\gamma t)$. При $E>0$ $\gamma=i\beta$, тобто обидва розв'язки $\exp(\pm i\beta t)$ скінченні і спектр для E є неперервним. При $t\to 0$ для $f_0=t^\alpha$ одержуємо $\alpha(\alpha-1)=l(l+1)$, тобто $\alpha_1=l+1$, $\alpha_2=-l$. Це означає, що несингулярний у нулі загальний розв'язок необхідно шукати у вигляді $f(t)=\exp(-\gamma t)t^{l+1}v(t)$. Для функції $v(t)$ у результаті одержуємо рівняння

$$t\frac{d^2 v}{dt^2}+2\left[|m|+\frac{1}{2}-\gamma t\right]\frac{dv}{dt}+2\left[Z-\left(|m|+\frac{1}{2}\right)\gamma\right]v=0\,.$$

Нарешті, після лінійного перетворення $2\gamma t\to t$ приходимо до рівняння Куммера

$$t\frac{d^2 v}{dt^2}+(\eta-t)\frac{dv}{dt}-\xi v=0\,,$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

де $\xi = |m| + 1/2 - Z/\gamma$, $\eta = 2|m| + 1$. Розв'язок цього рівняння має такий вигляд:

$$v(t) = {}_1F_1\left[|m| + 1/2 - Z/\gamma, 2|m| + 1; 2t\gamma\right].$$

Очевидно, що ця функція перетворюється на поліном, якщо $|m| + 1/2 - Z/\gamma = -n_\rho$, тобто приходимо до спектра енергій

$$E_{n_\rho|m|} = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2\left(n_\rho + |m| + 1/2\right)^2},\ n_\rho = 0,1,\ldots,\ m = 0,\pm 1,\ldots.$$

Звідси видно, що в двовимірному полі $V(\rho) = -Ze^2/\rho$, як і в тривимірному $V(r) = -Ze^2/r$, відбувається випадкове виродження, тому що енергія залежить від комбінації $n_\rho + |m|$ квантових чисел n_ρ і m. Якщо ввести квантове число $N = n_\rho + |m| + 1$ (аналог головного квантового числа n), то енергію можна переписати у вигляді $E_N = -\mu e^4 Z^2 / 2\hbar^2 (N - 1/2)^2$, де $N = 1,2,\ldots$. Цей рівень має кратність виродження $g(N) = 2N - 1$.

Нормована хвильова функція $\psi_{n_\rho m}(\rho,\varphi)$ записується у вигляді

$$\psi_{n_\rho m}(\rho,\varphi) = \frac{C_{n_\rho|m|}}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi)\left[\frac{2Z\rho}{a\left(n_\rho + |m| + 1/2\right)}\right]^{|m|} \cdot$$

$$\cdot \exp\left[-\frac{Z\rho}{a\left(n_\rho + |m| + 1/2\right)}\right] {}_1F_1\left[-n_\rho, 2|m| + 1; \frac{2Z\rho}{a\left(n_\rho + |m| + 1/2\right)}\right],$$

де

$$C_{n_\rho|m|} = \frac{1}{(2|m|)!}\left[\frac{\left(n_\rho + 2|m|\right)!}{2n_\rho!\left(n_\rho + |m| + 1/2\right)}\right]^{1/2}\left[\frac{2Z}{a\left(n_\rho + |m| + 1/2\right)}\right].$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

2. Знайти енергетичний спектр зв'язаних станів частинки з довільним значенням проекції моменту в двовимірному потенціальному полі $U(\rho)=0$ при $\rho \le a$ і $U(\rho)=\infty$ при $\rho > a$. Вказати кратність виродження рівнів.

Розв'язання: хвильова функція в аксіально-симетричному полі $U(\rho)$ записується у вигляді

$$\psi_{n_\rho m}(\rho,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}R_{n_\rho|m|}(\rho)\exp(im\varphi).$$

Її радіальна частина $R_{n_\rho|m|}(\rho)$ задовольняє рівняння Шредінгера:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E_{n_\rho|m|}-U(\rho)\right)\right]R_{n_\rho|m|}(\rho)=0.$$

Розв'язок цього рівняння у випадку нескінченно глибокої потенціальної ями при $\rho \le a$, який обмежений у нулі, має вигляд $R_{n_\rho|m|}(\rho)=CJ_{|m|}(\kappa\rho)$, де $\kappa=\sqrt{2\mu E_{n_\rho|m|}/\hbar^2}$. При цьому умова перетворення хвильової функції на нуль на стінці ями визначає спектр

$$E_{n_\rho|m|}=\frac{\hbar^2\alpha^2_{n_\rho+1,m}}{2\mu a^2},$$

де $\alpha_{km}>0$ – k-й корінь функції Бесселя $J_m(\alpha)$ (у порядку зростання α_{km}). Зокрема, враховуючи значення $\alpha_{10}\approx 2{,}40$ і $\alpha_{11}\approx 3{,}83$, знаходимо енергії основного рівня $E_{00}=2{,}88\hbar^2/\mu a^2$ (для нього $m=0$) і $E_{01}=7{,}33\hbar^2/\mu a^2$ – найнижчого рівня з $|m|=1$.

Зауважимо, що рівні, які відповідають $m=0$, невироджені, а для $|m|\ne 0$ – двократно вироджені.

3. Знайти енергетичні рівні дискретного спектра частинки у двовимірній потенціальній ямі вигляду $U(\rho)=-\alpha\delta(\rho-a)$, які відповідають значенню проекції моменту $m=0$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

Розв'язання: рівняння Шредінгера для станів з $m=0$ та енергією $E_{n_\rho 0}$ має вигляд

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E_{n_\rho 0}-U(\rho)\right)\right]\psi_{n_\rho 0}(\rho)=0.$$

Його розв'язок для δ-потенціалу при $E_{n_\rho 0}=-\hbar^2\kappa^2/2\mu<0$, який обмежений у нулі і дорівнює нулю на нескінченності, має вигляд $\psi_{n_\rho 0}(\rho)=C_1 I_0(\kappa\rho)$ при $\rho<a$ ($I_0(x)$ – модифікована функція Бесселя) і $\psi_{n_\rho 0}(\rho)=C_2 K_0(\kappa\rho)$ при $\rho>a$ ($K_0(x)$ – функція Макдональда). Умови зшивання розв'язку $\psi(a+0)=\psi(a-0)$, $\psi'(a+0)-\psi'(a-0)=\left(2\mu\alpha/\hbar^2\right)\psi(a)$ у точці $\rho=a$ приводять до співвідношення

$$x\left[K_0'(x)I_0(x)-K_0(x)I_0'(x)\right]=-\frac{2\mu\alpha a}{\hbar^2}K_0(x)I_0(x),$$

де $x=\kappa a$, за допомогою якого визначається спектр. Користуємось значенням вронскіана $W\left(I_0(x),K_0(x)\right)=-1/x$. Тоді рівність має вигляд $K_0(x)I_0(x)=1/\xi$, $\xi\equiv 2\mu\alpha a/\hbar^2$.

Розглянемо спочатку випадок, коли рівень має малу енергію $(\kappa a<<1)$. Користуючись при $x\to 0$ асимптотиками $I_0(x)\approx 1+x^2/4$ і $K_0(x)\approx\ln(2/\gamma x)$, де $\gamma=1{,}781...$ – стала Ейлера, маємо

$$\ln\left(\frac{2}{\kappa\gamma a}\right)\approx\frac{1}{\xi},\ \text{або}\ E_{00}\approx-\frac{2\hbar^2}{\mu\gamma^2a^2}\exp(-2/\xi),$$

причому $\xi<<1$, тобто рівень з малою енергією зв'язку може бути тільки у випадку мілкої ями. Це означає, що в δ-ямі є тільки один рівень (з $m=0$), як і в одновимірному випадку. Зі збільшенням α рівень знижується і при $\xi>>1$ його енергія

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (вологе не для друку)

$E_{00} \approx -\mu\alpha^2/2\hbar^2$, що можна одержати, використавши асимптотики $I_0(z) \approx \exp(z)/\sqrt{2\pi z}$ і $K_0(z) \approx \sqrt{\pi/2z}\exp(-z)$ при $z \to \infty$.

4. Знайти енергетичні рівні дискретного спектра частинки в двовимірній потенціальній ямі вигляду $U(\rho) = -U_0$ при $\rho < a$ і $U(\rho) = 0$ при $\rho > a$ (проекція моменту $m = 0$).

Розв'язання: розв'язок рівняння Шредінгера (для станів з $m = 0$) для циліндричної потенціальної ями має вигляд

$$\Psi_{n_\rho 0}(\rho) = \begin{cases} C_1 J_0(k\rho), \rho < a, k = \sqrt{2\mu\left(U_0 - \left|E_{n_\rho 0}\right|\right)/\hbar^2}, \\ C_2 K_0(\kappa\rho), \rho > a, \kappa = \sqrt{-2\mu E_{n_\rho 0}/\hbar^2}. \end{cases}$$

Із неперервності $\Psi_{n_\rho 0}$ і $\Psi'_{n_\rho 0}$ при $\rho = a$ випливає дисперсійне рівнянням для спектра рівнів з $m = 0$:

$$\kappa J_0(ka) K_0'(\kappa a) = k J_0'(ka) K_0(\kappa a).$$

У випадку мілкої ями, $\xi = \mu a^2 U_0/\hbar^2 << 1$, аргументи циліндричних функцій малі. Оскільки $J_0(x) \approx 1$, $J_0'(x) \approx -x/2$, $K_0(x) \approx \ln(2/\gamma x)$ ($\gamma = 1{,}781...$), $K_0'(x) \approx -1/x$ при $x << 1$, дисперсійне рівняння набуває вигляду

$$\frac{\mu}{\hbar^2}\left(U_0 - \left|E_{n_\rho 0}\right|\right)\ln\sqrt{2\hbar^2/\mu\gamma^2 a^2\left|E_{n_\rho 0}\right|} \approx 1.$$

Це рівняння має лише один корінь

$$E_{00} \approx -\frac{2\hbar^2}{\mu\gamma^2 a^2}\exp\left(-2\hbar^2/\mu a^2 U_0\right) = -\frac{2U_0}{\xi\gamma^2}\exp(-2/\xi),$$

який легко знайти, якщо знехтувати $\left|E_{n_\rho 0}\right|$ порівняно з U_0, оскільки, як випливає із дисперсійного рівняння, справедлива нерівність $\left|E_{n_\rho 0}\right| << U_0$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (зверстано для друку)

Таким чином, у мілкій двовимірній ямі, як і в симетричній одновимірній ямі, завжди існує як мінімум один зв'язаний стан. Але тепер глибина залягання рівня мала порівняно з глибиною ями вже експоненціально.

5. У двовимірному випадку знайти функцію Гріна вільної частинки при $E<0$, яка спадає при $\rho\to\infty$.

Розв'язання: функція Гріна задовольняє рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\Delta-\kappa^2\right)G_E\left(\vec{\rho},\vec{\rho}'\right)=\delta\left(\vec{\rho}-\vec{\rho}'\right),$$

де $\kappa=\sqrt{-2\mu E/\hbar^2}>0$. Із міркувань симетрії представляється очевидним, що вона має вигляд $G_E\left(\vec{\rho},\vec{\rho}'\right)=f\left(\left|\vec{\rho}-\vec{\rho}'\right|\right)$. Це рівняння при $\vec{\rho}\neq\vec{\rho}'$ і його розв'язок мають вигляд

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}-\kappa^2\right]f\left(\rho\right)=0,\ f\left(r\right)=CK_0\left(\kappa\rho\right),$$

де $K_0\left(z\right)$ – функція Макдональда (другий незалежний розв'язок, $\propto I_0\left(\kappa\rho\right)$, експоненціально зростає при $\rho\to\infty$.

Для визначення константи C проінтегруємо обидві частини рівняння Шредінгера по колу малого радіуса ε із центром у точці $\vec{\rho}=\vec{\rho}'$. При цьому в правій частині одержимо одиницю. Інтегрування другого доданка в лівій частині (із κ^2) дає нуль при $\varepsilon\to 0$. Інтеграл же від першого доданка перетворюємо за допомогою теореми Остроградського–Гаусса: $\int\Delta G_E dV=\oint\nabla G_E\cdot d\vec{S}$. У двовимірному випадку $dV\equiv dS$, $d\vec{S}\equiv d\vec{l}=\vec{n}dl$. Звернемо увагу на те, що орт $\vec{n}$ перпендикулярний контуру інтегрування. У даній задачі $d\vec{l}=\vec{n}dl=\left(\vec{\tilde{\rho}}/\tilde{\rho}\right)\tilde{\rho}d\varphi=\vec{\tilde{\rho}}d\varphi$, де $\tilde{\rho}=\left|\vec{\rho}-\vec{\rho}'\right|=\varepsilon$. Оскільки при

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$x \to 0$ маємо $K_0(x) \approx \ln 2/\gamma x$, то $\nabla K_0(\kappa\rho) \approx -(\ln 2/\kappa\gamma)\left(\vec{\rho}/\rho^2\right)$ при $\rho \to 0$ і в результаті інтегрування одержуємо $\pi\hbar^2 C/\mu = 1$.

Таким чином, шуканою функцією Гріна є

$$G_E(\vec{\rho},\vec{\rho}') = \frac{\mu}{\pi\hbar^2} K_0\left(\kappa|\vec{\rho}-\vec{\rho}'|\right).$$

3.5. Імовірності, середні величини, струми в системах із центральною симетрією

1. Електрон перебуває в атомі водню в основному стані $\psi_{100}(r) = \left(\pi a_0^3\right)^{-1/2} \exp(-r/a_0)$, де a_0 – радіус Бора. Визначити $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$ і найбільш імовірне значення r_0.

Відповідь: $\langle r \rangle = 3a_0/2$, $\langle r^2 \rangle = 3a_0^2$, $r_0 = a_0$.

2. Знайти ймовірність перебування $1s$-електрона атома водню в області, що перевищує найбільш імовірну відстань.

Відповідь: $P(r \ge a_0) = 5\exp(-2)$.

3. Для $2s$-електрона в атомі водню, який описується хвильовою функцією $\psi_{200}(r) = \left(8\pi a_0^3\right)^{-1/2}(1 - r/2a_0)\exp(-r/2a_0)$, знайти $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle^{1/2}$, $\left(\langle \Delta r^2 \rangle\right)^{1/2}$ і найбільш імовірне значення r_0.

Відповідь:

$\langle r \rangle = 6a_0$, $\langle r^2 \rangle^{1/2} = a_0\sqrt{42}$, $\left(\langle \Delta r^2 \rangle\right)^{1/2} = a_0\sqrt{6}$, $r_0 = \left(3 + \sqrt{5}\right)a_0$.

4. Знайти середнє значення $\langle V(r) \rangle$ у $2s$-стані атома водню для кулонівської потенціальної енергії $V(r) = -e^2/r$.

Відповідь: $\langle V(r) \rangle = -e^2/4a_0$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

5. Знайти середнє значення $\langle T(r)\rangle$ у $2s$-стані атома водню для кінетичної енергії $T(r) = -\left(\hbar^2/2\mu\right) r^{-2}\,\partial\left(r^2\partial/\partial r\right)\big/\partial r$.

Відповідь: $\langle T(r)\rangle = \hbar^2/8\mu a_0^2$.

6. Вивести так зване рекурентне співвідношення Крамерса $(s+1)\langle r^s\rangle/n^2 - a_0(2s+1)\langle r^{s-1}\rangle + sa_0^2\langle r^{s-2}\rangle\left[(2l+1)^2 - s^2\right]/4 = 0$, де $s > -2l-1$, для середніх значень $\langle r^s\rangle$ (s – ціле) радіуса електрона, який перебуває в атомі водню в стані з квантовими числами n, l.

Розв'язання: користуючись виразом $E_n = -\hbar^2/2\mu n^2 a_0^2$, де $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$, для значення енергії зв'язаного стану, а також позначенням $u(r) = rR_{n,l}(r)$, рівняння для радіального руху записується у вигляді

$$u'' + 2u/a_0 r - l(l+1)u/r^2 - u/n^2 a_0^2 = 0.$$

Помножимо це рівняння на $r^s u(r)$ й інтегруємо по r. Звідси

$$\int_0^\infty r^s uu''dr + 2\langle r^{s-1}\rangle/a_0 - l(l+1)\langle r^{s-2}\rangle - \langle r^s\rangle/a_0^2 n^2 = 0,$$

де введені позначення для середніх значень $\langle r^s\rangle = \int_0^\infty dr r^s u^2(r)$. Оскільки $u(r)$ при $r\to\infty$ має експоненціальне згасання, записані вище інтеграли збігаються на верхній межі. Тому важливо простежити за поведінкою підінтегральних функцій при $r\to 0$. З урахуванням того, що $u(r) \sim r^{l+1}$ при $r\to 0$, найбільш сингулярну поведінку має внесок $\langle r^s\rangle = \int_0^\infty dr r^s u^2(r)$, в якому підінтегральна функція поводить себе як $r^{s-2}u^2(r) \sim r^{s+2l}$ при $r\to 0$. Для збіжності інтеграла на нижній межі необхідно накласти умову $s + 2l > -1$, тобто $s > -2l - 1$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія 3.0 для друку)

Інтегруючи частинами, знайдемо допоміжне співвідношення

$$\left\langle r^s \right\rangle = \int_0^\infty dr r^s u^2 = \frac{1}{s+1}\int_0^\infty u^2 dr^{s+1} = -\frac{2}{s+1}\int_0^\infty dr r^{s+1} uu' .$$

Звідси $\int_0^\infty dr r^{s+1} uu' = -(s+1)\left\langle r^s \right\rangle \Big/ 2$. Тепер знайдемо, інтегруючи частинами,

$$I_s = \int_0^\infty dr r^s uu'' = \int_0^\infty du' r^s u = -\int_0^\infty dr r^s \left(u'\right)^2 - s\int_0^\infty dr r^{s-1} uu' .$$

Для другого члена в цьому виразі скористаємось допоміжним співвідношенням, а перший член перепишемо так, щоб інтегрувати його частинами:

$$I_s = -\int_0^\infty \left(u'\right)^2 dr^{s+1} \Big/ (s+1) + s(s-1)\left\langle r^{s-2} \right\rangle \Big/ 2 =$$

$$= 2\int_0^\infty dr r^{s+1} u'u'' \Big/ (s+1) + s(s-1)\left\langle r^{s-2} \right\rangle \Big/ 2 .$$

Підставимо під інтеграл вираз для u'' з рівняння радіального руху

$$I_s = \frac{2}{s+1}\int_0^\infty dr uu' \left[-\frac{2}{a_0} r^s + l(l+1) r^{s-1} + \frac{1}{n^2 a_0^2} r^{s+1} \right] + \frac{s(s-1)}{2}\left\langle r^{s-2} \right\rangle$$

і знову скористаємось допоміжним співвідношенням для інтеграла від uu', тоді

$$I_s = \frac{2s}{(s+1)a_0}\left\langle r^{s-1} \right\rangle + \left[\frac{s(s-1)}{2} - \frac{(s-1)l(l+1)}{(s+1)} \right]\left\langle r^{s-2} \right\rangle - \frac{1}{n^2 a_0^2}\left\langle r^s \right\rangle .$$

З іншого боку, $I_s = \left\langle r^s \right\rangle \Big/ n^2 a_0^2 + l(l+1)\left\langle r^{s-2} \right\rangle - 2\left\langle r^{s-1} \right\rangle \Big/ a_0$.

Після прирівнювання цих виразів та об'єднання подібних членів, нарешті, приходимо до рекурентного співвідношення Крамерса

$$(s+1)\left\langle r^s \right\rangle \Big/ n^2 - a_0 (2s+1)\left\langle r^{s-1} \right\rangle + s a_0^2 \left\langle r^{s-2} \right\rangle \Big[(2l+1)^2 - s^2 \Big] \Big/ 4 = 0 ,$$

причому $s > -2l - 1$.

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

7. Обчислити $\langle 1/r \rangle$ для електрона, який перебуває в атомі водню в стані з квантовими числами n,l. Обчислити також середньоквадратичне відхилення електрона від ядра та знайти його мінімальне значення.

Розв'язання: скористаємось співвідношенням Крамерса, одержаним у попередній задачі. Покладаючи в ньому $s=0$, маємо $1/n^2 - a_0\langle r^{-1}\rangle = 0$, тобто $\langle r^{-1}\rangle = 1/n^2 a_0^2$. Покладаючи далі $s=1$, одержуємо $2\langle r\rangle/n^2 - 3a_0 + l(l+1)\langle r^{-1}\rangle = 0$, звідки за використання значення $\langle r^{-1}\rangle$ маємо $\langle r\rangle = a_0\left[3n^2 - l(l+1)\right]/2$. Нарешті, покладаючи у співвідношенні Крамерса $s=2$ і користуючись попереднім результатом для $\langle r\rangle$, знаходимо

$$\langle r^2\rangle = a_0^2 n^2\left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right]/2.$$

Таким чином, середньоквадратичне відхилення електрона (який перебуває в стані з квантовими числами n,l) від ядра в атомі водню розраховується за такою формулою:

$$\left\langle (\Delta r)^2 \right\rangle^{1/2} = \left(\langle r^2\rangle - \langle r\rangle^2\right)^{1/2} = 2^{-1}\left[n^2\left(n^2+2\right) - l^2\left(l+1\right)^2\right]^{1/2} a_0.$$

За заданого квантового числа n мінімального значення цей вираз набуває для "кругових орбіт", тобто при $l = n-1$ маємо $\left(\langle r^2\rangle - \langle r\rangle^2\right)^{1/2} = na_0\sqrt{2n+1}/2$, $\left(\langle r^2\rangle - \langle r\rangle^2\right)^{1/2}/\langle r\rangle = 1/\sqrt{2n+1}$.

8. Обчислити $\langle 1/r^2 \rangle$ для електрона, який перебуває в атомі водню в стані з квантовими числами n,l. Розрахувати середнє значення кінетичної енергії радіального руху.

Розв'язання: для обчислення $\langle 1/r^2 \rangle$ скористаємось тим, що гамільтоніан для радіального рівняння Шредінгера має вигляд

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}.$$

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
Версія не для друку

Скористаємось тепер співвідношенням Фейнмана–Хеллманна, вибираючи при цьому як параметр λ орбітальне квантове число l.

Отже, маємо $\left\langle \hbar^2 (2l+1)/2\mu r^2 \right\rangle = dE_n/dl$. Нагадаємо, що $n = n_r + l + 1$ – головне квантове число, де n_r – радіальне квантове число. Оскільки $dE_n/dl = \mu e^4/\hbar^2 n^3$, то в результаті одержуємо $\left\langle 1/r^2 \right\rangle = 1/a_0^2 n^3 (l+1/2)$.

Середнє значення відцентрової енергії записується тепер таким чином:

$$\left\langle \hbar^2 l(l+1)/2\mu r^2 \right\rangle = \left(\mu e^4/2\hbar^2 n^3\right)\left[l(l+1)/(l+1/2)\right].$$

Різниця ж між середнім значенням повної кінетичної енергії та енергією відцентрового руху дає середнє значення кінетичної енергії радіального руху

$$\left\langle \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} \right\rangle = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r \right\rangle = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^3}\left[1 - \frac{l(l+1)}{n(l+1/2)}\right],$$

де $\hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r = -i\hbar(\partial/\partial r + 1/r)$ – оператор радіальної складової імпульсу.

9. Обчислити $\left\langle 1/r^3 \right\rangle$ для електрона, який перебуває в атомі водню в стані з квантовими числами n, l.

Розв'язання: для будь-якого оператора $\hat{f}$, який явно не залежить від часу, виконується рівність $\left\langle d\hat{f}/dt \right\rangle = \left\langle \left[\hat{f}, \hat{H}\right] \right\rangle / i\hbar = 0$, де усереднення відбувається за стаціонарними станами. Беручи як оператор $\hat{f}$ оператор $\hat{p}_r$, знайдемо середнє значення $\left\langle 1/r^3 \right\rangle$ за допомогою розрахованого перед цим комутатора

$$\left[\hat{p}_r, \hat{H}\right] = \left[\hat{p}_r, \hbar^2 l(l+1)/2\mu r^2 - e^2/r\right] = \hbar^2 l(l+1)/\mu r^3 - e^2/r^2 .$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (копія не для продажу)

Таким чином, із рівності $\left\langle \hbar^2 l(l+1)/\mu r^3 - e^2/r^2 \right\rangle = 0$ знаходимо $\left\langle 1/r^3 \right\rangle = \left\langle 1/r^2 \right\rangle \left[1/a_0 l(l+1) \right]$, а з використанням виразу для $\left\langle 1/r^2 \right\rangle$ з попереднього прикладу в результаті маємо $\left\langle 1/r^3 \right\rangle = 1/a_0^3 n^3 l(l+1)(l+1/2)$.

10. Обчислити середні значення $\left\langle r^n \right\rangle$ (n – ціле), кінетичної та потенціальної енергії електрона в основному стані атома водню.

Відповідь:

$$\left\langle r^n \right\rangle = (n+2)!(a_0/2)^n/2,\ \langle V \rangle = -e^2/a_0,\ \langle T \rangle = e^2/2a_0.$$

11. Визначити середній електростатичний потенціал поля, створюваний ядром і електроном в основному стані атома водню.

Розв'язання: середній потенціал $\varphi_e(r)$, який створюється "електронною хмаркою" у довільній точці $\vec{r}$, визначається як сферично-симетричний розв'язок рівняння Пуассона

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\varphi_e) = -4\pi\rho_e(r),$$

де густина електронного заряду визначається формулою $\rho_e(r) = -e|\psi_{1s}|^2 = \left(-e/\pi a_0^3\right)\exp(-2r/a_0)$. Після підстановки цього виразу в рівняння Пуассона та після інтегрування за змінною r маємо $\varphi_e(r) = e(1/r + 1/a_0)\exp(-2r/a_0) + B/r + A$. Вибираємо сталі так, щоб $\varphi_e(\infty) = 0$, а $\varphi_e(0)$ було скінченним. Тоді $A = 0$, $B = -e$. Додаючи до виразу $\varphi_e(r)$ потенціал ядра $\varphi_я(r) = e/r$, одержуємо $\varphi(r) = e(1/r + 1/a_0)\exp(-2r/a_0)$.

12. Знайти повний електричний струм I у $2p_{-1}$-стані атома водню в області $0 \le r \le \infty$, $0 \le \theta \le \pi/2$ (для довідки: $|\psi_{21,-1}|^2 = \left(r^2/64\pi a_0^5\right)\sin^2\theta\exp(-r/a_0)$).

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Відповідь: $I = -e\hbar/16\mu a_0^2$.

13. Обчислити для електрона, який перебуває в атомі водню у стані з квантовими числами n, l, середньоквадратичне відхилення відстані від ядра.

Відповідь: $\left(\left\langle r^2\right\rangle - \left\langle r\right\rangle^2\right)^{1/2} = 2^{-1}\left[n^2\left(n^2+2\right) - l^2\left(l+1\right)^2\right]^{1/2} a_0$.

За заданого квантового числа n мінімального значення цей вираз набуває для "кругових орбіт", тобто при $l = n-1$ маємо

$$\left(\left\langle r^2\right\rangle - \left\langle r\right\rangle^2\right)^{1/2} = na_0\sqrt{2n+1}/2\,,\ \left(\left\langle r^2\right\rangle - \left\langle r\right\rangle^2\right)^{1/2} \Big/ \left\langle r\right\rangle = 1/\sqrt{2n+1}\,.$$

14. Знайти розподіл імовірностей різних значень імпульсу електрона в основному стані атома водню.

Розв'язання: хвильова функція основного стану атома водню в координатному представленні, яка нормована на одиницю, має вигляд $\psi\left(\vec{r}\right) = \exp\left(-r/a_0\right)\Big/\sqrt{\pi a_0^3}$. Хвильова функція того ж стану в імпульсному представленні (нормована на одиницю) є $G\left(\vec{p}\right) = \left(2\pi\hbar\right)^{-3/2}\int \psi\left(\vec{r}\right)\exp\left(-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar\right)d\vec{r}$. Цей інтеграл обчислюється за допомогою переходу до сферичних координат з полярною віссю вздовж $\vec{p}$:

$$2\pi\int_0^\infty\int_{-1}^1 \exp\left(-r/a_0 - ipr\cos\theta/\hbar\right)r^2 dr d\cos\theta = \left(2\pi\hbar/ip\right)\cdot$$

$$\cdot\int_0^\infty\left\{\exp\left[-\left(1/a_0 - ip/\hbar\right)r\right] - \exp\left[-\left(1/a_0 + ip/\hbar\right)r\right]\right\}rdr =$$

$$= 8\pi a_0^3\hbar^4\Big/\left(\hbar^2 + a_0^2p^2\right)^2\,.$$

Щільність імовірності в p-просторі має вигляд

$$\left|G\left(\vec{p}\right)\right|^2 = \frac{8a_0^3\hbar^5}{\pi^2\left(\hbar^2 + a_0^2p^2\right)}\,.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія тільки для друку)

Вона, як і має бути через відсутність виділеного напрямку, залежить тільки від абсолютної величини імпульсу. Імовірність перебування імпульсу в інтервалі абсолютних величин від p до $p+dp$ можна одержати множенням $\left|G(p)\right|^2$ на елемент об'єму $4\pi p^2 dp$ у p-просторі:

$$w(p)dp = \frac{32}{\pi}\left(\frac{\hbar}{a_0}\right)^5 \frac{p^2 dp}{\left(p^2 + \hbar^2/a_0^2\right)^4}.$$

Виконання умови нормування $\int_0^\infty w(p)dp = 1$ легко перевірити за допомогою інтеграла $\int_0^\infty \left[x^2 \Big/ \left(1+x^2\right)^4\right] dx = \pi/32$. Функція $w(p)$ має максимум при $p = p_m = \hbar/a_0\sqrt{3}$. При $p << \hbar/a_0$ $\left|G(p)\right|^2 \approx \text{const}$, $w(p) \sim p^2$; при $p >> \hbar/a_0$ $\left|G(p)\right|^2 \sim p^{-8}$, $w(p) \sim p^{-6}$, тобто ймовірність швидко спадає зі зростанням p.

Таким чином, розподіл імпульсів помітно відрізняється від нуля тільки в інтервалі $(\Delta p)_{\text{еф}} \sim \hbar/a_0$. Оскільки істотний інтервал радіусів $(\Delta r)_{\text{еф}} \sim a_0$, приходимо до співвідношення невизначеностей $(\Delta p)_{\text{еф}}(\Delta r)_{\text{еф}} \sim \hbar$.

15. Обчислити кутову частину матричних елементів дипольного моменту для частинки в центрально-симетричному полі.

Розв'язання: хвильова функція для частинки в полі центральних сил має вигляд $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)P_{lm}(\cos\theta)\exp(im\varphi)$. Обчислимо матричний елемент $D_z = ez$:

$$\left\langle nlm\middle|D_z\middle|n'l'm'\right\rangle = \int \psi^*_{nlm} ez \psi_{n'l'm'} d\tau.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Очевидно, цей інтеграл можна представити у вигляді добутку інтегралів за змінними r,θ,φ: $\langle nlm|D_z|n'l'm'\rangle = I_r I_\theta I_\varphi$. Вигляд кутової функції однаковий у довільному сферично-симетричному полі. Тому обчислення I_θ і I_φ може бути виконано без конкретизації потенціальної енергії $V(r)$. Оскільки $z = r\cos\theta$, $d\tau = r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$, то, виносячи до I_φ всі множники, які залежать від φ, одержуємо

$$I_\varphi = \int_0^{2\pi} \exp(-im\varphi)\exp(im'\varphi)d\varphi = 2\pi\delta_{mm'}$$

і відповідно $\langle nlm|D_z|n'l'm'\rangle = 0$ при $m' \neq m$. При $m' = m$ обчислення I_θ дає

$$I_\theta = \int_0^{\pi} P_{lm}(\cos\theta)\cos\theta P_{l'm}(\cos\theta)\sin\theta d\theta .$$

Увівши заміну $x = \cos\theta$, знаходимо $I_\theta = \int_{-1}^{1} P_{lm}(x) x P_{l'm}(x) dx$. Поліном Лежандра задовольняє рівність $xP_{lm} = aP_{l+1,m} + bP_{l-1,m}$, де

$$a = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}},\ b = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}},\ \int_{-1}^{1} P_{lm}(x) P_{l'm}(x) dx = \delta_{ll'} .$$

У наслідок цього

$$I_\theta = \int_{-1}^{1} \left(aP_{l+1,m} + bP_{l-1,m}\right) P_{l'm}(x) dx = a\delta_{l+1,l'} + b\delta_{l',l-1},$$

тобто цей інтеграл відмінний від нуля тільки при $l' = l \pm 1$.

Для обчислення матричних елементів D_x і D_y зручно ввести $D_\pm = D_x \pm iD_y = er\sin\theta\exp(\pm i\varphi)$. Склавши

$$\langle nlm|D_\pm|n'l'm'\rangle = \int \psi^*_{nlm} r\sin\theta\exp(\pm i\varphi)\psi_{n'l'm'} d\tau = I'_r I'_\theta I'_\varphi ,$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

можна обчислити I'_φ і I'_θ. Оскільки

$$I'_\varphi = \int_0^{2\pi} \exp(-im\varphi)\exp(\pm i\varphi)\exp(im'\varphi)\,d\varphi = 2\pi\delta_{m',m\pm1},$$

то матричний елемент D_+ відмінний від нуля тільки при $m' = m-1$, а D_- при $m' = m+1$. Обчислимо I'_θ для D_+, поклавши $m' = m-1$:

$$I'_\theta = \int_0^{\pi} P_{lm}(\cos\theta)\sin\theta P_{l',m-1}(\cos\theta)\sin\theta\,d\theta.$$

Вводячи знову заміну $x = \cos\theta$; $\sin\theta = \sqrt{1-x^2}$, одержуємо

$$I'_\theta = \int_{-1}^{1} P_{lm}(x)\sqrt{1-x^2}P_{l',m-1}(x)dx.$$

Із теорії поліномів Лежандра маємо

$$\sqrt{1-x^2}P_{l',m-1} = a_1 P_{l'+1,m} + b_1 P_{l'-1,m},$$

де

$$a_1 = \sqrt{\frac{(l'+m)(l'+m+1)}{4(l'+1)^2-1}}, \quad b_1 = -\sqrt{\frac{(l'-m+1)(l'-m)}{4l'^2-1}}.$$

Таким чином, $I'_\theta = a_1\delta_{l,l'+1} + b_1\delta_{l,l'-1}$ і не дорівнює нулю тільки при $l' = l\pm1$.

Для D_-, вважаючи $m' = m+1$, одержуємо

$$I'_\theta = \int_{-1}^{1} P_{lm}(x)\sqrt{1-x^2}P_{l',m+1}(x)dx.$$

Замінюючи $\sqrt{1-x^2}P_{lm}$ через $a_2P_{l+1,m+1} + b_2P_{l-1,m+1}$, де

$$a_2 = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{4(l+1)^2-1}}, \quad b_2 = -\sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{4l^2-1}},$$

маємо $I'_\theta = a_2\delta_{l+1,l'} + b_2\delta_{l-1,l'}$.

Видавничий поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Вирази для матричних елементів D_x і D_y можна одержати очевидним шляхом:

$$\left\langle nlm\left|D_x\right|n'l'm'\right\rangle = \frac{1}{2}\left[\left\langle nlm\left|D_+\right|n'l'm'\right\rangle + \left\langle nlm\left|D_-\right|n'l'm'\right\rangle\right];$$

$$\left\langle nlm\left|D_y\right|n'l'm'\right\rangle = \frac{1}{2i}\left[\left\langle nlm\left|D_+\right|n'l'm'\right\rangle - \left\langle nlm\left|D_-\right|n'l'm'\right\rangle\right].$$

Вони відмінні від нуля, якщо $l' = l \pm 1$ і $m' = m \pm 1$.

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
(версія не для друку)

Розділ 4
НАБЛИЖЕНІ МЕТОДИ

Короткі теоретичні відомості

1. Узагальнюючи плоску хвилю де Бройля у вигляді $\psi(\vec{r},t)=\exp\left[iS(\vec{r},t)/\hbar\right]$, де функція $S(\vec{r},t)$ має розмірність дії, і підставляючи $\psi(\vec{r},t)$ у нестаціонарне рівняння Шредінгера, дістанемо для $S(\vec{r},t)$ рівняння

$$-\partial S/\partial t=(\nabla S)^2/2\mu-i\hbar\Delta S/2\mu+U(\vec{r},t),$$

яке при виконанні формальної процедури $\hbar\to 0$ зводиться до класичного рівняння Гамільтона–Якобі:

$$\partial S/\partial t+(\nabla S)^2/2\mu+U(\vec{r},t)=0\,.$$

Якщо порівняти ці рівняння, то доходимо висновку, що саме доданок, який містить сталу Планка, відповідає поправці, яка відрізняє "квантовий" рух частинки від "класичного". При такій інтерпретації вихідне рівняння за малої величини цього доданка можна розв'язувати методом послідовних наближень.

У випадку стаціонарного руху, наприклад в одновимірному потенціалі $U(x)$, можна виділити явно часову залежність функції дії $S(x,t)=\sigma(x)-Et$ і для стаціонарної дії $\sigma(x)$ знайти таке рівняння:

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\partial\sigma}{\partial x}\right)^2-\frac{i\hbar}{2\mu}\frac{\partial^2\sigma}{\partial x^2}+U(x)-E=0\,.$$

Розкладаючи функцію $\sigma(x)$ у ряд за степенями малого параметра $\hbar/i$ (суть методу Вентцеля–Крамерса–Бріллюена (ВКБ)):

$\sigma(x)=\sigma_0(x)+(\hbar/i)\sigma_1(x)+(\hbar/i)^2\sigma_2(x)+\ldots$, можна одержати в нульовому наближенні для $\sigma_0(x)$ стаціонарне рівняння Гамільтона–Якобі, у першому та наступних наближеннях – поправки різних порядків.

Таким чином, з точністю до першого порядку мализни два незалежних розв'язки одновимірного рівняння Шредінгера у квазікласичному наближенні при $E>U(x)$ мають вигляд

$$\psi_{1,2}(x)=\frac{1}{\sqrt{p(x)}}\exp\left[\pm\frac{i}{\hbar}\int_c^x p(x)dx\right],$$

де $p(x)=\sqrt{2\mu\left[E-U(x)\right]}$ – класичний імпульс частинки. Із нерівності $(\partial\sigma/\partial x)^2>>\left|\partial^2\sigma/\partial x^2\right|$ з урахуванням $p=\partial\sigma/\partial x$ можна одержати критерій застосовності квазікласичного наближення: $\left|d\lambda\!\!\!^{-}/dx\right|\equiv\hbar\left|dp^{-1}/dx\right|=\mu\hbar\left|U'(x)/p^3(x)\right|<<1$.

Якщо $U(x)$ зображає потенціальний бар'єр (тобто $U(x)>E$ в області $a\le x\le b$), то в квазікласичному наближенні прозорість цього бар'єра описується виразом

$$D(E)=\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2\mu\left[U(x)-E\right]}dx\right\}.$$

Якщо частинка здійснює циклічний рух у потенціальний ямі, то вимога однозначності хвильової функції в нульовому наближенні методу ВКБ приводить до такої умови:

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2\mu\left[E_n-U(x)\right]}dx=\pi(n+1/2),\quad n=0,1,\ldots.$$

Це так звана умова квантування Бора–Зоммерфельда. Спектр енергій E_n, який з неї можна одержати, у подальшому називатимемо ВКБ-спектром.

2. Наступним наближеним методом розв'язування операторного рівняння є прямий варіаційний метод (метод Рітца). Він

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

базується на принципі мінімальності енергії, тобто хвильова функція і власне значення енергії визначаються на основі варіаційного принципу (дослідження на умовний екстремум): екстремум функціонала $J\left(\psi,\psi^*\right)=\left\langle\psi\middle|\hat{H}\middle|\psi\right\rangle=\int\psi^*\hat{H}\psi dq$ за очевидної додаткової умови нормування $\left\langle\psi\middle|\psi\right\rangle=\int\psi^*\psi dq=1$ забезпечує функція, яка є розв'язком стаціонарного рівняння Шредінгера, тобто власна функція оператора $\hat{H}$, яка відповідає найнижчому рівню енергії.

Нехай маємо деяку пробну функцію $\psi_0\left(q;\alpha_1,...,\alpha_k\right)$, яка залежить від змінної q, містить вільні параметри $\alpha_1,...,\alpha_k$ та є нормованою: $\left\langle\psi_0\middle|\psi_0\right\rangle=\int\left|\psi_0\left(q;\alpha_1,...,\alpha_k\right)\right|^2dq=1$. За допомогою цієї функції обчислюється інтеграл

$$J_0\left(\alpha_1,...,\alpha_k\right)=\int\psi_0^*\left(q;\alpha_1,...,\alpha_k\right)\hat{H}\psi_0\left(q;\alpha_1,...,\alpha_k\right)dq\equiv\left\langle\psi_0\middle|\hat{H}\middle|\psi_0\right\rangle.$$

Далі із системи рівнянь $\partial J_0/\partial\alpha_1=0$, … $\partial J_0/\partial\alpha_k=0$ відшукуються значення параметрів $\alpha_{10},...,\alpha_{k0}$, які приводять до мінімуму величину $J_0\left(\alpha_1,...,\alpha_k\right)$. У результаті визначається енергія $E_0=J_0\left(\alpha_{10},...,\alpha_{k0}\right)$ й явний вигляд хвильової функції $\psi_0\left(q;\alpha_{10},...,\alpha_{k0}\right)$ основного стану.

Аналогічно розраховуються і всі наступні (збуджені) енергетичні рівні $E_n=J_0\left(\alpha_{1n},...,\alpha_{kn}\right)$ і відповідні хвильові функції $\psi_n\left(q;\alpha_{1n},...,\alpha_{kn}\right)$ у результаті послідовного дослідження на умовні екстремуми функціоналів $J_n\left(\psi_n,\psi_n^*\right)=\int\psi_n^*\hat{H}\psi_n dq$ за додаткових умов $\left\langle\psi_n\middle|\psi_n\right\rangle=1$, $\left\langle\psi_i\middle|\psi_n\right\rangle=0$ $\left(i=0,...,n-1\right)$.

Узагальненням методу Рітца є варіаційний метод Хартрі–Фока, який використовується для опису об'єктів, що складаються із багатьох тотожних частинок. Цей метод є найбільш ефективним, наприклад, для опису станів електронів у багатоелектронних атомах, молекулах чи електронів у металах, коли

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (електронна версія не для продажу)

виконуються процедури антисиметризацій хвильових функцій щодо перестановок тотожних частинок.

3. Метод стаціонарної теорії збурень базується на можливості представлення оператора Гамільтона системи у вигляді $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$, де збурення $\hat{W}$ є малою поправкою, а власні функції $\psi_n^{(0)}$ і власні значення $E_n^{(0)}$ оператора $\hat{H}_0$ вважаються відомими. Розкладаючи функцію ψ_n за функціями $\psi_n^{(0)}$: $\psi_n = \sum_m c_{nm}\psi_m^{(0)}$, власні значення E_n оператора $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ та значення коефіцієнтів c_{nm} шукаємо у вигляді рядів

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \ldots,\ c_{nm} = c_{nm}^{(0)} + c_{nm}^{(1)} + \ldots,$$

де величини $E_n^{(1)}$ і $c_{nm}^{(1)}$ – того ж порядку мализни, що й збурення $\hat{W}$, величини $E_n^{(2)}$ і $c_{nm}^{(2)}$ – другого порядку мализни і т. д. При цьому, якщо незбурений рівень $E_n^{(0)}$ невироджений, то

$$E_n^{(1)} = \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \hat{W} \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \equiv \left\langle n \middle| \hat{W} \middle| n \right\rangle,$$

$$E_n^{(2)} = \sum_m{}' \left\{ \left| \left\langle m \middle| \hat{W} \middle| n \right\rangle \right|^2 \Big/ \left[E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right] \right\}$$

(у сумі відсутній доданок з $m = n$), а для власних функцій

$$c_{nm}^{(0)} = \delta_{nm},\ c_{nn}^{(1)} = 0,\ c_{nm}^{(1)} = \left\langle m \middle| \hat{W} \middle| n \right\rangle \Big/ \left[E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right],\ m \neq n.$$

Умова застосовності методу стаціонарної теорії збурень $(n \neq m)$:

$$\left| \left\langle m \middle| \hat{W} \middle| n \right\rangle \right| << \left| E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right|.$$

4. Якщо рівень $E_n^{(0)}$ – s-кратно вироджений, тобто йому відповідають взаємно ортогональні власні функції $\psi_{n\alpha}^{(0)}$, де $\alpha = 1,\ldots,s$, причому $\hat{H}_0\psi_{n\alpha}^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_{n\alpha}^{(0)}$, то в нульовому набли-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для пошуку)

женні хвильова функція ψ_n збуреної задачі представляється у вигляді суперпозиції цих функцій незбуреної задачі $\psi_n = \sum_{\alpha=1}^{s} c_\alpha^{(0)} \psi_{n\alpha}^{(0)}$. Коефіцієнти $c_\alpha^{(0)}$ визначаються із системи s однорідних лінійних рівнянь вигляду

$$\sum_{\beta=1}^{s} \left(\left\langle n\alpha \left| \hat{W} \right| n\beta \right\rangle - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta} \right) c_\beta^{(0)} = 0 .$$

Умовою існування нетривіальних розв'язків $\{c_\beta^{(0)}\}$ є рівність нулю визначника цієї системи, тобто приходимо до секулярного рівняння $\left| \left\langle n\alpha \left| \hat{W} \right| n\beta \right\rangle - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta} \right| = 0$. Це рівняння визначає s значень $E_n^{(1)}$, а за допомогою зазначених вище рівнянь обчислюються коефіцієнти $c_\alpha^{(0)}$ і, відповідно, ψ_n.

5. Якщо зовнішнє збурення $\hat{W}(q,t)$ спричиняє переходи в межах незбуреної системи (з оператором $\hat{H}_0$) з одного її стаціонарного стану $\psi_k^{(0)}$ в інший $\psi_n^{(0)}$, то ця задача розв'язується за допомогою нестаціонарної теорії збурень: шукається розв'язок рівняння $i\hbar \dfrac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{W} \right) \Psi$ у вигляді

$$\Psi(q,t) = \sum_n a_n(t) \psi_n^{(0)}(q) \exp\left(-iE_n^{(0)} t / \hbar \right).$$

При цьому для $a_n(t)$ справедливе рівняння

$$i\hbar \frac{da_n(t)}{dt} = \sum_k W_{nk}(t) a_k(t) \exp(i\omega_{nk} t),$$

де $W_{nk}(t) = \int \psi_n^{(0)*} \hat{W}(q,t) \psi_k^{(0)} dq$ – матричний елемент енергії збурення, $\omega_{nk} = \left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right) / \hbar$. Розв'язок цього рівняння методом послідовних ітерацій $a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + a_n^{(1)}(t) + \ldots$ у найнижчому наближенні приводить до результату $a_n^{(0)}(t) = \text{const}$. Ва-

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

жаючи, що $\hat{W}(q,t) \to 0$ при $t \to -\infty$ і при цьому (тобто до включення збурення) система перебувала у стані $\psi_k^{(0)}$, і тому $a_n(-\infty) = \delta_{nk}$, вибирається $a_n^{(0)} \equiv a_{nk}^{(0)} = \delta_{nk}$ (замість $a_n(t)$ тепер пишемо $a_{nk}(t)$). Для поправки першого наближення з урахуванням $a_{nk}^{(1)}(-\infty) = 0$ маємо $a_{nk}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} W_{nk}(t)\exp(i\omega_{nk}t)dt$. Якщо при $t \to +\infty$ збурення $\hat{W}(q,t)$ зникає, то ймовірність переходу системи із початкового *k*-го стану в кінцевий *n*-й $(n \neq k)$ стан під впливом збурення за весь час його дії визначається за формулою

$$P(k \to n) \equiv P_{nk} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} W_{nk}(t)\exp(i\omega_{nk}t)\right|^2 \equiv \frac{4\pi^2}{\hbar^2}\left|W_{nk}(\omega_{nk})\right|^2,$$

де $W_{nk}(\omega_{nk}) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} W_{nk}(t)\exp(i\omega_{nk}t)dt$ – коефіцієнт Фур'є матричного елемента енергії збурення на частоті переходу ω_{nk}.

Якщо при $t \to +\infty$ збурення $\hat{W}(q,t)$ прямує до скінченної малої величини, інтеграл у P_{nk} розбігається. Проте ця розбіжність з фізичної точки зору несуттєва, і тому може бути легко усунена, а ймовірність переходу визначається виразом

$$P_{nk} = \int_{-\infty}^{t} (\partial W_{nk}/\partial t)\left[\exp(i\omega_{nk}t)/\hbar\omega_{nk}\right]dt.$$

Якщо збурення $\hat{W}(q,t)$ мало змінюється за проміжок часу $\sim \omega_{nk}^{-1}$, то значення інтеграла буде дуже малим, тобто при досить повільній (адіабатичній) зміні накладеного збурення система, яка перебуває в деякому невиродженому стаціонарному стані, і надалі в ньому залишається. У протилежному граничному випадку дуже швидкого (раптового) включення збурення похідні $\partial W_{nk}/\partial t$ перетворюються на нескінченність у "момент включення". У цьому випадку в інтегралі від $(\partial W_{nk}/\partial t)\exp(i\omega_{nk}t)$ можна винести із-під знака інтеграла по-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

вільний множник $\exp(i\omega_{nk}t)$, беручи його значення в цей момент. Після цього інтеграл одразу береться $P_{nk} = |W_{nk}|^2 / \hbar^2 \omega_{nk}^2$.

Імовірність переходу за умови раптових збурень може бути знайдена і в тих випадках, коли збурення не є малим. Якщо система перебуває в стані $\psi_i^{(0)}$ початкового гамільтоніана $\hat{H}_0$ і зміна гамільтоніана відбувається раптово (тобто за час, малий порівняно з періодами ω_{fi}^{-1} переходів із даного стану i в інші), то ця функція "не встигає" змінитися і залишається тією ж, що й до збурення. Але тепер вона не є власною функцією для нового гамільтоніана системи $\hat{H}$, тобто стан $\psi_i^{(0)}$ не буде стаціонарним. Проте ймовірність переходу системи в будь-який із нових стаціонарних станів визначається відповідно до загальних правил квантової механіки, коефіцієнтами розкладу функції $\psi_i^{(0)}$ за власними функціями ψ_f гамільтоніана $\hat{H}$: $P_{fi} = \left| \int \psi_i^{(0)} \psi_f^* dq \right|^2$.

Зауважимо, що одержані формули залишаються справедливими і в тому випадку, коли перехід здійснюється зі стану дискретного в стан неперервного спектра, а також між станами лише неперервного спектра.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

4.1. Метод квазікласичного наближення

1. Методом квазікласичного наближення розрахувати дозволені рівні енергії та хвильові функції для гармонічного осцилятора.

Розв'язання: скориставшись інтегралом енергії

$$E = p^2/2\mu + \mu\omega^2 x^2/2 = \mu\omega^2 A^2/2,$$

де $\omega = \sqrt{k/\mu}$ – частота коливань осцилятора, A – амплітуда його коливань, знаходимо $p = \mu\omega\sqrt{A^2 - x^2}$ і, підставляючи $x = A\cos\varphi$, одержуємо $\oint p dx = A^2 \pi\mu\omega = 2\pi\hbar n$.

Таким чином, дозволені амплітуди та енергії будуть $A_n^2 = 2n\hbar/\mu\omega$ і $E_n = \mu\omega^2 A_n^2/2 = n\hbar\omega$, відповідно.

2. Знайти рівні енергії частинки масою μ, що вільно рухається у площині по колу радіуса R (жорсткий плоский ротатор).

Відповідь: $E_m = \hbar^2 m^2/2I$, де $I = \mu R^2$ – момент інерції частинки, $m = 0, \pm 1, \ldots$.

3. Визначити рівні енергії атома водню, який вільно рухається в обмеженому об'ємі $0 \le x \le a$, $0 \le y \le b$, $0 \le z \le c$.

Розв'язання: позначаючи координату та масу ядра $\vec{r}_1$, m_1, а електрона $\vec{r}_2$, m_2, відокремлюємо змінні, вводячи відносну координату $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ і координату центра інерції $\vec{R} = \left(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2\right)/\left(m_1 + m_2\right)$. Центр ваги, радіус-вектор якого $\vec{R}$, рухається як вільна частинка з масою $M = m_1 + m_2$ у заданому об'ємі.

Задача про відносний рух електрона зводиться до задачі, у якій масу електрона m_2 необхідно замінити його зведеною масою $\mu = m_1 m_2/\left(m_1 + m_2\right)$. Ураховуючи квантування імпульсів центра ваги P_x, P_y, P_z, запишемо повну енергію атома водню:

$$E_{n_1 n_2 n_3 n} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + E_{\text{відн}} = \frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right) - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}.$$

4. Частинка масою μ вертикально падає на горизонтальну пластину і пружно (без втрати енергії) від неї відбивається. Користуючись умовою квантування Бора–Зомерфельда, знайти енергетичний спектр E_n і дозволені висоти h_n частинки.

Розв'язання: координата z частинки та її імпульс p пов'язані інтегралом енергії $E = p^2/2\mu + \mu g z = \mu g H$, звідки $p(z) = \pm\sqrt{2\mu\left(E - \mu g z\right)}$. За використання умови квантування

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

$\oint pdz = 2\int_0^H \sqrt{2\mu(E-\mu gz)}dz = 2\pi\hbar n$ приходимо до виразів $h_n = \left(3\pi n\hbar/2\mu\sqrt{2g}\right)^{2/3}$ та $E_n = \left(3\sqrt{\mu}g\pi n\hbar/2\sqrt{z}\right)^{2/3}$.

5. Знайти ВКБ-спектр частинки в потенціалі Морзе

$$U(x) = U_0\left[\exp(x/a)-1\right]^2.$$

Розв'язання: із рівняння $U(x) = E_n$ знаходимо точки зупинки $x_{1n,2n} = a\ln\left(1 \mp \sqrt{E_n/U_0}\right)$. У змінній $t = \left[\exp(x/a)-1\right]\sqrt{U_0/E_n}$ умова Бора–Зомерфельда записується у вигляді

$$\frac{E_n a}{\hbar}\sqrt{2m/U_0}\int_{-1}^{1}\sqrt{1-t^2}\Big/\left(1+t\sqrt{E_n/U_0}\right)dt = \pi(n+1/2).$$

Після інтегрування одержуємо такий ВКБ-спектр:

$$E_n = U_0\left\{1-\left[1-\frac{\hbar}{a\sqrt{2\mu U_0}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2\right\}, n = 0,...,\left[\frac{a\sqrt{2\mu U_0}}{\hbar}-\frac{1}{2}\right].$$

6. Знайти ВКБ-спектр частинки в потенціалі

$$U(x) = U_0\,\mathrm{tg}^2(\pi x/a), |x| < a/2.$$

Розв'язання: із рівняння $U(x) = E_n$ знаходимо точки зупинки $x_{1n,2n} = \mp(a/\pi)\mathrm{arctg}\sqrt{E_n/U_0}$. Тоді умова Бора–Зомерфельда записується у вигляді

$$\frac{2}{\hbar}\int_0^{(a/\pi)\mathrm{arctg}\sqrt{E_n/U_0}}\left\{2\mu\left[E_n - U_0\,\mathrm{tg}^2(\pi x/a)\right]\right\}^{1/2}dx = \pi(n+1/2).$$

Вводячи змінну інтегрування $t = \sqrt{U_0/E_n}\,\mathrm{tg}(\pi x/a)$, знаходимо ВКБ-спектр:

$$E_n = \frac{\hbar\pi}{\left(\sqrt{2}-1\right)a}\sqrt{\frac{U_0}{2\mu}}\left(n+\frac{1}{2}\right), n = 0,1,....$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" Версія не для друку

7. У квазікласичному наближенні знайти енергії E_n для потенціалу $U(x) = -U_0/\mathrm{ch}^2(x/a)$. Порівняти з точним результатом і знайти кількість зв'язаних станів у цій потенціальній ямі.

Розв'язання: спочатку знаходимо із рівняння $U(x) = E_n$ точки зупинки $x_{1n,2n} = \mp a\,\mathrm{Arch}\sqrt{U_0/|E_n|}$. Застосовуючи умову Бора–Зомерфельда, маємо

$$\frac{2}{\hbar}\int_0^{a\,\mathrm{Arch}\sqrt{U_0/|E_n|}} \left\{2\mu\left[U_0/\mathrm{ch}^2(x/a) - |E_n|\right]\right\}^{1/2} dx = \pi(n+1/2).$$

Інтегрування виконуємо за допомогою підстановки $\mathrm{sh}(x/a) = \kappa \sin t$, де $\kappa = \sqrt{U_0/|E_n| - 1}$ і одержуємо спектр енергій

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\sqrt{2\mu a^2 U_0}/\hbar - (n+1/2)\right]^2,\ n = 0,1,\ldots.$$

У точному результаті під коренем стоїть $2\mu a^2 U_0/\hbar^2 + 1/4$, тому за значень $\xi \equiv \sqrt{2\mu a^2 U_0}/\hbar >> 1$, коли в потенціалі є багато зв'язаних станів, квазікласичний і точний результати мало відрізняються один від одного. Більше того, квазікласичний результат непогано відтворює точний спектр навіть у тому випадку, коли в потенціалі є всього 3÷4 рівні зв'язаних станів. Дійсно, максимальне значення n визначається тим, що $n + 1/2 \le \xi$, тобто $n_{\max} \approx \xi$ при $\xi >> 1$. При цьому різниця точного і квазікласичного результатів проявляється в доданку $\sqrt{\xi^2 + 1/4} - \xi \approx 1/8\xi$ на фоні квазікласичного виразу $\xi - (n+1/2)$.

8. Знайти ВКБ-спектр частинки в потенціалі

$$U(x) = U_0(a/x - x/a)^2 \text{ для } x > 0.$$

Розв'язання: із рівняння $U(x) = E_n$ знаходимо точки зупинки $x_{1n,2n} = \left(\sqrt{E_n/U_0 + 4} \mp \sqrt{E_n/U_0}\right)/2$. Після введення змінної

Видання друкарської продукції
навчально-методичний центр
(первісний університет
(первісний університет
(первісний університет

$t=\left(a/x-x/a\right)\sqrt{U_0/E_n}$ умова Бора–Зомерфельда записується у вигляді

$$\left(E_n a\sqrt{\mu/2U_0}\,/\hbar\right)\int_{-1}^{1}\sqrt{1-t^2}\,dt=\pi\left(n+1/2\right).$$

Після інтегрування одержуємо спектр енергетичних рівнів

$$E_n=\hbar\sqrt{2U_0/\mu}\left(2n+1\right)/a,\ n=0,1,\ldots.$$

9. Знайти ВКБ-спектр частинки в потенціалі $V\left(x\right)=C\left|x\right|$.

Відповідь: $E_n=\left[3\hbar\pi C\left(n+1/2\right)/4\sqrt{2\mu}\,\right]^{2/3}$, $n=0,1,\ldots$

10. Знайти ВКБ-спектри частинки в потенціалах:

а) $V\left(x\right)=V_0x$, якщо $x>0$, $V\left(x\right)=\infty$, якщо $x\le 0$;

б) $V\left(x\right)=\mu\omega^2x^2/2$, якщо $x>0$, $V\left(x\right)=\infty$, якщо $x\le 0$.

Відповідь: а) $E_n=\left[3\hbar\pi V_0\left(n+1/2\right)/2\sqrt{2\mu}\,\right]^{2/3}$, $n=0,1,\ldots$,

б) $E_n=2\hbar\omega\left(n+1/2\right)$, $n=0,1,\ldots$.

11. У межах квазікласичного наближення показати, що у випадку степеневих потенціалів $U\left(x\right)=U_0\left|x/a\right|^{\alpha}$ еквідистантний спектр існує лише при $\alpha=2$, за $1<\alpha<2$ відстань між енергетичними рівнями зменшується зі зростанням енергії, а за $\alpha>2$ навпаки, відстань між рівнями зростає.

Розв'язання: після підстановки потенціалу $U\left(x\right)$ в умову Бора–Зомерфельда одержуємо

$$\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_n}\left[2\mu\left(E_n-U_0\left|x/a\right|^{\alpha}\right)\right]^{1/2}dx=\left(n+1/2\right)\pi,$$

де $x_n=\left|a\right|\left(E_n/U_0\right)^{1/\alpha}$. Після переходу до нової змінної $t=\left(U_0/E_n\right)^{1/\alpha}x/\left|a\right|$ ця умова переписується у вигляді

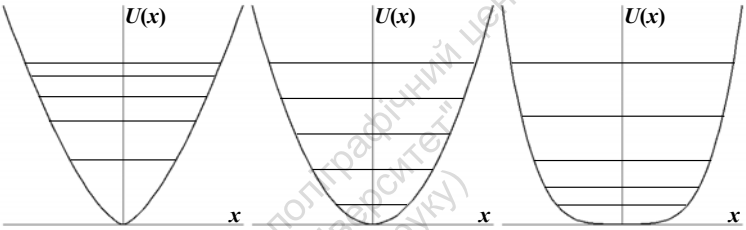
$$\frac{2\left|a\right|}{\hbar}\sqrt{2\mu E_n}\left(E_n/U_0\right)^{1/\alpha}\int_0^1\left(1-t^{\alpha}\right)^{1/2}dt=\left(n+1/2\right)\pi,$$

Державне підприємство "Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Інститут для друку)

а якщо всі параметри і сталі величини зібрати в одну константу, то за умови $n >> 1$ приходимо до наближеної рівності $E_n \approx A_\alpha n^{2\alpha/(\alpha+2)}$. Тоді відстань між енергетичними рівнями знаходимо таким чином:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n \approx \partial E_n / \partial n = B_\alpha n^{(\alpha-2)/(\alpha+2)},$$

де $B_\alpha = 2\alpha A_\alpha / (\alpha + 2)$. Звідси одержуємо, що при $1 < \alpha < 2$ $\Delta E_n \to 0$, якщо $n \to \infty$; при $\alpha = 2$ реалізується еквідистантний спектр з $\Delta E_n = B_\alpha$; при $\alpha > 2$ $\Delta E_n \to \infty$ зі зростанням n. Усі ці три випадки схематично проілюстровані на рис. 4.1.



а) б) в)

Рис. 4.1. Схематичне зображення ВКБ-спектрів у степеневих потенціалах $U(x) = U_0 |x/a|^\alpha$ при $1 < \alpha < 2$ – (а), $\alpha = 2$ – (б) і $\alpha > 2$ – (в)

12. У ВКБ-наближенні, виходячи з вигляду хвильової функції основного стану для однієї ізольованої ями, знайти розщеплення рівня енергії основного стану для симетричного потенціалу $U(x)$ у вигляді двох потенціальних ям, відокремлених бар'єром, імовірність тунелювання крізь який за цих енергій мала.

Розв'язання: наближений розв'язок рівняння Шредінгера у полі $U(x)$ (рис. 4.2) будуватимемо (за умови нехтування ймовірністю переходу крізь бар'єр) за допомогою квазікласичної хвильової функції $\psi_0(x)$, яка описує рух (за деякої енергії E_0) в одній ямі (скажімо, в ямі I), тобто експоненціально згасаючої

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

за межами цієї ями; функція $\psi_0(x)$ вважається нормованою, тому інтеграл від ψ_0^2 по області ями I дорівнює одиниці.

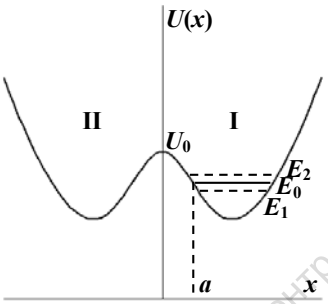


Рис. 4.2. Схематичне зображення симетричного потенціалу у вигляді двох потенціальних ям, відокремленних потенціальним бар'єром

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

За малої ймовірності тунелювання енергетичний рівень E_0 розщеплюється на рівні E_1 та E_2. Правильні хвильові функції нульового наближення, які відповідають цим рівням, є симетричною та антисиметричною комбінаціями функцій $\psi_0(x)$ і $\psi_0(-x)$:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_0(x) + \psi_0(-x)\right],$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_0(x) - \psi_0(-x)\right].$$

В області ями I функція $\psi_0(-x)$ дуже мала порівняно з $\psi_0(x)$, а в ямі II навпаки, тому добуток $\psi_0(x)\psi_0(-x)$ буде зникаючи малим скрізь, а функції $\psi_1(x)$ і $\psi_2(x)$ нормовані таким чином, що рівні одиниці інтеграли від їх квадратів по ямах I і II.

Запишемо рівняння Шредінгера:

$$\psi_0'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_0 - U)\psi_0 = 0, \qquad \psi_1'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_1 - U)\psi_1 = 0.$$

Помножимо перше рівняння на ψ_1, друге на ψ_0, віднімемо почленно та проінтегруємо по x у межах від 0 до ∞. Беручи до уваги, що за $x=0$:

$$\psi_1=\sqrt{2}\psi_0,\ \psi_1'=0\text{, а }\int_0^\infty \psi_0\psi_1 dx\approx\frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^\infty \psi_0^2 dx=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

знаходимо

$$E_1-E_0=-\frac{\hbar^2}{\mu}\psi_0(0)\psi_0'(0).$$

Аналогічним чином знаходимо для E_2-E_0 такий самий вираз із оберненим знаком. Таким чином,

$$E_2-E_1=\frac{2\hbar^2}{\mu}\psi_0(0)\psi_0'(0).$$

Хвильову функцію $\psi_0(x)$ у класично недоступній області $x<a$ можна записати у вигляді

$$\psi_0(x)=\sqrt{\frac{\omega}{2\pi v_0}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|dx\right),$$

де ω – частота класичного періодичного руху в ямах, a – точка повороту, що відповідає енергії E_0, $v_0=\sqrt{2(U_0-E_0)/\mu}$. Нарешті, обчислюючи значення функцій

$$\psi_0(0)=\sqrt{\frac{\omega}{2\pi v_0}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^a |p|dx\right)\quad\text{і}\quad\psi_0'(0)=\frac{\mu v_0}{\hbar}\psi_0(0),$$

знаходимо

$$E_2-E_1=\frac{\omega\hbar}{\pi}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^a |p|dx\right).$$

13. У квазікласичному наближенні знайти коефіцієнт прозорості параболічного бар'єра $U(x)=U_0\left[1-(x/a)^2\right]$ при $|x|<a$, $U(x)=0$ при $|x|\geq a$. Знайти критерій справедливості розв'язку.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Розв'язання: позначаючи через μ і E масу та енергію частинки $\left(E<U_0\right)$, маємо для коефіцієнта проходження (коефіцієнта прозорості) у квазікласичному наближенні вираз

$$D(E)\approx\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2\mu\left[U(x)-E\right]}dx\right\},$$

де x_1,x_2 – координати класичних точок повороту, які визначаються з рівності $U(x)=E$: $x_2=-x_1=a\sqrt{1-E/U_0}$.

Після підстановки в інтеграл потенціалу $U(x)$, а також застосування заміни змінної $x/x_2=t$, одержимо

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

Критерієм застосовності цієї формули є велике значення показника експоненти $\pi\sqrt{2\mu/U_0}\,(U_0-E)a/\hbar>>1$. Неважко переконатись, що для розглядуваного бар'єра виконання цієї нерівності водночас забезпечує законність у $D(E)$ передекспоненційного множника, що дорівнює одиниці. Дійсно, цей множник дорівнює одиниці у тому випадку, коли поле $U(x)$ задовольняє умову квазікласичності впродовж усього бар'єра, за винятком безпосередніх околів точок повороту. Ця умова має вигляд $\left|d\lambda\!\!\!^{-}/dx\right|\equiv\left|d\left\{\hbar/\sqrt{2\mu\left[E-U(x)\right]}\right\}/dx\right|<<1$, де $\lambda\!\!\!^{-}$ – довжина хвилі де Бройля. Перетворюючи цю нерівність до вигляду $\left|t/\left(t^2-1\right)^{3/2}\right|<<\pi\sqrt{2\mu/U_0}\,(U_0-E)a/\hbar$, де $x/x_2=t$, бачимо, що вона порушується тільки поблизу $t=\pm1$. Ширина ж області неквазікласичності за порядком величини дорівнює $|\Delta x|\sim a^{1/3}\hbar^{2/3}/\mu^{1/3}\left(U_0-E\right)^{1/6}U_0^{1/6}$. Для "інтегральної" квазікласичності поля $U(x)$ має бути $|\Delta x|<<a$, що й виконується.

Витяг з методичної розробки
(вебінар для студентів)

Таким чином, передекспоненційний множник у $D(E)$ дорівнює одиниці.

14. У ВКБ-наближенні знайти коефіцієнти проходження для бар'єрів вигляду:

а) $U(x) = U_0 / \mathrm{ch}^2(x/a)$;

б) $U(x) = U_0 \exp(-x/a)$ при $x > 0$, $U(x) = 0$ при $x \le 0$.

Вказати критерії застосовності результатів.

Відповідь:

а) $D(E) = \exp\left[-2\pi\sqrt{2\mu a^2/\hbar^2}\left(\sqrt{U_0} - \sqrt{E}\right)\right]$;

б) $D(E) = \exp\left[-4\sqrt{2\mu a^2/\hbar^2}\left(\sqrt{U_0 - E} - \sqrt{E}\,\mathrm{arctg}\sqrt{U_0/E - 1}\right)\right]$.

Як і в попередній задачі, критеріями застосовності цих формул є великі значення показників експонент.

15. Визначити енергетичні рівні частинки в кулонівському полі $V(r) = -e^2/r$, застосовуючи метод ВКБ до радіального хвильового рівняння.

Розв'язання: умову квантування $\int_{r_1}^{r_2} Q(r)dr = (n_r + 1/2)\pi$, де $Q^2 = 2\mu\left[E - V_{\text{еф}}(r)\right]/\hbar^2$, $n_r = 0,1,...$ – радіальне квантове число, а $r_1 < r_2$ – дві класичні точки повороту, можна застосовувати як для додатних, так і для від'ємних значень енергії E. Під $V_{\text{еф}}$ розуміємо потенціальну енергію, до складу якої входить доцентровий доданок, де виконана заміна величини $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$. Для подальшого розгляду спершу обґрунтуємо цю заміну.

У випадку еліптичних орбіт $(E < 0)$ рівняння для радіальної функції атома водню можна записати у вигляді $d^2u/dr^2 + \left(-A + 2B/r - l(l+1)/r^2\right)u = 0$, де $u = rR$, а значення коефіцієнтів A і B визначаються формулами $A = -2\mu E/\hbar^2 > 0$, $B = \mu e^2/\hbar^2 > 0$. При $r \to 0$ це рівняння має особливість, яка ви-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

значається доданком $l(l+1)/r^2$. За допомогою нового аргументу $r=\exp(x)$ перенесемо цю особливість із точки $r\to 0$ у точку $x\to -\infty$. Переходячи до аргументу x і вводячи хвильову функцію $u=\exp(x/2)\chi(x)$, приведемо радіальне рівняння до вигляду

$$d^2\chi/dx^2+\exp(2x)\left[-A+2B\exp(-x)-(l+1/2)^2\exp(-2x)\right]\chi=0.$$

До цього рівняння тепер застосовна апроксимація ВКБ, і тому можемо знайти спектр власних значень

$$\int_{x_1}^{x_2}\exp x\left[-A+2B\exp(-x)-(l+1/2)^2\exp(-2x)\right]^{1/2}dx=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\pi.$$

Повертаючись в останньому інтегралі до попередньої змінної $r=\exp(x)$, матимемо

$$\int_{r_1}^{r_2}\left[-A+2B/r-(l+1/2)^2/r^2\right]^{1/2}dr=(n_r+1/2)\pi,$$

де r_1, r_2 – корені підінтегральної функції. Із цієї формули можна зробити важливий висновок про те, що при використанні квазікласичних виразів для центральних сил в орбітальному моменті необхідно зробити заміну $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$.

Таким чином, у нашому випадку

$$Q^2=2\mu\left[-|E|+e^2/r-\hbar^2(l+l/2)^2/2\mu r^2\right]/\hbar^2.$$

За допомогою позначень $k^2=2\mu|E|/\hbar^2$, $a_0=\hbar^2/\mu e^2$, $\lambda=l+1/2$ цей вираз можна записати у вигляді

$$Q^2=-k^2(r-r_1)(r-r_2)/r^2,$$

де точки повороту r_1 і r_2 визначаються формулами $r_{1,2}=\left[1\mp\sqrt{1-(\lambda ka_0)^2}\right]/k^2a_0$. У цих позначеннях умова квантування набуває вигляду

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
(версія не для друку)

$$k\int_{r_1}^{r_2} dr\left[\left(r-r_1\right)\left(r_2-r\right)\right]\Big/r=\left(n_r+1/2\right)\pi\,.$$

Обчислення цього інтеграла можна розбити на три етапи. Спочатку за допомогою заміни змінної інтегрування $r=\left(r_2-r_1\right)x/2+\left(r_2+r_1\right)/2$ квадратична форма під знаком інтеграла зводиться до діагонального вигляду. Потім за допомогою другої підстановки $y=\sqrt{\left(1-x\right)/\left(1+x\right)}$ підінтегральний вираз перетворюється до раціонального вигляду

$$\left[k\left(r_2-r_1\right)^2/r_1\right]\int_{-\infty}^{\infty}\left[y^2\Big/\left(y^2+1\right)^2\left(y^2+r_2/r_1\right)\right]dy=\left(n_r+1/2\right)\pi\,.$$

І, нарешті, останній інтеграл береться за допомогою лишків, тобто одержуємо $\left(\sqrt{r_2/r_1}-1\right)^2\pi kr\Big/2=\left(n_r+1/2\right)\pi$. Покладаючи $\lambda ka_0=t$, цей результат можна записати у вигляді

$$\frac{\lambda}{2t}\left[1-\sqrt{1-t^2}\right]\left(\sqrt{\left(1+\sqrt{1-t^2}\right)\Big/\left(1-\sqrt{1-t^2}\right)}-1\right)^2=n_r+\frac{1}{2}\,.$$

Після спрощення це дає $\lambda\left(1-t\right)/t=n_r+1/2$. Звідси маємо $t=\lambda/\left(n_r+\lambda+1/2\right)$ або $ka_0=1/\left(n_r+\lambda+1/2\right)$, а внаслідок рівності $k^2=2\mu\left|E\right|/\hbar^2$ одержуємо $E=-\mu e^4/2\hbar^2\left(n_r+\lambda+1/2\right)^2$. Оскільки $\lambda=l+1/2$, то цей результат збігається з точною формулою для власних значень, причому $n=n_r+l+1$ є головним квантовим числом.

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

4.2. Прямий варіаційний метод Рітца

1. Знайти варіаційним методом енергію основного рівня частинки в потенціалі $U\left(x\right)=Fx$ для $x\geq 0$ і $U\left(x\right)=\infty$ для $x<0$, використовуючи пробні функції $\psi_1\left(x,\alpha\right)=Ax\exp\left(-\alpha x\right)$ та $\psi_2\left(x,\beta\right)=Bx\exp\left(-\beta x^2/2\right)$.

Відповідь: $E_{01} = 3\left(9\hbar^2 F^2/4\mu\right)^{1/3}/2$, $E_{02} = 3\left(3F^2\hbar^2/4\pi\mu\right)^{1/3}$.

Оскільки $E_{02} < E_{01}$, то ψ_2 є кращим наближенням, ніж ψ_1.

2. Знайти варіаційним методом енергію основного та першого збудженого станів одновимірного гармонічного осцилятора з масою μ і частотою ω, використовуючи при цьому такі пробні функції:

а) $\varphi_0(x,\alpha) = A\exp\left(-x^2/\alpha^2\right)$, $\varphi_1(x,\beta) = Bx\exp\left(-x^2/\beta^2\right)$;

б) $\varphi_0(x,\alpha) = A\exp\left(-\alpha|x|\right)$, $\varphi_1(x,\beta) = Bx\exp\left(-\beta|x|\right)$.

Відповідь:

а) $E_0 = \hbar\omega\sqrt{3}/4$, $E_1 = 3\hbar\omega/2$; б) $E_0 = \hbar\omega/\sqrt{2}$, $E_1 = \sqrt{3}\hbar\omega$.

3. Знайти наближене значення енергії основного стану гармонічного осцилятора з масою μ і частотою ω варіаційним методом, використовуючи такі пробні функції:

а) $\psi(x,\alpha) = A/\left(1+x^2/\alpha^2\right)$; б) $\psi(x,\alpha) = A/\left(1+x^2/\alpha^2\right)^2$.

Вказівка: при обчисленні A, $\langle T\rangle$ і $\langle V\rangle$ скористатись інтегралом

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx/\left(x^2+a^2\right)^{n+1} = \pi(2n-1)!!/2^n n! a^{2n+1}.$$

Відповідь: а) $E_0 = \hbar\omega/\sqrt{2}$; б) $E_0 = \sqrt{7}\hbar\omega/5$.

4. Знайти варіаційним методом енергію і хвильову функцію основного стану частинки в симетричній потенціальній ямі шириною a скінченної глибини V_0. Як пробну функцію взяти $\varphi_0(x,\alpha) = A\exp\left(-\alpha|x|\right)$.

Розв'язання: з умови нормування знаходимо сталу A:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_0^2 dx = 2A^2\int_0^{\infty}\exp(-2\alpha x)dx = 1,\ A^2 = \alpha.$$

Середнє значення потенціальної енергії обчислюється таким чином:

$$\langle V(\alpha)\rangle = -A^2V_0\int_0^{a/2}\exp(-2\alpha x)dx = V_0\left[\exp(-\alpha a)-1\right]/2.$$

Середнє ж значення кінетичної енергії розраховується так:

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (авторська редакція для друку)

$$\left\langle T(\alpha)\right\rangle = -\frac{\hbar^2 A^2}{2\mu}\lim_{\varepsilon\to 0}\left\{\int_{-\infty}^{-\varepsilon}\exp(\alpha x)\frac{d^2}{dx^2}\exp(\alpha x)\,dx + \right.$$

$$\left. + \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\exp\left[-\alpha|x|\right]\frac{d^2}{dx^2}\exp\left[-\alpha|x|\right]dx + \int_{\varepsilon}^{\infty}\exp(-\alpha x)\frac{d^2}{dx^2}\exp(-\alpha x)\,dx\right\}.$$

Сумарне значення першого і третього інтегралів у цьому виразі буде α. Другий інтеграл обчислюється таким чином:

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\exp\left[-\alpha|x|\right]\frac{d^2}{dx^2}\exp\left[-\alpha|x|\right]dx = \frac{d}{dx}\exp\left[-\alpha|x|\right]\Big|_{-0}^{+0} = -2\alpha\,.$$

Після цього функція $J(\alpha) = \left\langle V(\alpha)\right\rangle + \left\langle T(\alpha)\right\rangle$ досліджується на екстремум і визначається енергія основного рівня

$$E_0 = \frac{\hbar^2\alpha_0^2}{2\mu} + \frac{V_0}{2}\left[\exp(-\alpha_0 a) - 1\right],$$

де α_0 є розв'язком трансцендентного рівняння:

$$2\hbar^2\alpha_0 / \mu a V_0 = \exp(-\alpha_0 a)\,.$$

Очевидно, що за довільної глибини V_0 це рівняння має розв'язок.

5. Частинка масою μ міститься в потенціальному полі $U(x) = U_0(x/a)^4$. Знайти за допомогою варіаційного методу енергію основного стану частинки, обравши пробну функцію у вигляді $\psi(x,\alpha) = A\exp\left(-x^2/2\alpha\right)$.

Відповідь: $E_0 = \frac{3}{4}\left(3U_0\hbar^4/4\mu^2 a^4\right)^{1/3}$.

6. Розрахувати варіаційним методом енергію зв'язаного стану в дельта-ямі $U(x) = -U_0\delta(x)$ $(U_0 > 0)$, використовуючи пробні функції: а) $\varphi(x,\alpha) = A\exp\left(-\alpha x^2/2\right)$; б) $\varphi(x,\alpha) = A\exp\left(-\alpha|x|\right)$.

Відповідь: а) $E_0 = -\mu U_0^2/\pi\hbar^2$; б) $E_0 = -\mu U_0^2/\hbar^2$.

7. Варіаційним методом розрахувати енергію зв'язаного стану в потенціалі $U(x) = -\alpha\left[\delta(x-b) + \delta(x+b)\right]$ для таких пробних

Навчально-методичний центр "Київський університет" (Серія "Не для друку")

функцій: а) $\varphi(x,\beta)=B\exp\left(-\beta|x|\right)$; б) функція у вигляді симетричного трикутника з вершиною при $x=0$.

Відповідь: а) $E_0=-\hbar^2\beta_0^2\left(1+2b\beta_0\right)/2\mu\left(1-2b\beta_0\right)$, де β_0 є розв'язком рівняння $\hbar^2\beta_0/2\mu\alpha=\left(1-2b\beta_0\right)\exp\left(-2b\beta_0\right)$ (при цьому $2b\beta_0<1$); б) записуючи нормовану пробну функцію у вигляді $\psi_0(x)=\sqrt{3/2\beta}\left[|x|/\beta-1\right]\theta\left(\beta-|x|\right)$, де $\theta(x)$ – функція Хевісайда, знаходимо $E_0=-3\hbar^2/2\mu\beta_0^2-3\alpha b\left(\beta_0-b\right)/\beta_0^3$, де

$$\beta_0=\frac{1}{2}\left(3b+\frac{\hbar^2}{\mu\alpha}+\sqrt{b^2+\frac{\hbar^4}{\mu^2\alpha^2}+\frac{6b\hbar^2}{\mu\alpha}}\right)>b.$$

8. Розрахувати варіаційним методом енергію основного стану в потенціалі $U(x)=-U_0\exp\left(-|x|/b\right)$ ($b>0$, $U_0>0$). Як пробну функцію взяти $\varphi(x,\alpha)=A\exp\left(-\alpha|x|\right)$.

Відповідь: $E_0=\hbar^2\alpha_0^2/2\mu-2\alpha_0U_0b/\left(1+\alpha_0b\right)$, де α_0 є розв'язком рівняння $4\mu U_0b/\alpha_0\hbar^2=\left(1+\alpha_0b\right)^2$.

9. Знайти варіаційним методом енергію основного стану частинки в полі $V(x)=V_0|x|/a$ ($a>0$), використовуючи пробні функції: а) $\psi(x,\alpha)=A\exp\left(-\alpha|x|\right)$; б) $\psi(x,\alpha)=A\exp\left(-x^2/2\alpha\right)$.

Відповідь: а) $E_0=3\left(\hbar^2V_0^2/\mu a^2\right)^{1/3}$; $E_0=\left(2\hbar V_0/a\sqrt{\pi\mu}\right)^{2/3}$.

10. Знайти варіаційним методом наближені значення енергій основного E_1 і першого збудженого E_2 рівнів частинки в нескінченно глибокій одновимірній потенціальній ямі шириною a, якщо пробні хвильові функції вибираються такими: $\psi_1(x)=Ax\left(a-x\right)$ і $\psi_2(x)=Bx\left(a-x\right)\left(a-2x\right)$ при $0\le x\le a$.

Відповідь: $E_1=5\hbar^2/\mu a^2$, $E_2=21\hbar^2/\mu a^2$.

Видання містить авторський цінний матеріал "Київського університету" (передача на користь Держави)

11. Знайти варіаційним методом наближене значення енергії основного стану частинки в нескінченно глибокій двовимірній потенціальній ямі $U(\rho)=0$ при $\rho \le R$ і $U(\rho)=\infty$ за $\rho > R$, користуючись пробною функцією $\psi(\rho,\alpha)=A\cos\alpha\rho$, $\rho \le R$.

Відповідь: $E_0=\pi^2\hbar^2\left(\pi^2+4\right)\Big/2\mu R^2\left(\pi^2-4\right)$.

12. Застосовуючи прямий варіаційний метод Рітца, знайти основний стан тривимірного гармонічного осцилятора, якщо пробна функція $\varphi(x)=A(1+\alpha r)\exp(-\alpha r)$.

Розв'язання: з умови нормування знаходимо сталу A:

$$\int|\varphi|^2 d\tau = 4\pi A^2\int_0^\infty (1+\alpha r)^2 r^2 \exp(-2\alpha r)dr = 7\pi A^2/\alpha^3 = 1,$$

$A^2=\alpha^3/7\pi$. Оператор енергії для тривимірного ізотропного осцилятора $\hat{H}=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+\dfrac{\mu\omega^2 r^2}{2}$. Унаслідок самоспряженості оператора $\hat{\vec{p}}$ можна зручно перетворити $\langle\hat{T}\rangle$:

$$\langle\hat{T}\rangle=\frac{1}{2\mu}\int\varphi^*\hat{\vec{p}}^2\varphi d\tau=\frac{1}{2\mu}\int\left|\hat{\vec{p}}\varphi\right|^2 d\tau=\frac{\hbar^2}{2\mu}\int|\nabla\varphi|^2\,d\tau.$$

Функція φ від кутів не залежить, тому $|\nabla\varphi|=A\alpha^2 r\exp(-\alpha r)$ і

$$\langle\hat{T}\rangle=\frac{\hbar^2}{2\mu}A^2\alpha^4 4\pi\int_0^\infty r^4\exp(-2\alpha r)dr=\frac{3}{14}\frac{\hbar^2\alpha^2}{\mu}.$$

Середнє значення потенціальної енергії $\langle\hat{V}\rangle$ дорівнює

$$\langle\hat{V}\rangle=\int\varphi^*\left(\mu\omega^2 r^2/2\right)\varphi d\tau=$$

$$=2\pi A^2\mu\omega^2\int_0^\infty(1+\alpha r)^2 r^4\exp(-2\alpha r)dr=81\mu\omega^2/28\alpha^2.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія PS для друку)

Таким чином, $J(\alpha) \equiv \left\langle \hat{H}(\alpha) \right\rangle = 3\hbar^2\alpha^2/14\mu + 81\mu\omega^2/28\alpha^2$. Параметр α_0, за якого функціонал $J(\alpha)$ досягає мінімального значення, визначається рівнянням

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{3}{14}\frac{\hbar^2\alpha^2}{\mu} + \frac{81}{28}\frac{\mu\omega^2}{\alpha^2}\right)\Bigg|_{\alpha_0} = 0$$

і є $\alpha_0^2 = 3\sqrt{3/2}\,(\mu\omega/\hbar)$, а $J(\alpha_0) = \left\langle \hat{H} \right\rangle_{\min} = \frac{9}{7}\sqrt{\frac{3}{2}}\hbar\omega \approx 1{,}575\hbar\omega$, що всього на 5 % більше за точне значення найменшого рівня енергії цієї задачі $E_0 = 3\hbar\omega/2$.

13. Варіаційним методом розв'язати задачу дейтрона. Взаємодія між протоном і нейтроном задається як $\hat{V}(r) = -A\exp(-r/a)$. Пробна функція $\varphi(r) = B\exp(-\alpha r/2a)$.

Розв'язання: умова нормування функції $\varphi(r)$ дає $B^2 = \alpha^3/8\pi a^3$. Складемо $d\varphi/dr = -(B\alpha/2a)\exp(-\alpha r/2a)$ і знайдемо $\left\langle \hat{T} \right\rangle$ і $\left\langle \hat{V} \right\rangle$:

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \left(\hbar^2\alpha^2 B^2/8\mu a^2\right)4\pi\int_0^\infty r^2\exp(-\alpha r/a)\,dr = \hbar^2\alpha^2/8\mu a^2,$$

$$\left\langle \hat{V} \right\rangle = -4\pi A B^2\int_0^\infty r^2\exp\left[-(\alpha+1)r/a\right]dr = -A\alpha^3/(1+\alpha)^3.$$

З умови мінімуму функції $J(\alpha) = \hbar^2\alpha^2/8\mu a^2 - A\alpha^3/(1+\alpha)^3$ одержуємо $\hbar^2\alpha_0/4\mu a^2 - 3A\alpha_0^2/(1+\alpha_0)^4 = 0$. Розв'язати це рівняння четвертого степеня щодо α_0 можливо тільки чисельним методом, для чого необхідні конкретні значення параметрів задачі. Тоді основний рівень енергії дейтрона дорівнюватиме $J(\alpha_0)$.

14. За допомогою варіаційного методу знайти енергію основного стану атома водню, використовуючи пробну функцію $\psi(r) = C\exp(-\alpha r)$.

Відповідь: $E_0 = -\mu e^4/2\hbar^2$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

15. Порівняти енергію основного стану електрона в атомі водню E_0, розраховану варіаційним методом за використання двох пробних функцій:

1) $\varphi_1(r) = A(1+\alpha r)\exp(-\alpha r)$; 2) $\varphi_2(r) = B\exp\left(-\alpha r^2/2\right)$.

Відповідь: $E_{01} = -27\mu e^4/56\hbar^2$, $E_{02} = -4\mu e^4/3\pi\hbar^2 > E_{01}$. Це означає, що φ_1 є кращим наближенням, ніж φ_2.

4.3. Стаціонарна теорія збурень без виродження

1. Для частинки, що перебуває в нескінченно глибокій ямі шириною a знайти в першому порядку теорії збурень зсув n-го енергетичного рівня під дією збурення вигляду $\hat{V}(x) = V_0\left(a - |2x-a|\right)/a$. Знайти критерій справедливості розв'язку.

Відповідь:

$$E_n^{(1)} = V_0\left[\frac{1}{2} + \frac{1+(-1)^n}{\pi^2(n+1)^2}\right],\ |V_0| << \pi^2\hbar^2(n+1)/\mu a^2,\ n = 0,1,\ldots.$$

2. На частинку в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a з абсолютно непрозорими стінками накладено збурення

$$\hat{V}(x) = \begin{cases} 0, 0 < x < a/3, 2a/3 < x < a; \\ V_0, a/3 \le x \le 2a/3. \end{cases}$$

Знайти поправку першого порядку до енергії основного стану.

Розв'язання: у нульовому наближенні хвильова функція частинки в основному стані має вигляд $\psi_1(x) = \sqrt{2/a}\sin(\pi x/a)$, тому поправка першого порядку до енергії $E_1^{(0)} = \pi^2\hbar^2/2\mu a^2$ запишеться як $E_1^{(1)} = \int_0^a \psi_1^* \hat{V}\psi_1 dx = \frac{2}{a}\int_0^a V(x)\sin^2(\pi x/a)dx$. Урахувуючи, що збурення діє лише в інтервалі $a/3 \le x \le 2a/3$, дістаємо

$$E_1^{(1)} = \frac{2V_0}{a}\int_{a/3}^{2a/3}\sin^2(\pi x/a)dx = V_0\left(1/3 + \sqrt{3}/2\pi\right).$$

Видавництво поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

3. На частинку масою μ в одновимірній потенціальній ямі з абсолютно непрозорими стінками і шириною a діє збурення $\hat{V}(x) = V_0 \cos(\pi x/a)$. Знайти поправки першого та другого порядків до енергії частинки.

Розв'язання: хвильові функції частинки мають вигляд

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a),\ n = 1, 2, \ldots,$$

тому матричні елементи оператора збурення $\hat{V}(x) = V_0 \cos(\pi x/a)$ записуються як

$$V_{nm} = \int_0^a \psi_n^* \hat{V} \psi_m dx = \frac{2V_0}{a}\int_0^a \cos\frac{\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi x}{a}dx .$$

Застосовуючи формули тригонометрії до добутку синусів, а потім до добутку косинусів, і враховуючи, що

$$\int_0^a \cos\left[(n_1 - n_2)\pi x/a\right]dx = a\delta_{n_1,n_2} ,$$

дістанемо $V_{nm} = (V_0/2)\left(\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1}\right)$. Тоді $E_n^{(1)} = V_{nn} = 0$. Поправка другого порядку $E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}\left[\left|V_{nm}\right|^2 \Big/ \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)\right]$, де $E_k^{(0)} = k^2\pi^2\hbar^2 \big/ 2\mu a^2$, після підстановки V_{nm} і підсумовування за m набуває вигляду $E_n^{(2)} = V_0^2 \Big/ E_1^{(0)}\left(4n^2 - 1\right)$.

4. Частинка перебуває в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a. На частинку діє потенціал збурення $\hat{V}(x) = V_0 \cos^2(\pi x/a)$. Знайти поправки першого та другого порядків до енергії частинки.

Розв'язання: хвильові функції частинки мають вигляд

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a),\ n = 1, 2, \ldots,$$

тому матричні елементи оператора збурення $\hat{V}(x) = V_0 \cos^2(\pi x/a)$ записуються як

$$V_{nm} = \int_0^a \psi_n^* \hat{V} \psi_m dx = \frac{2V_0}{a}\int_0^a \cos^2\frac{\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{m\pi x}{a}dx .$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Застосовуючи формули тригонометрії до добутку синусів, а потім до добутку косинусів, і враховуючи, що

$$\int_0^a \cos\left[\left(n_1 - n_2\right)\pi x/a\right]dx = a\delta_{n_1,n_2} ,$$

дістанемо $V_{nm} = \left(V_0/2\right)\left[\delta_{mn} + \left(\delta_{m,n+2} + \delta_{m,n-2} - \delta_{m,2-n}\right)/2\right]$. Таким чином, поправки першого порядку записуються у вигляді $E_n^{(1)} = V_0\left(1 - \delta_{n,2-n}/2\right)/2$. Поправка другого порядку

$$E_n^{(2)} = \sum\nolimits_{m\neq n}\left[\left|V_{nm}\right|^2 \Big/ \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)\right],$$

де $E_n^{(0)} = n^2\pi^2\hbar^2/2\mu a^2$, після підстановки V_{nm} і підсумовування за m, набуває вигляду

$$E_n^{(2)} = \left(V_0^2/64E_1^{(0)}\right)\left[\theta(n-3)/(n-1) - 1/(n+1)\right],$$

де $\theta(x)$ – функція Хевісайда.

5. Частинка перебуває в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a. На частинку діє збурювальний потенціал $\hat{V}(x) = V_0\delta(x - a/2)$. Знайти поправки першого і другого порядків до енергії частинки. Знайти критерій справедливості розв'язку.

Відповідь:

парні n: $E_n^{(1)} = 2V_0/a$, $E_n^{(2)} = 2\mu V_0^2/\pi^2\hbar^2(n+1)^2$;

непарні n: $E_n^{(1)} = E_n^{(2)} = 0$;

критерій справедливості розв'язку

$$\left|V_0\right| << \hbar^2(n+1)/\pi^2\mu a ,\ n = 0,1,\ldots .$$

6. Для частинки, що перебуває в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a, знайти в першому порядку теорії збурень зміщення рівнів під дією збурення з амплітудою V_0, розташоване в області шириною b на дні ями симетрично щодо її центра. Одержати критерій справедливості розв'язку.

Видавничо-поліграфічний центр Київського університету (версія та дизайн)

Відповідь: $E_n^{(1)} = \dfrac{V_0}{a}\left[a - 2b + \dfrac{a}{\pi(n+1)}\sin\dfrac{2\pi(n+1)}{a}b\right]$, критерій справедливості розв'язку $|V_0| << \pi^2\hbar^2(n+1)/\mu a^2$, $n = 0,1,\ldots$.

7. На заряджений гармонічний осцилятор накладено постійне слабке електричне поле напруженістю E. Розрахувати поправки першого та другого порядків до енергії електрона. Порівняти з точним результатом.

Розв'язання: для частинки із зарядом q у постійному електричному полі напруженістю E збурення буде $\hat{V}(x) = -qE\hat{x}$. Оскільки збурення є непарною функцією щодо змінної x, діагональні матричні елементи дорівнюють нулю, тому поправка першого порядку до енергії $E_n^{(1)} = 0$. Для визначення поправок другого порядку необхідно обчислити недіагональні матричні елементи збурення $V_{mn} = -qE\int\varphi_m^*(x)x\varphi_n(x)dx$. Використовуючи відомі значення матричних елементів координати для гармонічного осцилятора $x_{n,n+1} = x_{n+1,n} = \sqrt{\hbar(n+1)/2\mu\omega}$, маємо $E_n^{(2)} = -q^2E^2/2\mu\omega^2$. Оскільки цей результат збігається з точним, то поправки більш високих порядків дорівнюють нулю.

8. Знайти зсув основного рівня в слабкому електричному полі та поляризовність зарядженої частинки, яка перебуває в потенціальному полі $U(x) = -\alpha\delta(x)$.

Розв'язання: для основного рівня частинки в δ-потенціалі маємо

$$E_0^{(0)} = -\hbar^2\kappa^2/2\mu,\ \psi_0^{(0)}(x) = \sqrt{\kappa}\exp(-\kappa|x|),\ \kappa = \mu\alpha/\hbar^2.$$

Для обчислення його зсуву під дією збурення $\hat{V} = -e\hat{E}x$ у другому порядку (очевидно $E_0^{(1)} = 0$) як незбурені хвильові функції неперервного спектра обираємо функції $\psi_k(x) = \exp(ikx)/\sqrt{2\pi}$ $\left(E_k = \hbar^2k^2/2\mu\right)$. Тоді маємо

Київський університет (версія не для друку)

$$E_0^{(2)} \equiv -\beta_0 E^2/2 = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\langle k|eEx|0\rangle\right|^2 \Big/ \left(E_0^{(0)} - E_k\right) dk =$$

$$= \frac{2\mu\kappa e^2 E^2}{\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} \frac{dk}{\kappa^2 + k^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} x \sin kx \exp\left(-\kappa|x|\right) dx \right|^2 .$$

Використовуючи значення інтегралів

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \sin kx \exp\left(-\kappa|x|\right) dx = 4\kappa k \Big/ \left(\kappa^2 + k^2\right)^2 ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\left(x^2 + a^2\right)^{n+1}} = \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial a^{2n}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2 + a^2} = \frac{\pi(2n-1)!!}{2^n n! a^{2n+1}} , \; a > 0 ,$$

знаходимо поляризовність $\beta_0 = 5\mu e^2/4\hbar^2\kappa^2$.

9. Частинка перебуває в одновимірному гармонічному осциляторі в основному стані. На систему діє збурення $\hat{V}(x) = V_0\delta(x)$. Знайти поправки першого та другого порядків до енергії частинки.

Розв'язання: у нульовому наближенні хвильова функція частинки в основному стані має вигляд

$$\psi_0(x) = \exp\left(-x^2/2b^2\right) \Big/ \sqrt{b\sqrt{\pi}} ,$$

де $b = \left(\hbar/\mu\omega\right)^{1/2}$. Поправкою першого порядку до енергії $E_0^{(0)} = \hbar\omega/2$ є

$$E_0^{(1)} = \left(V_0/b\sqrt{\pi}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \exp\left(-x^2/b^2\right) dx = V_0/b\sqrt{\pi} .$$

Поправка другого порядку до енергії основного стану обчислюється за формулою

$$E_0^{(2)} = \sum\nolimits_{n\neq 0} \left[\left|V_{0,2n}\right|^2 \Big/ \left(E_0^{(0)} - E_{2n}^{(0)}\right) \right],$$

де $E_{2n}^{(0)} = \hbar\omega\left(2n + 1/2\right)$, а матричні елементи потенціалу збурення на хвильовій функції основного стану $\psi_0(x)$ і парних хвильових функціях збуджених станів

Видавничий поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\psi_{2n}(x)=\left[2^{2n}(2n)!\sqrt{\pi}b\right]^{-1/2}H_{2n}(x/b)\exp\left(-x^2/2b^2\right),$$

де $H_n(x)$ – поліноми Ерміта, які обчислюються так:

$$V_{0,2n}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0\hat{V}\psi_{2n}=V_0H_{2n}(0)\Big/b2^n\sqrt{\pi(2n)!}\,.$$

Ураховуючи, що $H_{2n}(0)=(-1)^n(2n)!\big/n!$, і використовуючи степеневий ряд

$$\sum_{k=1}^{\infty}\left[(2k)!\big/(k!)^2k\right]x^k=1/2-x-(1-4x)^{1/2}\big/2\ \ \left(|x|\le 1/4\right),$$

знаходимо

$$E_0^{(2)}=-\frac{\mu V_0^2}{2\pi\hbar^2}\sum_{n=1}^{\infty}\left[(2n)!\big/(n!)^2n2^{2n}\right]=-\mu V_0^2\big/8\pi\hbar^2\,.$$

10. Плоский ротатор з моментом інерції I та електричним дипольним моментом $\vec{d}$ розміщений у слабкому однорідному електричному полі $\vec{E}$, напрямленому вздовж осі x. Заряд частинки e; відстань від початку координат a. Обчислити поправки до енергії ротатора в першому та другому наближеннях (записати також хвильові функції з точністю до першого наближення). Знайти поляризовність основного стану ротатора.

Розв'язання: для незбуреного ротатора маємо

$$\Psi_m^{(0)}=\exp(im\varphi)\big/\sqrt{2\pi}\,,\ E_m^{(0)}=\hbar^2m^2\big/2I\,,\ m=0,\pm1,\ldots,$$

де $I=\mu a^2$ – момент інерції. Збурення $\hat{V}=-\vec{d}\vec{E}=-ea\left|\vec{E}\right|\cos\varphi$. Користуючись формулою $\cos\varphi=\left[\exp(i\varphi)+\exp(-i\varphi)\right]\big/2$, знаходимо, що матричні елементи $V_{mm'}$ відмінні від нуля лише для значень $m'=m\pm1$ і рівні при цьому $-ea\left|\vec{E}\right|\big/2$. Таким чином, енергетичні рівні та хвильові функції збуреного ротатора записуються у вигляді

$$E_m=E_m^{(0)}+e\vec{E}^2a^4\mu\big/\hbar^2\left(4m^2+1\right),$$

$$\Psi_m=\Psi_m^{(0)}+\frac{\mu a^3e\left|\vec{E}\right|}{\hbar^2\sqrt{2\pi}}\left\{\frac{\exp\left[i(m-1)\varphi\right]}{2m-1}-\frac{\exp\left[i(m+1)\varphi\right]}{2m+1}\right\}.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Відповідно поляризовність основного стану ротатора (при $m=0$) буде $\beta_0 = 2e^2a^2I/\hbar^2$.

11. Знайти першу, відмінну від нуля, поправку до енергії основного стану просторового ротатора з моментом інерції I та електродинамічним моментом $\vec{d}$, на який накладено електричне поле напруженістю $\vec{E}$.

Розв'язання: хвильова функція основного стану просторового ротатора має вигляд $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$, а оператор збурення записується як $\hat{V} = -\vec{d}\vec{E} = -Ed\cos\theta$. Тоді маємо

$$E_0^{(1)} = V_{00} = \int Y_{00}^* \hat{V} Y_{00} d\Omega = -\left(Ed/4\pi\right)\int_0^{\pi}\cos\theta\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\varphi = 0.$$

Поправка другого порядку в цьому випадку має вигляд

$$E_0^{(2)} = \sum\nolimits_{l,m}\left[\left|V_{0,lm}\right|^2 \Big/ \left(E_0^{(0)} - E_l^{(0)}\right)\right].$$

Для значень $l=1$, $m=0$ маємо $Y_{10} = \sqrt{3/4\pi}\cos\theta$, тому

$$V_{0,10} = \int Y_{00}\hat{V}Y_{10}d\Omega = -\left(Ed\sqrt{3}/4\pi\right)\int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\varphi = Ed/\sqrt{3}.$$

Ураховуючи, що $E_0^{(0)} = \hbar^2 l(l+1)/2I$, маємо $E_0^{(0)} = 0$, $E_1^{(0)} = \hbar^2/I$. Таким чином, $E_0^{(2)} = -IE^2d^2/3\hbar^2$.

12. Знайти поправку до рівнів енергії атома водню за рахунок релятивістської залежності маси частинки від швидкості в першому порядку теорії збурень.

Розв'язання: оператор потенціалу збурення визначається на основі розкладу функції Гамільтона

$$H(\vec{r},\vec{p}) = \left(\vec{p}^2c^2 + \mu^2c^4\right)^{1/2} - e^2/|\vec{r}| \approx p^2/2\mu - e^2/r - p^4/8\mu^3c^2,$$

а саме: $\hat{V} = -\hat{\vec{p}}^4/8\mu^3c^2$. За використання виразу для оператора незбуреної задачі $\hat{H}_0 = \hat{\vec{p}}^2/2\mu - e^2/r$ поправку до рівнів енергії атома водню в першому порядку теорії збурень можна записати таким чином:

Видано у друкарському центрі Київського університету. Цей екземпляр призначений для студентів

$$E_{n_r l}^{(1)} = \int \psi_{n_r lm}^{(0)*} \hat{V} \psi_{n_r lm}^{(0)*} d\vec{r} = -\frac{1}{2\mu c^2} \left\langle n_r lm \left| \left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} \right)^2 \right| n_r lm \right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2\mu c^2} \left\langle n_r lm \left| \left(\hat{H}_0 + \frac{e^2}{r} \right)^2 \right| n_r lm \right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2\mu c^2} \left\langle n_r lm \left| \hat{H}_0^2 + \frac{\hat{H}_0 e^2}{r} + \frac{e^2 \hat{H}_0}{r} + \frac{e^4}{r^2} \right| n_r lm \right\rangle .$$

Ураховуючи ермітовість оператора гамільтона $\hat{H}_0$, маємо

$$\int \psi_n^{(0)*} \hat{H}_0 \frac{e^2}{r} \psi_n^{(0)} d\vec{r} = \int \left(\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} \right)^* \frac{e^2}{r} \psi_n^{(0)} d\vec{r} = E_n^{(0)} \int \frac{e^2}{r} \left| \psi_n^{(0)} \right|^2 d\vec{r} ,$$

тобто доведено рівність другого і третього доданків у виразі для поправки $E_{n_r l}^{(1)}$. Далі, користуючись теоремою

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_{f_n}(\lambda) \left| \frac{\partial \hat{f}}{\partial \lambda} \right| \psi_{f_n}(\lambda) \right\rangle ,$$

а також явним виразом для оператора гамільтона

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} ,$$

знаходимо такі матричні елементи:

$$\int (1/r) \left| \psi_n^{(0)} \right|^2 d\vec{r} = -2E_n^{(0)} / e^2 ,$$

$$\int \left(1/r^2 \right) \left| \psi_n^{(0)} \right|^2 d\vec{r} = -4\mu E_n^{(0)} / (2l+1) \hbar^2 n .$$

Таким чином, маємо

$$E_{n_r l}^{(1)} = E_n^{(0)} \left(e^2/\hbar c \right)^2 \left[-3/4n^2 + 2/n(2l+1) \right] .$$

13. Частинка перебуває в центральному потенціалі вигляду $U(r) = -U_0 / \left[\exp(r/a) - 1 \right]$, який відповідає умові $U_0 >> \hbar^2 / \mu a^2$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (вилучено для друку)

У першому порядку теорії збурень знайти відмінність енергетичних рівнів нижньої частини спектра від рівнів у кулонівському полі $U(r)=-U_0 a/r$, якщо взяти до уваги, що середнє значення r у кулонівському полі дорівнює $\langle r\rangle=\hbar^2\left[3n^2-l(l+1)\right]\Big/2\mu a U_0$.

Розв'язання: за $r<<a$ потенціал $U(r)=-U_0\Big/\left[\exp(r/a)-1\right]$ (потенціал Хюльтена) набуває вигляду $U(r)\approx -U_0 a/r$, що видно з розкладу $U(r)=-U_0\Big/(1+r/a+...-1)\approx -U_0 a/r$. Це означає, що хвильові функції для нижніх енергетичних рівнів, які локалізовані на відстанях порядку $r_n\approx\hbar^2 n^2\Big/\mu U_0 a^2$, у нульовому наближенні збігаються із хвильовими функціями в кулонівському полі, тобто $\psi^{(0)}_{nlm}(r,\theta,\varphi)=\psi^{\text{кул}}_{nlm}(r,\theta,\varphi)$.

Таким чином, відмінність енергетичних рівнів нижньої частини спектра від рівнів $E_n^{(0)}=-\mu a^2 U_0^2\Big/2\hbar^2 n^2$ у кулонівському полі $U(r)=-U_0 a/r$ у першому порядку теорії збурень визначається виразом

$$E_n^{(1)}=\int W(r)\left|\psi^{(0)}_{nlm}\right|^2 d\vec{r},$$

де

$$W(r)=\frac{U_0 a}{r}-\frac{U_0}{\left[\exp(r/a)-1\right]}=-U_0\left[-\frac{1}{2}+\frac{r}{12a}+O\left(\frac{r^3}{a^3}\right)\right].$$

Ураховуючи $\int r\left|\psi^{(0)}_{nlm}\right|^2 d\vec{r}=\langle r\rangle=\hbar^2\left[3n^2-l(l+1)\right]\Big/2\mu a U_0$, $E_n^{(1)}$ набуває вигляду $E_n^{(1)}=U_0\left\{1/2-\hbar^2\left[3n^2-l(l+1)\right]\Big/24\mu a^2 U_0\right\}$.

Зауважимо, що внесок доданка $\sim r^3\Big/a^3$ був би перевищенням точності, тому що цей додатковий зсув рівня дає таку саму за порядком величину, як і поправка другого наближення теорії збурень.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

14. Частинка перебуває в центральному потенціалі вигляду $U(r) = -U_0 a \exp(-r/a)/r$, який відповідає умові $U_0 >> \hbar^2/\mu a^2$. У першому порядку теорії збурень знайти відмінність енергетичних рівнів нижньої частини спектра від рівнів у кулонівському полі $U(r) = -U_0 a/r$, якщо взяти до уваги, що середні значення r і r^2 у ньому дорівнюють

$$\langle r \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu a U_0}\left[3n^2 - l(l+1)\right],$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\hbar^4 n^2}{2\mu^2 a^2 U_0^2}\left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right].$$

Розв'язання: розкладаємо потенціал збурення

$$W(r) = U(r) + U_0 a/r$$

у ряд Тейлора за степенями r/a:

$$W(r) = \frac{U_0 a}{r} - \frac{U_0 a}{r}\exp(r/a) \approx U_0\left[1 - \frac{r}{2a} + \frac{r^2}{6a^2} + O\left(\frac{r^3}{a^3}\right)\right].$$

Таким чином, вираз $E_n^{(1)} = \int W(r)\left|\psi_{nlm}^{(0)}\right|^2 d\vec{r}$ дорівнює

$$E_n^{(1)} = U_0\left\{1 - \frac{\hbar^2\left[3n^2 - l(l+1)\right]}{4\mu a^2 U_0} + \frac{n^2\hbar^4\left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right]}{12\mu^2 a^4 U_0^2}\right\}.$$

15. Застосовуючи стаціонарну теорію збурень, знайти у першому та другому наближеннях рівні енергії та хвильові функції частинки в полі $V(x) = \mu\omega^2 x^2/2 + \varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x^4$ (ангармонічний осцилятор).

Відповідь:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) + 3\varepsilon_2\left(\hbar/2\mu\omega\right)^2\left(2n^2 + 2n + 1\right) -$$

$$-\left(\varepsilon_1^2/\hbar\omega\right)\left(\hbar/2\mu\omega\right)^3\left(30n^3 + 30n + 11\right).$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (копія не для друку)

4.4. Стаціонарна теорія збурень за наявності виродження

1. Знайти в першому наближені поправки до енергії та до хвильової функції електрона в періодичному полі $\hat{V}(\vec{r})$, вважаючи це поле збуренням. Постійна ґратки a. Розглянути випадок рівності двох рівнів незбуреної задачі $E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}$, де $\vec{g}$ – вектор оберненої ґратки, $\vec{g}\cdot\vec{a} = n$.

Розв'язання: розв'язок незбуреної задачі записується таким чином: $\psi_{\vec{k}}^{(0)} = \exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right)\Big/\sqrt{L^3}$, $E_{\vec{k}}^{(0)} = \hbar^2 k^2 \big/ 2\mu$. Щоб зробити спектр дискретним, застосовуємо умову періодичності $\psi_{\vec{k}}^{(0)}(x+L) = \psi_{\vec{k}}^{(0)}(x)$. Для обчислення матричних елементів енергії збурення розкладаємо її в ряд Фур'є:

$$\hat{V}(\vec{r}) = \sum\nolimits_{\vec{g}} \hat{V}_{\vec{g}} \exp\left(2\pi i\vec{g}\vec{r}\right).$$

Тоді маємо

$$\left\langle \vec{k}' \middle| \hat{V} \middle| \vec{k} \right\rangle = \sum\nolimits_{\vec{g}} \hat{V}_{\vec{g}} \frac{1}{L^3} \int_{L^3} \exp\left[i\left(\vec{k} - \vec{k}' + 2\pi\vec{g}\right)\vec{r} \right] = \hat{V}_{\vec{g}_0},$$

де $2\pi\vec{g}_0 = \vec{k}' - \vec{k}$, а розв'язок збуреної задачі такий:

$$\psi_{\vec{k}} = \psi_{\vec{k}}^{(0)}(x) + \frac{2\mu}{\hbar^2\sqrt{L^3}} \sum\nolimits_{\vec{g}\neq 0} \frac{\hat{V}_{\vec{g}} \exp\left[i\left(\vec{k} + 2\pi\vec{g}\right)\vec{r} \right]}{\vec{k}^2 - \left(\vec{k} + 2\pi\vec{g}\right)^2},$$

$$E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}}^{(0)} + V_{\vec{0}} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \sum\nolimits_{\vec{g}\neq 0} \frac{\left|\hat{V}_{\vec{g}}\right|^2}{\vec{k}^2 - \left(\vec{k} + 2\pi\vec{g}\right)^2}.$$

Якщо $E_{\vec{k}}^{(0)} = E_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}^{(0)}$, то хвильову функцію збуреної задачі необхідно шукати у вигляді $\psi = C_1\psi_{\vec{k}}^{(0)} + C_2\psi_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}^{(0)}$. Тоді із вікового

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

рівняння $\left(E_{\vec{k}}^{(0)} - E + V_{\vec{0}}\right)^2 - \left|\hat{V}_{\vec{g}}\right|^2 = 0$ знаходимо енергії $E_{\vec{k}}^{(1,2)} = E_{\vec{k}}^{(0)} + V_{\vec{0}} \pm \left|\hat{V}_{\vec{g}}\right|$. Їм відповідають такі хвильові функції: $\psi_{\vec{k}}^{(1,2)} = \frac{1}{\sqrt{2L^3}}\left\{\exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right) \pm \exp\left[i\left(\vec{k} + 2\pi\vec{g}\right)\vec{r}\right]\right\}$. Спектр електрона в періодичному полі має заборонені смуги поблизу $\vec{k}\cdot\vec{g} = -\vec{g}^2$, ширини яких дорівнюють $2\left|\hat{V}_{\vec{g}}\right|$.

2. Атом водню перебуває в однорідному електричному полі $\vec{E}$, напрямленому вздовж осі z. Знайти розщеплення енергетичного рівня з головним квантовим числом $n = 2$.

Розв'язання: за відсутності поля незбурена задача має n^2-кратне виродження власних значень; тоді числу $n = 2$ відповідають чотири власні функції, які є розв'язками рівняння Шредінгера $\hat{H}_0\psi_{2lm} = E_2^0\psi_{2lm}$. Виписуємо їх детальніше:

$$\psi_1^0 = \psi_{100} = R_{20}(r);\ \psi_2^0 = \psi_{210} = R_{21}(r)P_{10}(\cos\theta) = R_{21}(r)\cos\theta;$$

$$\psi_3^0 = \psi_{211} = R_{21}\sin\theta\exp(i\varphi);\ \psi_4^0 = \psi_{21-1} = R_{21}\sin\theta\exp(-i\varphi).$$

Вибираючи вісь z уздовж напрямку зовнішнього електричного поля $\vec{E}$, у яке поміщено атом водню, оператор $\hat{H}$ збуреної задачі записуємо у вигляді $\hat{H} = \hat{H}_0 - e\left|\vec{E}\right|z$; очевидно, $\hat{W} = -e\left|\vec{E}\right|z$. Власні функції цього оператора необхідно шукати у вигляді лінійної комбінації $\psi = \sum_{i=1}^{4} c_i\psi_i^0$, а енергетичні рівні обчислюються з умови рівності нулю такого визначника:

$$\left|\left(E_2^0 - E\right)\delta_{ik} + \left\langle i\left|\hat{W}\right|k\right\rangle\right| = 0 \quad (i,k = 1,2,3,4).$$

Це так зване (секулярне) рівняння. Очевидно, $\left\langle i\left|\hat{W}\right|k\right\rangle$ може бути представлений у вигляді добутку інтегралів по r, θ і φ:

$$\left\langle i\left|\hat{W}\right|k\right\rangle = -e\left|\vec{E}\right|\int\psi_i^{0*}z\psi_k^0 d\tau = -e\left|\vec{E}\right|I_r I_\theta I_\varphi.$$

Видавничо-поліграфічний центр Київського університету (Друкується для довідок)

Оскільки $z = r\cos\theta$ від φ не залежить, то

$$I_\varphi = \int_0^{2\pi} \exp(-im\varphi)\exp(im'\varphi)d\varphi = 0 \text{ для } m \neq m'.$$

Отже, $\langle 1|\hat{W}|3\rangle = \langle 1|\hat{W}|4\rangle = \langle 2|\hat{W}|3\rangle = \langle 2|\hat{W}|4\rangle = \langle 3|\hat{W}|4\rangle = 0$. Окрім того, якщо $m \neq m'$ і $l \neq l'$, то

$$I_\theta = \int_0^\pi P_{lm}(\cos\theta)\cos\theta P_{lm}(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \int_{-1}^1 |P_{lm}(x)|^2 x dx = 0,$$

оскільки підінтегральна функція непарна. Отже, $\langle k|\hat{W}|k\rangle = 0$. Відрізнятися від нуля можуть лише $\langle 1|\hat{W}|2\rangle$ і $\langle 2|\hat{W}|1\rangle$:

$$\langle 1|\hat{W}|2\rangle = -e|\vec{E}|\int_0^\infty R_{20}R_{21}r^3 dr \int_0^\pi \cos^2\theta\sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = -\frac{4\pi}{3}e|\vec{E}|I_r.$$

Записуючи явно нормовані радіальні функції для атома водню:

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right),$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\frac{r}{2a_0}\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right),$$

а також ураховуючи $\int_0^\infty r^n \exp(-r/a_0)dr = n!a_0^{n+1}$, знаходимо

$$I_r = \frac{1}{16\pi a_0^4}\int_0^\infty r^4\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)dr = -\frac{9a_0}{4\pi}.$$

Отже, $\langle 1|\hat{W}|2\rangle = \langle 2|\hat{W}|1\rangle = 3e|\vec{E}|a_0$. Нарешті, розв'язуючи вікове рівняння

$$\begin{vmatrix} E_2^0 - E & 3e|\vec{E}|a_0 & 0 & 0 \\ 3e|\vec{E}|a_0 & E_2^0 - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^0 - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2^0 - E \end{vmatrix} = 0,$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Електронне видання)

одержуємо $E' = E_2^0 + 3e\left|\vec{E}\right|a_0$, $E'' = E_2^0 - 3e\left|\vec{E}\right|a_0$, $E''' = E^{IV} = E_2^0$. Відповідні їм хвильові функції дорівнюють $\psi' = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1^0 + \psi_2^0\right)$, $\psi'' = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1^0 - \psi_2^0\right)$, $\psi''' = c_3'''\psi_3^0 + c_4'''\psi_4^0$, $\psi^{IV} = c_3^{IV}\psi_3^0 + c_4^{IV}\psi_4^0$.

3. Показати, що для атомів першої групи, у яких рівні енергії E_{nl} визначаються числами n і l, лінійний ефект Штарка відсутній (ефект Штарка – розщеплення рівнів енергії в зовнішньому однорідному електричному полі).

Розв'язання: за відсутності поля рівняння Шредінгера (для незбуреної задачі) $\left[-\hbar^2\Delta/2\mu + \hat{V}(r)\right]\psi = \hat{H}_0\psi = E_{nl}\psi$ має вироджені власні значення – кожному рівню енергії E_{nl} відповідає $(2l+1)$ власних функції ψ_{nlm}, які відрізняються різними m за одних і тих самих n і l. Таким чином, хвильову функцію збуреної задачі необхідно шукати у вигляді $\psi = \sum_{m=-l}^{l} c_m\psi_{nlm}$. Для атома в зовнішньому електричному полі $\vec{E}$ рівняння має вигляд $\left(\hat{H}_0 - e\left|\vec{E}\right|z\right)\psi = E\psi$, де $\hat{W} = -e\left|\vec{E}\right|z$ – збурення (поле напрямлено вздовж осі z). Рівні E одержуємо, прирівнюючи до нуля визначник $\left|\left(E_{nl} - E\right)\delta_{mm'} + \left\langle m\left|\hat{W}\right|m'\right\rangle\right| = 0$; очевидно,

$$\left\langle m\left|\hat{W}\right|m'\right\rangle = -e\left|\vec{E}\right|\int \psi_{nlm}^* z\psi_{nlm}d\tau = -e\left|\vec{E}\right|I_r I_\theta I_\varphi .$$

Для $m \neq m'$ $I_\varphi = \int_0^{2\pi}\exp(-im\varphi)\exp(im'\varphi)d\varphi = 0$. Для $m = m'$ маємо

$$I_\theta = \int_0^\pi P_{lm}(\cos\theta)\cos\theta P_{lm}(\cos\theta)\sin\theta d\theta = \int_{-1}^{1}\left|P_{lm}(x)\right|^2 xdx = 0,$$

оскільки підінтегральна функція непарна.

Таким чином, рівняння для E зводиться до рівняння $\left(E_{nl} - E\right)^{2l+1} = 0$, тобто $E = E_{nl}$. Це означає, що розщеплення

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

у цьому наближенні рівня енергії в зовнішньому електричному полі відсутнє.

4. У першому порядку теорії збурень знайти поправки до енергії основного і першого збудженого станів водневоподібного (із зарядом Ze) атома, вважаючи ядро рівномірно зарядженою сферою радіуса R.

Розв'язання: визначаючи напруженість електричного поля всередині ядра за теоремою Гаусса і вимагаючи неперервності потенціалу при $r = R$, знаходимо, що при $r < R$ потенціальна енергія електрона має вигляд $\hat{U}(r) = -\left(3Ze^2/2R\right)\left[1 - r^2/3R^2\right]$, тобто енергія збурення дорівнює $\hat{W}(r) = \left[Ze^2/r - \hat{U}(r)\right]\theta(R-r)$, де $\theta(x)$ – функція Хевісайда. Поправка до основного рівня $(n=1)$ обчислюється на $\psi_0 = \psi_{100} = \sqrt{Z^3/\pi a_0^3}\exp(-r/a_0)$ і дорівнює $\left\langle 0\middle|\hat{W}\middle|0\right\rangle$. Оскільки $R \sim 10^{-12}$ см, а $a_0 \sim 10^{-8}$ см, то при обчисленні інтеграла експоненту можна замінити одиницею, і тоді

$$E_0^{(1)} = -\frac{4}{5}E_0^{(0)}\left(R/a_0\right)^2 Z^2 .$$

Навіть при $Z \sim 100$ маємо $E_0^{(1)}/E_0^{(0)} \sim 10^{-4}$.

Для чотирикратно виродженого рівня $(n=2)$ поправки визначаються із характеристичного рівняння і дорівнюють $\left\langle 1\middle|\hat{W}\middle|1\right\rangle$ та $\left\langle 2\middle|\hat{W}\middle|2\right\rangle = \left\langle 3\middle|\hat{W}\middle|3\right\rangle = \left\langle 4\middle|\hat{W}\middle|4\right\rangle$ (ненульовими є тільки діагональні матричні елементи $W(r)$). Нехтуючи членами порядку R/a_0 порівняно з одиницею, поправки дорівнюватимуть

$$E_1^{(1)} = \frac{Z^4e^2}{20a_0}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2, \ (l=0);$$

$$E_2^{(1)} = \frac{Z^2e^2}{1120a_0}\left(\frac{ZR}{a_0}\right)^4, \ (l=1).$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Зверсна назва фірми)

Таким чином, рівень з $(n=2)$ розщеплюється на два підрівні, енергія залежить не тільки від n, але й від l.

5. Визначити зумовлені збуренням $\hat{V}$ поправки першого наближення до енергії та правильні хвильові функції нульового наближення для двократно виродженого рівня.

Розв'язання: якщо за відсутності збурення $\hat{V}$ рівню енергії $E_n^{(0)}$ відповідають дві хвильові функції $\psi_{n1}^{(0)}$ і $\psi_{n2}^{(0)}$, то за наявності збурення він розщеплюється на два підрівні з енергіями $E_{n1}=E_n^{(0)}+E_{n1}^{(1)}$ і $E_{n2}=E_n^{(0)}+E_{n2}^{(1)}$. При цьому поправки першого наближення $E_{n1,2}^{(1)}$ визначаються на основі вікового рівняння:

$$\begin{vmatrix} V_{11}-E_n^{(1)} & V_{21} \\ V_{12} & V_{22}-E_n^{(1)} \end{vmatrix}=0,$$

де $V_{\alpha\beta}=\int \psi_{n\alpha}^{(0)*}\hat{V}\psi_{n\beta}^{(0)}d\tau$, $\alpha,\beta=1,2$. Розв'язуючи це рівняння, знаходимо $E_{n1,2}^{(1)}=\left[V_{11}+V_{22}\pm\hbar\omega_n^{(1)}\right]\Big/2$, де через $\hbar\omega_n^{(1)}$ позначена різниця двох значень поправки $E_n^{(1)}$, а саме:

$$\hbar\omega_n^{(1)}=\left[\left(V_{11}-V_{22}\right)^2+4\left|V_{12}\right|^2\right]^{1/2}.$$

Правильні хвильові функції нульового наближення для рівнів E_{n1} і E_{n2} записуються як $\psi_{n1,2}=c_1^{(1,2)}\psi_{n1}^{(0)}+c_2^{(1,2)}\psi_{n2}^{(0)}$, де коефіцієнти $c_{(1,2)}^{(1,2)}$ визначаються системою рівнянь

$$\left(V_{11}-E_{nj}^{(1)}\right)c_1^{(j)}+V_{21}c_2^{(j)}=0,$$

$$V_{12}c_1^{(j)}+\left(V_{22}-E_{nj}^{(1)}\right)c_2^{(j)}=0,$$

тобто маємо

$$c_1^{(1,2)}=\left\{\left(V_{12}/2\left|V_{12}\right|\right)\left[1\pm\left(V_{11}-V_{22}\right)\Big/\hbar\omega_n^{(1)}\right]\right\}^{1/2},$$

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

$$c_2^{(1,2)} = \pm\left\{\left(V_{21}/2|V_{12}|\right)\left[1 \mp \left(V_{11} - V_{22}\right)/\hbar\omega_n^{(1)}\right]\right\}^{1/2}.$$

6. Знайти поправки до енергій двох близьких рівнів $E_1^{(0)}$ та $E_2^{(0)}$, зумовлені незалежним від часу збуренням $\hat{V}$.

Розв'язання: обчислення поправок до енергій двох близьких рівнів $E_1^{(0)}$ та $E_2^{(0)}$ за формулою

$$E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum\nolimits_{k \neq n}\left[|V_{kn}|^2 \Big/ \left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\right]$$

неможливе, оскільки не виконується критерій застосування стаціонарної теорії збурень $V_{12} << E_1^{(0)} - E_2^{(0)}$.

Однак, нехтуючи різницею енергій $E_1^{(0)} - E_2^{(0)}$, рівні $E_1^{(0)}$ і $E_2^{(0)}$ можна розглядати як один рівень, але двократно вироджений, і застосовувати розрахунки попередньої задачі, згідно із формулами якої

$$E_{1,2} = E_{1,2}^{(0)} + \left(V_{11} + V_{22}\right)/2 \pm \left[|V_{12}|^2 + \left(V_{11} - V_{22}\right)^2/4\right]^{1/2}.$$

7. Одержати и формули для поправок першого наближення до функцій і формули другого наближення до власних значень.

Розв'язання: вважатимемо, що функції $\psi_n^{(0)}$ є правильними функціями нульового наближення. Розрахована за їх допомогою матриця $V_{nn'}$, очевидно, діагональна за індексами n, n' (вони належать до однієї й тієї ж групи функцій виродженого рівня), причому діагональні елементи V_{nn}, $V_{n'n'}$ дорівнюють відповідним поправкам першого наближення $E_n^{(1)}$, $E_{n'}^{(1)}, \ldots$.

Розглянемо збурення власної функції $\psi_n^{(0)}$ так, щоб у нульовому наближенні $E = E_n^{(0)}$, $c_n^{(0)} = 1$, $c_m^{(0)} = 0$ при $m \neq n$. У першому наближенні $E = E_n^{(0)} + V_{nn}$, $c_n = 1 + c_n^{(1)}$, $c_m = c_m^{(1)}$. Із загаль-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

ної системи рівнянь $\left(E-E_k^{(0)}\right)c_k=\sum_m V_{km}c_m$ запишемо рівняння з $k\neq n,n',\ldots$, зберігаючи в ньому члени першого порядку $\left(E_n^{(0)}-E_k^{(0)}\right)c_k^{(1)}=V_{kn}c_n^{(0)}=V_{kn}$, звідки $c_k^{(1)}=\dfrac{V_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$ при $k\neq n,n',\ldots$. Далі, випишемо рівняння з $k=n'$, зберігаючи в ньому члени другого порядку $E_n^{(1)}c_{n'}^{(1)}=V_{n'n'}c_{n'}^{(1)}+\sum_m{}' V_{n'm}c_m^{(1)}$ (у сумі за m відсутні члени з $m=n,n',\ldots$). Підставляючи $E_n^{(1)}=V_{nn}$ і вираз для $c_m^{(1)}$, одержимо при $n'\neq n$:

$$c_{n'}^{(1)}=\frac{1}{\left(V_{nn}-V_{n'n'}\right)}\sum_m{}'\frac{V_{n'm}V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$

(коефіцієнт $c_n^{(1)}$ у цьому наближенні дорівнює нулю).

Таким чином, одержані формули для $c_k^{(1)}$ і $c_{n'}^{(1)}$ визначають поправку $\psi_n^{(1)}=\sum_m c_m^{(1)}\psi_m^{(0)}$ першого наближення до власних функцій. Зазначимо, що умова мализни величин $c_k^{(1)}$ і $c_{n'}^{(1)}$ (а також умова застосовності розглядуваного методу теорії збурень) вимагає дотримання умов $\left|V_{mn}\right|<<\left|E_n^{(0)}-E_m^{(0)}\right|$ лише для переходів між станами, які належать до різних рівнів енергії. Переходи ж між станами, які належать до одного і того самого виродженого рівня, досить точно обчислюються віковим рівнянням.

Нарешті, виписуючи члени другого порядку в рівнянні $\left(E-E_k^{(0)}\right)c_k=\sum_m V_{km}c_m$ з $k=n$, одержуємо для поправки другого порядку до енергії формулу $E_n^{(2)}=\sum_m{}'\dfrac{V_{nm}V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$.

8. У початковий момент часу $t=0$ система перебуває в стані $\psi_1^{(0)}$, який належить до двократно виродженого рівня. Визначи-

Видавничо-поліграфічний центр
"Київський університет"
Версія не для друку

ти ймовірність того, що в подальший момент часу t система перебуватиме в другому стані $\psi_2^{(0)}$ з тією ж енергією, якщо перехід відбувається під впливом постійного збурення.

Розв'язання: складаємо правильні функції нульового наближення $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, $\psi' = c_1'\psi_1 + c_2'\psi_2$, де c_1, c_2 і c_1', c_2' – дві пари коефіцієнтів, які визначаються формулами задачі 5 (верхні індекси (0) у всіх величин для стислості опускаємо). Навпаки: $\psi_1 = \dfrac{c_2'\psi - c_2\psi'}{c_1c_2' - c_1'c_2}$. Функції ψ і ψ' стосуються станів зі збуреними енергіями $E + E^{(1)}$ і $E + E^{(1)\prime}$, де $E^{(1)}$, $E^{(1)\prime}$ – два значення із задачі 5. Вводячи часові множники, переходимо до хвильової функції, яка залежить від часу

$$\Psi_1 = \frac{\exp\left(-iEt/\hbar\right)}{c_1c_2' - c_1'c_2}\left[c_2'\psi\exp\left(-iE^{(1)}t/\hbar\right) - c_2\psi'\exp\left(-iE^{(1)\prime}t/\hbar\right)\right]$$

(у момент часу $t = 0$ $\Psi_1 = \psi_1$). Нарешті, виражаючи знову ψ, ψ' через ψ_1, ψ_2, одержимо Ψ_1 у вигляді лінійної комбінації від ψ_1, ψ_2 з коефіцієнтами, які залежать від часу. Квадрат модуля коефіцієнта при ψ_2 визначає шукану ймовірність переходу w_{21}. Розрахунок за допомогою формул задачі 5 дає

$$w_{21} = 2\left|V_{12}\right|^2\left[1 - \cos\omega^{(1)}t\right]\Big/\left(\hbar\omega^{(1)}\right)^2 .$$

Звідси видно, що ймовірність періодично коливається із частотою $\omega^{(1)}$. Для часів t, малих порівняно з відповідним періодом, імовірність w_{21} пропорційна t^2: $w_{21} = \left|V_{12}\right|^2 t^2 \big/ \hbar^2$.

9. Для плоского ізотропного осцилятора знайти розщеплення першого збудженого енергетичного рівня під дією збурення $U(x, y) = \alpha xy$, якщо для лінійного осцилятора $U(x) = kx^2/2$ розв'язок рівняння Шредінгера дає спектр $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ і власні функції

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}\sqrt{2^n n!}}\exp\left(-x^2/2a^2\right)H_n(x/a),$$

де $H_n(x)=(-1)^n\exp\left(x^2\right)\frac{d^n}{dx^n}\exp\left(-x^2\right)$ – поліном Ерміта, $a=\sqrt{\hbar/\mu\omega}$, $\omega=\sqrt{k/\mu}$.

Розв'язання: оскільки оператори $\hat{H}_1=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{kx^2}{2}$ і $\hat{H}_2=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{ky^2}{2}$ комутують один з одним, а також комутують з гамільтоніаном $\hat{H}=\hat{H}_1+\hat{H}_2$ плоского ізотропного осцилятора, то власні функції $\hat{H}$ є також власними функціями $\hat{H}_1$ і $\hat{H}_2$. Ураховуючи цю обставину, хвильові функції і рівні енергії для плоского осцилятора можна записати у вигляді

$$\psi_{n_1n_2}(x,y)=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y);\ E_N=\hbar\omega(N+1),N=0,1,...,$$

де $N=n_1+n_2$, $n_1=0,1,...$, $n_2=0,1,...$.

Енергетичному рівню E_N із даним значенням N відповідають $(N+1)$ незалежних власних функцій $\psi_{n_1n_2}(x,y)$ з $n_1=0,1,...,N$ (при цьому $n_2=N-n_1$, тобто він є $(N+1)$-кратно виродженим). Перший збуджений енергетичний рівень плоского осцилятора, таким чином, є двократно виродженим. Йому відповідають такі дві незбурені хвильові функції:

$$\psi_1^{(0)}\equiv\psi_{10}(x,y)=\left(x/a^2\right)\sqrt{2/\pi}\exp\left[-\left(x^2+y^2\right)/2a^2\right],$$

$$\psi_2^{(0)}\equiv\psi_{01}(x,y)=\left(y/a^2\right)\sqrt{2/\pi}\exp\left[-\left(x^2+y^2\right)/2a^2\right].$$

Матричні елементи збурення $U(x,y)=\alpha xy$ з такими хвильовими функціями мають вигляд $U_{11}=U_{22}=0$, $U_{12}=U_{21}=\alpha\hbar/2\mu\omega$. Секулярне рівняння тоді записується у вигляді

Видавничо-поліграфічний центр (версія не для друку)

$$\begin{vmatrix} 2\hbar\omega - E_1 & \alpha\hbar/2\mu\omega \\ \alpha\hbar/2\mu\omega & 2\hbar\omega - E_1 \end{vmatrix} = 0.$$

Розв'язуючи його, одержуємо $E_{1(1,2)} = 2\hbar\omega \mp \alpha\hbar/2\mu\omega$, тобто рівень $E_1 = 2\hbar\omega$ під дією збурення $U(x,y) = \alpha xy$ розщепився на два підрівні (виродження знялося). Енергетичному підрівню $E_{1(1)} = 2\hbar\omega - \alpha\hbar/2\mu\omega$ відповідає нормована хвильова функція $\psi_{1(1)}^{(0)} = \left[\psi_1^{(0)} - \psi_2^{(0)}\right]\Big/\sqrt{2}$, а енергетичному підрівню $E_{1(1)} = 2\hbar\omega + \alpha\hbar/2\mu\omega$ відповідає нормована хвильова функція $\psi_{1(1)}^{(0)} = \left[\psi_1^{(0)} + \psi_2^{(0)}\right]\Big/\sqrt{2}$.

10. Для плоского ізотропного осцилятора знайти розщеплення другого збудженого енергетичного рівня під дією збурення $\hat{U}(x,y) = \alpha xy$.

Відповідь: $E_{2(1)} = 3\hbar\omega$, $E_{2(2,3)} = 3\hbar\omega \pm 20\alpha\hbar/\mu\omega$.

Навчально-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

4.5. Нестаціонарна теорія збурень. Раптові збурення. Адіабатичні збурення

1. На заряджений лінійний осцилятор діє однорідне електричне поле, яке змінюється за законом $E(t) = E_0\Big/\left(1 + t^2/\tau^2\right)$. Вважаючи, що до включення поля (при $t \to -\infty$) осцилятор перебував у n-му квантовому стані, знайти в першому порядку теорії збурень імовірності збурень різних його станів при $t \to +\infty$.

Розв'язання: збурення осцилятора має вигляд $\hat{V}(\varphi,t) = -dE(t)\cos\varphi$. Його матричні елементи $V_{kn}(t)$, а відповідно і ймовірності переходів осцилятора в першому порядку теорії

збурень, відмінні від нуля лише для значень $k = n \pm 1$ (переходи виникають тільки між сусідніми рівнями). Скориставшись формулами

$$W^{(1)}\left(n \to k\right) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} V_{kn}\left(t\right)\exp\left(i\omega_{kn}t\right)dt\right|^2,$$

$$x_{n,n+1} = x_{n+1,n} = \sqrt{\left(n+1\right)/2}\,a,$$

маємо

$$W^{(1)}\left(n \to k\right) = \frac{e^2\left|I\left(\omega\right)\right|^2}{2\mu\hbar\omega}\begin{cases}\left(n+1\right), k = n+1,\\ n, \qquad k = n-1.\end{cases}$$

Тут

$$I\left(\omega\right) = \int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(i\omega t\right)E\left(t\right)dt = 2E_0\int_0^{\infty}\frac{\cos\omega t}{1+t^2/\tau^2}dt = \pi\tau E_0\exp\left(-\left|\omega\tau\right|\right).$$

Зазначимо, що основною умовою застосовності одержаних результатів є виконання нерівності $\left|\left\langle k\left|\hat{V}\right|n\right\rangle\right| << \left|E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right|$, яка в даній задачі набуває вигляду $eE_0\sqrt{\left(n+1\right)\hbar/\mu\omega} << \hbar\omega$.

2. На плоский ротатор, який має дипольний момент $\vec{d}$, діє однорідне, змінне в часі електричне поле $\vec{E}\left(t\right) = E\left(t\right)\vec{n}_0$, де $E\left(t\right) = E_0\exp\left(-t^2/\tau^2\right)\cos\omega_0 t$. До включення поля ротатор мав певні значення енергії та проекції моменту $\vec{m}$. Обчислити в першому порядку теорії збурень імовірність різних значень проекції моменту та енергії ротатора при $t \to \infty$.

Розв'язання: збурення ротатора має вигляд $V\left(\varphi,t\right) = -dE\left(t\right)\cos\varphi$, де φ – кут між віссю ротатора і напрямком електричного поля. Матричні елементи збурення відмінні від нуля лише за $m' = m \pm 1$ і дорівнюють при цьому $V_{m'm}\left(t\right) = -dE\left(t\right)/2$. Відповідно в першому порядку теорії збу-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Друкується для друзів)

рень виникають переходи лише на сусідні за енергіями рівні, їх імовірності дорівнюють

$$W^{(1)}\left(m\to m'\right)=\left(\pi\tau^2 d^2 E_0^2\big/16\hbar^2\right)\cdot$$

$$\cdot\left\{\exp\left[-\left(\omega_{m'm}-\omega_0\right)^2\tau^2\big/4\right]+\exp\left[-\left(\omega_{m'm}-\omega_0\right)^2\tau^2\big/4\right]\right\}^2,$$

де значення частот переходів $\omega_{m'm}$ дорівнюють $\left(1\pm 2m\right)\hbar/2I$ для $m'=m\pm 1$.

3. На частинку, що за $t\to-\infty$ перебуває в основному стані нескінченно глибокої потенціальної ями шириною a, накладається слабке поле $\hat{V}\left(x,t\right)=-xf_0\exp\left(-t^2/\tau^2\right)$. Обчислити в першому порядку теорії збурень імовірність переходів у збуджені стани при $t\to\infty$.

Відповідь: $W^{(1)}\left(1\to 2n\right)=\dfrac{16\pi^5\hbar^2\tau^2 n^2 f_0^2}{\mu^4 a^6\omega_{2n,1}^4}\exp\left(-\omega_{2n,1}^2\tau^2/2\right)$, де $\omega_{2n,1}=\pi^2\hbar^2\left(4n^2-1\right)\big/2\mu a^2$, $n=1,2,\ldots$.

4. Частинка масою μ перебуває в основному стані нескінченно глибокої потенціальної ями шириною a. На систему діє нестаціонарне збурення $\hat{V}\left(x,t\right)=-x^2 f\left(t\right)$, де $f\left(t\right)=1$ при $0\le t\le\tau$ та $f\left(t\right)=0$ при $t<0$ і $t>\tau$. При якій тривалості імпульсу τ імовірність збудження n-го рівня буде найбільшою? Яка ймовірність того, що частинка не залишиться в основному стані?

Відповідь: $W^{(1)}\left(1\to n\right)=\left(16\pi^4\hbar^2 n^2\big/\mu^4 a^4\omega_{2n,1}^6\right)\sin^2\left(\omega_{n1}\tau/2\right)$, де $\omega_{n1}=\pi^2\hbar^2\left(n^2-1\right)\big/2\mu a^2$, $n=2,3,\ldots$; при $\tau=\mu a^2\big/\hbar^2\left(n^2-1\right)$ буде найбільша ймовірність збудження n-го рівня; імовірність того, що частинка не залишиться в основному стані дорівнює $1-W^{(1)}\left(1\to 1\right)=1-\left(1/3-1/2\pi^2\right)^2\tau^2 a^4\big/\hbar^2$.

Вивчаючий політехнічний центр
Київський університет
(Серія "Для студентів")

5. Система, стаціонарні стани якої описуються функціями ψ_0 і ψ_1, перебуває у стані ψ_0. У момент часу $t=0$ вмикається збурення, яке не залежить від часу. Визначити залежність від часу функції $\psi(t)$, яка описує збурену систему.

Розв'язання: ортонормовані стаціонарні функції ψ_0 і ψ_1 задовольняють нестаціонарне рівняння Шредінгера $i\hbar\partial\psi_m/\partial t=\hat{H}\psi_m$ і мають вигляд

$$\psi_m(\vec{r},t)=u_m(\vec{r})\exp(-iE_m t/\hbar),$$

$$\int u_n^*(\vec{r})u_m(\vec{r})d\vec{r}=\delta_{nm},\quad n,m=0,1.$$

Після включення збурення $\hat{W}$ рівняння набуває вигляду

$$i\hbar\partial\psi/\partial t=\left(\hat{H}+\hat{W}\right)\psi.$$

Його розв'язок будемо шукати у такому вигляді:

$$\psi(\vec{r},t)=a_0(t)\psi_0(\vec{r},t)+a_1(t)\psi_1(\vec{r},t),$$

де $|a_0|^2+|a_1|^2=1$ і початкові значення коефіцієнтів $a_0(0)=1$, $a_1(0)=0$. Підставляючи ψ у рівняння, звичайним методом знаходимо

$$i\hbar\dot{a}_0=a_0W_{00}+a_1W_{10}\exp\left[i(E_0-E_1)t/\hbar\right],$$

$$i\hbar\dot{a}_1=a_0W_{01}\exp\left[i(E_1-E_0)t/\hbar\right]+a_1W_{11},$$

де $W_{ik}=\int u_i^*\hat{W}u_k d\tau$ – матричні елементи збурення $\hat{W}$. Якщо ввести $\alpha_0(t)=a_0(t)$ і $\alpha_1(t)=\exp\left[i(E_0-E_1)t/\hbar\right]a_1(t)$, то прийдемо до рівнянь для α_i:

$$i\hbar\dot{\alpha}_0=\alpha_0W_{00}+\alpha_1W_{10},$$

$$i\hbar\dot{\alpha}_1=\alpha_0W_{01}+a_1(W_{11}+E_1-E_0).$$

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

Це однорідні лінійні рівняння зі сталими коефіцієнтами, тобто коефіцієнти α_i можна шукати у вигляді $\alpha_0 = A\exp(-i\Omega t)$ і $\alpha_1 = B\exp(-i\Omega t)$. У результаті, одержимо систему однорідних алгебраїчних рівнянь щодо невідомих A, B:

$$(W_{00} - \hbar\Omega)A + W_{10}B = 0, \quad W_{01}A + (W_{11} + E_1 - E_0 - \hbar\Omega)B = 0 .$$

Ця система має нетривіальний розв'язок за умови

$$\begin{vmatrix} W_{00} - \hbar\Omega & W_{10} \\ W_{01} & W_{11} + E_1 - E_0 - \hbar\Omega \end{vmatrix} = 0 .$$

Розв'язуючи це характеристичне рівняння, одержимо

$$\hbar\Omega_{1,2} = W_{00} + \gamma/2 \pm \sqrt{|W_{10}|^2 + \gamma^2/4} ,$$

де $\gamma = W_{11} - W_{00} + E_1 - E_0$. На основі цього випишемо розв'язки для α_i:

$$\alpha_0 = A_1 \exp(-i\Omega_1 t) + A_2 \exp(-i\Omega_2 t)$$
$$\alpha_1 = B_1 \exp(-i\Omega_1 t) + B_2 \exp(-i\Omega_2 t) .$$

Сталі величини A_1, A_2, B_1, B_2 знаходимо, використовуючи співвідношення $B_i = (\hbar\Omega_i - W_{00})A_i / W_{10}, (i = 1,2)$, а також два рівняння, що випливають із початкових умов $A_1 + A_2 = 1$ та $B_1 + B_2 = 0$. Розв'язуючи цю неоднорідну систему чотирьох лінійних рівнянь, одержимо

$$A_{1,2} = \pm(W_{00} - \hbar\Omega_{2,1}) / \hbar(\Omega_1 - \Omega_2), \; B_{1,2} = \pm W_{10} / \hbar(\Omega_1 - \Omega_2) .$$

Розглянемо поведінку $p_i(t) = |a_i(t)|^2 = |\alpha_i(t)|^2 \; (i = 0,1)$ у часі. Далі після нескладних обчислень знаходимо

$$p_0(t) = 1 - |W_{10}|^2 \sin^2 \sigma t / \sigma^2 , \quad p_1(t) = |W_{10}|^2 \sin^2 \sigma t / \sigma^2 .$$

Таким чином, збурення приводить до переходу системи зі стану ψ_0 у стан ψ_1 із частотою $\sigma = \sqrt{|W_{10}|^2 + \gamma^2/4} / \hbar$, яка називається *частотою Рабі.*

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

6. Показати, що якщо збурення $\hat{W}(\vec{r})$, яке не залежить від часу, включене на проміжку часу $0 \le t \le \tau$, а в інший час $\hat{W}(\vec{r}) = 0$, то ймовірність переходу зі стану n у стан k дорівнює $(2\pi/\hbar)\left\langle n\left|\hat{W}(\vec{r})\right|k\right\rangle^2 \tau\delta(E_k - E_n)$.

Розв'язання: імовірність переходу визначається формулою

$$P_{kn} = |c_k|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2}\left|W_{kn}(\omega_{kn})\right|^2.$$

Для обчислення $c_k(t)$ урахуємо, що $W_{kn} = \text{const}$ при $0 \le t \le \tau$ і дорівнює нулю при всіх інших t. Тоді

$$c_k(t) = \frac{W_{kn}}{i\hbar}\int_0^\tau \exp(i\omega_{kn}t)\,dt = 2\frac{W_{kn}}{i\hbar}\exp\left(\frac{i\omega_{kn}\tau}{2}\right)\frac{\sin(i\omega_{kn}\tau/2)}{\omega_{kn}},$$

$$P_{kn} = \frac{4|W_{kn}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2\left[(E_k - E_n)\tau/2\hbar\right]}{\left[(E_k - E_n)/\hbar\right]^2} = \frac{4|W_{kn}|^2}{\hbar^2}F(E_k - E_n).$$

Функція $F(E_k - E_n)$ має максимум при $E_n = E_k$ і за досить великих τ її можна виразити через δ-функцію. Розглянемо інтеграл $I = \int_{-\infty}^{\infty} f(E_k)F(E_k - E_n)\,dE_k$. Виконуючи заміну змінних $z = (E_k - E_n)\tau/2\hbar$, $dE_k = (2\hbar/\tau)\,dz$, знаходимо, що $I = \frac{\hbar}{2}\int_{-\infty}^{\infty} f\left(E_n + \frac{2\hbar z}{\tau}\right)\frac{\sin^2 z}{z^2}\,dz$ і, спрямовуючи τ до нескінченності, одержуємо $I = \pi\tau\hbar f(E_n)/2$, тобто $F(E_k - E_n) = \hbar\pi\tau\delta(E_k - E_n)/2$, а отже, маємо

$$P_{kn} = \frac{2\pi}{\hbar}\tau|W_{kn}|^2\,\delta(E_k - E_n).$$

7. Обчислити ймовірність іонізації водневоподібного атома плоскою монохроматичною хвилею, вектор-потенціал якої має складові $A_x = A\cos(\omega t - \vec{kr})$, $A_y = 0$, $A_z = 0$. До включення збу-

Електронний архів кафедри теоретичної фізики ЧНУ ім. Петра Могили (версія не для друку)

рення електрон перебував у $1s$-стані поблизу ядра і зарядом Ze. У кінцевому стані його можна вважати вільним.

Розв'язання: імовірність переходу зі стану ψ_1 у стан $\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ під впливом збурення $\hat{W}(\vec{r},t)$ визначається у першому наближенні коефіцієнтом $c_{\vec{p}}(T)$, що дорівнює

$$c_{\vec{p}}(T)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^T W_{\vec{p}1}\exp\left[i\left(E_p-E_1\right)t/\hbar\right]dt,$$

де $W_{\vec{p}1}=\int\psi_{\vec{p}}^{*}\hat{W}(\vec{r},t)\psi_1 d\tau$, а E_1 і E_p – енергії відповідних станів. Для початкового стану необхідно знайти функцію з $n=1$, $l=0$, $m=0$ для електрона в кулонівському полі із зарядом Ze. Такою функцією є $\psi_1=\psi_{100}(r)=\sqrt{Z^3/\pi a_0^3}\exp(-rZ/a_0)$, де $a_0=\hbar^2/\mu e^2$ – радіус Бора. У кінцевому стані електрон описується плоскою хвилею $\psi_{\vec{p}}=\exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar)/\sqrt{V}$, де V – об'єм області, у якій розташований атом. Для визначення кількості станів із даним імпульсом користуємось вимогою періодичності $\psi_{\vec{p}}(x+L)=\psi_{\vec{p}}(x)$, причому $V=L^3$, і одержуємо дозволені значення $p_{xn}=\hbar n/L$. Звідси кількість станів з імпульсами, які потрапляють в інтервал $\vec{p}-(\vec{p}+d\vec{p})$, дорівнює $dN=2\dfrac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^3}V$ (множник 2 вказує на кількість можливих проекцій спіну).

Переходячи до сферичних координат у просторі імпульсів, одержуємо кількість станів з енергією в інтервалі dE_p, де $E_p=p^2/2\mu$, і напрямком імпульсу в тілесному куті $d\Omega$:

$$\rho(E_p)dE_p d\Omega=\left(2\mu p/\hbar^2\right)d\Omega dE_p.$$

Для даного випадку вектор-потенціал задається такими компонентами: $A_x=A\cos(\omega t-\vec{k}\vec{r})$; $A_y=A_z=0$, $(\vec{k}\,||\,Oz)$. У цьому випадку енергія взаємодії має вигляд

Видавництво поліграфічний центр (київський університет (версія на дяку))

$$\hat{W} = -\frac{e}{\mu}\left(\vec{A}\cdot\vec{p}\right) = -\frac{eA}{\mu}\cos\left(\omega t - \vec{k}\vec{r}\right)\hat{p}_x .$$

Із того, що $W_{\vec{p}1} = \int \psi^*_{\vec{p}} \hat{W} \psi_1 d\tau = W^*_{1\vec{p}} = \left[\int \psi^*_1 \hat{W} \psi_{\vec{p}} d\tau\right]^*$ та $\hat{p}_x \psi_{\vec{p}} = p_x \psi_{\vec{p}}$ випливає, що матричний елемент збурення $W_{\vec{p}1}$ можна представити у вигляді

$$W_{\vec{p}1} = -\frac{eAp_x}{\mu}\int \psi^*_{\vec{p}} \cos\left(\omega t - \vec{k}\vec{r}\right)\psi_1 d\tau .$$

На основі $\cos\left(\omega t - \vec{k}\vec{r}\right) = \left\{\exp\left[i\left(\omega t - \vec{k}\vec{r}\right)\right] + \exp\left[-i\left(\omega t - \vec{k}\vec{r}\right)\right]\right\}\Big/2$ одержуємо

$$C_{\vec{p}}(T) = -\frac{eAp_x}{2i\hbar\mu}\left[\int \psi^*_{\vec{p}} \exp\left(-i\vec{k}\vec{r}\right)\psi_1 d\tau \int_0^T \exp\left[i\left(E_p - E_1 + \hbar\omega\right)\Big/\hbar\right]dt + \right.$$
$$\left. + \int \psi^*_{\vec{p}} \exp\left(i\vec{k}\vec{r}\right)\psi_1 d\tau \int_0^T \exp\left[i\left(E_p - E_1 - \hbar\omega\right)\Big/\hbar\right]dt\right].$$

Оскільки

$$\int_0^T \exp\left[i\left(E_p - E_1 \pm \hbar\omega\right)t\Big/\hbar\right]dt = \frac{\exp\left[i\left(E_p - E_1 \pm \hbar\omega\right)T\Big/\hbar\right] - 1}{i\left(E_p - E_1 \pm \hbar\omega\right)\Big/\hbar},$$

то із двох доданків, які входять у $C_{\vec{p}}(T)$, головну роль при фотоефекті $\left(E_p > E_1\right)$ відіграє той, у якого знаменник містить $E_p - E_1 - \hbar\omega \sim 0$. Нехтуючи другим членом і підставляючи $\psi_{\vec{p}}$ і ψ_1, маємо

$$c_{\vec{p}}(T) = -\frac{eAIp_x}{2\hbar\mu}\sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3 V}}\frac{\left\{\exp\left[i\left(E_p - E_1 - \hbar\omega\right)T\Big/\hbar\right] - 1\right\}}{i\left(E_p - E_1 - \hbar\omega\right)\Big/\hbar},$$

де інтеграл $I = \int \exp\left(-Zr/a_0\right)\exp\left[i\left(\vec{k}\vec{r} - \vec{p}\vec{r}/\hbar\right)\right]d\tau$ після введення результуючого хвильового вектора $\vec{q} = \vec{p}/\hbar - \vec{k}$ у тимчасово

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (зверстано не для друку)

введеній сферичній системі координат із віссю Oz', орієнтованій уздовж вектора $\vec{q}$, так що $\vec{q}\vec{r} = qr\cos\theta'$, буде

$$I = \int_0^\infty r^2 \exp\left(-Zr/a_0\right)dr \int_0^\pi \exp\left(-iqr\cos\theta'\right)\sin\theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' =$$
$$= 8\pi Z \Big/ a_0\left(q^2 + Z^2/a_0^2\right)^2 .$$

Імовірність переходу в інтервал енергій ΔE_p, яка дорівнює $dW = \int \left|C_{\vec{p}}(T)\right|^2 \rho\left(E_p\right) dE_p d\Omega$, містить поряд із плавною функцією від E_p вираз

$$\frac{\left|\exp\left[i\left(E_p - E_1 - \hbar\omega\right)T/\hbar\right] - 1\right|^2}{\left(E_p - E_1 - \hbar\omega\right)^2/\hbar^2} dE_p = \frac{\sin^2\left(E_p - E_1 - \hbar\omega\right)T/2\hbar}{\left[\left(E_p - E_1 - \hbar\omega\right)T/2\hbar\right]^2} \cdot$$

$$\cdot \frac{dE_p}{2\hbar} 2\hbar T^2 = 2\pi\hbar T\delta\left(E_p - E_1 - \hbar\omega\right)dE_p ,$$

і тому ймовірність вильоту електрона за одну секунду в тілесний кут $d\Omega$ дорівнює

$$\frac{dW}{T} = \frac{8e^2}{\mu\pi}\frac{A^2Z^5}{\hbar^4 a_0^5}\frac{p_x^2 p}{\left(q^2 + Z^2/a_0^2\right)^4}\delta\left(E_p - E_1 - \hbar\omega\right)d\Omega ,$$

причому $E_p = E_1 + \hbar\omega = \hbar\omega - J$, $E_1 = -J = -\mu e^4 Z^2/2\hbar^2$, де J – енергія іонізації атома. Вираз у дужках за умови $k << p/\hbar$:

$$q^2 + Z^2/a_0^2 = p^2/\hbar^2 + k^2 - 2pk\cos\theta/\hbar + Z^2/a_0^2 = k^2 - 2pk\cos\theta/\hbar +$$
$$+ 2\mu\left(\mu Z^2 e^4/2\hbar^2 + p^2/2\mu\right)\Big/\hbar^2 \approx 2\mu\omega\left(1 - v\cos\theta/c\right)/\hbar .$$

Оскільки вектор $\vec{k}$ напрямлений уздовж осі Oz, то $p_x = p\cos\varphi\sin\theta$ і, нарешті, одержуємо

$$\frac{dW}{T} = \frac{e^2A^2Z^5}{2\pi a_0^5\mu^5\omega^4}\frac{p^3\cos^2\varphi\sin^2\theta}{\left(1 - v\cos\theta/c\right)^4}\delta\left(p^2/2\mu + J - \hbar\omega\right)d\Omega .$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Дрогобицьке відділення) Готується до друку

8. Знайти в першому порядку теорії збурень імовірність "іонізації" в одиницю часу частинки в одновимірній потенціальній ямі $U(x)=-\alpha\delta(x)$ під дією однорідного, періодичного в часі поля $\hat{V}(x,t)=-xF_0\cos\omega_0 t$.

Розв'язання: скористаємось загальною формулою для ймовірності переходу в стани неперервного спектра під впливом збурення $\hat{V}(x,t)=-F_0x\left[\exp(i\omega_0 t)+\exp(-i\omega_0 t)\right]/2$, а саме:

$$W=\frac{2\pi}{\hbar}\int|F_{k0}|^2\delta\left(E_k-E_0-\hbar\omega_0\right)dk\,.$$

Тут $E_0=-\hbar^2\kappa^2/2\mu$ – енергія частинки в дельта-ямі, $\kappa=\mu\alpha/\hbar^2$, $E_k=\hbar^2k^2/2\mu$ – енергія частинки у вільному стані із хвильовим числом k, F_{k0} – матричний елемент просторової частини збурення $\hat{F}(x)=-F_0x/2$ на хвильових функціях початкового $\psi_0(x)=\sqrt{\kappa}\exp(-\kappa|x|)$ і кінцевого $\psi_k(x)=\exp(ikx)/\sqrt{2\pi}$ станів, відповідно.

Знаходимо матричний елемент F_{k0} згідно із формулою

$$F_{k0}=-\frac{F_0}{2}\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x\exp(-\kappa|x|-ikx)dx=\frac{iF_0k\kappa^{3/2}}{\left(k^2+\kappa^2\right)^2}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,.$$

Підставляючи цей вираз та енергії E_0 і E_k у формулу для ймовірності переходу, одержимо

$$W=\frac{4F_0^2\kappa^3}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k^2}{\left(k^2+\kappa^2\right)^4}\delta\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(k^2+\kappa^2-\frac{2\mu\omega_0}{\hbar}\right)\right]dk\,.$$

З урахуванням властивостей для дельта-функції $\delta(\alpha x)=\delta(x)/|\alpha|$ та $\delta\left(x^2-a^2\right)=\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right]/2|a|$ одержимо

$$W=2F_0^2\left|E_0\right|^{3/2}\left(\hbar\omega_0-|E_0|\right)^{1/2}/\mu\hbar^3\omega_0^4\,.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

9. Частинка масою μ перебуває в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a. У деякий момент часу права стінка ями швидко зміщується в точку $b > a$. Знайти ймовірність переходу системи в різні стаціонарні стани після зупинки стінки ями.

Відповідь:

$$w(0 \to k) = \frac{4ab^3}{\pi^2\left[a^2(k+1)^2 - b^2\right]^2}\sin^2\left[\frac{\pi(k+1)a}{b}\right].$$

Умова застосовності $\tau\omega_{k0} = \pi^2\hbar\tau(k+1)^2 / \mu a^2 << 1$.

10. Частинка перебуває в дельта-ямі $U(x) = -\alpha\delta(x)$. При $t = 0$ яма раптово перемістилась у точку x_0. Визначити ймовірність того, що частинка буде в основному стані потенціальної ями $U(x) = -\alpha\delta(x - x_0)$.

Відповідь: $P_0 = \left(1 + \kappa|x_0|\right)^2 \exp\left(-2\kappa|x_0|\right)$, де $\kappa = \mu\alpha/\hbar^2$.

11. Атом важкого водню (дейтерію) перебуває в $1s$-стані. Раптово нейтрон ядра за рахунок β-розпаду перетворюється на протон. Знайти ймовірність переходу атома в $2s$-стан.

Відповідь: $P(1s \to 2s) = 0,25$.

12. Частинка перебуває в дельта-ямі $U(x) = -\alpha\delta(x)$. При $t = 0$ яма починає рухатись з постійною швидкістю v. Знайти ймовірність того, що яма захопить частинку із собою.

Розв'язання: для розрахунку шуканої ймовірності перейдемо в систему координат K', яка рухається разом з ямою, у якій $x' = x - vt$. Хвильові функції частинки безпосередньо одразу після початку руху ями в початковій і рухомій системах координат мають вигляд

$$\psi_0(x) = \sqrt{\kappa}\exp\left(-\kappa|x|\right), \qquad \tilde{\psi}_0(x') = \exp\left(-i\mu v x'/\hbar\right)\psi_0(x'),$$

де $\kappa = \mu\alpha/\hbar^2$. Тут співвідношення між хвильовими функціями відображає той факт, що перетворення хвильової функції базу-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

ється на простій заміні імпульсу p на $p' = p - \mu v$. Оскільки хвильова функція зв'язаного стану частинки в системі K' одержана із $\psi_0(x)$ за допомогою заміни x на x', то шукана ймовірність дорівнюватиме

$$w_0 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x') \tilde{\psi}_0(x') dx' \right|^2 = \frac{1}{\left(1 + v^2/4v_0^2\right)^2},$$

де $v_0^2 = \alpha^2/\hbar^2$ (зазначимо, що v_0^2 збігається з $\langle v^2 \rangle$ – середнім значенням квадрата швидкості в основному стані частинки в δ-ямі). У випадку $v << v_0$ маємо $w_0 \approx 1 - v^2/2v_0^2 \approx 1$, тобто частинка з великою ймовірністю захоплюється ямою. У зворотному граничному випадку $v >> v_0$ навпаки, $w_0 \approx (2v_0/v)^4 << 1$, а отже, частинка з великою ймовірністю покине яму.

13. Ядро атома, яке перебуває в нормальному стані, одержуємо раптовий поштовх, у результаті чого воно набуває швидкості v; тривалість поштовху τ вважається малою як порівняно з електронними періодами, так і порівняно з a/v, де a – атомні розміри. Визначити ймовірність збудження атома під впливом такого "струшування".

Розв'язання: як і в попередній задачі, переходимо до системи відліку K', яка рухається разом з ядром після удару. З умови $\tau << a/v$ ядро майже не зміщується за час удару, тому координати електронів у системах K' і K безпосередньо після збурення збігаються. Початкова хвильова функція в системі K': $\psi_0' = \psi_0 \exp\left(-i\vec{q}\sum_a \vec{r}_a\right)$, де $\vec{q} = \mu\vec{v}/\hbar$, ψ_0 – хвильова функція нормального стану при нерухомому ядрі, а підсумовування в експоненті виконується за всіма Z електронами в атомі. Імовірність переходу в k-й збуджений стан визначається формулою $w_{k0} = \left| \left\langle k \left| \exp\left(-i\vec{q}\sum_a \vec{r}_a\right) \right| 0 \right\rangle \right|^2$. Зокрема, якщо $qa << 1$, то, розкла-

даючи експоненту під знаком інтеграла і враховуючи, що інтеграл від $\psi_k^*\psi_0$ дорівнює нулю, одержимо $w_{k0} = \left|\left\langle k\left|\vec{q}\sum_a \vec{r}_a\right|0\right\rangle\right|^2$.

14. Визначити повну ймовірність збудження та іонізації атома водню при раптовому прискоренні.

Розв'язання: шукану ймовірність можна обчислити як різницю $1 - w_{00} = 1 - \left|\int \psi_0^2 \exp\left(-i\vec{q}\vec{r}\right) dV\right|^2$, де w_{00} – імовірність атома залишитись в основному стані $\psi_0 = \left(\pi a_0^3\right)^{-1/2} \exp\left(-r/a_0\right)$, де a_0 – борівський радіус. Обчисливши інтеграл, одержимо $1 - w_{00} = 1 - \left(1 + q^2 a_0^2/4\right)^{-4}$. У граничному випадку $qa_0 << 1$ ця ймовірність прямує до нуля як $1 - w_{00} \approx q^2 a_0^2$, а при $qa_0 >> 1$ – до одиниці як $1 - w_{00} \approx 1 - \left(2/qa_0\right)^8$.

15. Гамільтоніан $\hat{H}\left(\hat{p}, q, \lambda(t)\right)$ деякої системи явно залежить від часу. Для кожного моменту часу t вважаються відомими спектр власних значень $E_n\left(\lambda(t)\right)$ "миттєвого" гамільтоніана, який є дискретним, і повна система відповідних ортонормованих власних функцій $\Psi_n\left(q, \lambda(t)\right)$. Записати хвильове рівняння для системи в представленні, базисом якого є система функцій $\Psi_n\left(q, \lambda(t)\right)$. Показати, що при адіабатичній зміні гамільтоніана (при $\dot{\lambda} \to 0$) розподіл за квантовими станами системи не залежить від часу. Який класичний аналог цього результату?

Розв'язання: запишемо хвильову функцію системи у вигляді розкладу

$$\Psi\left(q, \lambda(t)\right) = \sum_n C_n(t) \Psi_n\left(q, \lambda(t)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\,dt'\right),$$

де $\Psi_n\left(q, \lambda(t)\right)$, $E_n\left(\lambda(t)\right)$ – власні функції та власні значення "миттєвого" (тобто в даний момент часу) гамільтоніана, для яко-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

го $\hat{H}\left(\hat{p},q,\lambda(t)\right)\Psi_n\left(q,\lambda(t)\right)=E_n\left(\lambda(t)\right)\Psi_n\left(q,\lambda(t)\right)$, а коефіцієнти $C_n(t)$ є власними функціями в представленні, базисом якого є система функцій $\Psi_n\left(q,\lambda(t)\right)$. Підставляючи $\Psi\left(q,\lambda(t)\right)$ у нестаціонарне рівняння Шредінгера, помноживши при цьому його обидві частини на $\Psi_k^*\left(q,\lambda(t)\right)$ зліва та інтегруючи по координаті q з використанням ортогональності хвильових функцій $\Psi_n\left(q,\lambda(t)\right)$, знаходимо

$$\dot{C}_k(t)=-\sum\nolimits_n C_n(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\left(E_k-E_n\right)dt'\right]\int\Psi_k^*\dot{\Psi}_n dq\,.$$

Це й є шукане хвильове рівняння. Воно зручне для дослідження системи, гамільтоніан якої повільно змінюється із часом. Дійсно, оскільки $\dot{\Psi}_n=\dot{\lambda}\,\partial\Psi_n/\partial\lambda$, то $\left\langle\Psi_k\middle|\dot{\Psi}_n\right\rangle\propto\dot{\lambda}<<1$. Тоді одержуємо $C_n(t)=C_n^{(0)}=\text{const}$, що можна охарактеризувати як (наближене) збереження номера квантового стану при адіабатичній зміні гамільтоніана системи. Цей результат є квантово-механічним аналогом адіабатичної інваріантності величини $I=\frac{1}{2\pi}\oint pdq$ у класичній механіці. Остання обставина стає особливо наочною в квазікласичному випадку, якщо зважати на правило квантування Бора–Зомерфельда.

Видавничо-поліграфічний комплекс
"Кримський інженерно-педагогічний університет"
(версія не для друку)

Розділ 5

РУХ ЧАСТИНОК В ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ПОЛЯХ. СПІН

Короткі теоретичні відомості

1. Згідно з класичною теорією Максвелла напруженості електричного та магнітного полів виражаються через векторний $\vec{A}(\vec{r})$ і скалярний $\Phi(\vec{r})$ потенціали таким чином:

$$\vec{E} = -\text{grad}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{H} = \text{rot}\,\vec{A}.$$

Щоб узагальнити рівняння Шредінгера для частинки з масою μ і зарядом e, яка рухається в довільному електромагнітному полі, необхідно оператор імпульсу $\hat{\vec{p}}$ у гамільтоніані $\hat{H} = \hat{\vec{p}}^2/2\mu + U(\vec{r})$ замінити на оператор $\hat{\vec{p}} - e\hat{\vec{A}}/c$ і до потенціальної енергії U дописати член $e\hat{\Phi}$, тобто будемо мати

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left[\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}}(\vec{r})\right]^2 + \hat{U}(\vec{r}) + e\hat{\Phi}(\vec{r}).$$

Очевидно, що цей результат узгоджується із функцією Гамільтона в класичній механіці для зарядженої частинки в електромагнітному полі. При виборі калібровки для векторного потенціалу у вигляді $\text{div}\,\vec{A} = 0$ одержимо нестаціонарне рівняння Шредінгера

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + \frac{i\hbar e}{\mu c}\left(\hat{\vec{A}}\cdot\nabla\Psi\right) + \frac{e^2\hat{\vec{A}}^2}{2\mu c^2}\Psi + e\hat{\Phi}\Psi + U\Psi.$$

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

Зауважимо, що доданок $e^2\hat{\vec{A}}^2/2\mu c^2$ в операторі Гамільтона, який одержано з оператора кінетичної енергії, можна інтерпретувати як пондемоторний доданок до оператора потенціальної енергії.

2. Більшість елементарних частинок та їхніх ансамблів (атомів, молекул тощо), окрім орбітального механічного моменту, пов'язаного з реальним рухом зарядів, характеризуються ще власним моментом – спіном $\vec{s}$, не пов'язаним із рухом у просторі. Це означає, що для частинки зі спіном хвильова функція має залежати не тільки від просторової неперервної змінної $\vec{r}$, але й від однієї дискретної змінної σ, яка вказує значення проекції вектора спіну $\vec{s}$ на деякий вибраний напрямок у просторі (вісь z) і пробігає $(2s+1)$-значень: $\sigma = -s, -s+1, ..., s$. Нехай $\Psi(\vec{r},\sigma)$ – така функція, яка по суті являє собою сукупність декількох різних функцій координат, що відповідають різним значенням σ; про них будемо говорити як про спінові компоненти хвильової функції. При цьому інтеграл $\int|\Psi(\vec{r},\sigma)|^2\,dV$ визначає ймовірність мати конкретне значення σ. Імовірність частинки перебувати в елементі об'єму dV, маючи довільне значення σ, дорівнює $dV\sum_\sigma|\Psi(\vec{r},\sigma)|^2$.

Квантово-механічний оператор спіну $\hat{\vec{s}}$ при застосуванні його до хвильової функції діє на спінову змінну σ. Іншими словами, він перетворює один компонент хвильової функції на інші компоненти (у деяких випадках може залишити його незмінним). Це можна реалізувати, якщо оператори спіну представляються у вигляді $(2s+1)$-рядних матриць. У цьому представленні оператори компонентів вектора спіну записуються у вигляді матриць $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$ і $\hat{s}_z$, елементи яких визначаються загальними формулами (див. розд. 3) при $l = s$ і $m = \sigma$:

$$\langle\sigma|\hat{s}_x|\sigma-1\rangle = \langle\sigma-1|\hat{s}_x|\sigma\rangle = \hbar\sqrt{(s+\sigma)(s-\sigma+1)}/2,$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\left\langle \sigma \left| \hat{s}_y \right| \sigma - 1 \right\rangle = -\left\langle \sigma - 1 \left| \hat{s}_y \right| \sigma \right\rangle = -i\hbar\sqrt{(s+\sigma)(s-\sigma+1)}\,/2\,,$$

$$\left\langle \sigma \left| \hat{s}_z \right| \sigma \right\rangle = \hbar\sigma\,.$$

Зокрема, у випадку спіну $\hbar/2$ ($s=1/2$, $\sigma=\pm 1/2$) ці оператори $\hat{\vec{s}} = \hbar\hat{\vec{\sigma}}/2$ виражаються через дворядні матриці Паулі

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

Зазначимо деякі специфічні властивості матриць Паулі. Безпосередньо перемножуючи ці матриці, одержуємо такі рівності:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{1}\,,$$

$$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_x\,,\ \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y\,,\ \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z\,.$$

Ці рівності можна об'єднати в одну $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k = \delta_{ik} + i\varepsilon_{ikl}\hat{\sigma}_l$, де $i,k,l = 1,2,3$, $\hat{\sigma}_1 = \hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_2 = \hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_3 = \hat{\sigma}_z$. Звідси, а також із правил комутацій $\left[\hat{s}_i, \hat{s}_k\right] = i\varepsilon_{ikl}\hbar\hat{s}_l$, знайдемо, що

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_i = 2\delta_{ik}\,,$$

тобто матриці Паулі антикомутативні. За допомогою цих рівностей можна переконатись у справедливості таких корисних формул: $\hat{\sigma}^2 = 3\hat{1}$, $\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{a}\right)\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{b}\right) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\hat{\vec{\sigma}}\left[\vec{a},\vec{b}\right]$, де $\vec{a}$ і $\vec{b}$ – довільні вектори, $\hat{1}$ – одинична матриця. Наведемо ще значення слідів (сум діагональних членів) матриць Паулі та їхніх добутків $\mathrm{Sp}\,\hat{\sigma}_i = 0$, $\mathrm{Sp}\,\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k = 2\delta_{ik}$.

Визначимо поведінку спінових функцій $\psi(\sigma)$ щодо поворотів навколо осі z. При повороті на скінченний кут φ ці функції переходять у функції $\psi'(\sigma) = \psi(\sigma)\exp(i\sigma\varphi)$. Зокрема, при повороті на кут 2π вони множаться на множник $\exp(2\pi i\sigma)$, однаковий для всіх σ і який дорівнює $(-1)^{2s}$ (число 2σ завжди має ту саму парність, що й $2s$).

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія для друку)

Таким чином, при повному повороті системи координат навколо осі z хвильові функції частинки із цілим спіном повертаються до свого початкового значення, а хвильові функції частинок із напівцілим спіном змінюють знак.

3. Якщо спін (фактично власне значення оператора спіну) дорівнює нулю, то хвильова функція має один компонент $\psi(0)$ і при дії оператора спіну вона перетворюється на нуль $\hat{\vec{s}}\psi(0)=0$. Це означає, що вона є скаляром.

Хвильова функція частинки зі спіном $s=1/2$ (в одиницях $\hbar$) має два компонента, для яких часто використовуються позначення $\psi^1 \equiv \psi(\sigma=+1/2)$ і $\psi^2 \equiv \psi(\sigma=-1/2)$. Таку двокомпонентну величину $\psi=\begin{pmatrix}\psi^1\\ \psi^2\end{pmatrix}\equiv\begin{pmatrix}\psi(1/2)\\ \psi(-1/2)\end{pmatrix}$ називають *спінором*. При довільному повороті системи координат компоненти спінора перетворюються лінійно, тобто $\psi^{\lambda'}=\left(\hat{U}\psi\right)^{\lambda}$, де $\hat{U}$ – унітарна матриця. Алгебра спіноров аналогічна тензорній алгебрі. Це досягається введенням поряд з контраваріантними компонентами спінора $\psi^{1,2}$ також коваріантних компонентів згідно з означенням $\psi_1=\psi^2$, $\psi_2=-\psi^1$. Інваріантна комбінація двох спіноров тоді записується у вигляді скалярного добутку $\psi^{\lambda}\varphi_{\lambda}=-\psi_{\mu}\varphi^{\mu}$, наслідком якого є те, що скалярний добуток спінора самого на себе дорівнює нулю $\psi^{\lambda}\psi_{\lambda}=0$. Перехід від контра- до коваріантних компонентів спіноров і навпаки можна представити у вигляді

$$\psi_{\lambda}=g_{\lambda\mu}\psi^{\mu},\ \psi^{\lambda}=g^{\mu\lambda}\psi_{\mu},$$

де $\left(g_{\lambda\mu}\right)=\left(g^{\lambda\mu}\right)=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}$ – метричний спінор у векторному просторі двох вимірів.

4. Аналогічно переходу від векторів до тензорів можна ввести поняття про спінори вищих рангів. Наприклад спінором дру-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (вірсія не для друку)

гого рангу назвемо чотирикомпонентну величину $\psi^{\lambda\mu}$, компоненти якої перетворюються як добутки $\psi^{\lambda}\varphi^{\mu}$ компонентів двох спінорів першого рангу. Розглядають також коваріантні $\psi_{\lambda\mu}$ і змішані $\psi_{\lambda}{}^{\mu}$ компоненти, які перетворюються відповідно як $\psi_{\lambda}\varphi_{\mu}$ і $\psi_{\lambda}\varphi^{\mu}$. Маємо такі зв'язки між ними: $\psi_{\lambda}{}^{\mu} = g_{\lambda\mu}\psi^{\nu\mu}$, $\psi_{\lambda\mu} = g_{\lambda\mu}g_{\mu\rho}\psi^{\nu\rho}$, так що $\psi_{12} = -\psi_{1}{}^{1} = -\psi^{21}$, $\psi_{11} = \psi_{1}{}^{2} = \psi^{22}$ і т. д. Самі величини $g_{\lambda\mu}$ складають антисиметричний одиничний спінор другого рангу. Можна переконатись, що при перетворенні координат його компоненти залишаються незмінними і $g_{\lambda\mu}g^{\mu\nu} = \delta_{\lambda}^{\nu}$. Аналогічним чином визначаються спінори довільного рангу. Наприклад, із двох спінорів другого і третього рангів $\psi_{\lambda\mu}$ і $\psi^{\nu\rho\sigma}$ можна утворити спінор п'ятого рангу $\psi_{\lambda\mu}{}^{\nu\rho\sigma}$ і т. д.

Як і в звичайній тензорній алгебрі, у спінорній алгебрі існує крім операції множення ще операція спрощення (згортання) за парою індексів, тобто підсумовування компонентів за однаковими значеннями одного коваріантного і одного контраваріантного індексів. Це призводить до зниження рангу спінора на дві одиниці. Наприклад, спрощення спінора $\psi_{\lambda\mu}{}^{\nu\rho\sigma}$ за індексами μ і ν дає спінор третього рангу $\psi_{\lambda\mu}{}^{\mu\rho\sigma}$; спрощення спінора $\psi_{\lambda}{}^{\mu}$ дає скаляр $\psi_{\lambda}{}^{\lambda}$ $\left(\psi_{\lambda}{}^{\lambda} = -\psi^{\lambda}{}_{\lambda}\right)$. Якщо спінор симетричний за якими-небудь двома своїми індексами, то в результаті спрощення за цими індексами одержимо нуль.

Симетричним спінором *n*-го рангу називаємо спінор, який симетричний за всіма своїми індексами. З асиметричного спінора можна скласти симетричний спінор шляхом операції симетризації. Із компонентів симетричного спінора неможливо скласти спінори більш низького рангу. Антисиметричний (за всіма своїми індексами) спінор може бути тільки спінором другого рангу і він зводиться до скаляра, помноженого на одиничний спінор $g_{\lambda\mu}$. Компоненти спінора $\psi^{*}_{\lambda\mu\ldots}$, комплексно-

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

спряженого з $\psi_{\lambda\mu\ldots}$, перетворюються як компоненти контраваріантного спінора $\varphi^{\lambda\mu\ldots}$, і навпаки. Відповідно, сума квадрадів модулей компонентів довільного спінора є інваріантом.

Для сукупності тотожних частинок справедливий такий принцип: у сукупності однакових частинок реалізуються лише такі стани, які не змінюються при обміні частинок. Хвильову функцію системи N тотожних невзаємодіючих частинок можна записати у найбільш загальному вигляді як

$$\Psi_{p_1,\ldots,p_N}(q_1,\ldots,q_N)=\sqrt{\frac{N_1!\cdot\ldots N_k!}{N!}}\sum\nolimits_{\nu}(\pm 1)^{\nu}\,P_{\nu}\psi_{p_1}(q_1)\cdot\ldots\cdot\psi_{p_N}(q_N),$$

де підсумовування проводиться за всіма можливими перестановками ν різних індексів p_1, …, p_k (при цьому $\sum_i N_i = N$). Нижній знак береться для системи ферміонів (частинок з напівцілим спіном), причому парна кількість перестановок дає знак "плюс", непарна відповідно – знак "мінус", а верхній знак береться для системи бозонів (частинок із цілим спіном). Очевидно, що в першому випадку антисиметрична хвильова функція записується у вигляді визначника

$$\Psi_{p_1,\ldots,p_N}(q_1,\ldots,q_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\psi_{p_1}(q_1) & \ldots & \psi_{p_1}(q_N)\\ \ldots & \ldots & \ldots\\ \psi_{p_N}(q_1) & \ldots & \psi_{p_N}(q_N)\end{vmatrix}.$$

У цьому випадку всі номери p_1, …, p_k мають бути різними, тобто звідси випливає так званий принцип Паулі: у системі однакових ферміонів не можуть одночасно перебувати в одному і тому ж квантовому стані дві (або більше) частинок. У другому випадку симетричну хвильову функцію також можна записати за допомогою визначника, але при його розкритті всі знаки "мінус" необхідно замінити на знак "плюс" (такий визначник називається *перманентом*). Для бозонних систем принцип Паулі вже не виконується. Це означає, що можливий випадок, коли всі частинки будуть перебувати в одному й тому ж стані (це т. зв. бозе-конденсат).

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

Якщо гамільтоніан системи не залежить від спінових ступенів вільності, то хвильову функцію можна представити у вигляді $\Psi(q_1,...,q_N)=\Phi(\vec{x}_1,...,\vec{x}_N)\chi(s_1,...,s_N)$, де функція Φ залежить лише від просторових координат (її називають координатною хвильовою функцією), а функція χ залежить лише від спінових змінних (її називають *спіновою хвильовою функцією*). Здавалось б, що спінова функція ніяк не впливає на фізичні властивості системи. Однак унаслідок принципу тотожності вибір симетрії функції χ задає симетрію функції Φ. Наприклад, для системи двох електронів для побудови антисиметричної функції є дві можливості: $\Psi^a=\Phi^s\chi^a$ або $\Psi^a=\Phi^a\chi^s$. Відповідно у першому випадку енергія дорівнює

$$E_s=\left\langle\Psi^a\left|\hat{H}\right|\Psi^a\right\rangle=\left\langle\chi^a\middle|\chi^a\right\rangle\left\langle\Phi^s\left|\hat{H}\right|\Phi^s\right\rangle=\left\langle\Phi^s\left|\hat{H}\right|\Phi^s\right\rangle,$$

а в другому $E_a=\left\langle\Phi^a\left|\hat{H}\right|\Phi^a\right\rangle$. Зрозуміло, що ці два значення різні. Цю залежність трактують як своєрідну взаємодію між частинками, яку називають *обмінною взаємодією*, а різницю між E_a і E_s – *обмінною енергією*. Це квантовий ефект, який є наслідком тотожності частинок.

5. При нерелятивістському русі електрона зі спіном $\vec{s}$ у магнітному полі з напруженістю $\vec{H}$ унаслідок наявності його магнітного моменту $\vec{\mu}_B=-(e/\mu c)\vec{s}$ виникає додаткова потенціальна енергія, яка дорівнює енергії магнітного диполя в полі $\vec{H}$: $W_{\vec{\mu}}=-\left(\vec{\mu}_B\cdot\vec{H}\right)=e\hbar\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{H}\right)\Big/2\mu c$. Це означає, що гамільтоніан для руху електрона в електромагнітному полі має бути доповнений цим додатковим членом, тобто він набуває такої форми:

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left[\hat{\vec{p}}+\frac{e}{c}\hat{\vec{A}}(\vec{r})\right]^2+\hat{U}(\vec{r})-e\hat{\Phi}(\vec{r})+\frac{e\hbar}{2\mu c}\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{H}\right).$$

Нестаціонарне рівняння Шредінгера для спінора $\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$ тепер матиме вигляд

Видавництво «Політехніка» (електронна версія)

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\vec{p}}+\frac{e}{c}\hat{\vec{A}}\right)\psi+\hat{U}\psi-e\hat{\Phi}\psi+\frac{e\hbar}{2\mu c}\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{H}\right)\psi.$$

Це рівняння називають *рівнянням Паулі*.

Повний електричний струм, пов'язаний з орбітальним і спіновим рухом, має вигляд

$$\vec{j}_e=\frac{ie\hbar}{2\mu}\left(\psi^+\nabla\psi-\psi\nabla\psi^+\right)+\frac{e^2}{\mu c}\vec{A}\left(\psi^+\psi\right)-\frac{e\hbar}{2\mu}\mathrm{rot}\left(\psi^+\hat{\vec{\sigma}}\psi\right).$$

5.1. Рух заряджених частинок у постійних електричних і магнітних полях без урахування спіну

1. Одержати вираз для гамільтоніана зарядженої частинки за наявності магнітного поля. Показати, що присутність у рівнянні Шредінгера векторного потенціалу не суперечить калібрувальній інваріантності.

Розв'язання: нерелятивістська функція Гамільтона має вигляд

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2+e\Phi\left(\vec{r}\right)+V\left(\vec{r}\right),$$

де $\Phi\left(\vec{r}\right)$ – скалярний потенціал електромагнітного поля, $V\left(\vec{r}\right)$ – потенціал сил неелектромагнітного походження (напр., ядерних сил). Тоді гамільтоніан одержуємо заміною вектора $\vec{p}$ оператором $-i\hbar\nabla$. У результаті приходимо до узагальненого рівняння Шредінгера $i\hbar\partial\psi/\partial t=\hat{H}\psi$, де

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\frac{ie\hbar}{2\mu c}\left(\nabla\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\nabla\right)+\frac{e^2}{2\mu c^2}\vec{A}^2+e\Phi+V.$$

Оскільки $\nabla\cdot\vec{A}\psi=\psi\mathrm{div}\vec{A}+\vec{A}\cdot\nabla\psi$, то останній вираз можна спростити:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\frac{ie\hbar}{\mu c}\left(\vec{A}\cdot\nabla+\frac{1}{2}\mathrm{div}\vec{A}\right)+\frac{e^2}{2\mu c^2}\vec{A}^2+e\Phi+V.$$

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (Версія не для друку)

Згідно з класичною теорією Максвелла, напруженості полів $\vec{H} = \mathrm{rot}\,\vec{A}$ і $\vec{E} = -\mathrm{grad}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ залишаються незмінними, якщо векторний $\vec{A}$ та скалярний Φ потенціали піддати одночасному калібрувальному перетворенню

$$\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \mathrm{grad}\chi\,,\ \Phi \to \Phi' = \Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \chi}{\partial t}\,,$$

де χ – довільна функція координат і часу. Якщо фізичні явища визначаються напруженостями полів, а не їхніми потенціалами, то ця калібрувальна інваріантність має спостерігатись і в квантовій теорії.

Якщо підставити вирази для $\vec{A}'$ і Φ' у гамільтоніан, то це призведе до появи додаткових членів, що порушить калібрувальну інваріантність рівняння Шредінгера. Існує єдина можливість позбутися цих додаткових членів. Для цього необхідно, щоб сама хвильова функція брала участь у калібрувальному перетворенні. Оскільки добуток $\psi^*\psi$ має безпосередній фізичний зміст, то він, так само як і напруженості полів, не має змінюватися при калібрувальному перетворенні. Таким чином, це перетворення має вигляд $\psi \to \psi' = \exp(i\alpha)\psi$, де α – деяка функція координат та часу. Очевидно, при цьому має бути

$$\nabla\psi' = \exp(i\alpha)(\nabla\psi + i\psi\nabla\alpha)\,,$$

$$\nabla^2\psi' = \exp(i\alpha)\left[\nabla^2\psi + 2i\nabla\psi\cdot\nabla\alpha + i\psi\nabla^2\alpha - (\nabla\alpha)^2\psi\right],$$

$$\dot{\psi}' = \exp(i\alpha)(\dot{\psi} + i\dot{\alpha}\psi)\,,$$

(тут крапка означає частинну похідну за часом). Підставляючи ці вирази в гамільтоніан і замінюючи при цьому $\vec{A}$ і Φ на $\vec{A}'$ та Φ', маємо

$$\exp(-i\alpha)\hat{H}'\psi' = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\nabla^2\psi + 2i\nabla\alpha\cdot\nabla\psi + i\psi\nabla^2\alpha - (\nabla\alpha)^2\psi\right] + \frac{ie\hbar}{\mu c}\cdot$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

$$\cdot\left[\vec{A}\cdot\nabla\psi+i\psi\vec{A}\cdot\nabla\alpha+\nabla\chi\cdot\nabla\psi+i\psi\nabla\chi\cdot\nabla\alpha+\frac{1}{2}\psi\left(\nabla\cdot\vec{A}\right)+\frac{1}{2}\psi\nabla^2\chi\right]+$$

$$+\frac{e^2}{2\mu c^2}\left[\vec{A}^2+2\vec{A}\cdot\nabla\chi+\left(\nabla\chi\right)^2\right]\psi+\left(e\Phi-\frac{e}{c}\dot{\chi}\right)+V\psi\,.$$

Після перегрупування членів цей вираз набуває вигляду

$$\exp\left(-i\alpha\right)\hat{H}'\psi'=\hat{H}\psi+\frac{ie\hbar}{\mu c}\nabla\left(\chi-\frac{\hbar c}{e}\alpha\right)\cdot\nabla\psi+$$

$$+\frac{ie\hbar}{2\mu c}\left[\nabla^2\left(\chi-\frac{\hbar c}{e}\alpha\right)+\frac{e^2}{\mu c^2}\vec{A}\cdot\nabla\left(\chi-\frac{\hbar c}{e}\alpha\right)\right]\psi+$$

$$+\frac{e^2}{2\mu c^2}\left\{(\nabla\chi)^2-2\frac{\hbar c}{e}\nabla\chi\cdot\nabla\alpha+\frac{\hbar^2c^2}{e^2}\left(\nabla\alpha\right)^2\right\}\psi-\frac{e}{c}\dot{\chi}\psi+V\psi.$$

Додаткові члени, які фігурують у цьому виразі, взаємно скорочуються, якщо покласти $\alpha=e\chi/\hbar c$. У результаті приходимо до такої рівності:

$$\exp\left(-i\alpha\right)\hat{H}'\psi'=\hat{H}\psi-e\dot{\chi}\psi/c\,.$$

Оскільки наше перетворення одночасно змінює і ліву частину рівняння Шредінгера

$$i\hbar\exp\left(-i\alpha\right)\dot{\psi}'=i\hbar\left(\dot{\psi}+i\dot{\alpha}\psi\right)=i\hbar\dot{\psi}-e\dot{\chi}\psi/c\,,$$

то останні члени в обох частинах рівняння Шредінгера взаємно скорочуються, і воно буде виконуватися для штрихованих величин так само, як і для нештрихованих. Цим і доводиться калібрувальна інваріантність теорії.

2. Записати гамільтоніан $\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\vec{p}}-e\vec{A}/c\right)^2+e\varphi-\left(\hat{\vec{m}}\cdot\vec{H}\right)$ для кулонівської калібровки $\operatorname{div}\vec{A}\left(\vec{r},t\right)=0$.

Вказівка: скористатися комутаційним співвідношенням $\left[\hat{\vec{p}},\vec{A}\left(\vec{r}\right)\right]=-i\hbar\operatorname{div}\vec{A}\left(\vec{r}\right)$.

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

3. Показати, що заміна в рівнянні Шредінгера вектор-потенціалу $\vec{A}$ і скалярного потенціалу φ на $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla f$ і $\varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{df}{dt}$ приводить до несуттєвих змін у хвильовій функції.

Розв'язання: нестаціонарне рівняння Шредінгера для частинки в полях, що характеризуються $\vec{A}$ та φ, має вигляд

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)\psi = \frac{1}{2\mu}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \psi .$$

З іншого боку, нестаціонарне рівняння Шредінгера для зміненої хвильової функції ψ' при заміні $\vec{A}$ та φ на $\vec{A}'$ та φ' має вигляд

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi + \frac{e}{c}\frac{df}{dt}\right)\psi' = \frac{1}{2\mu}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A} - e\nabla f\right)^2 \psi' .$$

Порівнюючи ці рівняння для ψ і ψ', бачимо, що дія оператора ∇ на ψ еквівалентна дії $\left(\nabla - ie\nabla f/\hbar c\right)$ на ψ'. Дія ж оператора $\partial/\partial t$ на ψ еквівалентна дії оператора $\left[\partial/\partial t - \left(ie/\hbar c\right)\partial f/\partial t\right]$ на ψ'. Це показує, що ψ відрізняється від ψ' лише на множник $\psi = \exp\left(-ief/\hbar c\right)\psi'$. При такій зміні хвильової функції вирази $\psi\psi^*$ та $\langle L\rangle = \int \psi^* \hat{L}\psi dV$ не змінюються.

4. Знайти рівні енергії та нормовані відповідним чином хвильові функції (квантування Ландау) стаціонарних станів зарядженої безспінової частинки в однорідному магнітному полі (напрямленому вздовж осі z), використовуючи такі калібровки векторного потенціалу:

а) $A_x = 0$, $A_y = Hx$, $A_z = 0$; б) $\vec{A} = \left[\vec{H}, \vec{r}\right]/2$.

Розв'язання:

а) оскільки оператори $\hat{p}_y$ і $\hat{p}_z$ комутують з гамільтоніаном частинки

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left[\hat{p}_x^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{eHx}{c}\right)^2 + \hat{p}_z^2\right],$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

то власну функцію можна шукати у вигляді

$$\Psi_{Ep_y p_z}(x,y,z)=\frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[i\left(p_y y+p_z z\right)/\hbar\right]\psi(x).$$

Підставляючи її в рівняння Шредінгера, одержуємо рівняння для функції $\psi(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{1}{2\mu}\left(p_y-\frac{eHx}{c}\right)^2\psi(x)=E_\perp\psi(x),$$

де введена енергія $E_\perp=E-p_z^2/2\mu$ поперечного руху. Розв'язок цього рівняння виражається через розв'язок рівняння Шредінгера для лінійного осцилятора з власною частотою $\omega_H=|e|H/\mu c$:

$$\Psi_{np_y p_z}(x,y,z)=\frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[i\left(p_y y+p_z z\right)/\hbar\right]\Psi_n^{\text{осц}}\left(x-cp_y/eH\right),$$

$$E_{np_z}=E_{\perp n}+p_z^2/2\mu,\ E_{\perp n}=\hbar\omega_H\left(n+1/2\right),\ n=0,1,\ldots\ .$$

Слід зазначити, що енергетичні рівні поперечного руху $E_{\perp n}$ – рівні Ландау – є дискретними, кратність виродження яких нескінченна (енергія не залежить від величини p_y, $-\infty<p_y<\infty$), а "поперечна" частина власної функції гамільтоніана $\Psi_{np_y p_z}$ не може бути нормована на одиницю, оскільки $|\Psi|^2$ взагалі не залежить від y;

б) при такому виборі векторного потенціалу гамільтоніан частинки має вигляд

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu}-\frac{e\hbar H\hat{L}_z}{2\mu c}+\frac{e^2H^2\rho^2}{8\mu c^2}\equiv\hat{H}_\perp+\frac{\hat{p}_z^2}{2\mu}.$$

Оскільки оператори $\hat{L}_z$, $\hat{p}_z$ та $\hat{H}$ взаємно комутують один з одним, то власні функції в циліндричній системі координат можна вибрати у вигляді

$$\Psi_{Emp_z}(\rho,z,\varphi)=\exp\left[i\left(m\varphi+p_z z/\hbar\right)\right]\sqrt{\rho}f(\rho)/2\pi\sqrt{\hbar}\ .$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Із рівняння Шредінгера одержуємо рівняння для радіальної функції:

$$f'' + \frac{2}{\rho} f' + \left(\frac{2\mu E_\perp}{\hbar^2} - \frac{m^2 - 1/4}{\rho^2} + \frac{emH}{\hbar c} - \frac{e^2 H^2 \rho^2}{4\hbar^2 c^2} \right) f = 0.$$

Розв'язок цього рівняння має вигляд

$$f = C \frac{\exp(-x/2) x^{|m|/2}}{\sqrt{\rho}} {}_1F_1 \left(\frac{-2E_\perp / \hbar\omega_H + |m| + 1 - em/|e|}{2}, |m| + 1; x \right),$$

$$x = \rho^2 / 2a_H^2, \quad a_H = \sqrt{\hbar / \mu\omega_H}, \quad \omega_H = |e| H / \mu c,$$

де ${}_1F_1(\alpha, \beta; x)$ – гіпергеометрична функція. Наступна вимога, щоб ${}_1F_1$ зводилась до полінома

$$\left(-2E_\perp / \omega_H + |m| + 1 - em/|e| \right) / 2 = -n_\rho,$$

де $n_\rho = 0, 1, \ldots$, визначає енергетичний спектр поперечного руху частинки. Звідси випливає $E_{\perp n} = \hbar\omega_H (n + 1/2)$, де $n = n_\rho + \left[\left(|m| - em/|e| \right) / 2 \right]$, $n = 0, 1, \ldots$. При цьому рівню $E_{\perp n}$ з даним n відповідають стани частинок зі значеннями проекції моменту m на напрямок магнітного поля, що дорівнюють $m = -n, -n+1, \ldots, 0, +1, \ldots, +\infty$ при $e > 0$, $m = -\infty, \ldots, -1, 0, \ldots, n$ при $e < 0$. Нескінченна кількість можливих значень m відповідає нескінченній кратності виродження рівнів Ландау.

Зауважимо, що власні функції гамільтоніана описують стани частинки, локалізовані в поперечних (перпендикулярних до $\vec{H}$) напрямках. Для нормування на одиницю "поперечної" частини $\Psi_{nm}(\rho, \varphi)$ власних функцій гамільтоніана значення нормуючого коефіцієнта слід обрати таким, що дорівнює

$$|C|^2 = \left(|m| + n_p \right)! / n_p! \left(|m|! \right)^2 a_H^2 .$$

У зв'язку з питанням про нормування хвильових функцій стаціонарних станів дискретного спектра нагадаємо, що для частинки в потенціальному полі $U(\vec{r})$ вони завжди локалізовані в обмеженій області простору. Їхні незвичні для частинки в одно-

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

рідному магнітному полі властивості пов'язані з тією обставиною, що дискретні енергетичні рівні поперечного руху мають нескінченну кратність виродження. Дійсно, розглянемо хвильовий пакет, складений із власних функцій Ψ_{np_y} :

$$\Psi_n(x,y) = \int C(p_y)\Psi_{np_y}(x,y)dp_y.$$

Ця хвильова функція також відповідає рівню Ландау $E_{\perp n}$, причому, якщо $\int \left|C(p_y)\right|^2 dp_y = 1$, то вона вже нормована на одиницю й описує локалізований стан частинки, на відміну від ненормованих на одиницю Ψ_{np_y}. І навпаки, із нормованих Ψ_{nm} можна скласти хвильові функції вигляду $\tilde{\Psi}_n = \sum_m C_m \Psi_{nm}$. Вони також відповідають рівню Ландау $E_{\perp n}$, проте у випадку $\sum_m \left|C_m\right|^2 = \infty$ вже не описують локалізованого у площині (x,y) стану частинки.

5. Для зарядженої безспінової частинки в постійному однорідному магнітному полі знайти оператори координат центра орбіти $\hat{\vec{\rho}}_0$ поперечного (перпендикулярного магнітному полю, напрямленого вздовж осі z) руху, квадрата радіуса-вектора цього центра $\hat{\vec{\rho}}_0^2$ і квадрата радіуса ларморівської орбіти $\hat{\vec{\rho}}_л^2$. Встановити комутаційні співвідношення для цих операторів один з одним та з гамільтоніаном.

Розв'язання: обираємо вісь z уздовж напрямку магнітного поля. У класичній механіці рух зарядженої частинки в перпендикулярній магнітному полю площині відбувається по колу (ларморівська орбіта) з квадратом радіуса

$$\rho_л^2 = v_\perp^2 / \omega_H^2 \equiv \left(v_x^2 + v_y^2\right) / \omega_H^2 \,, \;\; \omega_H = |e| H / \mu c \,.$$

При цьому вектори $\vec{\rho}$, $\vec{\rho}_0$, $\vec{v}_\perp$ – радіус-вектори частинки, центра орбіти (кола) і швидкості пов'язані співвідношенням $\left[\vec{\omega}, \left(\vec{\rho} - \vec{\rho}_0\right)\right] = \vec{v}_\perp$, $\vec{\omega} = \left(0, 0, \omega = -e\omega_H / |e|\right)$. Ця формула виражає

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

характер руху частинки у площині (x,y) – рівномірне обертання, причому знак ω визначає напрямок обертання. Звідси випливають співвідношення

$$x_0 = x - v_y/\omega, \quad y_0 = y + v_x/\omega, \quad \rho_0^2 = x_0^2 + y_0^2.$$

Квантово-механічним узагальненням цих виразів класичної механіки є відповідні ермітові оператори:

$$\hat{x}_0 = \hat{x} - \hat{v}_y/\omega = x - \left(-i\hbar\partial/\partial y - eA_y/c\right)\Big/\mu\omega,$$

$$\hat{y}_0 = \hat{y} + \hat{v}_x/\omega \ , \quad \hat{\rho}_0^2 = \hat{x}_0^2 + \hat{y}_0^2, \quad \hat{\rho}_л^2 = \left(\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2\right)\Big/\omega^2$$

(при цьому $\mu\hat{\vec{v}} = \hat{\vec{p}} - e\vec{A}/c$, $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$), для яких маємо такі комутаційні співвідношення:

$$\left[\hat{H},\hat{x}_0\right] = \left[\hat{H},\hat{y}_0\right] = \left[\hat{H},\hat{\rho}_0^2\right] = \left[\hat{H},\hat{\rho}_л^2\right] = 0,$$

$$\left[\hat{x}_0,\hat{y}_0\right] = -i\hbar c/eH, \quad \left[\hat{\rho}_0^2,\hat{\rho}_л^2\right] = 0.$$

Комутативність введених операторів з гамільтоніаном частинки означає, що відповідні фізичні величини є інтегралами руху, як і в класичній механіці.

6. Для зарядженої безспінової частинки в постійному однорідному магнітному полі знайти спектр власних значень операторів $\hat{\bar{\rho}}_0^2$ і $\hat{\bar{\rho}}_л^2$ (див. попередню задачу).

Розв'язання: оскільки $\hat{\rho}_л^2 = 2\hat{H}_\perp/\mu\omega_H^2$, де $\hat{H}_\perp = \hat{H} - \hat{p}_z^2/2\mu$ – гамільтоніан поперечного руху частинки, то скориставшись результатом із задачі 4 цього розділу, знаходимо спектр власних значень квадрата радіуса орбіти

$$\left(\rho_л^2\right)_n = (2n+1)a_H^2, \quad a_H^2 = \hbar c/|e|H, \quad n = 0,1,\ldots.$$

Вибираючи векторний потенціал у вигляді $\vec{A} = \left[\vec{H},\vec{r}\right]/2$, помічаємо, що $\mu\omega_H^2\hat{\rho}_0^2 = 2\hat{H}_\perp + 2\left(e/|e|\right)\omega_H\hat{l}_z$, а отже, хвильові функції

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
Зверсія не для друку

$\Psi_{np_y p_z}$ із задачі 4 є власними функціями оператора $\hat{\rho}_0^2$. При цьому спектр його власних значень такий: $\left(\rho_0^2\right)_k = (2k+1)a_H^2$, $k = n + em/|e| = 0,1, \ldots$.

Щодо власних значень як оператора $\hat{x}_0$, так і оператора $\hat{y}_0$, то вони мають неперервні спектри. Зазначимо, зокрема, що хвильові функції $\Psi_{np_y p_z}$ із задачі 4 є власними функціями оператора $\hat{x}_0$, які відповідають власним значенням $x_0 = -p_y/\mu\omega$. Але внаслідок некомутативності операторів $\hat{x}_0$ і $\hat{y}_0$ положення самого центра орбіти точно не визначене й обмежене співвідношенням невизначеностей $\Delta x_0 \Delta y_0 \geq a_H^2/2$.

7. Для безспінової частинки із зарядом e у постійному однорідному магнітному полі знайти поперечний просторовий розподіл у стаціонарних станах Ψ_{ntp_z} (див. задачу 4 для калібровки $\vec{A} = \left[\vec{H}, \vec{r}\right]/2$) у випадках: а) $m = -en/|e|$ (при цьому спеціально обговорити значення $n >> 1$ і виконати граничний перехід до класичної механіки); б) $n = 0$ і $|m| >> 1$.

Розв'язання:

а) використовуючи хвильові функції для частинки в однорідному магнітному полі для станів із $m = -en/|e|$, одержуємо розподіл імовірностей

$$dw(\rho) = \left|\Psi_{ntp_z}\right|^2 2\pi\rho d\rho = \frac{1}{n! a_H^2}\left(\frac{\rho^2}{2a_H^2}\right)^n \exp\left(-\frac{\rho^2}{2a_H^2}\right)\rho d\rho,$$

за допомогою якого знаходимо

$$\langle\rho\rangle = \int \rho dw = \Gamma(n+3/2)\sqrt{2}a_H/n!, \quad \left\langle\rho^2\right\rangle = 2(n+1)a_H^2,$$

де $\rho_{\text{н.ім}} = \sqrt{2n+1}a_H$ – найбільш імовірне значення змінної ρ, яке відповідає максимуму розподілу $dw/d\rho$.

Вінницький національний технічний університет (Вінницький університет "Політехніка") (версія не для друку)

Зазначимо, що в розглянутих станах оператори $\hat{\rho}_0^2$ та $\hat{\rho}_л^2$ (див. задачу 6) мають значення $\left(\rho_0^2\right)_0 = a_H^2$, $\left(\rho_л^2\right)_n = (2n+1)a_H^2$.

У випадку квазікласичного наближення, коли $n >> 1$, при використанні для гамма-функції за $x \to \infty$ асимптотики $\Gamma(x) \approx \sqrt{2\pi}x^{x-1/2}\exp(-x)$ знаходимо $\langle\rho\rangle \approx \sqrt{2n}a_H$, а отже, $\rho_{н.ім} = \sqrt{\left(\rho_л^2\right)_n} \approx \sqrt{\left\langle\rho^2\right\rangle} \approx \langle\rho\rangle \approx \sqrt{2n}a_H >> a_H$. Одержані співвідношення означають, що радіальний (за змінної ρ) розподіл імовірностей при $n >> 1$ має різкий максимум поблизу значення $\rho_{н.ім}$. При цьому вираз dw у найбільш суттєвій області значень ρ можна перетворити до вигляду

$$dw \approx \left(\pi a_H^2\right)^{-1/2} \exp\left[-(\rho - \rho_{н.ім})^2 / a_H^2\right] d\rho$$

і знайти $\Delta\rho \equiv \sqrt{\left\langle\rho^2\right\rangle - \langle\rho\rangle^2} \approx a_H / \sqrt{2} << \langle\rho\rangle$.

Таким чином, імовірність знаходження частинки помітно відмінна від нуля лише у вузькій кільцевій області радіуса $\sqrt{2n}a_H$ і ширини порядку a_H. Це відповідає переходу до класичної картини руху, де радіус орбіти частинки пов'язаний з енергією частинки так само, як і в класичній механіці. При цьому співвідношення $m = -en/|e|$ для значень $n >> 1$ після підстановок $m = M_z/\hbar$ та $n = E_\perp/\hbar\omega_H$ переходять у класичний зв'язок між моментом частинки щодо центра орбіти та енергією поперечного руху, а саме: $E_\perp = |e||M_z|H/\mu c = \left(\vec{\omega}, \vec{M}\right)$;

б) тепер при $n = 0$ і $m = -e|m|/|e|$ маємо розподіл імовірностей

$$dw = \left(\rho^2/2a_H^2\right)^{|m|} \exp\left(-\rho^2/2a_H^2\right)\rho d\rho \Big/ |m|!a_H^2 ,$$

який відрізняється від dw у пункті (а) лише заміною n на $|m|$. Аналогічна заміна у формулах для $\langle\rho\rangle$, $\left\langle\rho^2\right\rangle$ і $\rho_{н.ім}$ визначає

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет Версія не для друку

для даного випадку й інші характеристики радіального розподілу частинки, а саме: $\left(\rho_{\text{л}}^2\right)_0 = a_H^2$, $\left(\rho_0^2\right)_{|m|} = \left(2|m|+1\right)a_H^2$ тощо.

Інтерпретація розглянутих станів частинки має мало спільного з попереднім випадком. Енергія поперечного руху при $n=0$ набуває мінімального значення, що дорівнює $\hbar\omega_H/2$, і такі стани є істотно "некласичними". Маючи на увазі, що тепер замість $\left(\rho_0^2\right)_0 = a_H^2$ і $\left(\rho_{\text{л}}^2\right)_n = \left(2n+1\right)a_H^2$ беруться $\left(\rho_{\text{л}}^2\right)_0 = a_H^2$, $\left(\rho_0^2\right)_{|m|} = \left(2|m|+1\right)a_H^2$, просторовому розподілу частинки при $|m| >> 1$ у таких станах можна зіставити таку картину: однорідний розподіл орбіт мінімального радіуса, що дорівнює $\sqrt{\left(\rho_{\text{л}}^2\right)_0} = a_H$ по вузькій кільцеподібній області радіуса $R \approx \sqrt{2|m|}a_H >> a_H$ і шириною порядку a_H.

8. На електрон, який перебуває в центральному полі (напр., у полі ядра атома), додатково діє однорідне магнітне поле $\vec{H}$. Визначити стаціонарні стани електрона. Спін електрона не враховувати.

Розв'язання: нехтуючи релятивістськими ефектами, диференційне рівняння для стаціонарних станів електрона набуває вигляду

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 u - \frac{ie\hbar}{\mu c}\left(\vec{A}\cdot\nabla\right)u + Vu = Eu,$$

причому ми скористалися кулонівською калібровкою $div\vec{A} = 0$ і знехтували доданком, пропорційним $\vec{A}^2$. У випадку однорідного поля $\vec{H}$, напрямленого вздовж осі z, можна задовольнити цю умову калібрування, якщо вибрати $A_x = -Hy/2$, $A_y = Hx/2$, $A_z = 0$. При цьому $\vec{A}\cdot\nabla \mathrm{u} = \frac{1}{2}H\left(x\frac{\partial u}{\partial y} - y\frac{\partial u}{\partial x}\right) = \frac{1}{2}H\frac{\partial u}{\partial \varphi}$ і рівняння Шредінгера можна записати у вигляді

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 u - \frac{ie\hbar}{2\mu c}H\frac{\partial u}{\partial\varphi} + Vu = Eu.$$

Зауважимо, що член, який містить магнітне поле, можна переписати як $e\vec{H}\cdot\hat{\vec{L}}/2\mu c$, де $\hat{\vec{L}}$ – оператор моменту кількості руху, z-складова якого дорівнює $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$. Згідно з класичною теорією електромагнетизму частинка із зарядом $-e$ та моментом кількості руху $\vec{L}$ створює магнітний момент $\vec{M} = -e\vec{L}/2\mu c$, а тому цей член можна записати ще у вигляді $-\vec{M}\cdot\vec{H}$. Розв'язок диференційного рівняння шукаємо у вигляді $u = f_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$. Тоді член, що містить магнітне поле, дає у рівняння внесок $e\hbar mHu/2\mu c$, тобто рівняння переписується у вигляді

$$-\hbar^2\nabla^2 u/2\mu + Vu = \left(E - e\hbar mH/2\mu c\right)u.$$

Це рівняння за формою збігається з диференційним рівнянням для випадку $H = 0$. Звідси випливає, що під дією магнітного поля енергетичні рівні розщеплюються:

$$E_{nlm} = E_{nl}^0 + e\hbar mH/2\mu c,$$

де через E_{nl}^0 позначені власні значення для випадку $H = 0$. Ураховуючи, що $\hbar m = L_z$, і беручи до уваги рівність $\vec{M} = -e\vec{L}/2\mu c$, останнє співвідношення можна звести до вигляду $E_{nlm} = E_{nl}^0 - \vec{M}\cdot\vec{H}$, що й слід було очікувати, виходячи з класичних міркувань. Характерний магнітний момент $e\hbar/2\mu c$ називають магнетоном Бора, а квантове число m – магнітним квантовим числом. У даному випадку система власних станів така ж сама, що і за $H = 0$, але магнітне поле знімає просторове виродження енергетичних рівнів.

9. Скласти вектор густини струму ймовірності $\vec{j}$ для частинки із зарядом e у магнітному полі.

Розв'язання: запишемо нестаціонарне рівняння Шредінгера

Видавничий центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\frac{ie\hbar}{\mu c}\left(\vec{A}\cdot\nabla+\frac{1}{2}\mathrm{div}\vec{A}\right)+\frac{e^2}{2\mu c^2}\vec{A}^2+e\Phi\right]\Psi$$

та комплексно-спряжене рівняння Шредінгера

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{ie\hbar}{\mu c}\left(\vec{A}\cdot\nabla+\frac{1}{2}\mathrm{div}\vec{A}\right)+\frac{e^2}{2\mu c^2}\vec{A}^2+e\Phi\right]\Psi^*.$$

Помножимо перше рівняння на Ψ^*, а друге відповідно на Ψ. Далі, віднімаючи одержані вирази та ділячи на $i\hbar$, маємо

$$\frac{\partial\left(\Psi\Psi^*\right)}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2\mu}\left(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*\right)+\frac{e}{\mu c}\left[\vec{A}\cdot\nabla\left(\Psi\Psi^*\right)+\Psi\Psi^*\mathrm{div}\vec{A}\right].$$

Величина $\rho=\Psi\Psi^*$ є густиною ймовірності. Оскільки праву частину цього виразу можна представити у вигляді дивергенції від деякого вектора, то одержуємо рівняння неперервності $\partial\rho/\partial t+\mathrm{div}\vec{j}=0$, де шуканий вектор густини струму ймовірності має вигляд

$$\vec{j}=\frac{i\hbar}{2\mu}\left(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi\right)-\frac{e\rho}{\mu c}\vec{A}.$$

10. Провести канонічне перетворення $\psi=\hat{S}\varphi$, де $\hat{S}=\exp\left[i\sum_k e_k\left(\vec{r}_k\cdot\vec{A}(t,0)\right)/\hbar c\right]$, у нестаціонарному рівнянні Шредінгера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left\{\sum_k\frac{1}{2\mu_k}\left[\vec{p}_k-\frac{e_k\vec{A}(t,\vec{r}_k)}{c}\right]^2+V\right\}\psi.$$

Вважаючи, що розміри атома набагато менші за довжину хвилі електромагнітного випромінювання, розкласти векторний потенціал у ряд $\vec{A}(t,\vec{r})=\vec{A}(t,0)+(\vec{r}\cdot\nabla)\vec{A}(t,0)$ та одержати рівняння для функції φ.

Розв'язання: у новому представленні, помноживши нестаціонарне рівняння Шредінгера зліва на $\hat{S}^+$, одержуємо

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}-\sum_k e_k\vec{r}_k\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}(t,0)}{\partial t}\varphi=\left\{\sum_k\left[\left(\hat{S}^+\hat{\vec{P}}_k^2\hat{S}\right)\Big/2\mu_k\right]+V\right\}\varphi,$$

де $\hat{\vec{P}}_k=\hat{\vec{p}}_k-e_k\vec{A}(t,\vec{r}_k)/c$. Очевидно, що $\hat{S}^+\hat{\vec{P}}_k^2\hat{S}=\left(\hat{S}^+\hat{\vec{P}}_k\hat{S}\right)^2$, $\hat{S}^+\hat{\vec{P}}_k\hat{S}=\hat{\vec{p}}_k-\frac{e_k}{c}\left[(\vec{r}_k\cdot\nabla_k)\vec{A}(t,\vec{r}_k)\right]_{\vec{r}_k=0}$ (при цьому був використаний вказаний у задачі розклад $\vec{A}(t,\vec{r}_k)$). Після підстановки останньої рівності в попередню, а також нехтуванням членами порядку $\vec{r}_k^2$ та $(\vec{r}_k\cdot\vec{p}_k)$, приходимо до рівняння для функції φ:

$$i\hbar\partial\varphi/\partial t=\left[\sum_k\left(\hat{\vec{P}}_k^2/2\mu_k\right)+\left(V-\vec{E}\vec{d}\right)\right]\varphi,$$

де $\vec{d}=\sum_k e_k\vec{r}_k$ – дипольний момент, $\vec{E}=-\partial\vec{A}(t,0)/c\partial t$, $\mathrm{div}\vec{A}=0$.

11. Визначити спектр і хвильові функції для зарядженої безспінової частинки, яка перебуває у взаємно перпендикулярних однорідних електричному та магнітному полях.

Розв'язання: спрямуємо вісь z уздовж магнітного поля, а вісь x – уздовж електричного поля та виберемо векторний потенціал у вигляді $A_x=0$, $A_y=Hx$, $A_z=0$. Тоді гамільтоніан частинки набуває такого вигляду:

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left\{\hat{p}_x^2+\left(\hat{p}_y-\frac{eH}{c}x\right)^2+\hat{p}_z^2\right\}-eEx.$$

Унаслідок взаємної комутативності операторів $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ і $\hat{H}$ його власні функції можна шукати у вигляді

$$\Psi_{Ep_yp_z}(x,y,z)=(2\pi\hbar)^{-1}\exp\left[i\left(p_yy+p_zz\right)/\hbar\right]f(x).$$

При цьому із рівняння Шредінгера одержуємо рівняння для функції $f(x)$:

$$f''(x)+\left[2\mu E_\perp+2\mu eEx-\left(p_y-eHx/c\right)^2\right]\hbar^{-2}f(x)=0,$$

Фрагмент фотографії
Київський університет
Версія 16 (ПХДФ/КУ)

де $E_{\perp} = E - p_z^2 / 2\mu$. Останнє рівняння зводиться до рівняння Шредінгера для лінійного осцилятора з власною частотою $\omega_H = |e| H / \mu c$. Користуючись його розв'язками, записуємо власні функції та спектр гамільтоніана $\hat{H}$ у вигляді

$$\Psi_{np_y p_z}(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left[i\left(p_y y + p_z z \right) / \hbar \right] \psi_n^{\text{осц}} \left(x - \frac{c p_y}{eH} - \frac{\mu c^2 E}{eH^2} \right),$$

$$E_{np_y p_z} = \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{cEp_y}{H} - \frac{\mu c^2 E^2}{2H^2} + \frac{p_z^2}{2\mu}, \text{ де } n = 0, 1, \ldots .$$

Наведемо ряд властивостей одержаних результатів:

1) енергетичний спектр частинки – неперервний і необмежений знизу;

2) власні функції описують стани, у яких частинка вздовж осі x є локалізованою;

3) похідні $\partial E_{np_y p_z} / \partial p_z = p_z / \mu$ та $\partial E_{np_y p_z} / \partial p_y = -Ec / H$ визначають відповідно z-компоненту швидкості частинки і швидкість її дрейфу вздовж осі y.

12. Визначити спектр і хвильові функції для зарядженої безспінової частинки, яка перебуває у паралельних однорідних електричному і магнітному полях.

Розв'язання: вибираємо вісь z уздовж напрямку електричного та магнітного полів. Для калібровки векторного потенціалу $\vec{A} = \left[\vec{H}, \vec{r} \right] / 2$ гамільтоніан частинки набуває вигляду

$$\hat{H} = \hat{H}_{\perp} + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} - eEz,$$

де $\hat{H}_{\perp}$ – гамільтоніан поперечного руху (див. задачу 4). При цьому зберігається розподіл "поперечного" і "повздовжнього" рухів частинки, але тепер повздовжній рух відповідає частинці в однорідному полі, а не вільній, як у задачі 4. Відповідно розв'язок задачі, що розглядається, одержуємо із формул задачі 4 заміною $p_z^2 / 2\mu$ на енергію E_l повздовжнього руху та плоскої

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

хвилі $\Psi_{p_z}(z)$ на хвильову функцію $\Psi_{E_l}(z)$ частинки в однорідному полі (див. задачу 5 із підрозд. 2.1). Зазначимо, що енергетичний спектр частинки є неперервним і необмеженим знизу.

13. Знайти рівні енергії та нормовані хвильові функції стаціонарних станів зарядженого сферичного осцилятора (заряджена частинка в потенціалі $U(r)=kr^2/2$), який перебуває в однорідному магнітному полі. Дослідити граничні випадки а) слабкого і б) сильного магнітних полів.

Розв'язання: при виборі векторного потенціалу $\vec{A}=\left[\vec{H},\vec{r}\right]/2$, гамільтоніан частинки в циліндричних координатах, де вісь *z* напрямлена вздовж магнітного поля, набуває вигляду

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{eH\hat{L}_z}{\hbar c}\right]+\left(\frac{k}{2}+\frac{e^2H^2}{8\mu c^2}\right)\rho^2+\hat{H}_l,$$

де $\hat{H}_l=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{kz^2}{2}$ – оператор лінійного осцилятора. Оскільки оператори $\hat{L}_z$, $\hat{H}_l$ та $\hat{H}$ взаємно комутативні, то власні функції гамільтоніана можна вибрати у вигляді

$$\Psi_{Emn_2}=\exp(im\varphi)\Psi^{\text{осц}}_{n_2}(z)\sqrt{\rho}f(\rho)\Big/\sqrt{2\pi},$$

де $n_2=0,1,\ldots$. При цьому рівняння Шредінгера зводиться до рівняння для функції $f(\rho)$:

$$f''+\frac{2}{\rho}f'+\left(\frac{2\mu E_\perp}{\hbar^2}+\frac{eHm}{\hbar c}-\frac{m^2-1/4}{\rho^2}-\frac{\rho^2}{4b^4}\right)f=0,$$

де

$$E_\perp=E-\hbar\omega\left(n_2+1/2\right),\ \omega=\sqrt{k/\mu},$$

$$\omega_H=|e|H/\mu c,\ b=\left(\hbar/\mu\right)^{1/2}\left(4\omega^2+\omega_H^2\right)^{-1/4}.$$

Воно відрізняється від рівняння Шредінгера для сферичного осцилятора лише перепозначенням величин. Таким чином, маємо

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет імені
Версія тільки для ознайомлення

$$\sqrt{\rho} f_{n_1 m} = C\left(\rho/b\right)^{|m|} \exp\left(-\rho^2/4b^2\right) {}_1F_1\left(-n_1, |m|+1; \rho^2/2b^2\right),$$

$$E_{\perp n_1 m} = -\frac{\hbar\omega_H em}{2|e|} + \frac{\hbar}{2}\sqrt{\omega_H^2 + 4\omega^2}\left(2n_1 + |m| + 1\right),$$

де $n_1 = 0,\ 1,\ \ldots$. Одержані вирази визначають власні функції та спектр гамільтоніана осцилятора в магнітному полі:

$$E_{n_1 m n_2} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\omega_H^2 + 4\omega^2}\left(2n_1 + |m| + 1\right) + \hbar\omega\left(n_2 + \frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar\omega_H em}{2|e|}.$$

У випадку слабкого поля, коли $\omega_H << \omega$, маємо

$$E_{n_1 m n_2} \approx E_N^{(0)} - \frac{e\hbar m H}{2\mu c} + \frac{e^2\hbar\left(2n_1 + |m| + 1\right)H^2}{8\mu^2 c^2 \omega}.$$

Тут $E_N^{(0)} = \hbar\omega\left(N + 3/2\right)$ визначає рівні незбуреного сферичного осцилятора, при цьому $N = 2n_1 + |m| + n_2$. Лінійна щодо H частина зсуву рівнів відповідає взаємодії магнітного моменту осцилятора з магнітним полем, яка описується виразом $\hat{V} = -\left(\hat{\vec{\mu}} \cdot \hat{\vec{H}}\right)$, де $\hat{\vec{\mu}} = e\hbar\hat{\vec{l}}/2\mu c$ – оператор орбітального магнітного моменту зарядженої частинки. Квадратичний щодо H доданок визначає діамагнітну частину зсуву рівня. Зокрема, для основного рівня лінійній по полю зсув відсутній і $\Delta E_0 \approx -\chi_0 H^2/2$, де $\chi_0 = -\hbar e^2/4\mu^2 c^2 \omega$ визначає магнітну сприйнятливість основного стану осцилятора.

У випадку сильного магнітного поля, коли $\omega_H >> \omega$, одержуємо $E_{n_1 m n_2} \approx E_{\perp n} + \hbar\omega^2\left(2n_1 + |m| + 1\right)/\omega_H + E_{l n_2}$. Тепер "поперечна" частина спектра визначається в основному дією магнітного поля, і $E_{\perp n} = \hbar\omega_n\left(n + 1/2\right)$ відповідає спектру рівнів Ландау, де $n = n_1 + |m|/2 - em/2|e|$. Другий доданок дає поправку, що враховує вплив пружної сили на поперечний рух частинки. Нарешті, останній доданок $E_{l n_2} = \hbar\omega\left(n_2 + 1/2\right)$ відповідає енергії вільних коливань уздовж напрямку магнітного поля.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Свідоцтво ДК № 1105 від 31.03.2003 р.)

14. Показати, що магнітне поле $\vec{H}(\vec{r})$, яке відмінне від нуля в обмеженій області простору, не може "зв'язати" заряджену безспінову частинку (тому не існує стаціонарних станів, у яких частинка локалізована в обмеженій області простору). Чому цей результат не суперечить існуванню магнітних пасток для заряджених частинок у класичній механіці?

Розв'язання: власні значення гамільтоніана частинки $\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2$ додатні, а при значеннях енергії $E > 0$ на великих відстанях, де частинка є вільною, не існує спадаючих при $r \to +\infty$ розв'язків рівняння Шредінгера. Незважаючи на те, що зв'язаних станів частинки не існує, можуть існувати квазістаціонарні стани, час життя яких у макроскопічних умовах може вважатися нескінченно великим.

15. Показати, що за наявності в просторі однорідного магнітного поля у зарядженої частинки в довільному потенціалі притягування, що задовольняє умови $U(r) \le 0$, $U(r) \to 0$ при $r \to \infty$, завжди існують стаціонарні стани, в яких вона локалізована в обмеженій області простору (і не тільки в поперечному напрямку). У випадку неглибокої потенціальної ями наближено оцінити енергію зв'язку частинки.

Розв'язання: скористаємось варіаційним методом. Вибравши векторний потенціал у вигляді $\vec{A} = \left[\vec{H}, \vec{r}\right]/2$, запишемо гамільтоніан частинки $\hat{H} = \hat{H}_\perp + \hat{p}_z^2/2\mu + U(r)$, де $\hat{H}_\perp$ – поперечна частина гамільтоніана в магнітному полі, яке напрямлене вздовж осі z (див. задачу 4). Розглянемо тепер нормовані на одиницю хвильові функції вигляду

$$\Psi_{0m} = \sqrt{\kappa}\exp\left(-\kappa|z|\right)\Psi_{n=0,m}(\rho,\varphi),$$

де Ψ_{nm} – поперечна частина хвильової функції із задачі 4. Для неї $\hat{H}_\perp \Psi_{0m} = \left(\hbar\omega_H/2\right)\Psi_{0m}$, де $\omega_H = |e|H/\mu c$. Середнє значення енергії частинки в стані з хвильовою функцією Ψ_{0m} дорівнює

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

$$\left\langle E_m(\kappa)\right\rangle = \int \Psi_m^* \hat{H} \Psi_m dV =$$

$$= \frac{\hbar\omega_H}{2} + \frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu} + \kappa\int U(r)\exp\left(-2\kappa|z|\right)\left|\Psi_{0m}\right|^2 dV .$$

Оскільки згідно з умовою $U(r) \le 0$, то за достатньо малих значень параметра κ завжди буде $\left\langle E_m(\kappa)\right\rangle < \hbar\omega_H/2$. Ця нерівність означає, що у гамільтоніана існують власні значення, які менші $\hbar\omega_H/2$ (мінімального значення частинки в однорідному магнітному полі), і тому існують відповідні зв'язані стани частинки, в яких вона не може йти на нескінченність. Зазначимо, що кількість таких незалежних станів нескінченно велика, як і кількість різних значень величини проекції моменту m (за можливих значень m залежно від знака заряду частинки див. у задачі 4.

Утворення зв'язаних станів частинки, навіть у випадку мілкої тривимірної потенціальної ями, має таке пояснення: у поперечному напрямку частинка "зв'язується" лише одним магнітним полем, а наявність потенціальної ями приводить до зв'язування і в повздовжньому напрямку, як це відбувається при одновимірному русі.

Розглянемо випадок мілкої ями більш детально. При цьому хвильові функції зв'язаних стаціонарних станів наближено мають вигляд

$$\Psi_{Em}(\vec{r}) \approx \Psi_{0m}(\rho,\varphi)\psi_{\varepsilon m}(z), \; E = \hbar\omega_H/2 + \varepsilon .$$

Тут враховано, що залежність власних функцій гамільтоніана від поперечних координат визначається в основному дією лише магнітного поля. Підставивши цю хвильову функцію в рівняння Шредінгера $\hat{H}\Psi_{Em} \approx E\Psi_{Em}$, після множення зліва на $\Psi_{0m}^*(\rho)$ і інтегрувавши за координатами поперечного руху, одержуємо одновимірне рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Psi''_{\varepsilon m}(z) + \left[U_{m,\text{еф}}(z) - \varepsilon_m\right]\Psi_{\varepsilon m}(z) = 0$$

з ефективною потенціальною енергією

$$U_{m,\text{еф}}(z) = \int U(r)\left|\Psi_{0m}(\rho)\right|^2 d^2\rho = \frac{2}{|m|!}\int_0^\infty U(r)\tilde{\rho}^{2|m|+1}\exp\left(-\tilde{\rho}^2\right)d\tilde{\rho} .$$

Тут $\tilde{\rho}=\rho/\sqrt{2}a_H$, $a_H=\sqrt{\hbar/\mu\omega_H}$, $r=\sqrt{\rho^2+z^2}$ і при перетвореннях використовується явний вигляд власної функції (див. задачу 4) $\Psi_{0m}=\tilde{\rho}^{|m|}\exp\left(im\varphi-\tilde{\rho}^2/2\right)\Big/\sqrt{2\pi|m|!}a_H$.

У випадку мілкої ями $U(r)$ ефективний потенціал $U_{m,\text{еф}}(z)$ відповідає також мілкій одновимірній ямі, а енергія рівня ε_m (відраховується від основного рівня Ландау) визначається так:

$$\varepsilon_m\approx-\mu\alpha_m^2/2\hbar^2\ ,\ \ \alpha_m=-\int_{-\infty}^{\infty}U_{m,\text{еф}}(z)dz\ .$$

При цьому залежність хвильових функцій Ψ_{Em} від z така ж, як і в Ψ_{0m} із $\kappa=\mu\alpha_m/\hbar^2$.

Проста оцінка показує, що енергія зв'язку станів мала: $|\varepsilon_m|<<\hbar\omega_H$. При цьому енергія зв'язку для станів з різними значеннями m проекції моменту частинки суттєво залежить від співвідношення між "магнітною" довжиною a_H і радіусом R потенціальної ями. Особливо різкою є залежність ε_m від m, коли $R<<a_H\propto H^{-1/2}$. У цьому випадку в інтегралі для $U_{m,\text{еф}}(z)$ можна замінити $\exp\left(-\tilde{\rho}^2\right)$ одиницею й одержати $\varepsilon_m\propto\left(R/a_H\right)^{4|m|+4}\propto H^{2|m|+2}\propto H^{2|m|+2}$; тому енергія зв'язку частинки швидко зменшується зі збільшенням $|m|$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

5.2. Векторні, комутаційні та ймовірністні задачі з операторами спіну

1. Показати, що коефіцієнти в наступному розкладі довільної квадратної матриці другого рангу $\hat{A}$ за повною системою матриць $\hat{1}$, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$: $\hat{A}=a_0\hat{1}+a_x\hat{\sigma}_x+a_y\hat{\sigma}_y+a_z\hat{\sigma}_z\equiv a_0\hat{1}+\vec{a}\cdot\hat{\vec{\sigma}}$ дорівнюють $a_0=\text{Sp}\,\hat{A}/2$, $a_k=\text{Sp}\left(\hat{\sigma}_k\hat{A}\right)\Big/2$.

Розв'язання: беручи слід від $\hat{A}$, ураховуючи, що $\mathrm{Sp}\,\hat{\sigma}_i = 0$, $\mathrm{Sp}\hat{1} = 2$, знаходимо $a_0 = \mathrm{Sp}\,\hat{A}/2$. Далі, помноживши обидві частини співвідношення $\hat{A} = a_0\hat{1} + \vec{a}\cdot\hat{\vec{\sigma}}$ на матрицю $\hat{\sigma}_k$ праворуч, знову обчислюємо слід. Використовуючи при цьому співвідношення $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k = \delta_{ik} + i\varepsilon_{ikl}\hat{\sigma}_l$, знаходимо

$$a_k = \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\left(\hat{A}\hat{\sigma}_k\right) = \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\left(\hat{\sigma}_k\hat{A}\right).$$

2. Які степені оператора $\hat{\vec{s}}$ довільного спіну s незалежні?

Розв'язання: оператор $\left(\hat{s}_z - s\right)\left(\hat{s}_z - s + 1\right)\cdot\ldots\cdot\left(\hat{s}_z + s\right)$, складений із різниць $\hat{s}_z$ і всіх можливих власних значень s_z, дає нуль при дії на довільну хвильову функцію, а тому сам дорівнює нулю. Звідси випливає, що $\left(\hat{s}_z\right)^{2s+1}$ виражається через більш низькі степені оператора $\hat{s}_z$, а отже, незалежними є лише його степені від 1 до $2s$.

3. Звести довільну функцію лінійного за матрицями Паулі скаляра $a\hat{1} + \vec{b}\cdot\hat{\vec{\sigma}}$ до лінійної функції.

Розв'язання: для визначення коефіцієнтів у шуканій формулі $f\left(a\hat{1} + \vec{b}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\right) = A\hat{1} + \vec{B}\cdot\hat{\vec{\sigma}}$ помічаємо, що при виборі осі z уздовж напрямку вектора $\vec{b}$ власні значення оператора $a\hat{1} + \vec{b}\cdot\hat{\vec{\sigma}}$ дорівнюють $a \pm b$, а відповідні власні значення оператора $f\left(a\hat{1} + \vec{b}\cdot\hat{\vec{\sigma}}\right)$ дорівнюють $f\left(a \pm b\right)$. Звідси знаходимо

$$A = \left[f\left(a+b\right) + f\left(a-b\right)\right]/2,\ \vec{B} = \vec{b}\left[f\left(a+b\right) + f\left(a-b\right)\right]/2b.$$

4. Обчислити скалярний добуток $\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2$ спінів двох частинок (спін кожної частинки $\hbar/2$) у триплетному ($S = \hbar$) і синглетному ($S = 0$) станах.

Розв'язання: за формулою (справедливою при складанні довільних моментів)

$$\vec{L}_1\vec{L}_2 = \frac{1}{2}\left[L\left(L+1\right) - L_1\left(L_1+1\right) - L_2\left(L_2+1\right)\right]$$

Видавництво поліграфічний центр "Київський університет" (версія на друк)

знайдемо $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \hbar^2/4$ для триплетного і $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = -3\hbar^2/4$ для синглетного станів.

5. Довести, що оператори $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ і $\hat{\sigma}_z$, які визначаються рівностями $\hat{\sigma}_x\alpha = \beta$, $\hat{\sigma}_y\alpha = i\beta$, $\hat{\sigma}_z\alpha = \alpha$, $\hat{\sigma}_x\beta = \alpha$, $\hat{\sigma}_y\beta = -i\alpha$, $\hat{\sigma}_z\beta = -\beta$, задовольняють ті самі співвідношення, що й матриці Паулі.

Розв'язання: із рівностей $\hat{\sigma}_z\alpha = \alpha$ та $\hat{\sigma}_z\beta = -\beta$ випливає, що оператор $\hat{\sigma}_z$ має два власних значення, які дорівнюють +1 та –1, а це відповідає складовій вектора спіну (в одиницях $\hbar/2$). Власні функції для $\hat{\sigma}_z$, α та β, очевидно не будуть власними для $\hat{\sigma}_x$ та $\hat{\sigma}_y$, але, додаючи і віднімаючи рівності

$$\hat{\sigma}_x\alpha = \beta,\ \hat{\sigma}_x\beta = \alpha,\ \hat{\sigma}_y\alpha = i\beta,\ \hat{\sigma}_y\beta = -i\alpha,$$

одержуємо такі рівняння:

$$\hat{\sigma}_x(\alpha+\beta) = \alpha+\beta, \quad \hat{\sigma}_y(\alpha+i\beta) = \alpha+i\beta,$$

$$\hat{\sigma}_x(\alpha-\beta) = -(\alpha-\beta), \quad \hat{\sigma}_y(\alpha-i\beta) = -(\alpha-i\beta).$$

Ці рівняння показують, що $\hat{\sigma}_x$ і $\hat{\sigma}_y$ мають такі ж власні значення, як і $\hat{\sigma}_z$, а саме: ± 1. Складаючи вираз

$$(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \hat{\sigma}_x\begin{pmatrix}\alpha\\ -\beta\end{pmatrix} - \hat{\sigma}_z\begin{pmatrix}\beta\\ \alpha\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}2\beta\\ -2\alpha\end{pmatrix} = -2i\hat{\sigma}_y\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix},$$

переконуємось, що $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = -2i\hat{\sigma}_y$. Застосовуючи далі до рівностей $\hat{\sigma}_x\alpha = \beta$, $\hat{\sigma}_x\beta = \alpha$, $\hat{\sigma}_y\alpha = i\beta$ та $\hat{\sigma}_y\beta = -i\alpha$ оператор $\hat{\sigma}_y$, одержуємо $\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \hat{\sigma}_y\begin{pmatrix}\beta\\ \alpha\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-i\alpha\\ i\beta\end{pmatrix} = -i\hat{\sigma}_z\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$, звідки випливає, що $\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = -i\hat{\sigma}_z$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (вірсія не для друку)

Рівність $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=i\hat{\sigma}_z\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$ означає, що $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\alpha=i\hat{\sigma}_z\alpha$ і $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\beta=i\hat{\sigma}_z\beta$. Оскільки це справедливо для всіх власних функцій (їх лише дві), то справедливо й для будь-якої іншої функції, а тому можна записати рівність операторів.

6. Записати оператор $d\hat{\sigma}_x/dt$, використовуючи оператор Гамільтона $\hat{H}$ для частинки зі спіном $\hbar/2$, на яку діє магнітне поле з напруженістю $\vec{H}$.

Розв'язання: оскільки $\hat{\sigma}_x$ комутує з $\vec{p}$ і $\vec{r}$, то складаємо оператор $d\hat{\sigma}_x/dt$ за загальним правилом

$$\frac{d\hat{\sigma}_x}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left[\hat{\sigma}_x,\hat{H}\right]=\frac{e}{\mu}\left(\hat{\sigma}_yH_z-\hat{\sigma}_zH_y\right).$$

7. Знайти квадрат проекції спіну $\hbar/2$ на довільний напрямок.

Відповідь: $\left(\hat{S}\cdot\vec{n}\right)^2=\hbar^2/4$, де $\vec{n}$ – вектор одиничної довжини, який вказує напрямок.

8. Перевірити рівність $\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{A}}\right)\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{B}}\right)=\left(\hat{\vec{A}}\cdot\hat{\vec{B}}\right)+i\vec{\sigma}\left[\hat{\vec{A}}\times\hat{\vec{B}}\right]$, де $\hat{\vec{\sigma}}$ – вектор, складовими якого є матриці Паулі $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$.

Відповідь: при записі лівої частини рівності необхідно скористатись рівностями для матриць Паулі: $\hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=\hat{\sigma}_z^2=1$, $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=i\hat{\sigma}_z$. Тоді вираз $\hat{\sigma}_x\hat{A}_x\hat{\sigma}_x\hat{B}_x$ зводиться до $\hat{A}_x\hat{B}_x$, а $\hat{\sigma}_x\hat{A}_x\hat{\sigma}_y\hat{B}_y+\hat{\sigma}_y\hat{A}_y\hat{\sigma}_x\hat{B}_x=i\hat{\sigma}_z\left(\hat{A}_x\hat{B}_y-\hat{A}_y\hat{B}_x\right)=i\hat{\sigma}_z\left[\hat{\vec{A}}\times\hat{\vec{B}}\right]_z$.

9. Довести, що спінові оператори $\hat{\sigma}_+=\left(\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y\right)/2$ та $\hat{\sigma}_-=\left(\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y\right)/2$ є ермітово-спряженими. Знайти для них комутаційні співвідношення один з одним і з $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$. Знайти $\hat{\sigma}_+^2$ та $\hat{\sigma}_-^2$.

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія для друку)

Розв'язання: використовуючи перестановочні співвідношення $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = \left[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\right] = -\left[\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_x\right] = 2i\hat{\sigma}_z$, доведемо, що $\left[\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_-\right] = \hat{\sigma}_z$, $\left[\hat{\sigma}_\pm, \hat{\sigma}_x\right] = \pm\hat{\sigma}_z$, $\left[\hat{\sigma}_\pm, \hat{\sigma}_y\right] = i\hat{\sigma}_z$, $\left[\hat{\sigma}_\pm, \hat{\sigma}_z\right] = \mp\hat{\sigma}_\pm$ і $\hat{\sigma}_+^2 = \hat{\sigma}_-^2 = \hat{0}$.

10. Довести, що для операторів $\hat{\sigma}_+$ і $\hat{\sigma}_-$ за будь-якого цілого n виконується рівність $\left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right)^n = \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-$.

Розв'язання: складемо вираз

$$\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- = \frac{1}{4}\left(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y\right)\left(\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{1} + \hat{\sigma}_z\right).$$

При піднесенні до квадрата одержимо

$$\left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right)^2 = \frac{1}{4}\left(\hat{1} + \hat{\sigma}_z\right)^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{1} + \hat{\sigma}_z\right) = \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-.$$

Доведення при довільному n виконується за індукцією.

11. Довести справедливість рівностей:

1) $\sin\left(\hat{\sigma}_x\varphi\right) = \hat{\sigma}_x \sin\varphi$; 2) $\cos\left(\hat{\sigma}_z\varphi\right) = \hat{1}\cos\varphi$;

3) $\exp\left(i\hat{\sigma}_y\varphi\right) = \hat{1}\cos\varphi + i\hat{\sigma}_y\sin\varphi$;

4) $\exp\left(i\hat{\sigma}_z\varphi\right)\hat{\sigma}_y \exp\left(-i\hat{\sigma}_z\varphi\right) = \exp\left(2i\hat{\sigma}_z\varphi\right)\hat{\sigma}_y$.

Розв'язання: рівності 1, 2, 3 доводяться шляхом розкладу функцій $\sin\left(\hat{\sigma}_x\varphi\right)$ і $\cos\left(\hat{\sigma}_z\varphi\right)$ у ряди Тейлора. Ці ряди містять відповідно тільки непарні та тільки парні степені аргументу, проте $\hat{\sigma}_x^{2n+1} = \hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_z^{2n} = \hat{1}$. Для доведення рівності 4 скористаємось тим, що

$$\hat{\sigma}_y \exp\left(-i\hat{\sigma}_z\varphi\right) = \hat{\sigma}_y\left(\cos\varphi - i\hat{\sigma}_z\sin\varphi\right) =$$
$$= \left(\cos\varphi + i\hat{\sigma}_z\sin\varphi\right)\hat{\sigma}_y = \exp\left(i\hat{\sigma}_z\varphi\right)\hat{\sigma}_y.$$

12. Перехід до нового представлення виконується за допомогою оператора $\hat{S} = \exp\left(-i\hat{\sigma}_z\varphi/2\right)$, тобто $\psi' = \hat{S}\psi$. Знайти оператори у новому представленні, якщо в попередньому представленні вони дорівнюють:

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

$$\hat{A} = \hat{\sigma}_x \sin\varphi + \hat{\sigma}_y \cos\varphi,\ \hat{B} = \hat{\sigma}_x \cos\varphi - \hat{\sigma}_y \sin\varphi.$$

Розв'язання: означимо $\hat{A}' = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^+$, де $\hat{S}^+ = \exp\left(i\hat{\sigma}_z\varphi/2\right)$. Оскільки $\hat{\sigma}_z$ антикомутує з $\hat{\sigma}_x$ і $\hat{\sigma}_y$, то, використовуючи результати попередньої задачі і властивості матриць Паулі ($\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\sigma_z$), одержимо

$$\hat{A}' = \exp\left(-i\hat{\sigma}_z\varphi\right)\hat{A} = \left(\cos\varphi - i\hat{\sigma}_z\sin\varphi\right)\left(\hat{\sigma}_x\sin\varphi + \hat{\sigma}_y\cos\varphi\right) = \hat{\sigma}_y.$$

Так само $\hat{B}' = \exp\left(-i\hat{\sigma}_z\varphi\right)\hat{B} = \hat{\sigma}_x$.

13. Показати, що оператор $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^k$ можна лінійно виразити через $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)$.

Розв'язання: позначивши власні функції триплетного і синглетного станів через χ_t та χ_s, одержуємо $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^2 \chi_t = 1\chi_t$ і $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)\chi_s = -3\chi_s$. Оскільки три триплетних та одна синглетна функції утворюють повну систему спінових функцій двох частинок, то спочатку визначимо дію $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^k$ на χ_t та χ_s. Очевидно, $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^2 \chi_t = \left(\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2\right)\left(\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2\right)\chi_t = 1^2\chi_t$ і, відповідно, $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^k \chi_t = 1^k\chi_t = \chi_t$, $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^2 \chi_s = \left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)\left(-3\chi_s\right) = \left(-3\right)^2\chi_s$ і $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^k \chi_s = (-3)^k\chi_s$. Нехай маємо $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^k = A\hat{1} + B\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)$. Покажемо, як підібрати A та B, щоб ця рівність була справедливою при дії на χ_t та χ_s і, відповідно, на будь-яку спінову функцію двох частинок. Оскільки $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^k \chi_t = \left(A + B\right)\chi_t$, $\left(\hat{\bar{\sigma}}_1 \cdot \hat{\bar{\sigma}}_2\right)^k \chi_t = 1\chi_t$, то одержуємо $A + B = 1$. Маємо також

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (версія не для друку)

$$\left(\hat{\vec{\sigma}}_1\cdot\hat{\vec{\sigma}}_2\right)^k\chi_s=\left[A+B\left(\hat{\vec{\sigma}}_1\cdot\hat{\vec{\sigma}}_2\right)\right]\chi_s=\left(A-3B\right)\chi_s$$

та

$$\left(\hat{\vec{\sigma}}_1\cdot\hat{\vec{\sigma}}_2\right)^k\chi_s=\left(-3\right)^k\chi_s\text{, тобто }A-3B=\left(-3\right)^k.$$

Звідси $A=\frac{1}{4}\left[3+\left(-3\right)^k\right]$, $B=\frac{1}{4}\left[1-\left(-3\right)^k\right]$.

Таким чином,

$$\left(\hat{\vec{\sigma}}_1\cdot\hat{\vec{\sigma}}_2\right)^k=\left[3+\left(-3\right)^k\right]\frac{1}{4}\hat{1}+\left[1-\left(-3\right)^k\right]\frac{1}{4}\left(\hat{\vec{\sigma}}_1\cdot\hat{\vec{\sigma}}_2\right).$$

Зокрема для $k=2$ маємо $\left(\hat{\vec{\sigma}}_1\cdot\hat{\vec{\sigma}}_2\right)^2=3\hat{1}-2\left(\hat{\vec{\sigma}}_1\cdot\hat{\vec{\sigma}}_2\right)$.

14. Система із двох спінів з $s=1/2$ (в одиницях $\hbar$) перебуває в стані, який описується спіновою функцією вигляду $\Psi_{\alpha\beta}=\varphi_\alpha\chi_\beta$ (мультиплікативний вигляд $\Psi_{\alpha\beta}$ вказує на відсутність кореляції між спіновими станами частинок). Яка ймовірність різних значень S сумарного спіну в цьому стані? Чому дорівнює значення $\left\langle\hat{\vec{S}}^2\right\rangle$? Розглянути, зокрема, випадок, коли $\varphi_\alpha=\chi_\alpha$.

Розв'язання: запишемо спінову функцію у вигляді суперпозиції симетричного та антисиметричного доданків:

$$\Psi_{\alpha\beta}=\frac{1}{2}\left(\varphi_\alpha\chi_\beta+\chi_\alpha\varphi_\beta\right)+\frac{1}{2}\left(\varphi_\alpha\chi_\beta-\chi_\alpha\varphi_\beta\right).$$

Тут перший, симетричний, доданок відповідає $S=1$, а другий, антисиметричний, – значенню $S=0$. При цьому (вважаємо, що функції φ_α і χ_β, як і $\Psi_{\alpha\beta}$, нормовані на одиницю) норма кожного з доданків визначає ймовірність відповідного значення S, тому

$$w\left(S=0,1\right)=\frac{1}{4}\left(\varphi_\alpha^*\chi_\beta^*\mp\chi_\alpha^*\varphi_\beta^*\right)\left(\varphi_\alpha\chi_\beta\mp\chi_\alpha\varphi_\beta\right)=\frac{1}{2}\left(1\mp\left|\left\langle\varphi|\chi\right\rangle\right|^2\right),$$

знак "+" відповідає $S=1$; нарешті $\left\langle\hat{\vec{S}}^2\right\rangle=2w\left(S=1\right)$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для продажу)

15. Знайти оператор спінового обміну $\hat{C}$, дія якого на спінову функцію $\Psi_{\alpha\beta}$ така: $\hat{C}\Psi_{\alpha\beta} = \Psi_{\beta\alpha}$. Виразити оператор $\hat{C}$ через матриці Паулі.

Розв'язання: запишемо спінову функцію системи у вигляді $\Psi_{\alpha\beta} = \Psi^{+}_{\alpha\beta} + \Psi^{-}_{\alpha\beta}$, де $\Psi^{\pm}_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\left(\Psi_{\alpha\beta} \pm \Psi_{\beta\alpha}\right)$. Зважаючи на симетрії функцій Ψ_{SS_z}, помічаємо, що $\Psi^{+}_{\alpha\beta}$ відповідає сумарному спіну $S = 1$, а $\Psi^{-}_{\alpha\beta}$ – значенню $S = 0$ (порівняти з попередньою задачею). Тому $\hat{\vec{S}}^2\Psi_{\alpha\beta} = 2\Psi^{+}_{\alpha\beta}$ і відповідно

$$\Psi^{-}_{\alpha\beta} = \Psi_{\alpha\beta} - \frac{1}{2}\hat{\vec{S}}^2\Psi_{\alpha\beta}.$$

У відповідності з визначенням $\hat{C}$ маємо $\hat{C}\Psi_{\alpha\beta} = \Psi^{+}_{\alpha\beta} - \Psi^{-}_{\alpha\beta}$. Із наведених співвідношень випливає

$$\hat{C} = \hat{\vec{S}}^2 - 1 = \frac{1}{4}\left(\hat{\vec{\sigma}}_1 + \hat{\vec{\sigma}}_2\right)^2 - 1 = \frac{1}{2}\left(1 + \hat{\vec{\sigma}}_1\hat{\vec{\sigma}}_2\right).$$

Звідси видно, що оператор $\hat{C}$ ермітовий. Спінові функції Ψ_S (S – сумарний спін) є його власними функціями, а відповідні власні значення дорівнюють $+1$ при $S = 1$ і -1 при $S = 0$. Очевидно також, що $\hat{C}^2 = 1$.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

5.3. Власні функції та власні значення операторів спіну

1. Для частинки зі спіном $1/2$ (в одиницях $\hbar$) знайти власні значення і власні функції операторів $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$ та $\hat{s}_z$, відповідно.

Розв'язання: власна функція $\chi_{s_x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ і власне значення s_x оператора $\hat{s}_x = \hat{\sigma}_x/2$ відшукується з розв'язання рівняння $\hat{s}_x\chi_{s_x} = s_x\chi_{s_x}$:

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}\equiv\frac{1}{2}\begin{pmatrix}b\\ a\end{pmatrix}=s_x\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix},$$

або $b=2s_x a$, $a=2s_x b$. Нетривіальний розв'язок цієї системи рівнянь існує за умови $4s_x^2=1$. Звідси можливі значення (спектр) величини $s_x=\pm 1/2$. При цьому $a=b$ для $s_x=1/2$ і $a=-b$ для $s_x=-1/2$. Нормовані на одиницю, так що $\left\langle \chi_{s_x}\middle|\chi_{s_x}\right\rangle=|a|^2+|b|^2=1$, власні функції χ_{s_x} мають вигляд

$$\chi_{s_x=+1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix},\qquad \chi_{s_x=-1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}.$$

Аналогічно знаходимо

$$\chi_{s_y=+1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix},\quad \chi_{s_y=-1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix},$$

$$\chi_{s_z=+1/2}=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix},\quad \chi_{s_z=-1/2}=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія для друку)

2. Знайти оператор проекції спіну $\hat{s}_{\vec{n}}$ на довільний напрямок, який задається одиничним вектором $\vec{n}$. У стані із заданим значенням проекції спіну на вісь z знайти $\left\langle s_{\vec{n}}\right\rangle$. Які в цих станах імовірності значень проекції спіну $\pm\hbar/2$ на напрямок $\vec{n}$?

Розв'язання: оператор спіну $\hat{\vec{s}}=\hbar\hat{\vec{\sigma}}/2$ є оператором векторної (точніше, псевдовекторної) величини, і тому оператор $\hat{s}_{\vec{n}}$ проекції його на довільний напрямок $\vec{n}$ має виражатися через оператори компонентів $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ так само, як і у випадку звичайного вектора, тобто

$$\hat{s}_{\vec{n}}=\left(\vec{n},\hat{\vec{s}}\right)=\frac{\hbar}{2}\left(\vec{n},\hat{\vec{\sigma}}\right)=\frac{\hbar}{2}\left(\sin\theta\cos\varphi\hat{\sigma}_x+\sin\theta\sin\varphi\hat{\sigma}_y+\cos\theta\hat{\sigma}_z\right),$$

де θ і φ – полярний та азимутальний кути напрямку $\vec{n}$. Використовуючи явний вигляд матриць Паулі, маємо

$$\hat{s}_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \exp(-i\varphi)\sin\theta \\ \exp(i\varphi)\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}.$$

Значення $\langle s_{\vec{n}} \rangle$ у стані $\chi_{s_z=\hbar/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ дорівнює

$$\langle \chi | \hat{s}_{\vec{n}} | \chi \rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\theta & \exp(-i\varphi)\sin\theta \\ \exp(i\varphi)\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos\theta.$$

Аналогічно для стану з $s_z = -\hbar/2$ знаходимо $\langle s_{\vec{n}} \rangle = -\hbar\cos\theta/2$. Узагальнюючи, одержуємо $\langle s_{\vec{n}} \rangle = s_z \cos\theta$.

Позначимо $w(+)$ імовірність значення $s_{\vec{n}} = +\hbar/2$, при цьому $w(-) = 1 - w(+)$ – імовірність значення $s_{\vec{n}} = -\hbar/2$. Ураховуючи, що $\langle s_{\vec{n}} \rangle = s_z \cos\theta$, знаходимо

$$\langle s_{\vec{n}} \rangle = w(+)(\hbar/2) + w(-)(-\hbar/2) = \left[2w(+) - 1\right]\hbar/2 = s_z \cos\theta,$$

$$w(+) = \cos^2(\theta/2),\ w(-) = \sin^2(\theta/2).$$

3. У випадку спіну $s = 1/2$ (в одиницях $\hbar$) нормована хвильова функція найбільш загального спінового стану має вигляд $\chi = \begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \exp(i\beta)\sin\alpha \end{pmatrix}$, де $0 \le \alpha \le \pi/2$, $0 \le \beta \le 2\pi$. Знайти полярний та азимутальний кути такої осі $\vec{n}$ у просторі, проекція спіну на яку має значення $+1/2$.

Розв'язання: знайдемо спочатку власні функції $\chi_{s_{\vec{n}}=1/2} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ оператора проекції спіну на напрямок $\vec{n}$. Використовуючи явний вигляд оператора $\hat{s}_{\vec{n}}$, встановлений у попередній задачі, із рівняння на власні функції $\hat{s}_{\vec{n}}\chi_{s_{\vec{n}}=1/2} = \frac{1}{2}\chi_{s_{\vec{n}}=1/2}$ одержуємо співвідношення $a\sin(\theta/2) = b\exp(-i\varphi)\cos(\theta/2)$. Звідси, вибираючи $a = \cos(\theta/2)$,

Видавничо-поліграфічний центр
Київський університет
(версія не для друку)

знаходимо $b = \exp(i\varphi)\sin(\theta/2)$, тому спінова функція $\chi_{s_{\vec{n}}=1/2}$ набуває вигляду, вказаному в умові задачі. При цьому $\theta = 2\alpha$ та $\varphi = \beta$ визначають шукані полярний та азимутальний кути.

4. Знайти: 1) власні значення та власні функції оператора $\hat{f} = a + \vec{b}\hat{\vec{\sigma}}$; 2) явний вираз для оператора вигляду $\hat{F} = F\left(a + \vec{b}\hat{\vec{\sigma}}\right)$, де a та $\vec{b}$ – дійсний скалярний і векторний параметри, $F(z)$ – достатньо довільна функція змінної z.

Розглянути як ілюстрацію оператор $\hat{R}(\vec{\varphi}_0) = \exp\left(i\vec{\varphi}_0\hat{\vec{\sigma}}/2\right)$, який описує перетворення спінової функції, $\chi' = \hat{R}(\vec{\varphi}_0)\chi$, при повороті системи координат на кут φ_0 навколо напрямку $\vec{\varphi}_0/\varphi_0$, і за його допомогою знайти власні функції $\chi_{s_{\vec{n}}=\pm 1/2}$ оператора проекції спіну на напрямок вектора $\vec{n}$.

Розв'язання:

1) оператор має всього два власних значення, що дорівнюють $f_{1,2} = a \pm b$. Відповідні їм власні функції визначаються результатом із задачі 3, причому $\vec{n} = \pm\vec{b}/b$;

2) вигляд оператора $\hat{F} = F\left(\hat{f}\right)$ випливає із задачі 13 підрозд. 1.2:

$$\hat{F} = \frac{1}{2}\left[F(a+b) + F(a-b)\right] + \frac{1}{2b}\left[F(a+b) - F(a-b)\right]\vec{b}\hat{\vec{\sigma}}.$$

Зокрема, $\hat{R}(\vec{\varphi}_0) = \cos(\varphi_0/2) + i\sin(\varphi_0/2)\left(\vec{\varphi}_0\hat{\vec{\sigma}}/\varphi_0\right)$. Щоб спінові функції $\chi_{s_z=\pm 1/2}$ у результаті обертання системи координат перейшли в $\chi_{s_{\vec{n}}=\pm 1/2}$, вектор $\vec{\varphi}_0$ вибираємо таким, що дорівнює $\vec{\varphi}_0 = (\theta\sin\varphi, -\theta\cos\varphi, 0)$, де θ і φ – полярний та азимутальний кути вектора $\vec{n}$. При цьому

$$\hat{R}(\vec{\varphi}_0) = \cos(\theta/2) + i\sin(\theta/2)\left(\sin\varphi\hat{\sigma}_x - \cos\varphi\hat{\sigma}_y\right),$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

тому

$$\chi_{s_{\vec{n}}=+1/2} = \hat{R}\left(\vec{\varphi}_0\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\left(\theta/2\right)\\ \exp\left(i\varphi\right)\sin\left(\theta/2\right)\end{pmatrix}.$$

5. Для системи із двох спінів з $s=1/2$ (в одиницях $\hbar$) знайти власні функції χ_{ss_z} операторів квадрата сумарного спіну та його проекції на вісь z. Звернути увагу на характер симетрії цих функцій щодо взаємної перестановки спінових змінних обох частинок залежно від значення S.

***Розв'язання*:** вигляд спінових функцій для $S=1$ та $S_z=\pm 1$ очевидний:

$$\chi_{11} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2 \text{ та } \chi_{1,-1} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2.$$

Далі, спінові функції $S_z=0$ мають вигляд

$$\chi_{S,S_z=0} = C_S^{(1)}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + C_S^{(2)}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2.$$

Із рівняння $\hat{\vec{S}}^2\chi_{00}=0$ випливає, що $\hat{S}_x\chi_{00}=0$, тобто

$$\hat{S}_x\chi_{00} = \frac{1}{2}\left(\hat{\sigma}_{x1}+\hat{\sigma}_{x2}\right)\left\{C_0^{(1)}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + C_0^{(2)}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right\} =$$

$$= \left(C_0^{(1)}+C_0^{(2)}\right)\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2\right\} = 0.$$

Звідси $C_0^{(1)} = -C_0^{(2)}$. При цьому з умови нормування спінової функції маємо $C_0^{(1)} = 1/\sqrt{2}$. Для визначення $C_S^{(1,2)}$ при $S=1$ зручно скористатися умовою ортогональності власних функцій $\left\langle\chi_{00}\middle|\chi_{10}\right\rangle = 0$, що дає $C_1^{(1)} = C_1^{(2)}$.

Таким чином, власні функції $\chi_{S,0}$ мають вигляд

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$$\chi_{1(0),0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 \pm \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right\}.$$

Спінові функції мають визначену симетрію щодо перестановок спінових змінних обох частинок: вони симетричні при $S=1$ й антисиметричні при $S=0$.

5.4. Вищі спіни. Системи тотожних частинок

1. Довести рівності $g_{\lambda\mu}\psi_\nu + g_{\mu\nu}\psi_\lambda + g_{\nu\lambda}\psi_\mu = 0$, де ψ_λ – довільний спінор, і $\psi_{\lambda\mu}\psi_\mu{}^\lambda = -\psi_{\rho\sigma}\psi^{\rho\sigma}g_{\lambda\mu}/2$.

Вказівки: показати, що вираз у лівій частині першої рівності є антисиметричним спінором третього рангу. При доведенні другої рівності скористатись тим, що спінор другого рангу зводиться до скаляра, помноженого на метричний спінор.

2. Стани частинки зі значенням λ проекції спіну на напрямок імпульсу називають *спіральними* (оскільки вектор імпульсу *полярний*, а спіну *аксіальний,* то спіральність є псевдоскалярною величиною і при інверсії координат змінює знак). Для частинки зі спіном $s=\hbar/2$ знайти хвильові функції $\Psi_{\vec{p}_0,\lambda}$ станів з відповідним імпульсом $\vec{p}_0$ та спіральностями $\lambda = \pm 1/2$.

Відповідь:

$$\Psi_{\vec{p}_0,\lambda=1/2} = \left[\exp\left(i\vec{p}_0\vec{r}/\hbar\right)/\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}\right]\begin{pmatrix}\cos\left(\tilde{\theta}/2\right)\\ \exp\left(i\tilde{\varphi}\right)\sin\left(\tilde{\theta}/2\right)\end{pmatrix},$$

$$\Psi_{\vec{p}_0,\lambda=-1/2} = \left[\exp\left(i\vec{p}_0\vec{r}/\hbar\right)/\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}\right]\begin{pmatrix}\sin\left(\tilde{\theta}/2\right)\\ -\exp\left(i\tilde{\varphi}\right)\cos\left(\tilde{\theta}/2\right)\end{pmatrix}.$$

Тут $\tilde{\theta},\tilde{\varphi}$ – полярний і азимутальний кути вектора $\vec{p}_0$.

3. Квантова система складається із двох слабо взаємодіючих частинок, що перебувають у квантових станах $\psi_{n_1}\left(\xi_1\right)$, $\psi_{n_2}\left(\xi_2\right)$ $\left(\xi = \vec{r}, L_{sz}\right)$. Записати хвильові функції нульового наближення для системи, якщо частинки є: а) бозонами; б) ферміонами.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Розв'язання: хвильові функції нульового наближення записуються як добуток одночастинкових функцій $\psi_1 = \psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_2}(\xi_2)$. Однак згідно з принципом тотожності хвильова функція $\psi_2 = \psi_{n_1}(\xi_2)\psi_{n_2}(\xi_1)$ описує той самий стан, що і функція ψ_1. Утворюючи із функцій ψ_1 та ψ_2 симетричну й антисиметричну комбінації, дістаємо хвильові функції бозонів

$$\psi_s = (\psi_1 + \psi_2)/\sqrt{2} = \left[\psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_2}(\xi_2) + \psi_{n_1}(\xi_2)\psi_{n_2}(\xi_1)\right]/\sqrt{2}$$

і ферміонів

$$\psi_s = (\psi_1 - \psi_2)/\sqrt{2} = \left[\psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_2}(\xi_2) - \psi_{n_1}(\xi_2)\psi_{n_2}(\xi_1)\right]/\sqrt{2}\,.$$

4. Для системи із двох однакових частинок зі спінами $s = 1$ (в одиницях $\hbar$) записати спінові функції, симетричні щодо перестановки спінових змінних.

Розв'язання: якщо $s = 1$, то $m = 0, \pm 1$, тому симетричні спінові функції мають вигляд $(1 \equiv L_{sz1}, 2 \equiv L_{sz2})$:

$$\chi_s^{(1)} = \chi_1(1)\chi_1(2),\ \chi_s^{(4)} = \left[\chi_0(1)\chi_1(2) + \chi_0(2)\chi_1(1)\right]/\sqrt{2}\,,$$

$$\chi_s^{(2)} = \chi_0(1)\chi_1(2),\ \chi_s^{(5)} = \left[\chi_0(1)\chi_{-1}(2) + \chi_0(2)\chi_{-1}(1)\right]/\sqrt{2}\,,$$

$$\chi_s^{(2)} = \chi_{-1}(1)\chi_{-1}(2),\ \chi_s^{(6)} = \left[\chi_1(1)\chi_{-1}(2) + \chi_1(2)\chi_{-1}(1)\right]/\sqrt{2}\,.$$

5. Для системи з двох однакових частинок зі спінами $s = 1$ (в одиницях $\hbar$) записати спінові функції, антисиметричні щодо перестановки спінових змінних.

Відповідь: антисиметричних спінових функцій у цьому випадку три:

$$\chi_a^{(1)} = \left[\chi_0(1)\chi_1(2) - \chi_0(2)\chi_1(1)\right]/\sqrt{2}\,,$$

$$\chi_a^{(2)} = \left[\chi_0(1)\chi_{-1}(2) - \chi_0(2)\chi_{-1}(1)\right]/\sqrt{2}\,,$$

$$\chi_a^{(3)} = \left[\chi_1(1)\chi_{-1}(2) - \chi_1(2)\chi_{-1}(1)\right]/\sqrt{2}\,.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

6. Нехай $\psi_{n_i}(\xi)$ – нормовані хвильові функції одночастинкових станів $(\xi = \vec{r}, L_{sz})$. Записати нормовані хвильові функції системи трьох тотожних бозонів, що перебувають у станах із квантовими числами: а) $n_1 = n_2 = n_3 = n$; б) $n_1 = n_2 \neq n_3$.

Відповідь: а) $\psi = \psi_n(\xi_1)\psi_n(\xi_2)\psi_n(\xi_3)$,

б) $$\psi = \Big[\psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_1}(\xi_2)\psi_{n_3}(\xi_3) + \psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_3}(\xi_2)\psi_{n_1}(\xi_3) + \\ + \psi_{n_3}(\xi_1)\psi_{n_1}(\xi_2)\psi_{n_1}(\xi_3)\Big]\Big/\sqrt{3}.$$

7. Розв'язати попередню задачу для квантових чисел $n_1 \neq n_2 \neq n_3$.

Відповідь:

$$\psi = \Big[\psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_2}(\xi_2)\psi_{n_3}(\xi_3) + \psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_3}(\xi_3)\psi_{n_1}(\xi_2) + \\ + \psi_{n_1}(\xi_3)\psi_{n_2}(\xi_1)\psi_{n_3}(\xi_2) + \psi_{n_1}(\xi_3)\psi_{n_2}(\xi_2)\psi_{n_3}(\xi_1) + \\ + \psi_{n_1}(\xi_2)\psi_{n_2}(\xi_1)\psi_{n_3}(\xi_3) + \psi_{n_1}(\xi_2)\psi_{n_2}(\xi_3)\psi_{n_3}(\xi_1)\Big]\Big/\sqrt{6}.$$

8. Для системи з двох однакових бозонів з нульовими спінами, що описується нормованою на одиницю хвильовою функцією $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, знайти ймовірність того, що одна частинка міститься в об'ємі dV_1, а інша – в об'ємі dV_2.

Розв'язання: якби частинки можна було розрізняти, то шукана ймовірність становила б $dw = \left|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\right|^2 dV_1 dV_2$. Для протилежного випадку вона дорівнює

$$dw = \left|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\right|^2 dV_1 dV_2 + \left|\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)\right|^2 dV_1 dV_2 = 2\left|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\right|^2 dV_1 dV_2.$$

9. Визначити обмінне розщеплення рівнів енергії системи із двох електронів за умови, що взаємодія між ними розглядається як збурення.

Розв'язання: нехай частинка перебуває (без урахування їхньої взаємодії) у станах з орбітальними хвильовими функціями

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$\varphi_1(\vec{r})$ і $\varphi_2(\vec{r})$. Станам системи з повним спіном $S=0$ і $S=1$ відповідають симетричні та антисиметричні добутки

$$\varphi=\left[\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2)\pm\varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_1)\right]/\sqrt{2}\,.$$

Середні значення оператора взаємодії частинок $U(\vec{r}_2-\vec{r}_1)$ у цих станах дорівнюють $A\pm J$, де

$$A=\iint U\left|\varphi_1(\vec{r}_1)\right|^2\left|\varphi_2(\vec{r}_2)\right|^2 dV_1dV_2\,,$$

$$J=\iint U\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_1^*(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_2)\varphi_2^*(\vec{r}_1)dV_1dV_2$$

(інтеграл J називають *обмінним*). Без урахування адитивної сталої A, яка не має обмінного характеру, знаходимо, таким чином, зміщення рівнів: $\Delta E_0=J$, $\Delta E_1=-J$ (індекс указує значення S). Ці величини можна представити як власні значення спінового *обмінного оператора*

$$\hat{V}_{\text{обм}}=-\frac{J}{2}\left(1+4\hat{\vec{S}}_1\hat{\vec{S}}_2\right).$$

10. Для системи із N тотожних частинок зі спіном $1/2$ (в одиницях $\hbar$) визначити максимальну кількість різних рівнів енергії із заданим значенням повного спіну S.

Розв'язання: задане значення проекції повного спіну системи M_S можна здійснити $f(M_S)=N!/(N/2+M_S)!(N/2-M_S)!$ способами ($N/2+M_S$ частинкам приписують $\sigma=1/2$, а іншим $\sigma=-1/2$). Кожному рівню енергії із заданим S відповідає $2S+1$ станів зі значеннями $M_S=-S,-S+1,...,S$. Очевидно, що кількість різних рівнів із заданим значенням S дорівнює

$$n(S)=f(S)-f(S+1)=N!(2S+1)/(N/2+S+1)!(N/2-S)!\,.$$

Повна кількість $n=\sum_S n(S)$ різних рівнів енергії дорівнює

$$n=f(0)=\frac{N!}{\left[(N/2)!\right]^2}\ \text{ або }\ n=f(1/2)=\frac{N!}{\left[(N+1)/2\right]!\left[(N-1)/2\right]!}$$

відповідно для парних і непарних значень N.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія для друку)

5.5. Рух частинок у постійних і змінних магнітних полях з урахуванням спіну

1. Знайти хвильові функції стаціонарних станів і відповідні значення енергії для нейтральної частинки, яка має спін $\hbar/2$ і спіновий магнітний момент μ_0 (тому $\hat{\vec{\mu}} = \mu_0 \hat{\vec{\sigma}}$) в однорідному магнітному полі.

Розв'язання: направивши вісь z уздовж магнітного поля, маємо гамільтоніан частинки $\hat{H} = \hat{\vec{p}}^2/2\mu - \mu_0 H \hat{\sigma}_z$. Унаслідок взаємної комутативності операторів $\hat{H}$, $\hat{\vec{p}}$, $\hat{\sigma}_z$ одержуємо власні функції гамільтоніана та відповідні їм значення енергії частинки

$$\Psi_{\vec{p}s_z} = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar)\chi_{s_z},\ E_{\vec{p}s_z} = \vec{p}^2/2\mu - 2\mu_0 H s_z/\hbar,$$

де χ_{s_z} – спінові функції, які є власними функціями оператора $\hat{s}_z$, що відповідають власним значенням $s_z = \pm\hbar/2$ (задача 1, підрозд. 5.4).

2. Знайти хвильові функції стаціонарних станів і відповідні значення енергії для зарядженої частинки зі спіном $\hbar/2$ і спіновим магнітним моментом $\mu_0 = e\hbar/2\mu c$, яка перебуває в однорідному магнітному полі.

Розв'язання: гамільтоніан частинки зі спіном відрізняється від гамільтоніана безспінової частинки доданком $-\mu_0 H\hat{\sigma}_z$ (вісь z напрямлена вздовж магнітного поля). Оскільки магнітне поле не залежить від просторових координат, то в рівнянні Шредінгера координатні і спінові змінні відокремлюються. Ця обставина з урахуванням результату розв'язання задачі 4 із підрозд. 5.1 і збереження s_z дозволяє записати власні функції розглядуваного гамільтоніана у вигляді $\Psi_{np_z \nu s_z} = \Psi_{np_z \nu}(\vec{r})\chi_{s_z}$, де $\Psi_{np_z\nu}(\vec{r})$ – власні функції гамільтоніана безспінової частинки. Їхній явний вигляд залежить від вибору калібровки векторного потенціалу (при цьому $\nu \equiv p_y$ і $\nu \equiv m$ відповідають випадкам *а*) і *б*) із задачі 4 у підрозд. 5.1). Наведені власні функції $\Psi_{np_z \nu s_z}$ відповідають енергії частинки

$$E_{np_z s_z} = E_{\perp n s_z} + p_z^2/2\mu,\ E_{\perp n s_z} = \hbar\omega_H(n + 1/2) - 2\mu_0 H s_z/\hbar,$$

Електронний варіант підручника
(версія чернетки для друку)

де $n = 0,1,...$; $\omega_H = |e| H / \mu c$; при цьому дискретна частина спектра $E_{\perp n s_z}$ пов'язана з поперечним рухом частинки і враховує також взаємодію з магнітним моментом частинки.

Для електрона магнітний момент $\mu_0 = -|e|\hbar / 2\mu c$, тоді маємо $E_{\perp n s_z} \equiv E_N = \hbar\omega_N N$, де $N = n + s_z + 1/2$, $N = 0,1,...$. Цей спектр має такі характерні особливості. Основний рівень $N = 0$ невироджений, при цьому його енергія $E_0 = 0$ ($n = 0$, $s_z = -\hbar/2$), а рівні з $N \neq 0$ "двократно" вироджені: їм відповідають стани як із $n = N$, $s_z = -\hbar/2$, так і з $n = N - 1$, $s_z = +\hbar/2$.

3. Електрон рухається в напрямку осі y в однорідному магнітному полі $\vec{H} = H\vec{e}_z$. Спін електрона паралельний $\vec{H}$. У момент часу $t = 0$ при $y = 0$ електрон потрапляє в додаткове магнітне поле $\vec{H}' = H'\vec{e}_x$. Визначити ймовірність того, що при виході з додаткового поля в момент часу t у точці $y = l$ напрямок спіну електрона буде протилежним початковому.

Розв'язання: до потрапляння в додаткове поле з напруженістю $\vec{H}'$ електрон описується хвильовою функцією $\Psi(y,\sigma,t) = \exp\left[i(ky - \omega t)\right]\alpha(\sigma)$, яка задовольняє рівняння $i\hbar\partial\Psi/\partial t = -\hbar^2\Delta\Psi/2\mu + \mu_B H\hat{\sigma}_z\Psi$, де $\hbar\omega = \hbar^2 k^2/2\mu + \mu_B H$, $\mu_B = -e\hbar/2\mu c$. Після включення $\vec{H}'$ рівняння набуває вигляду $i\hbar\partial\Psi/\partial t = -\hbar^2\Delta\Psi/2\mu + \mu_B\left(H\sigma_z + H'\hat{\sigma}_x\right)\Psi$. Використовуючи підстановку $\Psi(y,\sigma,t) = \exp\left[i(ky - \omega_0 t)\right]\left[\alpha(t)\alpha(\sigma) + b(t)\beta(\sigma)\right]$ де $\hbar\omega_0 = \hbar^2 k^2/2\mu$, знаходимо рівняння для $\alpha(t)$ та $b(t)$:

$$i\hbar\, d\alpha/dt = \mu_B H\alpha + \mu_B H'b,\ i\hbar\, db/dt = -\mu_B Hb + \mu_B H'\alpha .$$

Представивши $\alpha(t) = A\exp(-i\varepsilon t/\hbar)$ і $b(t) = C\exp(-i\varepsilon/\hbar)$, для A та C знаходимо два однорідні алгебраїчні рівняння

$$(\mu_B H - \varepsilon)A + \mu_B H'C = 0,\ \mu_B H'\alpha - (\mu_B H + \varepsilon)C = 0.$$

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" Версія не для друку

Прирівнявши визначник до нуля, знаходимо

$$\varepsilon_1 = \mu_B \sqrt{H^2 + (H')^2}\ ,\ \text{тоді}\ C_1 = \frac{1}{H'}\left(\sqrt{H^2 + (H')^2} - H\right) A_1;$$

$$\varepsilon_2 = -\mu_B \sqrt{H^2 + (H')^2}\ ,\ \text{тоді}\ C_2 = -\frac{1}{H'}\left(\sqrt{H^2 + (H')^2} + H\right) A_2$$

і загальний розв'язок

$$\Psi(y,\sigma,t) = \exp\left[i(ky - \omega_0 t)\right]\left\{A_1 \exp(-i\varepsilon_1 t/\hbar)\left[\alpha(\sigma) + \right.\right.$$

$$\left. + \frac{1}{H'}\left(\sqrt{H^2 + (H')^2} - H\right)\beta(\sigma)\right] + A_2 \exp(-i\varepsilon t/\hbar)\cdot$$

$$\left.\cdot\left[\alpha(\sigma) - \frac{1}{H'}\left(\sqrt{H^2 + (H')^2} + H\right)\beta(\sigma)\right]\right\}.$$

Із початкових умов маємо $A_1 + A_2 = 1$, $C_1 + C_2 = 0$. Підставляючи знайдені A_1 та A_2 у $\Psi(y,\sigma,t)$, позначивши $\mu_B \sqrt{H^2 + (H')^2}\,/\hbar$ як τ, зведемо $\Psi(y,\sigma,t)$ до вигляду

$$\Psi(y,\sigma,t) = \exp\left[i(ky - \omega_0 t)\right]\left\{\left[\cos\tau - iB\sin\tau \Big/ \sqrt{H^2 + (H')^2}\,\right]\alpha(\sigma) + \right.$$

$$\left. + iH'\sin\tau\beta(\sigma) \Big/ \sqrt{H^2 + (H')^2}\right\}.$$

Очевидно, що шукана ймовірність у момент часу $t_0 = l/v$ визначається як квадрат модуля коефіцієнта при $\beta(\sigma)$ і дорівнює $(H')^2 \sin^2\tau \Big/ \left[H^2 + (H')^2\right]$ Вона буде мати максимум при $\tau = \mu_B l \sqrt{H^2 + (H')^2}\,/\hbar v = \pi/2$.

4. Визначити спінову хвильову функцію нейтральної частинки зі спіном $s = \hbar/2$, яка перебуває в однорідному магнітному полі, постійному за напрямком, але змінному за величиною за довільним законом $H(t)$.

Розв'язання: гамільтоніан для руху нейтральної частинки, яка перебуває в магнітному полі, можна записати у формі

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

$\hat{H} = -m\hat{\vec{s}}\vec{H}/s$, де m – магнітний момент частинки, а $\hat{\vec{s}} = \hbar\hat{\vec{\sigma}}/2$ – оператор її "власного" моменту. Тоді спінор ψ^{υ} задовольняє хвильове рівняння $i\hbar\dfrac{\partial\psi^{\upsilon}}{\partial t} = -m\vec{H}\hat{\vec{\sigma}}\psi^{\upsilon}$. Вибираючи напрямок магнітного поля вздовж осі z, переписуємо це рівняння у спінорних компонентах $i\hbar\,\partial\psi^1/\partial t = -mH\psi^1$, $i\hbar\,\partial\psi^2/\partial t = mH\psi^2$. Звідси маємо $\psi^1 = C_1\exp\left(im\int Hdt/\hbar\right)$, $\psi^2 = C_2\exp\left(-im\int Hdt/\hbar\right)$. Сталі C_1, C_2 мають бути визначені з початкових умов і за умови нормування $\left|\psi^1\right|^2 + \left|\psi^2\right|^2 = 1$.

5. Визначити спінову хвильову функцію нейтральної частинки зі спіном $s = \hbar/2$, яка перебуває в однорідному магнітному полі, постійному за величиною, але за напрямком, що рівномірно обертається (з кутовою швидкістю ω) навколо осі z, утворюючи з нею кут θ.

Розв'язання: магнітне поле має складові $H_x = H\sin\theta\cos\omega t$, $H_y = H\sin\theta\sin\omega t$, $H_z = H\cos\theta$. Тоді для спінорних компонентів одержуємо систему рівнянь

$$\dot{\psi}^1 = i\omega_H\left[\cos\theta\psi^1 + \sin\theta\exp\left(-i\omega t\right)\psi^2\right],$$
$$\dot{\psi}^2 = i\omega_H\left[\sin\theta\exp\left(i\omega t\right)\psi^1 - \cos\theta\psi^2\right],$$

де $\omega_H = mH/\hbar$. Підстановка $\psi^{1,2} = \exp\left(\mp i\omega t/2\right)\varphi^{1,2}$ приводить ці рівняння до системи лінійних рівнянь зі сталими коефіцієнтами, розв'язуючи які, одержуємо

$$\psi^1 = \exp\left(-i\omega t/2\right)\left[C_1\exp\left(i\Omega t/2\right) + C_2\exp\left(-i\Omega t/2\right)\right],$$

$$\psi^2 = 2\omega_H\sin\theta\exp\left(i\omega t/2\right)\left[C_1 g_1\exp\left(i\Omega t/2\right) - C_2 g_2\exp\left(-i\Omega t/2\right)\right],$$

де

$$g_{1,2} = \Omega \pm \omega \pm 2\omega_H\cos\theta,\ \Omega = \left[\left(\omega + 2\omega_H\cos\theta\right)^2 + 4\omega_H^2\sin^2\theta\right]^{1/2}.$$

Видавничо-поліграфічний центр Київський університет (використання лише для перегляду)

ЛІТЕРАТУРА

1. *Сборник* задач по теоретической физике / Л. Г. Гречко, В. И. Сугаков, О. Ф. Томасевич, А. М. Федорченко. – М. : Высшая шк., 1984.

2. *Коган В. И.* Сборник задач по квантовой механике / В. И. Коган, В. М. Галицкий. – М. : ГИТТЛ, 1956.

3. *Галицкий В. М.* Задачи по квантовой механике / В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. – М. : Наука, 1992.

4. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике / З. Флюгге. – М. : Изд.-во ЛКИ, 2008. – Т. 1.

5. *Гольдман И. И.* Сборник задач по квантовой механике / И. И. Гольдман, В. Д. Кривченков. – М. : ГИТТЛ, 1957.

6. *Серова Ф. Г.* Сборник задач по теоретической физике: квантовая механика, статистическая физика : учебное пособие / Ф. Г. Серова, А. А. Янкина. – М. : Просвещение, 1979.

7. *Венгер Є. Ф.* Збірник задач з квантової механіки / Є. Ф. Венгер, В. М. Грибань, О. В. Мельничук. – К. : Вища шк., 2003.

8. *Елютин П. В.* Квантовая механіка (з задачами) / П. В.Елютин, В. Д.Кривченков. – М. : Наука, 1976.

9. *Ландау Л. Д.* Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1989.

10. *Блохинцев Д. И.* Основы квантовой механики / Д. И. Блохинцев. – М. : Наука, 1976.

11. *Давыдов А. С.* Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М. : Наука, 1973.

12. *Киселёв В. В.* Квантовая механика : курс лекций / В. В. Киселёв. – М. : МЦНМО, 2009.

13. *Вакарчук І. О.* Квантова механіка / І. О. Вакарчук. – Львів : Вид-во Львівського ун-ту, 2012.

14. *Юхновський І. Р.* Основи квантової механіки / І. Р. Юхновський. – К. : Либідь, 2002.

15. *Висоцький В. І.* Квантова механіка та її використання у прикладній фізиці / В. І. Висоцький. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2008.

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (Версія не для друку)

Навчальне видання

ВИСОЦЬКИЙ Володимир Іванович
МАКСЮТА Микола Васильович
ЯСТРЕМСЬКИЙ Іван Олександрович

ЗБІРНИК ЗАДАЧ ІЗ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Навчальний посібник

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет" (версія не для друку)

Оригінал-макет виготовлено ВПЦ "Київський університет"

Формат 60x84$^{1/16}$. Ум. друк. арк. 16,7. Наклад 100. Зам. № 218-8778.
Гарнітура Times New Roman. Папір офсетний. Друк офсетний. Вид. № Рф*4.
Підписано до друку 04.03.19

Видавець і виготовлювач
ВПЦ "Київський університет"
01601, Київ, б-р Т. Шевченка, 14, кімн. 43
☎ (044) 239 32 22; (044) 239 31 72; тел./факс (044) 239 31 28
e-mail: vpc_div.chief@univ.net.ua; redaktor@univ.net.ua
http: vpc.univ.kiev.ua
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 1103 від 31.10.02