КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 1:

«Операторы, их собственные функции и собственные значения»

Задачи

1. Перемножьте операторы $\hat{L}-\hat{M}$ и $\hat{L}+\hat{M}$.

Произведение

$$\left(\hat{L}-\hat{M}\right)\left(\hat{L}+\hat{M}\right)=\hat{L}\left(\hat{L}+\hat{M}\right)-\hat{M}\left(\hat{L}+\hat{M}\right)=\hat{L}^2-\hat{M}^2+\left(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}\right).$$

Ответ: $\hat{L}^2-\hat{M}^2+\left(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}\right)$.

2. Для операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$, удовлетворяющих соотношению $\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=1$, найдите $\hat{L}\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{L}$.

К соотношению $\hat{L}\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{L}$ добавим и отнимем $\hat{M}\hat{L}\hat{M}$

$$\hat{L}\hat{M}^2-\hat{M}\hat{L}\hat{M}+\hat{M}\hat{L}\hat{M}-\hat{M}^2\hat{L}=\left(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}\right)\hat{M}+\hat{M}\left(\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}\right)=2\hat{M}$$

,

т.к. $\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=1$.

Ответ: $\hat{L}\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{L}=2\hat{M}$.

3. Для операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$, удовлетворяющих соотношению $\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=1$, найдите $\hat{L}f\left(\hat{M}\right)-f\left(\hat{M}\right)\hat{L}$.

Используя результаты предыдущей задачи, докажем, что полученное при $n=2$ соотношение верно и для $n+1$. Пусть

$$\hat{L}\hat{M}^n-\hat{M}^n\hat{L}=n\hat{M}^{n-1},$$

тогда

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

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

Это соотношение справедливо для любого n. Разложим $f\left(\hat{M}\right)$ в ряд по $\hat{M}$

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

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

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

Ответ: $\hat{L}f\left(\hat{M}\right)-f\left(\hat{M}\right)\hat{L}$.

4. Проверьте, является ли оператор возведения в квадрат линейным.

Условие линейности оператора

$$\hat{L}\left(C_1\psi_1+C_2\psi_2\right)=C_1\hat{L}\psi_1+C_2\hat{L}\psi_2.$$

Возведем в квадрат линейную комбинацию функций

$$\left(C_1\psi_1+C_2\psi_2\right)^2=\left(C_1\psi_1\right)^2+\left(C_2\psi_2\right)^2+2C_1C_2\psi_1\psi_2\neq C_1\psi_1^2+C_2\psi_2^2.$$

Оператор возведения в квадрат не является линейным.

5. Проверьте, является ли оператор $\hat{L}=\dfrac{d}{dx}$ линейным.

Условие линейности оператора

$$\hat{L}\left(C_1\psi_1+C_2\psi_2\right)=C_1\hat{L}\psi_1+C_2\hat{L}\psi_2.$$

Найдем

$$\frac{d}{dx}\left(C_1\psi_1+C_2\psi_2\right)=C_1\frac{d\psi_1}{dx}+C_2\frac{d\psi_2}{dx}.$$

Оператор $\hat{L}=\dfrac{d}{dx}$ является линейным.

6. Докажите, что оператор комплексного сопряжения не является линейным.

Пусть оператор комплексного сопряжения $\hat{K}$. Тогда по определению

$$\hat{K}\psi = \psi^*.$$

Тогда для любых a_1, a_2 и ψ_1, ψ_2 имеем

$$\hat{K}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = (a_1\psi_1 + a_2\psi_2)^* = a_1^*\psi_1^* + a_2^*\psi_2^* =$$
$$= a_1^*\hat{K}\psi_1 + a_2^*\hat{K}\psi_2 \neq a_1\hat{K}\psi_1 + a_2\hat{K}\psi_2,$$

что требовалось доказать.

7. Найдите оператор, переводящий функцию $\psi(x)$ в функцию $\psi(x+a)$ (оператор трансляции).

Воспользуемся определением оператора

$$\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$$

и разложим функцию $\psi(x+a)$ в ряд по степеням a:

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

Заметим, что $\sum\limits_{n=0}^{\infty}\frac{(ax)^n}{n!} = e^{ax}$, можем записать получившийся ряд в виде $\sum\limits_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x) = e^{a\frac{d\psi(x)}{dx}}$, а оператор

$$\hat{T}_a = e^{a\frac{d}{dx}}.$$

Ответ: $\hat{T}_a = e^{a\frac{d}{dx}}$.

8. Найдите оператор, переводящий функцию $\psi(\varphi)$ в функцию $\psi(\varphi+\alpha)$, где φ – угловая переменная (оператор поворота пространства на угол α).

Воспользуемся определением оператора

$$\hat{T}_\alpha\psi(\varphi) = \psi(\varphi+\alpha)$$

и разложим функцию $\psi(\varphi+\alpha)$ в ряд по степеням α:

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

Заметим, что $\sum\limits_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\alpha\frac{d}{d\varphi}\right)^n}{n!} = e^{\alpha\frac{d}{d\varphi}}$, можем записать оператор

$$\hat{T}_\alpha = e^{\alpha\frac{d}{d\varphi}}.$$

Ответ: $\hat{T}_\alpha = e^{\alpha\frac{d}{d\varphi}}$.

9. Найдите собственные функции и собственные значения оператора $\frac{d}{d\varphi}$.

Уравнение на собственные функции и собственные значения

$$\frac{d\psi}{d\varphi} = \lambda\psi.$$

Решение уравнения следует искать в виде $\psi = Ae^{\alpha\varphi}$, где $\alpha = \lambda$. По условию угловой периодичности переменной $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$,

$$Ae^{\lambda\varphi} = Ae^{\lambda(\varphi+2\pi)} = Ae^{\lambda\varphi}e^{2\pi\lambda},\ e^{2\pi\lambda} = 1,$$

что может быть, если $\lambda = im$, где m – целое.

Пронормируем функцию

$$1 = \int_0^{2\pi} A^* e^{-im\varphi} A e^{im\varphi} d\varphi = |A|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = |A|^2 2\pi,$$

откуда $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$, тогда собственная функция

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}.$$

Ответ: $\lambda = im$, $\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$.

10. Найдите собственные функции и собственные значения оператора $\sin\frac{d}{d\varphi}$.

Уравнение на собственные функции и собственные значения

$$\sin\frac{d\psi}{d\varphi}=\lambda\psi .$$

Чтобы решить это уравнение, разложим оператор $\sin\frac{d}{d\varphi}$ в степенной ряд

$$\sin\frac{d}{d\varphi}\psi=\left(\frac{d}{d\varphi}-\frac{1}{3!}\frac{d^3}{d\varphi^3}+\frac{1}{5!}\frac{d^5}{d\varphi^5}-...\right)\psi=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\frac{d^{2k+1}\psi}{d\varphi^{2k+1}} .$$

Решение уравнения

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

следует искать в виде $\psi=Ae^{\alpha\varphi}$ и из требования периодичности функции $\alpha=im$, где m – целое. Нормировка на 1 дает $A=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Подставим эту функцию в уравнение и получим собственные значения:

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

Ответ: $\lambda=\sin(im)$, $\psi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$.

11. Найдите собственное значение оператора $\hat{L}=\frac{d^2}{dx^2}$, соответствующее собственной функции $f(x)=\sin kx$.

Согласно определению собственных функций $f(x)$ и собственных значений λ оператора $\hat{L}$

$$\hat{L}f(x)=\lambda f(x),$$

применим определение к заданной функции

$$\frac{d^2}{dx^2}\sin kx=-k^2\sin kx .$$

Сравнивая данное равенство с определением, получаем, что заданной функции соответствует собственное значение оператора $\hat{L}$:

$$\lambda=-k^2 .$$

Ответ: $\lambda=-k^2$.

12. Найдите спектр собственных значений и собственных функций уравнения $\frac{d^2f(x)}{dx^2}=-k^2f(x)$, если граничные условия имеют вид $f(0)=0$, $f(a)=0$.

Данное уравнение является дифференциальным уравнением второго порядка с постоянными коэффициентами:

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2}+k^2f(x)=0\ –$$

волновое уравнение. Его общее решение:

$$f(x)=A\sin kx+B\cos kx ,$$

где A и B – произвольные постоянные интегрирования.

Из граничных условий

$$f(0)=0\quad\Rightarrow\quad B=0,$$

$$f(a)=0\quad\Rightarrow\quad A\sin ka+B\cos ka=0 .$$

То есть постоянная A – произвольная, а $\sin ka=0$ при $ka=\pi n$, где n – целое. Т.е. $k=\frac{\pi n}{a}$. Собственные функции уравнения:

$$f(x)=A\sin\frac{\pi nx}{a},$$

а соответствующие им собственные значения

$$k=\frac{\pi n}{a},\ n=0,\pm1,\pm2,...$$

Ответ: $f(x)=A\sin\frac{\pi nx}{a}$, $k=\frac{\pi n}{a}$, $n=0,\pm1,\pm2,...$

13. Найдите условие нормировки волн де Бройля.

Волна де Бройля имеет вид:

$$\psi(x,t) = C\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right) = \psi(x)\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right),$$

где

$$\psi(x) = C\exp\frac{ipx}{\hbar}.$$

Если период волны де Бройля равен ℓ, то есть $\psi(x) = \psi(x+\ell)$, то

$$C\exp\frac{ipx}{\hbar} = C\exp\frac{ipx}{\hbar}\cdot\exp\frac{ip\ell}{\hbar},$$

то есть

$$\exp\frac{ip\ell}{\hbar} = 1,$$

следовательно,

$$p = \frac{2\pi n}{\ell}\hbar.$$

Из условий нормировки

$$\int_0^\ell |\psi(x)|^2 dx = 1$$

или

$$\int_0^\ell C^* e^{\frac{ipx}{\hbar}} C e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx = |C|^2 \int_0^\ell dx = |C|^2 \ell = 1,$$

то есть

$$C = \frac{1}{\sqrt{\ell}}.$$

Отсюда нормировка волны де Бройля имеет вид:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\ell}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right).$$

Для трехмерного случая

$$p_x = \frac{2\pi n_x}{\ell_x}\hbar, \quad p_y = \frac{2\pi n_y}{\ell_y}\hbar, \quad p_z = \frac{2\pi n_z}{\ell_z}\hbar,$$

где $V = \ell_x \cdot \ell_y \cdot \ell_z$ – параллелепипед периодичности, $n_x, n_y, n_z = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \ldots$

Волна де Бройля

$$\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{\ell_x\cdot\ell_y\cdot\ell_z}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\cdot\vec{r})\right).$$

Ответ: $\psi(x,t) = \dfrac{1}{\sqrt{\ell}}\exp\left(-\dfrac{i}{\hbar}(Et - px)\right)$.

14. Функция $f(\varphi) = Ce^{ik\varphi}$ задана в интервале $0 \le \varphi \le 2\pi$. Определите нормирующий на единицу множитель C.

Условие нормировки на единицу

$$\int f^*(x) f(x) dx = 1,$$

интегрирование производится по всей области определения функции. Следовательно, для полярной координаты φ нормировка

$$\int_0^{2\pi} C^* e^{-ik\varphi} C e^{ik\varphi} d\varphi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = |C|^2 2\pi = 1,$$

откуда нормирующий множитель

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},$$

а нормированная функция имеет вид:

$$f(\varphi) = \frac{e^{ik\varphi}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Ответ: $C = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

15. В момент времени $t = 0$ частица описывается функцией $\psi(x,0) = Ae^{-a^2x^2 + ik_0x}$, где a и k_0 – постоянные. Определите ширину волнового пакета.

Разложим данную функцию в ряд Фурье по k:

$$\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx} dk$$

– волновой пакет, описывающий частицу.

$$C(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) e^{ikx} dx = \frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2x^2 + i(k_0 - k)x} dx.$$

Дополняя показатель экспоненты до полного квадрата, получим

$$C(k)=\frac{A}{2\pi}e^{-\frac{(k_0-k)^2}{2a^2}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{a^2}{2}\left(x-i\frac{(k_0-k)}{a}\right)^2}dx=\frac{A}{a\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(k_0-k)^2}{2a^2}}.$$

Значение $C(k)$ максимально вблизи $k=k_0$. Выражение

$$|C(k)|^2dk=\frac{A^2}{2\pi a^2}e^{-\frac{(k_0-k)^2}{a^2}}dk$$

пропорционально вероятности найти у частицы квазиимпульс в интервале $k\div k+dk$. Ширину пакета в квазиимпульсном пространстве можно определить как $\Delta k\approx\frac{1}{a}$.

Ответ: $\Delta k\approx\frac{1}{a}$.

16. Пусть собственные функции и собственные значения двух операторов удовлетворяют условиям $\hat{L}_1 f_1(x)=\lambda_1 f_1(x)$ и $\hat{L}_2 f_2(y)=\lambda_2 f_2(y)$. Будет ли собственная функция оператора $\psi(x,y)$ иметь вид $\psi(x,y)=f_1(x)f_2(y)$, если $\hat{L}\psi(x,y)=\lambda\psi(x,y)$, а $\hat{L}=\hat{L}_1\cdot\hat{L}_2$, причем $\hat{L}_1=\frac{d}{dx}$ и $\hat{L}_2=\frac{d}{dy}$?

Решим уравнение на собственные функции и собственные значения:

$$\hat{L}\psi(x,y)=\lambda\psi(x,y).$$

Подставим в него явное значение оператора $\hat{L}=\frac{d^2}{dxdy}$ и функцию $\psi(x,y)$ в виде произведения $\psi(x,y)=f_1(x)f_2(y)$:

$$\frac{d^2}{dxdy}f_1(x)f_2(y)=\frac{d}{dx}\left(f_1(x)\frac{d}{dy}f_2(y)\right)=\frac{d}{dx}\left(f_1(x)\lambda_2 f_2(y)\right)=$$

$$=\left(\frac{d}{dx}f_1(x)\right)\lambda_2 f_2(y)=\lambda_1 f_1(x)\lambda_2 f_2(y)=\lambda_1\lambda_2 f_1(x)f_2(y).$$

Следовательно, функция $\psi(x,y)=f_1(x)f_2(y)$ является собственной функцией оператора $\hat{L}$, соответствующей собственному значению $\lambda=\lambda_1\lambda_2$.

Ответ: да.

17. Найдите собственные функции и собственные значения оператора $\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$. Какая волновая функция соответствует проекции момента $L_z=3\hbar$?

Уравнение на собственные функции и собственные значения

$$\hat{L}_z\psi=\lambda\psi,$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}=\lambda\psi$$

приводит к дифференциальному уравнению

$$\frac{d\psi}{\psi} = i\hbar\lambda d\varphi ,$$

его решение $\psi = Ce^{i\hbar\lambda\varphi}$. В силу периодичности функции угловой координаты $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$:

$$Ce^{i\hbar\lambda\varphi} = Ce^{i\hbar\lambda\varphi + i\hbar\lambda 2\pi}, \; e^{i\hbar\lambda 2\pi} = 1 ,$$

следовательно, $\hbar\lambda = m$, где m – целое. То есть собственному значению $L_z = m\hbar$ соответствует собственная функция $\psi_m = Ce^{im\varphi}$. Пронормируем ее:

$$1 = \int_0^{2\pi} \left|\psi_m(\varphi)\right|^2 d\varphi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi |C|^2 \text{, откуда } C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} ,$$

тогда $\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$.

Собственному значению $L_z = 3\hbar$ соответствует функция

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} .$$

Ответ: $\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$, $L_z = m\hbar$, $\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 2:

«Понятие вероятности в квантовой механике. Среднее значение физической величины»

Задачи

1. Найдите возможные собственные значения оператора $\hat{L}_z$ и их вероятности для частицы, находящейся в состоянии а) $\Psi(\varphi) = A\sin^3\varphi$; б) $\Psi(\varphi) = A(2-\cos 4\varphi)$.

а) Собственные функции оператора $\hat{L}_z$

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Выразим функцию состояния через экспоненты.

$$\sin\varphi = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i},$$

тогда

$$\Psi(\varphi) = A\left(\frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}\right)^3 = -\frac{A}{8i}\left(e^{3i\varphi} - 3e^{i\varphi} + 3e^{-i\varphi}1e^{3i\varphi}\right) =$$

$$= -\frac{A\sqrt{2\pi}}{8i}\left(\frac{e^{3i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} - 3\frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + 3\frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} - \frac{e^{3i\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\right) =$$

$$= \left(-\frac{A\sqrt{2\pi}}{8i}\frac{e^{3i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i}\frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} - \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i}\frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{A\sqrt{2\pi}}{8i}\frac{e^{3i\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\right) =$$

$$= \left(-\frac{A\sqrt{2\pi}}{8i}\psi_3(\varphi) + \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i}\psi_1(\varphi) - \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i}\psi_{-1}(\varphi) + \frac{A\sqrt{2\pi}}{8i}\psi_{-3}(\varphi)\right).$$

Разложение функции состояния по собственным функциям оператора $\hat{L}_z$

$$\psi(\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m \psi_m(\varphi)$$

содержит коэффициенты разложения c_m, такие, что $w_m = |c_m|^2$ – вероятность системы находиться в состоянии с магнитным квантовым числом m. Тогда из разложения функции получаем коэффициенты:

$$c_3 = -\frac{A\sqrt{2\pi}}{8i},\quad c_1 = \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i},\quad c_{-1} = -\frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i},\quad c_{-3} = \frac{A\sqrt{2\pi}}{8i}$$

и вероятности:

$$w_3 = \frac{|A|^2\pi}{32},\quad w_1 = \frac{9|A|^2\pi}{32},\quad w_{-1} = \frac{9|A|^2\pi}{32},\quad w_{-3} = \frac{|A|^2\pi}{32},$$

но поскольку сумма вероятностей должна быть равна 1, то

$$1 = \frac{|A|^2\pi}{32} + \frac{9|A|^2\pi}{32} + \frac{9|A|^2\pi}{32} + \frac{|A|^2\pi}{32} = \frac{10|A|^2\pi}{16},$$

откуда

$$|A|^2 = \frac{16}{10\pi},\ \text{а}\ A = \frac{4}{\sqrt{10\pi}},$$

тогда

$$w_3 = \frac{16\pi}{32\cdot 10\pi} = \frac{1}{20},\quad w_1 = \frac{9}{20},\quad w_{-1} = \frac{9}{20},\quad w_{-3} = \frac{9}{20}.$$

Итак, частица может находиться в состояниях с квантовыми числами $m = \pm 1; \pm 3$, то есть проекция момента импульса может иметь значения с соответствующими вероятностями:

L_z	$-3\hbar$	$-\hbar$	$\hbar$	$3\hbar$
w	0,05	0,45	0,45	0,05

б) Аналогично:

$$\cos\varphi = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2},$$

тогда

$$\Psi(\varphi) = A\left(1 - \frac{e^{i4\varphi} + e^{-i4\varphi}}{2}\right)^3 = A\sqrt{2\pi}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} - \frac{e^{i4\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{e^{-i4\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\right) =$$

$$= \left(A\sqrt{2\pi}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi}} - A\sqrt{2\pi}\,\frac{e^{i4\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + A\sqrt{2\pi}\,\frac{e^{-i4\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \right) =$$

$$= \left(A\sqrt{2\pi}\psi_0(\varphi) - A\sqrt{2\pi}\psi_4(\varphi) + A\sqrt{2\pi}\psi_{-4}(\varphi) \right).$$

коэффициенты:

$$c_0 = 2A\sqrt{2\pi}, \quad c_4 = A\sqrt{2\pi}, \quad c_{-4} = -A\sqrt{2\pi}$$

и вероятности:

$$w_0 = 4|A|^2\pi, \quad w_4 = |A|^2\pi, \quad w_{-4} = |A|^2\pi,$$

но поскольку сумма вероятностей должна быть равна 1, то

$$1 = 4|A|^2\pi + |A|^2\pi + |A|^2\pi = 6|A|^2\pi,$$

откуда

$$|A|^2 = \frac{1}{6\pi}, \text{ а } A = \frac{1}{\sqrt{6\pi}},$$

тогда

$$w_0 = \frac{4\pi}{6\pi} = \frac{2}{3}, \quad w_4 = \frac{1}{6}, \quad w_{-4} = \frac{1}{6}.$$

Итак, частица может находиться в состояниях с квантовыми числами $m = 0; \pm 4$, то есть проекция момента импульса может иметь значения с соответствующими вероятностями:

L_z	0	$-4\hbar$	$4\hbar$
w	$2/3$	$1/6$	$1/6$

Ответ: а) $L_z = \pm\hbar; \pm 3\hbar$; w =0,05; 0,45;

б) $L_z = 0; \pm 4\hbar$; $w = \frac{2}{3}; \frac{1}{6}$.

2. В момент времени $t = 0$ частица описывается функцией

$$\psi(x,0) = Ae^{-a^2x^2 + ik_0x},$$

где a и k_0 – постоянные. Пронормируйте функцию и найдите область локализации частицы и плотность тока.

Из условия нормировки

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^* e^{-a^2x^2 - ik_0x} Ae^{-a^2x^2 + ik_0x} dx =$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2a^2x^2} dx = |A|^2 \frac{1}{a}\sqrt{\frac{\pi}{2}},$$

откуда

$$A = \sqrt{a\sqrt{\frac{2}{\pi}}}.$$

Чтобы найти область локализации, найдем плотность вероятности

$$\rho(x) = |\psi(x,0)|^2 = a\sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-2a^2x^2}.$$

Эта функция имеет максимум в точке $x_0 = 0$ и быстро убывает с ростом $|x|$, следовательно, частица локализована в начале координат. Ширина пакета, заданного такой функцией, порядка $\frac{1}{a\sqrt{2}}$.

Плотность тока вероятности

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} \right) = \frac{a\hbar k_0}{m\sqrt{\pi}} e^{-2a^2x^2} = \frac{\hbar k_0}{m}\rho.$$

Конечное выражение для тока совпадает с классическим. Множитель ρ (аналог плотности заряда) зависит только от параметров вещественной части функции состояния, а множитель $\frac{\hbar k_0}{m}$ (аналог скорости частицы) – связан только с мнимой частью.

Ответ: $x_0 = 0$, $\psi(x) = \sqrt{a\sqrt{\frac{2}{\pi}}} e^{-a^2x^2 + ik_0x}$, $j_x = \frac{a\hbar k_0}{m\sqrt{\pi}} e^{-2a^2x^2}$.

3. Определите распределение вероятности различных значений импульса для основного состояния частицы, находящейся в «ящике» размерами $a \times b \times c$.

Волновая функция такой частицы в координатном представлении

$$\Psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\frac{\pi x}{a} \sin\frac{\pi y}{b} \sin\frac{\pi z}{c}.$$

В импульсном представлении

$$\Psi\left(p_x,p_y,p_z\right)=\int_0^a dx\int_0^b dy\int_0^z dz\,\frac{e^{-\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{\pi^3\hbar^3 abc}}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{b}\sin\frac{\pi z}{c}=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi^3\hbar^3 abc}}\int_0^a e^{-\frac{ip_x x}{\hbar}}\sin\frac{\pi x}{a}dx\int_0^b e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}}\sin\frac{\pi y}{b}dy\int_0^z e^{-\frac{ip_z z}{\hbar}}\sin\frac{\pi z}{c}dz\,.$$

Интеграл

$$\int e^{-\alpha x}\sin\beta x dx=\begin{vmatrix} U=\sin\beta x & dU=\beta\cos\beta x dx \\ dV=e^{-\alpha x}dx & V=-\frac{1}{\alpha}e^{-\alpha x}\end{vmatrix}=$$

$$=-\frac{\sin\beta x}{\alpha}e^{-\alpha x}+\frac{\beta}{\alpha}\int e^{-\alpha x}\cos\beta x dx=$$

$$=\begin{vmatrix} U=\cos\beta x & dU=-\beta\sin\beta x dx \\ dV=e^{-\alpha x}dx & V=-\frac{1}{\alpha}e^{-\alpha x}\end{vmatrix}=$$

$$=-\frac{\sin\beta x}{\alpha}e^{-\alpha x}+\frac{\beta}{\alpha}\left(-\frac{\cos\beta x}{\alpha}e^{-\alpha x}-\frac{\beta}{\alpha}\int e^{-\alpha x}\sin\beta x dx\right)=$$

$$=-\frac{\sin\beta x}{\alpha}e^{-\alpha x}-\frac{\beta\cos\beta x}{\alpha^2}e^{-\alpha x}-\frac{\beta^2}{\alpha^2}\int e^{-\alpha x}\sin\beta x dx\,,$$

$$\int e^{-\alpha x}\sin\beta x dx=-\frac{\alpha\sin\beta x+\beta\cos\beta x}{\alpha^2+\beta^2}e^{-\alpha x}$$

Распределение вероятности значений импульса

$$\rho(\vec{p})=\left|\Psi\left(p_x,p_y,p_z\right)\right|^2=\frac{\left(4\pi\hbar^3\right)^3 abc\cos^2\frac{p_x a}{2\hbar}\cos^2\frac{p_y b}{2\hbar}\cos^2\frac{p_z c}{2\hbar}}{\left(p_x^2a^2-\pi^2\hbar^2\right)\left(p_y^2b^2-\pi^2\hbar^2\right)\left(p_z^2c^2-\pi^2\hbar^2\right)}\,.$$

Ответ: $\rho(\vec{p})=\dfrac{\left(4\pi\hbar^3\right)^3 abc\cos^2\frac{p_x a}{2\hbar}\cos^2\frac{p_y b}{2\hbar}\cos^2\frac{p_z c}{2\hbar}}{\left(p_x^2a^2-\pi^2\hbar^2\right)\left(p_y^2b^2-\pi^2\hbar^2\right)\left(p_z^2c^2-\pi^2\hbar^2\right)}$.

4. Найдите сумму $\sum_n x_n\delta_{nk}$ **.**

Так как $\delta_{nk}=\begin{cases}1 \text{ при } n=k,\\ 0 \text{ при } n\neq k,\end{cases}$

то сумма $\sum_n x_n\delta_{nk}=x_k$.

Ответ: x_k .

5. Найдите вероятность того, что импульс электрона в основном состоянии атома водорода заключен в интервале $(p, p+dp)$.

Вероятность частицы иметь указанный импульс

$$dw=\left|\Psi\left(\vec{p}\right)\right|^2 d\vec{p}\,,$$

где $\Psi\left(\vec{p}\right)$ – функция состояния в импульсном представлении.

Функция основного состояния электрона в атоме водорода в координатном представлении

$$\Psi(r)=\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a}}\,,$$

где a – радиус первой боровской орбиты электрона.

Волновая функция в импульсном представлении может быть записана так

$$\Psi\left(\vec{p}\right)=\int\frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}}\Psi(r)dV=\frac{1}{\pi^2\left(2a\hbar\right)^{3/2}}\int e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}-\frac{r}{a}}dV\,.$$

Вычисление интеграла по бесконечному объему проведем в сферических координатах. Ось Oz направим вдоль вектора импульса,

$$\int e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}-\frac{r}{a}}dV=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi e^{-i\frac{pr\cos\theta}{\hbar}-\frac{r}{a}}\sin\theta d\theta=$$

$$=2\pi\int_0^\infty r^2dr\int_{-1}^1 e^{-i\frac{pr\cos\theta}{\hbar}-\frac{r}{a}}d\cos\theta=\frac{2\pi\hbar}{ip}\int_0^\infty\left[e^{-\left(\frac{1}{a}-i\frac{p}{\hbar}\right)r}-e^{-\left(\frac{1}{a}+i\frac{p}{\hbar}\right)r}\right]rdr=$$

$$=\frac{8\pi a^3\hbar^4}{\left(a^2p^2+\hbar^2\right)^2}.$$

Волновая функция в импульсном представлении имеет вид

$$\Psi(\vec{p}) = \frac{1}{\pi}\frac{\hbar(2a\hbar)^{3/2}}{\left(a^2p^2+\hbar^2\right)^2}.$$

Квадрат волновой функции

$$\left|\Psi(\vec{p})\right|^2 = \frac{8a^3\hbar^5}{\pi^2\left(a^2p^2+\hbar^2\right)^4}.$$

Умножая на объем шарового слоя в импульсном пространстве $4\pi p^2 dp$, получим искомую вероятность

$$dw = \frac{32a^3\hbar^5p^2}{\pi^2\left(a^2p^2+\hbar^2\right)^4}dp.$$

Ответ: $dw = \dfrac{32a^3\hbar^5p^2}{\pi^2\left(a^2p^2+\hbar^2\right)^4}dp$.

6. Вычислите вероятности нахождения частицы в интервалах значений координаты z от z_1 до z_2 по заданной волновой функции $\Psi(x,y,z) = A\exp\left(-\dfrac{x^2+y^2+z^2}{2a^2}\right)$.

Вероятность частицы иметь координату

$$w = \int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{z_1}^{z_2}dz\left|A\exp\left(-\frac{x^2+y^2+z^2}{2a^2}\right)\right|^2 =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\int_{z_1}^{z_2}dz|A|^2\exp\left(-\frac{x^2+y^2+z^2}{a^2}\right) =$$

$$= |A|^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)dx\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{y^2}{a^2}\right)dy\int_{z_1}^{z_2}\exp\left(-\frac{z^2}{a^2}\right)dz =$$

$$= |A|^2a\sqrt{\pi}a\sqrt{\pi}a\left(erf(z_2)-erf(z_1)\right) = \pi|A|^2a^3\left(erf(z_2)-erf(z_1)\right),$$

где $\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\alpha x^2\right)dx = \sqrt{\dfrac{\pi}{\alpha}}$ – интеграл Пуассона, а функция $erf(z) = \int_{z}^{\infty}\exp\left(-\alpha x^2\right)dx$ – интеграл ошибок.

Ответ: $w = \pi|A|^2a^3\left(erf(z_2)-erf(z_1)\right)$.

7. Найдите среднее значение проекции момента импульса $\hat{L}_z$ и среднее значение квадрата проекции момента импульса $\hat{L}_z^2$ для частицы, находящейся в состоянии
а) $\Psi(\varphi) = A\sin^3\varphi$**; б)** $\Psi(\varphi) = A(2-\cos 4\varphi)$**.**

а) Исходя из решения задачи 18, частица может находиться в состояниях с квантовыми числами $m = \pm1;\pm3$, то есть проекция момента импульса может иметь значения с соответствующими вероятностями:

L_z	$-3\hbar$	$-\hbar$	$\hbar$	$3\hbar$
w	0,05	0,45	0,45	0,05

Тогда среднее значение проекции момента L_z

$$\left\langle L_z\right\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty}w_m\left(L_z\right)_m,$$

$$\left\langle L_z\right\rangle = 0{,}05\cdot(-3\hbar)+0{,}45\cdot(-\hbar)+0{,}45\cdot\hbar+0{,}05\cdot3\hbar = 0,$$

а среднее значение квадрата проекции момента L_z^2

$$\left\langle L_z^2\right\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty}w_m\left(L_z^2\right)_m,$$

$$\left\langle L_z^2\right\rangle = 0{,}05\cdot9\hbar^2+0{,}45\cdot\hbar^2+0{,}45\cdot\hbar^2+0{,}05\cdot9\hbar^2 = 1{,}8\hbar^2.$$

Аналогично, частица может находиться в состояниях с квантовыми числами $m = 0;\pm4$, то есть проекция момента импульса может иметь значения с соответствующими вероятностями:

L_z	0	$-4\hbar$	$4\hbar$
w	$2/3$	$1/6$	$1/6$

Тогда среднее значение проекции момента L_z

$$\left\langle L_z\right\rangle = \frac{2}{3}\cdot0+\frac{1}{6}\cdot(-4\hbar)+\frac{1}{6}\cdot4\hbar = 0,$$

а среднее значение квадрата проекции момента L_z^2

$$\left\langle L_z^2\right\rangle = \frac{2}{3}\cdot0+\frac{1}{6}\cdot16\hbar^2+\frac{1}{6}\cdot16\hbar^2 = \frac{16}{3}\hbar^2.$$

Ответ: а) $\langle L_z \rangle = 0$, $\langle L_z^2 \rangle = 1{,}8\hbar^2$; б) $\langle L_z \rangle = 0$, $\langle L_z^2 \rangle = \frac{16}{3}\hbar^2$.

8. Найдите среднее значение проекции момента импульса $\hat{L}^2$ частицы, находящейся в состоянии $\Psi(\theta,\varphi) = A\sin\theta\cos\varphi$.

По определению среднего значения физической величины L^2, которой соответствует оператор $\hat{L}^2$

$$\langle L^2 \rangle = (\psi; \hat{L}^2\psi),$$

в сферических координатах оператор $\hat{L}^2$ имеет вид

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

тогда среднее значение

$$\langle L^2 \rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\psi^*\hat{L}^2\psi\sin\theta d\theta d\varphi =$$

$$= -\hbar^2|A|^2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin\theta\cos\varphi\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}\right)\sin\theta\cos\varphi\sin\theta d\theta d\varphi =$$

$$= -\hbar^2|A|^2\left[\int_0^{2\pi}\cos^2 d\varphi\int_0^{\pi}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\sin^2\theta d\theta - \right.$$

$$\left. - \int_0^{2\pi}\cos\varphi\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}\cos\varphi d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\right] = \frac{8}{3}\hbar^2|A|^2\pi.$$

Пронормируем функцию ψ

$$1 = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\psi^*\psi\sin\theta d\theta d\varphi = |A|^2\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin^2\theta\cos^2\varphi\sin\theta d\theta d\varphi =$$

$$= -|A|^2\int_0^{2\pi}\cos^2\varphi d\varphi\int_0^{\pi}\sin^2\theta d\cos\theta = -|A|^2\pi\left(\cos\theta - \frac{\cos^3\theta}{3}\right)\Bigg|_0^{\pi} = \frac{4}{3}|A|^2\pi,$$

$$|A|^2 = \frac{3}{4\pi},$$

тогда

$$\langle L^2 \rangle = 2\hbar^2.$$

Ответ: $\langle L^2 \rangle = 2\hbar^2$.

9. Найдите среднее значение координаты $\langle x \rangle$ и импульса $\langle p_x \rangle$ частицы, находящейся в состоянии $\Psi(x) = Ae^{ikx - \frac{x^2}{a^2}}$.

По определению среднего значения

$$\langle x \rangle = \int\Psi^* x\Psi dx = |A|^2\int e^{-ikx - a^2x^2}xe^{ikx - a^2x^2}dx = |A|^2\int xe^{-a^2x^2}dx = 0,$$

$$\langle p_x \rangle = \int\Psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi dx = \int\Psi^*\left(\hbar k + \frac{i\hbar x}{a}\right)\Psi dx =$$

$$= \hbar k\int\Psi^*\Psi dx + \frac{i\hbar x}{a}\int\Psi^* x\Psi dx = \hbar k.$$

Ответ: $\langle x \rangle = 0$, $\langle p_x \rangle = \hbar k$.

10. Найдите среднее значение квадратичного отклонения координаты $\langle \Delta x^2 \rangle$ частицы, находящейся в состоянии $\psi(x) = Ae^{ikx - a^2x^2}$.

Поскольку среднее значение координаты в этом состоянии равно нулю, то $\Delta x = x - \langle x \rangle = x$ и $\langle \Delta x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle$.

По определению среднего значения квадрата координаты

$$\langle x^2 \rangle = \int\psi^* x^2\psi dx = |A|^2\int e^{-ikx - a^2x^2}x^2e^{ikx - a^2x^2}dx = |A|^2\int x^2e^{-a^2x^2}dx.$$

Воспользуемся интегралом Пуассона

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\beta x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}, \quad \frac{\partial}{\partial\beta}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\beta x^2}dx = \frac{\partial}{\partial\beta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}, \quad -\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\beta x^2}dx = -\frac{1}{2\beta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}},$$

тогда с учетом нормировки $A = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}}$ (задача 8)

$$\left\langle x^2\right\rangle = \frac{|A|^2\sqrt{\pi}}{2a^3} = \frac{a}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{2a^3} = \frac{1}{2a^2}.$$

Ответ: $\left\langle x^2\right\rangle = \dfrac{1}{2a^2}$.

11. Проверьте соотношение неопределенностей для частицы, описываемой функцией $\Psi(x) = Ae^{ikx-\alpha x^2}$.

Пронормируем волновую функцию

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x)|^2 dx = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx-\alpha x^2}\cdot e^{ikx-\alpha x^2}dx =$$

$$= |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2}dx = |A|^2\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}},$$

$$A = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}.$$

Найдем среднее значение квадрата отклонения координаты для случая, когда начало отсчета выбрано в точке локализации частицы $\bar{x} = 0$.

$$\Delta x^2 = \overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{x^2} = \left(\Psi;\hat{x}^2\Psi\right) = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\hat{x}^2\Psi dx =$$

$$= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx-\alpha x^2}\cdot x^2\cdot e^{ikx-\alpha x^2}dx = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2\cdot e^{-2\alpha x^2}dx.$$

Значение интеграла найдем с помощью интеграла Пуассона

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$

Продифференцируем интеграл Пуассона по α

$$\frac{\partial I(\alpha)}{\partial\alpha} = -\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2}dx = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}.$$

$$\Delta x^2 = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{8\alpha^3}} = \frac{1}{4\alpha}.$$

Найдем среднее значение квадрата отклонения импульса для случая, когда начало отсчета движется с постоянной скоростью, равной скорости частицы $\bar{p} = p_0 = \hbar k$.

$$\Delta p^2 = \overline{(p-\bar{p})^2} = \left(\Psi;(\hat{p}-p_0)^2\Psi\right) = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(\hat{p}-p_0)^2\Psi dx =$$

$$= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx-\alpha x^2}\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}-p_0\right)^2 e^{ikx-\alpha x^2}dx =$$

$$= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x}-\hbar k\right)e^{-ikx-\alpha x^2}\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}-\hbar k\right)e^{ikx-\alpha x^2}dx =$$

$$= \hbar^2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(k-2i\alpha x-k)e^{-ikx-\alpha x^2}\cdot(k+2i\alpha x-k)e^{ikx-\alpha x^2}dx =$$

$$= 4\alpha^2\hbar^2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2 e^{-2\alpha x^2}dx = 4\alpha^2\hbar^2\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{8\alpha^3}} = \alpha\hbar^2.$$

Найдем

$$\Delta x\Delta p = \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}\,\overline{(p-\bar{p})^2}} = \sqrt{\frac{1}{4\alpha}\alpha\hbar^2} = \frac{\hbar}{2}.$$

Вывод: соотношение неопределенностей выполняется.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 3:

«Эрмитовы операторы. Коммутатор операторов»

Задачи

1. Найдите правило эрмитового сопряжения произведения операторов.

Правило получим, пользуясь следующими преобразованиями матричных элементов операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$.

$$\left(\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{+}\right)_{nk}=\left(\psi_n;\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{+}\psi_k\right)=\left(\left(\hat{L}\hat{M}\right)\psi_n;\psi_k\right)=$$

$$=\left(\psi_k;\left(\hat{L}\hat{M}\right)\psi_n\right)^{*}=\sum_m\left(\psi_k;\hat{L}\psi_m\right)^{*}\left(\psi_m;\hat{M}\psi_k\right)^{*}=$$

$$=\sum_m\left(\hat{L}\psi_m;\psi_k\right)\left(\hat{M}\psi_k;\psi_m\right)=\sum_m\left(\psi_m;\hat{L}^{+}\psi_n\right)\left(\psi_k;\hat{M}^{+}\psi_m\right)=$$

$$=\sum_m\left(\psi_k;\hat{M}^{+}\psi_m\right)\left(\psi_m;\hat{L}^{+}\psi_n\right)=\left(\psi_k;\hat{M}^{+}\hat{L}^{+}\psi_n\right)=\left(\psi_k;\hat{M}^{+}\hat{L}^{+}\psi_n\right),$$

$$\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{+}=\hat{M}^{+}\hat{L}^{+}.$$

Ответ: $\left(\hat{L}\hat{M}\right)^{+}=\hat{M}^{+}\hat{L}^{+}$.

2. Докажите, что оператор Лапласа является самосопряженным.

Воспользуемся равенствами

$$\Delta\varphi=div\nabla\varphi \text{ и } div\left(\varphi\vec{B}\right)=\varphi div\vec{B}+\vec{B}\cdot\nabla\varphi.$$

Рассмотрим произвольные функции ψ_1 и ψ_2, интегрируемые с квадратом модуля и равные нулю на бесконечности. Найдем

$$\left(\psi_1;\Delta\psi_2\right)=\int\psi_1^{*}\Delta\psi_2 dV=\int\psi_1^{*}div\left(\nabla\psi_2\right)dV=$$

$$=\int div\left(\psi_1^{*}\nabla\psi_2\right)dV-\int\nabla\psi_1^{*}\cdot\nabla\psi_2 dV.$$

$\int div\left(\psi_1^{*}\nabla\psi_2\right)dV=\oint\psi_1^{*}\nabla\psi_2\cdot d\vec{s}$ по теореме Остроградского-Гаусса, $\oint\psi_1^{*}\nabla\psi_2\cdot d\vec{s}=0$ – по свойству функций.

Тогда

$$\left(\psi_1;\Delta\psi_2\right)=-\int\nabla\psi_1^{*}\cdot\nabla\psi_2 dV=-\int\nabla\psi_2\cdot\nabla\psi_1^{*}dV=$$

$$=-\int\left\{div\left(\psi_2\cdot\nabla\psi_1^{*}\right)-\psi_2 div\nabla\psi_1^{*}\right\}dV=\int\psi_2\Delta\psi_1^{*}dV=\int\Delta\psi_1^{*}\psi_2 dV.$$

Выполняется условие самосопряженности оператора

$$\left(\psi_1;\Delta\psi_2\right)=\left(\Delta\psi_1;\psi_2\right),$$

что требовалось доказать.

3. Оператор $\hat{A}$ эрмитов. Является ли оператор $\hat{B}=C\hat{A}$, где C – произвольная константа, тоже эрмитовым?

Согласно определению эрмитового оператора

$$\left(\psi,\hat{A}\varphi\right)=\left(\hat{A}\psi,\varphi\right),$$

где ψ и φ – произвольные функции. Т.е.

$$\int\psi^{*}(x)\hat{A}\varphi(x)dx=\int\hat{A}^{*}\psi^{*}(x)\varphi(x)dx.$$

Воспользуемся этим определением для оператора $\hat{B}$

$$\int\psi^{*}(x)C\hat{A}\varphi(x)dx=C\int\psi^{*}(x)\hat{A}\varphi(x)dx=$$

$$=C\int\hat{A}^{*}\psi^{*}(x)\varphi(x)dx=\int C\hat{A}^{*}\psi^{*}(x)\varphi(x)dx,$$

следовательно, $\int\psi^{*}(x)\hat{B}\varphi(x)dx=\int\hat{B}^{*}\psi^{*}(x)\varphi(x)dx$ выполняется для действительных C.

Ответ: является при действительном C.

4. Найдите оператор, сопряженный оператору трансляции координаты x на величину a $\hat{T}_a\psi(x)=\psi(x+a)$.

Воспользуемся определением эрмитовости оператора

$$\left(\psi_1(x);\hat{T}_a\psi_2(x)\right)=\left(\hat{T}_a^{+}\psi_1(x);\psi_2(x)\right)$$

или в явном виде:

$$\int\psi_1^{*}(x)\hat{T}_a\psi_2(x)dx=\int\hat{T}_a^{+}\psi_1^{*}(x)\psi_2(x)dx.$$

Воспользуемся определением оператора трансляции

$$\hat{T}_a\psi(x)=\psi(x+a):$$

$$\int \psi_1^*(x)\hat{T}_a\psi_2(x)dx = \int \psi_1^*(x)\psi_2(x+a)dx .$$

Поскольку интегрирование ведется по всему координатному пространству, замена $x+a=x'$ не отразится на пределах интегрирования:

$$\int \psi_1^*(x'-a)\psi_2(x')dx' = \int \hat{T}_{-a}\psi_1^*(x')\psi_2(x')dx' ,$$

то есть $\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$.

Ответ: $\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$.

5. Докажите, что собственные значения эрмитового оператора действительны.

Пусть ψ_n и λ_n – собственные функции и собственные значения эрмитового оператора $\hat{L}$. Тогда они связаны определением:

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n\psi_n .$$

Умножим это уравнение слева скалярно на ψ_n:

$$\left(\psi_n;\hat{L}\psi_n\right) = \left(\psi_n;\lambda_n\psi_n\right) = \lambda_n\left(\psi_n;\psi_n\right) = \lambda_n .$$

Умножим это уравнение справа скалярно на ψ_n:

$$\left(\hat{L}\psi_n;\psi_n\right) = \left(\lambda_n^*\psi_n;\psi_n\right) = \lambda_n^*\left(\psi_n;\psi_n\right) = \lambda_n^* .$$

Так как оператор $\hat{L}$ эрмитов, то

$$\left(\psi_n;\hat{L}\psi_n\right) = \left(\hat{L}\psi_n;\psi_n\right) \text{ и } \lambda_n^* = \lambda_n ,$$

что возможно только для действительных собственных значений.

6. Докажите, что невырожденные собственные функции оператора $\hat{L}$, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны друг другу.

Пусть λ и μ – различные ($\lambda \neq \mu$) собственные значения оператора $\hat{L}$, а ψ и ϕ – его собственные функции, соответствующие этим собственным значениям.

Тогда для ψ и ϕ выполняется определение

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi , \tag{1}$$

$$\hat{L}\phi = \mu\phi . \tag{2}$$

Домножим (1) на ϕ справа, а (2) на ψ слева и учтем действительность собственных значений

$$\left(\hat{L}\psi;\phi\right) = \left(\lambda^*\psi;\phi\right) \;\Rightarrow\; \left(\hat{L}\psi;\phi\right) = \lambda\left(\psi;\phi\right),$$

$$\left(\psi;\hat{L}\phi\right) = \left(\psi;\mu\phi\right) \;\Rightarrow\; \left(\psi;\hat{L}\phi\right) = \mu\left(\psi;\phi\right).$$

Вычтем одно из другого

$$\left(\hat{L}\psi;\phi\right) - \left(\psi;\hat{L}\phi\right) = \left(\lambda-\mu\right)\left(\psi;\phi\right). \tag{3}$$

По определению эрмитового оператора левая часть равенства равна 0, по условию $\lambda \neq \mu$, следовательно, $\left(\psi;\phi\right)=0$, что возможно, только если эти функции ортогональны, что требовалось доказать.

7. Докажите, что собственные функции вырожденного состояния ортогональны друг другу.

Пусть оператор $\hat{L}$ обладает дискретным спектром собственных значений и имеет место вырождение:

$$\hat{L}\psi_{ni} = \lambda_n\psi_{ni} , \tag{1}$$

где $i = 1,\ 2,\ ...,\ m_n$. Здесь одному и тому же собственному значению λ_n принадлежит несколько (m_n) собственных функций $\psi_{n1},\ \psi_{n2},\ ...,\psi_{nm_n}$, где m_n – кратность вырождения. Уравнению (1) удовлетворяет также любая линейная комбинация этих функций $\psi_n^j = \sum_{i=1}^{m_n} C_{ij}\psi_{ni}$. Эта функция нормирована на единицу. Покажем, что если данные функции ψ_{ni} неортогональны, то мы можем заменить их последовательностью функций, являющихся их линейной комбинацией, и потребовать, чтобы они были ортогональными.

Рассмотрим случай двукратного вырождения. Пусть имеет место

$$\hat{L}\psi_1 = \lambda\psi_1 ; \quad \hat{L}\psi_2 = \lambda\psi_2 .$$

Допустим, ψ_1 и ψ_2 неортогональны, т. е. $\left(\psi_1,\psi_2\right) \neq 0$. Вместо ψ_1 и ψ_2 выберем ортогональные друг другу функции $\psi_1' = \psi_1$ и $\psi_2' = \psi_1 + a\psi_2$, тогда $\left(\psi_1',\psi_2'\right) = 0$, т. е.

$$\left(\psi_1, \psi_1 + a\psi_2\right) = 0; \quad \left(\psi_1, \psi_1\right) + a\left(\psi_1, \psi_2\right) = 0,$$

откуда $a = -\dfrac{(\psi_1,\psi_1)}{(\psi_1,\psi_2)}$. Аналогично можно провести ортогонализацию собственных функций и при m_n-кратном вырождении.

8. Покажите, что унитарный оператор $\hat{U}$ можно представить в виде $\hat{U} = e^{i\hat{\Phi}}$, где $\hat{\Phi}$ – некоторый эрмитов оператор.

Если $\hat{U} = e^{i\hat{\Phi}}$, то $\hat{U}^{-1} = e^{-i\hat{\Phi}}$.

Покажем, что $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{+}$. Разложим экспоненту в ряд

$$\hat{U} = e^{i\hat{\Phi}} = 1 + i\hat{\Phi} + \frac{i^2}{2!}\hat{\Phi}^2 + \frac{i^3}{3!}\hat{\Phi}^3 + \ldots$$

$$\hat{U}^{-1} = e^{-i\hat{\Phi}} = 1 - i\hat{\Phi} + \frac{i^2}{2!}\hat{\Phi}^2 - \frac{i^3}{3!}\hat{\Phi}^3 + \ldots$$

Поскольку оператор $\hat{\Phi}$ эрмитов, то $\hat{\Phi}^{+} = \hat{\Phi}$ и его любая степень $\hat{\Phi}^n = \left(\hat{\Phi}^n\right)^{+} = \left(\hat{\Phi}^{+}\right)^{n}$, собирая члены разложения опять в экспоненту, получим $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{+}$.

9. Докажите следующие равенства для коммутаторов:

а) $\left[\hat{p}_x;\hat{x}\right] = -i\hbar$ **; б)** $\left[\hat{p}_y;\hat{x}\right] = 0$ **; в)** $\left[f(\hat{x})\hat{p}_x; f(\hat{x})\right] = -i\hbar\dfrac{\partial f(\hat{x})}{\partial x}$**, где** $f(\hat{x})$ **– функция оператора** $\hat{x}$**;**

г) $\left[\hat{a};\left[\hat{b};\hat{c}\right]\right] + \left[\hat{b};\left[\hat{c};\hat{a}\right]\right] + \left[\hat{c};\left[\hat{a};\hat{b}\right]\right] = 0$.

а) Найдем коммутатор, действуя им на некоторую произвольную функцию $\psi(x,y,z)$.

$$\left[\hat{p}_x;\hat{x}\right]\psi .$$

Раскроем коммутатор и подставим явный вид операторов $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$.

$$\left[\hat{p}_x;\hat{x}\right]\psi = \hat{p}_x\hat{x}\psi - \hat{x}\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(x\psi\right) + xi\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi =$$

$$= -i\hbar\psi - i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar\psi .$$

Поскольку функция была выбрана произвольно, то равенство доказано.

б) Аналогично пункту а)

$$\left[\hat{p}_y;\hat{x}\right]\psi = \hat{p}_y\hat{x}\psi - \hat{x}\hat{p}_y\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\left(x\psi\right) + xi\hbar\frac{\partial}{\partial y}\psi =$$

$$= -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial y} + i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial y} = 0.$$

в) Покажем, что действие коммутатора на произвольную функцию $\psi(x,y,z)$ равносильно умножению этой функции на правую часть равенства

$$\left[f(\hat{x})\hat{p}_x; f(\hat{x})\right]\psi = -\psi i\hbar\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x}.$$

Для этого раскроем коммутатор и подставим явный вид операторов $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$.

$$\left[\hat{p}_x; f(\hat{x})\right]\psi = \hat{p}_x f(\hat{x})\psi - f(\hat{x})\hat{p}_x\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(f(\hat{x})\psi\right) + f(\hat{x})i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi =$$

$$= -i\hbar\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x}\psi - i\hbar f(\hat{x})\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar f(\hat{x})\frac{\partial\psi}{\partial x} = -i\hbar\psi\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x},$$

что требовалось доказать.

г) Раскроем коммутаторы

$$\left[\hat{a};\left[\hat{b};\hat{c}\right]\right] + \left[\hat{b};\left[\hat{c};\hat{a}\right]\right] + \left[\hat{c};\left[\hat{a};\hat{b}\right]\right] =$$

$$= \hat{a}\left(\hat{b}\hat{c} - \hat{c}\hat{b}\right) - \left(\hat{b}\hat{c} - \hat{c}\hat{b}\right)\hat{a} + \hat{b}\left(\hat{c}\hat{a} - \hat{a}\hat{c}\right) - \left(\hat{c}\hat{a} - \hat{a}\hat{c}\right)\hat{b} + \hat{c}\left(\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}\right) - \left(\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}\right)\hat{c} =$$

$$= \underline{\hat{a}\hat{b}\hat{c}} - \underline{\underline{\hat{a}\hat{c}\hat{b}}} - \hat{b}\hat{c}\hat{a} + \hat{c}\hat{b}\hat{a} + \hat{b}\hat{c}\hat{a} - \hat{b}\hat{a}\hat{c} - \hat{c}\hat{a}\hat{b} + \underline{\underline{\hat{a}\hat{c}\hat{b}}} + \hat{c}\hat{a}\hat{b} - \hat{c}\hat{b}\hat{a} - \underline{\hat{a}\hat{b}\hat{c}} + \hat{b}\hat{a}\hat{c} = 0.$$

Для наглядности подчеркнуты некоторые одинаковые слагаемые с разными знаками.

10. Найдите коммутаторы операторов

а) $\left[\hat{L}_x;\hat{x}\right]$**;** **б)** $\left[\hat{L}_x;\hat{y}\right]$**;** **в)** $\left[\hat{L}_x;\hat{z}\right]$**;** **г)** $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_x\right]$**;** **д)** $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_y\right]$**;** **е)** $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_z\right]$**; ж)** $\left[\hat{L}_x;\hat{L}_y\right]$**; з)** $\left[\hat{L}_x;\hat{L}_z\right]$**; и)** $\left[\hat{L}_x;\hat{L}^2\right]$**.**

а) Найдем коммутатор операторов, используя соотношение между операторами проекции момента импульса и проекции импульса и координаты

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y .$$

$$\left[\hat{L}_x;\hat{x}\right] = \hat{L}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{L}_x = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\hat{x} - \hat{x}\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{x} - \hat{z}\hat{p}_y\hat{x} - \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z + \hat{x}\hat{z}\hat{p}_y = \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{z}\hat{p}_y - \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z + \hat{x}\hat{z}\hat{p}_y = 0 .$$

б) Аналогично пункту а)

$$\left[\hat{L}_x;\hat{y}\right] = \hat{L}_x\hat{y} - \hat{y}\hat{L}_x = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\hat{y} - \hat{y}\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{y} - \hat{z}\hat{p}_y\hat{y} - \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z + \hat{y}\hat{z}\hat{p}_y = \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\left(\hat{y}\hat{p}_y - i\hbar\right) - \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z + \hat{y}\hat{z}\hat{p}_y = i\hbar\hat{z}$$

.

Здесь использованы результаты предыдущей задачи. Из коммутатора $\hat{p}_y\hat{y} - \hat{y}\hat{p}_y = -i\hbar$ следует $\hat{p}_y\hat{y} = \hat{y}\hat{p}_y - i\hbar$.

в) Аналогично пункту б)

$$\left[\hat{L}_x;\hat{z}\right] = -i\hbar\hat{y} .$$

г) $$\left[\hat{L}_x;\hat{p}_x\right] = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\hat{p}_x - \hat{p}_x\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_y = 0.$$

д) $$\left[\hat{L}_x;\hat{p}_y\right] = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\hat{p}_y - \hat{p}_y\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_y - \hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_y - \left(\hat{y}\hat{p}_y - i\hbar\right)\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_y = i\hbar\hat{p}_z.$$

е) Аналогично пункту д)

$$\left[\hat{L}_x;\hat{p}_z\right] = -i\hbar\hat{p}_y .$$

ж) Используем результаты предыдущих пунктов и соотношения $\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z$, $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$.

$$\left[\hat{L}_x;\hat{L}_y\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = \hat{L}_x\left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right) - \left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right)\hat{L}_x =$$

$$= \hat{L}_x\hat{z}\hat{p}_x - \hat{L}_x\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{L}_x + \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x =$$

$$= \left(\hat{z}\hat{L}_x - i\hbar\hat{y}\right)\hat{p}_x - \hat{x}\hat{L}_x\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{L}_x + \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x =$$

$$= \hat{z}\hat{p}_x\hat{L}_x - i\hbar\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\left(\hat{p}_z\hat{L}_x - ih\hat{p}_y\right) - \hat{z}\hat{p}_x\hat{L}_x - \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x =$$

$$= -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x + ih\hat{x}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{p}_z\hat{L}_x = ih\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) = i\hbar\hat{L}_z .$$

з) Аналогично пункту ж)

$$\left[\hat{L}_x;\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z .$$

и) Используем результаты предыдущих пунктов

$$\left[\hat{L}_x;\hat{L}^2\right] = \hat{L}_x\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{L}_x = \hat{L}_x\left(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\right) - \left(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\right)\hat{L}_x =$$

$$= \hat{L}_x\hat{L}_x^2 + \hat{L}_x\hat{L}_y^2 + \hat{L}_x\hat{L}_z^2 - \hat{L}_x^2\hat{L}_x - \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_z^2\hat{L}_x =$$

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

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

$$- \hat{L}_y^2\hat{L}_x - \hat{L}_z^2\hat{L}_x = i\hbar\left(\hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_z\right) = 0 .$$

Ответ: а) $\left[\hat{L}_x;\hat{x}\right] = 0$, б) $\left[\hat{L}_x;\hat{y}\right] = i\hbar\hat{z}$, в) $\left[\hat{L}_x;\hat{z}\right] = -i\hbar\hat{y}$, г) $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_x\right] = 0$, д) $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_y\right] = i\hbar\hat{p}_z$, е) $\left[\hat{L}_x;\hat{p}_z\right] = -i\hbar\hat{p}_y$, ж) $\left[\hat{L}_x;\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z$, з) $\left[\hat{L}_x;\hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z$, и) $\left[\hat{L}_x;\hat{L}^2\right] = 0$.

11. Докажите, что $\left[\hat{p}_x;f(\hat{x})\right]=\hat{p}_x f(\hat{x})-f(\hat{x})\hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial x}$, где $f(\hat{x})$ – функция оператора $\hat{x}$.

Воспользуемся явным видом оператора импульса $\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ и подействуем коммутатором $\left[\hat{p}_x;f(\hat{x})\right]$ на произвольную дифференцируемую функцию $\psi(x)$:

$$\left[\hat{p}_x;f(\hat{x})\right]\psi(x)=\hat{p}_x f(\hat{x})\psi(x)-f(\hat{x})\hat{p}_x\psi(x)=$$

$$=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\big(f(x)\psi(x)\big)-f(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)=$$

$$=-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\psi-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}f+i\hbar f\frac{\partial\psi}{\partial x}=-i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}\psi=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial x}\psi,$$

поскольку функция произвольная, то равенство доказано.

12. Докажите, что физические величины L и M одновременно могут быть точно измерены тогда и только тогда, когда операторы этих величин $\hat{L}$ и $\hat{M}$ коммутируют.

Пусть у этих операторов существует произвольная общая собственная функция ψ, и собственные значения операторов, которым соответствует эта функция λ и μ тогда

$$\hat{L}\hat{M}\psi=\hat{L}\mu\psi=\lambda\mu\psi,\ \hat{M}\hat{L}\psi=\hat{M}\lambda\psi=\mu\lambda\psi,$$

вычтем одно равенство из другого

$$\hat{M}\hat{L}\psi-\hat{L}\hat{M}\psi=\mu\lambda\psi-\lambda\mu\psi=0,$$

тогда $\left[\hat{M};\hat{L}\right]=\hat{M}\hat{L}-\hat{L}\hat{M}=0$, что требовалось доказать.

13. Перейдите от классической скобки Пуассона к квантовой, считая, что ее свойства сохраняются и для операторов.

Используем свойство классической скобки Пуассона

$$(f;g\varphi)=g(f;\varphi)+(f;g)\varphi,$$

где f,g,φ – функции, представляющие физические величины. По первой аксиоме квантовой механики это же соотношение справедливо и для операторов физических величин $\hat{f},\hat{g},\hat{\varphi}$. Используем это соотношение для операторов, считая сначала произведением первое слагаемое, а затем – второе. Получим:

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

Положим в первом равенстве $\hat{g}=\hat{g}_1\hat{g}_2$ и используем второе равенство, получим

$$\left(\hat{f}_1\hat{f}_2;\hat{g}_1\hat{g}_2\right)=\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\hat{g}_2\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\hat{g}_2\right)=$$
$$=\left(\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_1;\hat{g}_2\right)\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_2\right)\right)=$$
$$=\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2\hat{f}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_1;\hat{g}_2\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{f}_1\hat{g}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_2\right).$$

Положим во втором равенстве $\hat{f}=\hat{f}_1\hat{f}_2$ и используем первое равенство, получим

$$\left(\hat{f}_1\hat{f}_2;\hat{g}_1\hat{g}_2\right)=\left(\hat{f}_1\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_1\hat{f}_2;\hat{g}_2\right)=$$
$$=\left(\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\left(\hat{f}_1;\hat{g}_2\right)\hat{f}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_2\right)\right)=$$
$$=\left(\hat{f}_1;\hat{g}_1\right)\hat{f}_2\hat{g}_2+\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_1\right)\hat{g}_2+\hat{g}_1\left(\hat{f}_1;\hat{g}_2\right)\hat{f}_2+\hat{g}_1\hat{f}_1\left(\hat{f}_2;\hat{g}_2\right).$$

Сравнивая правые части, получаем равенство

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

справедливое для любых самосопряженных операторов. Следовательно,

$$\left(\hat{f};\hat{g}\right)=C\left[\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}\right].$$

В силу самосопряженности $\hat{f}^+=\hat{f},\hat{g}^+=\hat{g}$, получаем, что $C^*=-C$. (Размерность C должна быть обратной размерности действия по аналогии с классической скобкой Пуассона $(f;g)=\sum_{i=1}^{\infty}\left(\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}-\frac{\partial g}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial q_i}\right)$, величина $C=\frac{i}{\hbar}$ вполне удовлетворяет этому свойству.) Квантовая скобка Пуассона

$$\left(\hat{f};\hat{g}\right)=\frac{i}{\hbar}\left[\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}\right].$$

Ответ: $\left(\hat{f};\hat{g}\right)=\frac{i}{\hbar}\left[\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}\right]$.

14. Докажите, что квантовые скобки Пуассона определяются коммутатором следующим образом:

$$\left\{\hat{F},\hat{Q}\right\}=\frac{i}{\hbar}\left(\hat{F}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{F}\right).$$

Квантовые скобки Пуассона для физических величин F и Q определяются условием:

$$\{F,Q\}=\sum\left(\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial Q}{\partial q_i}-\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial Q}{\partial p_i}\right), \qquad (1)$$

где p_i, q_i – обобщенные импульсы и координаты соответственно. Рассмотрим $\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}\right\}$. Эти квантовые скобки в соответствии с условием (1) имеют значение:

$$\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}\right\}=\sum\left(\frac{\partial\left(\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2\right)}{\partial p_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial q_i}-\frac{\partial\left(\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2\right)}{\partial q_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial p_i}\right)=$$

$$=\sum\left(\frac{\partial\hat{F}_1}{\partial p_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial q_i}\hat{F}_2+\hat{F}_1\frac{\partial\hat{F}_2}{\partial p_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial q_i}-\frac{\partial\hat{F}_1}{\partial q_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial p_i}\hat{F}_2-\hat{F}_1\frac{\partial\hat{F}_2}{\partial q_i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial p_i}\right).$$

Рассмотрим первое и третье и второе и четвертое слагаемые, получим:

$$\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}\right\}=\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}\right\}+\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}\right\}\hat{F}_2. \qquad (2)$$

Аналогично

$$\left\{\hat{F},\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}=\hat{Q}_1\left\{\hat{F},\hat{Q}_2\right\}+\left\{\hat{F},\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2. \qquad (3)$$

Рассчитаем произведение $\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}$, используя сначала равенство (2), затем (3):

$$\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}=\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}+\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}\hat{F}_2=$$

$$=\hat{F}_1\hat{Q}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}+\hat{Q}_1\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_2\right\}\hat{F}_2+\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2+\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2\hat{F}_2. \qquad (4)$$

Затем рассчитаем $\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}$, используя сначала равенство (3), затем (2):

$$\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\cdot\hat{Q}_2\right\}=\hat{Q}_1\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}+\left\{\hat{F}_1\cdot\hat{F}_2,\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2=$$

$$=\hat{Q}_1\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}+\hat{F}_1\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_1\right\}\hat{Q}_2+\hat{Q}_1\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_2\right\}\hat{F}_2+\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\right\}\hat{F}_2\hat{Q}_2. \qquad (5)$$

Вычтем из равенства (4) равенство (5):

$$\left(\hat{Q}_1\hat{F}_1-\hat{F}_1\hat{Q}_1\right)\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}-\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\right\}\left(\hat{F}_2\hat{Q}_2-\hat{Q}_2\hat{F}_2\right)=0. \qquad (6)$$

Чтобы равенство (6) было абсолютным, необходимо, чтобы выполнялись условия:

$$\left\{\hat{F}_1,\hat{Q}_1\right\}=C\left(\hat{Q}_1\hat{F}_1-\hat{F}_1\hat{Q}_1\right),$$
$$\left\{\hat{F}_2,\hat{Q}_2\right\}=C\left(\hat{F}_2\hat{Q}_2-\hat{Q}_2\hat{F}_2\right). \qquad (7)$$

Так как условия (7) должны выполняться для любых операторов, то они должны выполняться и для операторов $\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ и $\hat{x}=x$. В соответствии с условием (1) и учитывая то, что обобщенные импульс p_x и координата x независимы,

$$\{p_x,x\}=\sum\left(\frac{\partial p_x}{\partial p_x}\frac{\partial x}{\partial x}-\frac{\partial p_x}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial p_x}\right)=1,$$

но так как из (7):

$$\{\hat{p}_x,\hat{x}\}=C(-i\hbar)\left(\frac{\partial}{\partial x}x-x\frac{\partial}{\partial x}\right)=1,$$

то необходимо, чтобы

$$C=\frac{i}{\hbar},$$

то есть $\left\{\hat{F},\hat{Q}\right\}=\dfrac{i}{\hbar}\left(\hat{F}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{F}\right)$.

Квантовые скобки Пуассона пропорциональны коммутатору рассматриваемой пары операторов, причем коэффициент пропорциональности равен $\dfrac{i}{\hbar}$.

15. Проверьте, является ли импульс $\hat{\vec{p}}$ интегралом движения в центральном поле.

Необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю производной по времени от соответствующего оператора

$$\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}=\frac{\partial\hat{\vec{p}}}{\partial t}+\left\{\hat{H},\hat{\vec{p}}\right\}=0,$$

где $\left\{\hat{H},\hat{\vec{p}}\right\}=\dfrac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\vec{p}}\right]$ – квантовые скобки Пуассона, выраженные через коммутатор оператора $\hat{\vec{p}}$ с оператором Гамильтона. В центральном поле оператор Гамильтона имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{U}(r),$$

где r – модуль радиус-вектора. Оператор $\hat{\vec{p}}$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю, он коммутирует со слагаемым кинетической энергии $\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$, но не коммутирует с оператором потенциальной энергии:

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

следовательно, коммутатор

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

Вывод: оператор импульса не является интегралом движения в центрально симметричном поле.

16. Проверьте, является ли момент импульса $\hat{\vec{L}}$ интегралом движения в центральном поле.

Необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю производной по времени от соответствующего оператора

$$\frac{d\hat{\vec{L}}}{dt} = \frac{\partial\hat{\vec{L}}}{\partial t} + \left\{\hat{H}, \hat{\vec{L}}\right\} = 0,$$

где $\left\{\hat{H}, \hat{\vec{L}}\right\} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\vec{L}}\right]$ – квантовые скобки Пуассона, выраженные через коммутатор оператора $\hat{\vec{L}}$ с оператором Гамильтона. Оператор $\hat{\vec{L}}$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю. В центральном поле оператор Гамильтона имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{U}(r),$$

где r – модуль радиус-вектора. Найдем коммутатор оператора одной из проекций импульса $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ с оператором Гамильтона:

$$\left[\hat{H}, \hat{L}_z\right] = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right), \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right] + \left[\hat{U}(r), \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right].$$

Операторы $\hat{x}\hat{p}_y$ и $\hat{y}\hat{p}_x$ коммутируют с $\hat{p}_z$. Воспользуемся соотношением $\left[\hat{p}_x, \hat{x}\right] = -i\hbar$ и $\left[\hat{p}_x, \hat{p}_y\right] = 0$.

$$\left[\hat{H}, \hat{L}_z\right] = \frac{\hat{p}_y}{2m}\left[\hat{p}_x^2, \hat{x}\right] - \frac{\hat{p}_x}{2m}\left[\hat{p}_y^2, \hat{y}\right] + \hat{x}\left[\hat{U}(r), \hat{p}_y\right] - \hat{y}\left[\hat{U}(r), \hat{p}_x\right] =$$

$$= -i\hbar\left(\frac{\hat{p}_y\hat{p}_x}{m} - \frac{\hat{p}_x\hat{p}_y}{m} + \hat{x}\left(\hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\hat{U}(r)\right) - \hat{y}\left(\hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\hat{U}(r)\right)\right) =$$

$$= -i\hbar\left(\hat{x}\left(\hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial\hat{U}(r)}{\partial y} - \hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial y}\right) - \hat{y}\left(\hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial\hat{U}(r)}{\partial x} - \hat{U}(r)\frac{\partial}{\partial x}\right)\right) = 0.$$

Аналогично можно показать, что $\left[\hat{H}, \hat{L}_y\right] = 0$ и $\left[\hat{H}, \hat{L}_x\right] = 0$.

Вывод: оператор момента импульса является интегралом движения в центральном поле.

17. Проверьте, является ли квадрат момента импульса $\hat{L}^2$ интегралом движения в центральном поле.

Поскольку оператор $\hat{L}^2$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю. Тогда необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю скобки Пуассона соответствующего квантового оператора с оператором Гамильтона.

$$\left\{\hat{H}; \hat{L}^2\right\} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}; \hat{L}^2\right] = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H}\right).$$

Оператор Гамильтона для частицы в центральном поле имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r),$$

где $\hat{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}$ – оператор, содержащий только производные по угловым переменным, следовательно, он коммутирует с любой функцией радиальной переменной.

Тогда

$$\left[\hat{H};\hat{L}^2\right] = \left[\frac{\hat{L}^2}{2mr^2};\hat{L}^2\right] + \left[\hat{U}(r);\hat{L}^2\right] = 0,$$

следовательно, момент количества движения является интегралом движения. В классическом случае модуль момента импульса сохраняется.

18. Покажите, что квадрат момента количества движения свободной частицы является интегралом движения.

Поскольку оператор $\hat{L}^2$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю. Тогда необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю скобки Пуассона соответствующего квантового оператора с оператором Гамильтона.

$$\left\{\hat{H};\hat{L}^2\right\} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H};\hat{L}^2\right] = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H}\right).$$

Оператор Гамильтона для свободной частицы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m}.$$

Поскольку коммутатор

$$\left[\hat{H};\hat{L}^2\right] = \left[\frac{\hat{P}^2}{2m};\hat{L}^2\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{P}^2;\hat{L}^2\right] = 0,$$

следовательно, момент количества движения является интегралом движения свободной частицы. В классическом случае модуль момента импульса свободной частицы сохраняется.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 4:

«Теория представлений»

Задачи

1. Оператор координаты в координатном представлении равен $\hat{x} = x$. Найдите вид оператора координаты $\hat{x}$ в импульсном представлении.

Оператор импульса в координатном представлении $\hat{p} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$. Найдем собственную функцию этого оператора

$$-i\hbar\frac{\partial\psi(x,p)}{\partial x} = p\psi(x,p).$$

Собственной функцией оператора импульса является пространственная часть волны де Бройля:

$$\psi(x,p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px},$$

нормированная на δ-функцию:

$$\left(\psi(x,p);\psi(x,p')\right) = \delta(p-p').$$

Определение оператора координаты в импульсном представлении:

$$\hat{x}c(p) = b(p).$$

Оператор $\hat{x}$ в импульсном представлении имеет вид интегрального оператора с ядром $x(p',p)$:

$$x(p',p) = \int\psi^*(x,p')\hat{x}\psi(x,p)dx = \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}xe^{\frac{i}{\hbar}px}dx =$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int xe^{-\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx.$$

По определению

$$\int c(p)x(p',p)dp = b(p'),$$

$$\int c(p)\left\{\frac{1}{2\pi\hbar}\int xe^{-\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx\right\}dp = b(p'),$$

$$\int c(p)\frac{(-i\hbar)}{2\pi\hbar}\frac{\partial}{\partial x}\left\{\int e^{-\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx\right\}dp = b(p').$$

Учтем, что δ-функция выражается через интеграл:

$$\delta(p'-p) = \frac{1}{2\pi}\int e^{-i(p'-p)x}dx,$$

тогда:

$$-i\hbar\int c(p)\frac{\partial}{\partial x}\delta(p'-p)dp = b(p'),$$

проинтегрируем левую часть равенства по частям, учитывая, что значение δ-функции на $\pm\infty$ равно нулю:

$$-i\hbar\int c(p)\frac{\partial}{\partial x}\delta(p'-p)dp = -i\hbar c(p)\delta(p'-p)\Big|_{-\infty}^{\infty} + i\hbar\int\frac{\partial c(p)}{\partial x}\delta(p'-p)dp,$$

$$-i\hbar\int\frac{\partial c(p)}{\partial x}\delta(p'-p)dp = -i\hbar\frac{\partial c(p')}{\partial x} = b(p').$$

Окончательно будем иметь оператор координаты в импульсном представлении

$$\hat{x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

Ответ: $\hat{x} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$.

2. Матрица оператора $\hat{A}$ имеет диагональный вид. Пусть оператор $\hat{B}$ коммутирует с оператором $\hat{A}$ ($\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = 0$). Может ли представление оператора $\hat{A}$ являться собственным для оператора $\hat{B}$?

Поскольку матрица оператора $\hat{A}$ имеет диагональный вид, то оператор $\hat{A}$ записан в собственном представлении. Поскольку операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то они обладают общей полной системой собственных функций, эти функции составляют базис общего собственного представления операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$.

Ответ: да.

3. Даны два некоммутирующих оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Найдите представление, в котором оба они имеют диагональный вид?

Так как операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют, то системы их собственных функций не совпадают. Если матрица оператора $\hat{A}$ имеет диагональный вид в собственном базисе, то этот базис не является собственным для оператора $\hat{B}$, тогда в этом представлении матрица $\hat{B}$ не диагональная. То же самое справедливо для $\hat{B}$ и $\hat{A}$. Следовательно, представления, в котором и $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют одновременно диагональный вид, не существует.

Ответ: нет.

4. Функция Ψ является собственной функцией оператора $\hat{L}$. Какой вид имеет эта функция в представлении оператора $\hat{L}$?

Пусть оператор $\hat{L}$ имеет дискретный спектр собственных значений. Волновая функция в представлении оператора $\hat{L}$ имеет вид вектор-столбца с компонентами

$$\Psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad c_n = (\psi_n ; \Psi),$$

где ψ_n – собственные функции оператора $\hat{L}$. Если Ψ – собственная функция оператора $\hat{L}$, то она – одна из ψ_n, т.е. $\Psi = \psi_{n'}$. Компоненты вектор-столбца:

$$c_n = (\psi_n ; \Psi) = (\psi_n ; \psi_{n'}) = \delta_{n,n'},$$

тогда

$$\Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

где единица занимает строку с номером n'.

Ответ: $\Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$.

5. По заданной волновой функции $\Psi(x, y, z)$ вычислите вероятности нахождения частицы в интервалах значений координаты z от z_1 до z_2 и импульса p_y от p_1 до p_2.

Вероятность частицы иметь координату z от z_1 до z_2

$$w=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dp_y\int_{z_1}^{z_2}dz\left|\Psi(x, p_y, z)\right|^2,$$

где $\Psi(x, p_y, z)=\int\frac{\exp\left(-\frac{ip_y y}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Psi(x, y, z)dy$ – функция состояния частицы в представлении оператора $\hat{p}_y$.

Ответ: $w=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dp_y\int_{z_1}^{z_2}dz\left|\int\frac{\exp\left(-\frac{ip_y y}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Psi(x, y, z)dy\right|^2$.

6. Запишите в импульсном представлении волновую функцию $\Psi(x, y, z)=A\exp\left(-\frac{x^2+y^2+z^2}{2a^2}\right)$.

Волновая функция в импульсном представлении имеет вид

$$\Psi(p_x, p_y, p_z)=$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_x x}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}dx\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_y y}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}dy\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_z z}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Psi(x, y, z)dz.$$

Подставим явный вид функции

$$\Psi(p_x, p_y, p_z)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_x x}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}dx\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_y y}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}dy\times$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_z z}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}A\exp\left(-\frac{x^2+y^2+z^2}{2a^2}\right)dz=$$

$$=A\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_x x}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)dx\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_y y}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{y^2}{2a^2}\right)dy\times$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_z z}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{z^2}{2a^2}\right)dz.$$

Выделим полный квадрат в показателе экспоненты и найдем каждый интеграл в отдельности:

$$-\left(\frac{x^2}{2a^2}+\frac{ip_x x}{\hbar}\right)=-\frac{1}{2a^2}\left(x^2+2\frac{ia^2p_x}{\hbar}x+\left(\frac{ia^2p_x}{\hbar}\right)^2-\left(\frac{ia^2p_x}{\hbar}\right)^2\right)=$$

$$=-\left(\frac{1}{2a^2}\left(x+\frac{ia^2p_x}{\hbar}\right)^2+\frac{1}{2}\left(\frac{ap_x}{\hbar}\right)^2\right).$$

Тогда интеграл по x:

$$I(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{ip_x x}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}-\frac{ip_x x}{\hbar}\right)dx=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}-\frac{ip_x x}{\hbar}\right)dx=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{1}{2a^2}\left(x+\frac{ia^2p_x}{\hbar}\right)^2-\frac{a^2p_x^2}{\hbar^2}\right)dx=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{a^2p_x^2}{\hbar^2}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{1}{2a^2}\left(x+\frac{ia^2p_x}{\hbar}\right)^2\right)d\left(x+\frac{ia^2p_x}{\hbar}\right)=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{a^2p_x^2}{\hbar^2}\right)\sqrt{2a^2\pi}.$$

Тогда интеграл $I(x)=\frac{a}{\sqrt{\hbar}}\exp\left(-\frac{a^2p_x^2}{\hbar^2}\right)$, аналогично находятся интегралы по y и z. Волновая функция в импульсном представлении

$$\Psi(p_x, p_y, p_z)=\left(\frac{a}{\sqrt{\hbar}}\right)^3\exp\left(-\frac{a^2p_x^2}{\hbar^2}-\frac{a^2p_y^2}{\hbar^2}-\frac{a^2p_z^2}{\hbar^2}\right).$$

Ответ: $\Psi(p_x, p_y, p_z)=\frac{a^3}{\sqrt{\hbar^3}}\exp\left(-\frac{a^2\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)}{\hbar^2}\right)$.

7. Выразите оператор трансляции $\hat{T}_{\vec{a}}$ параллельного переноса на конечное расстояние $\vec{a}$ через оператор импульса.

Согласно определению оператора трансляции $\hat{T}_{\vec{a}}$

$$\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a}).$$

Разложим функцию $\psi(\vec{r} + \vec{a})$ в ряд Тейлора по $\vec{a}$

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}) = \psi(\vec{r}) + \frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial\vec{r}} \cdot \vec{a} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi(\vec{r})}{\partial\vec{r}^{\,2}} \cdot \vec{a}^{\,2} + \ldots,$$

где $\dfrac{\partial}{\partial\vec{r}} = \vec{\nabla}$ – оператор набла. Оператор импульса может быть выражен через него:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla},$$

тогда

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}) = \left[1 + \frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}} \cdot \vec{a} + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}} \cdot \vec{a}\right)^2 + \ldots\right]\psi(\vec{r}),$$

где множитель в квадратных скобках и есть оператор трансляции

$$\hat{T}_{\vec{a}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}} \cdot \vec{a} + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}} \cdot \vec{a}\right)^2 + \ldots = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a}}.$$

Ответ: $\hat{T}_{\vec{a}} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot\vec{a}}$.

Задачи

1. Потенциальная энергия системы есть степенная функция от всех координат с показателем степени n. Найдите соотношение между средними значениями кинетической и потенциальной энергии.

Пусть состояние системы описывается функцией $\psi(x,y,z)$. Средние значения кинетической и потенциальной энергии

$$\langle T\rangle = -\int \psi^* \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi dV, \quad \langle U\rangle = \int \psi^* \hat{U}\psi dV .$$

Пусть масштаб длины изменился в a раз, $r \to ar$. Так как функция $\psi(x,y,z)$ нормирована, то произведение $\psi^*\psi dV$ не изменится с изменением масштаба. Оператор Лапласа в интеграле кинетической энергии получит дополнительный множитель $\Delta \to \frac{\Delta}{a^2}$, то есть $\langle T\rangle \to \frac{\langle T\rangle}{a^2}$, а оператор потенциальной энергии по условию задачи $\langle U\rangle \to a^n\langle U\rangle$, тогда среднее значение функции Гамильтона $\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle U\rangle$ преобразуется следующим образом:

$$\langle H_a\rangle = \frac{\langle T\rangle}{a^2} + a^n\langle U\rangle .$$

Поскольку среднее значение оператора Гамильтона в стационарном состоянии постоянно, то производная ее равна нулю

$$\frac{\partial\langle H_a\rangle}{\partial a} = -2\frac{\langle T\rangle}{a^3} + na^{n-1}\langle U\rangle = 0 ,$$

откуда

$$\langle U\rangle = \frac{2}{na^{n+2}}\langle T\rangle .$$

Возвращаясь к пространству исходного масштаба $a = 1$, получим соотношение

$$\langle U\rangle = \frac{2}{n}\langle T\rangle .$$

Так, для электрического взаимодействия $n = -1$

$$\langle U\rangle = -2\langle T\rangle, \quad \langle H\rangle = -\frac{\langle U\rangle}{2} + \langle U\rangle = \frac{\langle U\rangle}{2} .$$

Ответ: $\langle U\rangle = -2\langle T\rangle$.

2. Оператор кинетической энергии в декартовых координатах имеет вид:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right).$$

Запишите этот оператор в сферических координатах. Выразите оператор кинетической энергии через оператор момента импульса.

Выражение, заключенное в скобки, есть оператор Лапласа, который в сферических координатах

$$x = r\sin\theta\cos\varphi,$$

$$y = r\sin\theta\sin\varphi,$$

$$z = r\cos\theta$$

имеет вид:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = \Delta =$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}.$$

Оператор кинетической энергии в сферических координатах имеет вид:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}\right).$$

Поскольку оператор квадрата момента импульса в сферических координатах имеет вид:

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

то оператор кинетической энергии связан с оператором квадрата момента импульса:

$$\hat{T} = \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right),$$

где в знаменателе $mr^2 = I$ – момент инерции частицы относительно оси Oz.

Ответ:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}\right),$$

$$\hat{T} = \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right).$$

3. Найдите коммутатор операторов кинетической $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ и потенциальной энергии частицы в поле $\hat{U}(x,y,z)$.

Найдем действие коммутатора $\hat{T}\hat{U} - \hat{U}\hat{T}$ на произвольную функцию $\psi(x,y,z)$.

$$\left(\hat{T}\hat{U} - \hat{U}\hat{T}\right)\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(U\psi) + U\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi =$$

$$= -\psi\frac{\hbar^2}{2m}\Delta U - U\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = -\psi\frac{\hbar^2}{2m}\Delta U = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta U\right)\psi,$$

тогда

$$\hat{T}\hat{U} - \hat{U}\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta U.$$

Ответ: $\hat{T}\hat{U} - \hat{U}\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta U$.

4. Найдите общее решение одномерного временного уравнения Шредингера.

Будем искать решение одномерного уравнения Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

в виде $\psi(x,t) = T(t)X(x)$ (уравнение допускает разделение переменных). Тогда

$$\frac{i\hbar}{T}\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2mX}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = a.$$

Чтобы X было конечным на бесконечности, необходимо, чтобы a было положительным. Обозначим $\frac{2ma}{\hbar^2} = k^2$, получим два уравнения

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + k^2 X = 0 \text{ и } i\hbar\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{k^2\hbar^2}{2m}T = 0,$$

решения которых

$$X(x) = e^{ikx} \text{ и } T(t) = e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}.$$

Общее решение имеет вид

$$\psi(x,t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk.$$

Ответ: $\psi(x,t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk$.

5. Частица с импульсом p_x движется вдоль оси Ox в свободном пространстве. Найдите волновую функцию частицы.

Уравнение на собственные функции оператора импульса

$$\hat{\vec{p}}\psi = \vec{p}\psi$$

спроецируем на ось Ox:

$$\hat{p}_x\psi = p_x\psi$$

и учтем явный вид оператора импульса:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\nabla_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},$$

тогда уравнение

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p_x\psi$$

дает решение

$$\ln\psi = i\frac{p_x}{\hbar}x + \ln C$$

после потенцирования

$$\psi = Ce^{i\frac{p_x}{\hbar}x}.$$

Волновая функция является периодической, ее период по оси Ox равен λ, можем найти его из соотношения

$$\frac{p_x}{\hbar}\lambda = 2\pi, \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p_x},$$

этот период имеет смысл длины волны де Бройля, а волновая функция – волна де Бройля без учета времени, где C – амплитуда этой волны. Тогда волновое число

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p_x}{\hbar}.$$

Ответ: $\psi = Ce^{ikx}$.

6. Запишите временное уравнение Шредингера для заряженной частицы в электромагнитном поле.

Временное уравнение Шредингера

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

где $\hat{H}$ – оператор Гамильтона. В классической механике функция Гамильтона

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + U(\vec{r})$$

для заряженной частицы в электромагнитном поле импульс переходит в сумму $\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$, где $\vec{A}$ – векторный потенциал электромагнитного поля. К потенциальной энергии следует добавить потенциальную энергию взаимодействия заряда с полем $U(\vec{r}) \to U(\vec{r}) + e\varphi$, тогда функция Гамильтона имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r}) + e\varphi.$$

Тогда уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left\{\frac{\left(-i\hbar\nabla - (e/c)\vec{A}\right)^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r}) + e\varphi\right\}\psi(\vec{r},t).$$

Ответ: $i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left\{\frac{\left(-i\hbar\nabla - (e/c)\vec{A}\right)^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r}) + e\varphi\right\}\psi(\vec{r},t).$

Задачи

1. Частица находится в основном состоянии в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a. Найдите среднее значение координаты и квадрата координаты частицы.

Волновая функция частицы в основном состоянии

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{\pi x}{a},$$

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi x}{a}\, x \sin\frac{\pi x}{a}\, dx = \frac{1}{a}\int_0^a x\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)dx =$$

$$= \frac{1}{a}\left[\frac{x^2}{2} - \frac{xa\sin\frac{2\pi x}{a}}{2\pi} - \frac{a^2\cos\frac{2\pi x}{a}}{4\pi^2}\right]\Bigg|_0^a = \frac{1}{a}\cdot\frac{a^2}{2} = \frac{a}{2}$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\frac{\pi x}{a}\, x^2 \sin\frac{\pi x}{a}\, dx = \frac{1}{a}\int_0^a x^2\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)dx =$$

$$= \frac{1}{a}\left[\frac{x^3}{3} - \frac{x^2 a\sin\frac{2\pi x}{a}}{2\pi} - \frac{xa^2\cos\frac{2\pi x}{a}}{2\pi^2} + \frac{a^3\sin\frac{2\pi x}{a}}{4\pi^3}\right]\Bigg|_0^a =$$

$$= \frac{1}{a}\left(\frac{a^3}{3} - \frac{a^3}{2\pi^2}\right) = a^2\,\frac{2\pi^2-3}{6\pi^2}.$$

Ответ: $\langle x \rangle = \dfrac{a}{2}$, $\langle x^2 \rangle = a^2\,\dfrac{2\pi^2-3}{6\pi^2}$.

2. Найдите уровни энергии и собственные функции частицы массы m, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме вида

$$U = \begin{cases} 0 & при \quad 0 \le x \le a, \quad 0 \le y \le b, \quad 0 \le z \le c, \\ \infty & при \quad x < 0, x > a, \quad y < 0, y > b, \quad z < 0, z > c. \end{cases}$$

Вне ямы, где потенциал равен ∞, частица находиться не может, то есть вероятность равна 0, волновая функция тоже равна нулю. На границах ямы волновая функция тоже равна нулю.

Будем искать решение трехмерного уравнения Шредингера внутри ямы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi,$$

$$\Delta\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0.$$

Будем искать решение уравнения в виде

$$\psi(x,y,z) = X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z).$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)XYZ + \frac{2mE}{\hbar^2}XYZ = 0,$$

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}YZ + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}XZ + \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}XY + \frac{2mE}{\hbar^2}XYZ = 0,$$

разделим все уравнение на XYZ.

$$\frac{1}{X}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2},$$

каждое из слагаемых в левой части зависит от разных переменных, их сумма – постоянная величина, следовательно, каждое из этих слагаемых – тоже константа.

Тогда уравнения и граничные условия примут вид

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{2mE_1}{\hbar^2}X = 0,\ X(0) = X(a) = 0,$$

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{2mE_2}{\hbar^2}Y = 0,\ Y(0) = Y(b) = 0,$$

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + \frac{2mE_3}{\hbar^2}Z = 0,\ Z(0) = Z(c) = 0,$$

где $E = E_1 + E_2 + E_3$. Решения этих уравнений аналогичны решению уравнений для одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямы:

$$X_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n_1 x}{a},\ E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n_1^2,$$

$$Y_{n_2}(y)=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\frac{\pi n_2 y}{b},\ E_2=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mb^2}n_2^2,$$
$$Z_{n_3}(z)=\sqrt{\frac{2}{c}}\sin\frac{\pi n_3 z}{c},\ E_3=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mc^2}n_3^2,$$
тогда волновая функция
$$\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{\pi n_1 x}{a}\sin\frac{\pi n_2 y}{b}\sin\frac{\pi n_3 z}{c}$$
и энергия
$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right).$$
Ответ: $E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right)$,

$\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{\pi n_1 x}{a}\sin\frac{\pi n_2 y}{b}\sin\frac{\pi n_3 z}{c}$.

3. Найдите возможные собственные значения энергии и их вероятности для частицы массы m, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a в состоянии $\Psi(x)=Ax(a-x)$.

Сначала пронормируем функцию
$$1=|A|^2\int_0^a x^2(a-x)^2\,dx=|A|^2\left(\frac{x^3a^2}{3}-\frac{2x^4a}{4}+\frac{x^5}{5}\right)\Bigg|_0^a=\frac{|A|^2a^5}{30},$$
$$A=\sqrt{\frac{30}{a^5}}.$$

Собственные функции оператора частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме
$$\Psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a},$$
соответствующие им уровни энергии
$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma}.$$

Разложение функции состояния по собственным функциям:

$$\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)$$

содержит коэффициенты разложения c_n, такие, что

$$c_n=(\psi_n(x);\psi(x)),$$

$$c_n=\int_0^a\psi_n^*(x)\psi(x)dx=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a}\sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x)dx=$$

$$=\frac{\sqrt{60}}{a^2}\int_0^a x\sin\frac{\pi nx}{a}dx-\frac{\sqrt{60}}{a^3}\int_0^a x^2\sin\frac{\pi nx}{a}dx=$$

$$=\frac{\sqrt{60}}{a^2}\left(\frac{a}{\pi n}\right)^2\int_0^a\left(\frac{\pi nx}{a}\right)\sin\frac{\pi nx}{a}d\left(\frac{\pi nx}{a}\right)-$$

$$-\frac{\sqrt{60}}{a^3}\left(\frac{a}{\pi n}\right)^3\int_0^a\left(\frac{\pi nx}{a}\right)^2\sin\frac{\pi nx}{a}d\left(\frac{\pi nx}{a}\right)=$$

$$=\frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^2}\int_0^{\pi n}y\sin y dy-\frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^3}\int_0^{\pi n}y^2\sin y dy=$$

$$=\frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^2}(\sin y-y\cos y)\Big|_0^{\pi n}-\frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^3}\left(\left(1-y^2\right)\cos y+2y\sin y\right)\Big|_0^{\pi n}=$$

$$=\frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^2}(\sin\pi n-\pi n\cos\pi n-\sin 0)-$$

$$-\frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^3}\left(\left(1-(\pi n)^2\right)\cos\pi n+2\pi n\sin\pi n-\cos 0\right)=$$

$$=\frac{2\sqrt{60}}{(\pi n)^3}\left(1-(-1)^n\right)=\begin{cases}\dfrac{2\sqrt{60}}{(\pi n)^3} & \text{при } n=2k+1 \text{ (нечетное)}\\ 0 & \text{при } n=2k \text{ (четное)}\end{cases}$$

Вероятности

$$w_n=\begin{cases}\dfrac{960}{\pi^6n^6} & \text{при } n=2k+1 \text{ (нечетное)}\\ 0 & \text{при } n=2k \text{ (четное)}\end{cases}$$

Ответ: $w_n=\begin{cases}\dfrac{960}{\pi^6n^6} & \text{при } n=2k+1 \text{ (нечетное)}\\ 0 & \text{при } n=2k \text{ (четное)}\end{cases}$.

4. Покажите, что волновая функция $\Psi(x) = Ax(a-x)$ может достаточно точно описывать основное состояние частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

Исходя из ответа задачи 3, видим, что вероятность нахождения частицы на первом уровне равна

$$w_1 = \frac{960}{\pi^6} = 0{,}9985.$$

На следующем разрешенном $(n = 3)$

$$w_3 = \frac{960}{3^6 \pi^6} = \frac{960}{729\pi^6} = 0{,}0014.$$

Вероятности следующих уровней меньше w_1 в n^6 раз. Следовательно, волновая функция $\Psi(x) = Ax(a-x)$ близка к функции состояния первого уровня частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

5. Найдите вероятность того, что частица массы m, находящаяся в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a в состоянии $\psi(x) = Ax(a-x)$, имеет энергию $E = \dfrac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

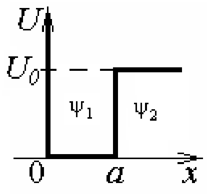
Энергия $E = \dfrac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ соответствует уровню энергии частицы массы m в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a с номером $n = 3$. Исходя из задач 3 и 4 искомая вероятность

$$w_3 = \frac{960}{3^6 \pi^6} = \frac{960}{729\pi^6} = 0{,}0014.$$

Ответ: $w_3 = 0{,}0014.$

6. Частица массы m находится в полубесконечной потенциальной яме с потенциалом вида

$$U=\begin{cases}\infty & x\le 0;\\ 0 & 0<x<a;\\ U_0 & x\ge a.\end{cases}$$



Найдите уравнение на уровни энергии. Найдите условие появления первого и n-го дискретного энергетического уровня.

Разобьем пространство на три области, где волновые функции

$$\psi(x)=\begin{cases}0 & x\le 0;\\ \psi_1 & 0<x<a;\\ \psi_2 & x\ge a.\end{cases}$$

Уравнения Шредингера в одномерном случае

$$\psi_1''+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1=0, \qquad \psi_2''-\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}\psi_2=0.$$

Условия непрерывности, гладкости и ограниченности функции

$$\psi_1(0)=0,\quad \psi_1(a)=\psi_2(a),\quad \psi_1'(a)=\psi_2'(a),\quad |\psi_2(\infty)|<\infty.$$

Решение этих уравнений:

$$\psi_1(x)=A\sin(kx+b), \text{ где } k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ из } \psi_1(0)=0 \ \Rightarrow\ b=0,$$

$$\psi_2(x)=Be^{-qx}+Ce^{qx}, \text{ где } q=\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}, \text{ из } |\psi_2(\infty)|<\infty\ \ C=0,$$

из $\psi_1(a)=\psi_2(a)\ \Rightarrow\ A\sin ka=Be^{-qa}$,

из $\psi_1'(a)=\psi_2'(a)\ \Rightarrow\ kA\cos ka=-qBe^{-qa}$.

Из последних уравнений

$$\frac{1}{k}tgka=-\frac{1}{q}.$$

Преобразуем

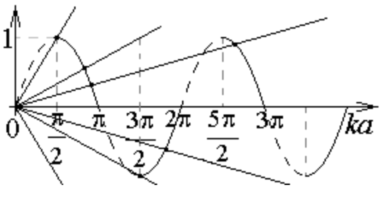
$$\sin ka=\frac{\pm tgka}{\sqrt{1+tg^2ka}}=\pm\frac{k}{q\sqrt{1+\frac{k^2}{q^2}}}=\pm\frac{k}{\sqrt{q^2+k^2}},$$

$$q^2 + k^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mU_0}{\hbar^2},$$

$$\sin ka = \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0 a^2}} ka$$

– уравнение на уровни энергии, т.к. $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Это уравнение можно решить графически. Решение – точки пересечения синусоиды и прямой, зависящих от параметра ka. Удовлетворяют условию только те области определения синусоиды, где $tgka$ отрицателен. Угол наклона прямой зависит от множителя $\frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0 a^2}}$, то есть от параметров ямы – ширины a и глубины U_0.



Количество точек пересечения конечно. Нет ни одного уровня энергии, если $ka < \frac{\pi}{2}$, $U_0 a^2 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$. Первый уровень появляется, если $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$. При увеличения размеров ямы количество уровней увеличивается, появляется n-й уровень при $ka = \pi\left(n - \frac{1}{2}\right)$, $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}(2n-1)^2$.

Ответ: Уравнение $\sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0 a^2}} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a$ дает дискретный спектр, первый уровень появляется при $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$, n-й – при $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}(2n-1)^2$.

7. В потенциальной яме задачи 6 энергия единственного уровня $E = U_0/2$. Определите: а) параметры ямы $U_0 a^2$, б) наиболее вероятное значение координаты частицы, в) найдите вероятность нахождения частицы внутри ямы, г) постройте график плотности вероятности.

Воспользуемся решением задачи 6. а) Поскольку уровень единственный, то

$$\frac{\pi}{2} < ka < \frac{3\pi}{2}, \quad \frac{\pi}{2} < \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a < \frac{3\pi}{2}, \quad \frac{\pi}{2} < \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} a < \frac{3\pi}{2}.$$

Уравнение на уровни энергии даст

$$\sin ka = \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}} k = \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}} \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2}}{2},$$

$$ka = \frac{3\pi}{4}, \quad \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} a = \frac{3\pi}{4}, \quad U_0 a^2 = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{16m}.$$

б) волновая функция

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin kx & 0 < x < a; \\ Be^{-qx} & x \geq a. \end{cases}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} = k.$$

Плотность вероятности

$$w(x) = \begin{cases} A^2 \sin^2 kx & 0 < x < a; \\ B^2 e^{-2qx} & x \geq a. \end{cases}$$

Очевидно, что наиболее вероятное положение частицы – внутри ямы. Чтобы найти эту координату, найдем экстремум плотности вероятности.

$$\frac{dw}{dx} = a^2 2 \sin kx \cdot k \cdot \cos kx = 0, \quad \sin 2kx = 0, \quad 2kx = \pi n, \quad x_n = \frac{\pi n}{2k}.$$

Из а)

$$k = \frac{3\pi}{4a}, \; x_n = \frac{4a\pi n}{2 \cdot 3\pi} = \frac{2an}{3}.$$

Наиболее вероятное значение координаты $x_1 = \dfrac{2a}{3}$.

в) Вероятность нахождения частицы внутри ямы

$$w_1=\int\limits_0^a A^2\sin^2 kxdx=\frac{A^2}{2}\int\limits_0^a(1-\cos 2kx)dx=\frac{A^2}{2}\left(a-\frac{1}{2k}\sin 2ka\right),$$

поскольку $ka=\dfrac{3\pi}{4}$,

$$w_1=\frac{A^2}{2}\left(a-\frac{4a}{2\cdot 3\pi}\sin 2\frac{3\pi}{4}\right)=\frac{A^2a}{2}\left(1+\frac{\sqrt{2}}{3\pi}\right).$$

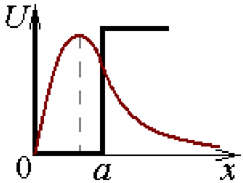
Найдем так же вероятность нахождения частицы вне ямы

$$w_2=\int\limits_a^\infty B^2e^{-2qx}dx=\frac{B^2e^{-2qa}}{2q},$$

поскольку $q=k=\dfrac{3\pi}{4a}$ (см. б)), и $A\sin ka=Be^{-qa}$ (см. б), то

$$Be^{-qa}=-A\frac{\sqrt{2}}{2},\ w_2=\frac{A^2a}{3\pi}.$$

Полная вероятность $w_1+w_2=1$, откуда



$$1=\frac{A^2a}{2}\left(1+\frac{\sqrt{2}}{3\pi}+\frac{2}{3\pi}\right),$$

тогда $A^2=\dfrac{6\pi}{a\left(3\pi+\sqrt{2}+4\right)}$.

Вероятность нахождения частицы внутри ямы $w_1=\dfrac{3\pi+\sqrt{2}}{3\pi+\sqrt{2}+4}=0{,}73$.

Ответ: а) $U_0a^2=\dfrac{9\pi^2\hbar^2}{16m}$, б) $x_1=\dfrac{2a}{3}$, в) $w_1=0{,}73$.

8. Параметры ямы задачи 6 $U_0a^2=\dfrac{75\hbar^2}{m}$. Определите количество уровней энергии.

Воспользуемся ответом задачи 6

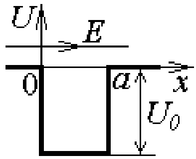
$$\frac{75\hbar^2}{m}=\frac{\pi^2\hbar^2}{8m}(2n-1)^2,\ (2n-1)^2=\frac{75\cdot 8}{\pi^2},\ n=4{,}3,$$

то есть $n=4$.

Ответ: $n=4$.

9. Частица находится в потенциальном поле вида

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



Найдите уравнение, определяющее возможные значения уровней энергии при $E<U_0$. Покажите, что уровни энергии дискретны.

Разобьем пространство на три области, где волновые функции

$$\psi(x)=\begin{cases}\psi_1 & x\le 0;\\ \psi_2 & 0<x<a;\\ \psi_3 & x\ge a.\end{cases}$$

Уравнения Шредингера в одномерном случае

$$\psi_2''+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2=0, \qquad \psi_{1,3}''-\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}\psi_{1,3}=0.$$

Условия непрерывности, гладкости и ограниченности функции на бесконечности:

$$\psi_1(0)=\psi_2(0),\quad \psi_1'(0)=\psi_2'(0),\quad \psi_2(a)=\psi_3(a),\quad \psi_2'(a)=\psi_3'(a),$$

$$|\psi_1(-\infty)|<\infty, \quad |\psi_3(\infty)|<\infty.$$

Решение этих уравнений:

$$\psi_2(x)=A\sin(kx+b),\ \text{где}\ k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$$\psi_1(x)=Be^{-qx}+Ce^{qx},\ \psi_3(x)=De^{-qx}+Ee^{qx},\ \text{где}\ q=\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar},$$

из $|\psi_1(-\infty)|<\infty \Rightarrow B=0$, из $|\psi_3(\infty)|<\infty \Rightarrow E=0$,

из $\psi_1(0)=\psi_2(0) \Rightarrow A\sin b=C$, из $\psi_1'(0)=\psi_2'(0) \Rightarrow kA\cos b=qC$,

из $\psi_1(a)=\psi_2(a) \Rightarrow A\sin(ka+b)=De^{-qa}$,

из $\psi_1'(a)=\psi_2'(a) \Rightarrow kA\cos(ka+b)=-qDe^{-qa}$.

Из последних уравнений

$$tgb=\frac{k}{q},\ tg(ka+b)=-\frac{k}{q},$$

т.е. $tg(ka+b)=-tgka$, из тригонометрии $ka+b=\pi n-b$, т.е. $ka=\pi n-2b$.

Преобразуем

$$\sin b = \frac{\pm tgb}{\sqrt{1+tg^2 b}} = \pm \frac{k}{q\sqrt{1+\frac{k^2}{q^2}}} = \pm \frac{k}{\sqrt{q^2+k^2}},$$

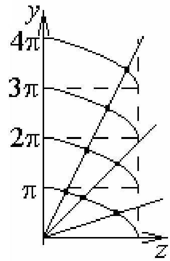
$$q^2 + k^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mU_0}{\hbar^2}, \qquad \sin b = \pm \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}},$$

то уравнение на уровни энергии $ka = \pi n - 2\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}$,

т.к. $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, то $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = \pi n - 2\arcsin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}}$,

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} a \sqrt{\frac{E}{U_0}} = \pi n - 2\arcsin \sqrt{\frac{E}{U_0}},$$

это уравнение вида $\alpha z = \pi n - 2\arcsin z$. Его можно решать графически. Решение – точки пересечения графика семейства функций $y = \pi n - 2\arcsin z$ и прямой $y = \alpha z$. Угол наклона прямой зависит от множителя $\alpha = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} a$, то есть от параметров ямы – ширины a и глубины U_0. Уровни энергии дискретны.



В этой потенциальной яме обязательно есть хотя бы один уровень энергии. Из графика видно, что прямая обязательно пересекает хоть одну кривую семейства. Количество точек пересечения конечно.

Ответ: $\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} a \sqrt{\frac{E}{U_0}} = \pi n - 2\arcsin \sqrt{\frac{E}{U_0}}$.

10. Частица находится в потенциальном поле задачи 9. Найдите параметры ямы $U_0 a^2$, при которых: а) энергия основного состояния равна $E = U_0/2$, б) появляется n-й уровень энергии, в) определите количество уровней энергии, если размеры ямы удовлетворяют соотношению $U_0 a^2 = \frac{75\hbar^2}{m}$.

а) Воспользуемся результатами задачи 9.

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}a\sqrt{\frac{U_0}{2U_0}} = \pi\cdot 1 - 2\arcsin\sqrt{\frac{U_0}{2U_0}}\ ,$$

$$\frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar}a = \pi - 2\frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{2}\ ,\ U_0a^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{4m}\ .$$

б) Условия возникновения нового уровня – $ka = \pi(n-1)$, подставим это в

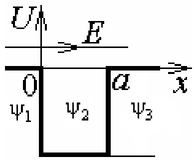
$$\pi(n-1) = \pi n - 2\arcsin\frac{\hbar\pi(n-1)}{a\sqrt{2mU_0}}\ ,$$

$$\frac{\hbar\pi(n-1)}{a\sqrt{2mU_0}} = 1,\ U_0a^2 = \frac{\pi^2(n-1)^2\hbar^2}{2m}\ .$$

в) $U_0a^2 = \dfrac{\pi^2(n-1)^2\hbar^2}{2m} = \dfrac{75\hbar^2}{m}$, $(n-1)^2 = \dfrac{150}{\pi^2} = 15{,}3$, $n = 4{,}8$, поскольку n – целое, причем по условию предыдущего пункта пятый уровень не появился, то $n = 4$.

Ответ: а) $U_0a^2 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{4m}$, б) $U_0a^2 = \dfrac{\pi^2(n-1)^2\hbar^2}{2m}$, в) $n = 4$.

11. Частица массы m падает слева на симметричную потенциальную яму глубиной U_0



$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le a; \\ -U_0 & x < 0; x > a. \end{cases}$$

Энергия частицы $E > 0$. Найдите коэффициент прозрачности D ямы и коэффициент отражения частицы R.

Разобьем пространство на три области, где волновые функции

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1 & x \le 0; \\ \psi_2 & 0 < x < a; \\ \psi_3 & x \ge a. \end{cases}$$

Уравнения Шредингера в одномерном случае

$$\psi_2'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2 = 0\ , \qquad \psi_{1,3}'' + \frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}\psi_{1,3} = 0\ .$$

Условия непрерывности, гладкости и ограниченности функции

$$\psi_1(0)=\psi_2(0),\quad \psi_1'(0)=\psi_2'(0),\quad \psi_2(a)=\psi_3(a),\quad \psi_2'(a)=\psi_3'(a),$$

$$|\psi_1(-\infty)|<\infty,\quad |\psi_3(\infty)|<\infty.$$

Решение этих уравнений:

$\psi_1(x)=A_1e^{iqx}+B_1e^{-iqx}$, $\psi_3(x)=A_3e^{iqx}+B_3e^{-iqx}$, где $q=\dfrac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}$,

$$\psi_2(x)=A_2e^{ikx}+B_2e^{-ikx},\ \text{где}\ k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Аналогично задаче 63 $B_3=0$.

из $\psi_1(0)=\psi_2(0)\ \Rightarrow\ A_1+B_1=A_2+B_2$,

из $\psi_1'(0)=\psi_2'(0)\ \Rightarrow A_1-B_1=(A_2-B_2)\dfrac{q}{k}$.

из $\psi_1(a)=\psi_2(a)\ \Rightarrow A_2e^{iqa}+B_2e^{-iqa}=A_3e^{iqa}\ A_2e^{iqa}+B_2e^{-iqa}=A_3e^{iqa}$,

из $\psi_1'(a)=\psi_2'(a)\ \Rightarrow A_2e^{iqa}-B_2e^{-iqa}=\dfrac{k}{q}A_3e^{iqa}$.

Из последних двух уравнений

$$A_2=\frac{1}{2}e^{i(k-q)a}\left(\frac{q+k}{q}\right)A_3,\quad B_2=\frac{1}{2}e^{i(k+q)a}\left(\frac{q-k}{q}\right)A_3.$$

Из первых двух уравнений с учетом полученных выражений

$$A_1=\frac{1}{2}\left(A_2\left(1+\frac{q}{k}\right)+B_2\left(1-\frac{q}{k}\right)\right)=$$

$$=\frac{A_3}{4}\left(e^{i(k-q)a}\frac{q+k}{q}\frac{q+k}{k}+e^{i(k+q)a}\frac{q-k}{q}\frac{k-q}{k}\right)=$$

$$=\frac{A_3}{4kq}\left(e^{-iqa}(q+k)^2-e^{iqa}(q-k)^2\right)e^{ika}.$$

$$B_1=\frac{1}{2}\left(A_2\left(1-\frac{q}{k}\right)+B_2\left(1+\frac{q}{k}\right)\right)=$$

$$=\frac{A_3}{4}\left(e^{i(k-q)a}\frac{k-q}{q}\frac{q+k}{k}+e^{i(k+q)a}\frac{q-k}{q}\frac{k+q}{k}\right)=$$

$$= \frac{A_3}{4kq}\left(e^{iqa} - e^{-iqa}\right)\left(q^2 - k^2\right)e^{ika} = \frac{iA_3}{2kq}\left(q^2 - k^2\right)e^{ika}\sin qa.$$

Коэффициент прозрачности:

$$D = \frac{w_{прош}}{w_{пад}} = \frac{\left|\psi_{прош}\right|^2}{\left|\psi_{пад}\right|^2} = \frac{\left|A_3\right|^2}{\left|A_1\right|^2} = \frac{16k^2q^2}{\left|e^{-iqa}(q+k)^2 - e^{iqa}(q-k)^2\right|^2}.$$

Коэффициент отражения:

$$R = \frac{w_{отр}}{w_{пад}} = \frac{\left|\psi_{отр}\right|^2}{\left|\psi_{пад}\right|^2} = \frac{\left|B_1\right|^2}{\left|A_1\right|^2} = \left|\frac{2\left(q^2 - k^2\right)\sin qa}{\left(e^{-iqa}(q+k)^2 - e^{iqa}(q-k)^2\right)}\right|^2.$$

Находим модуль комплексного знаменателя и получаем:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{\left(k^2 - q^2\right)^2}{4k^2q^2}\sin^2 qa}.$$

$$k^2 - q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m\left(E + U_0\right)}{\hbar^2} = -\frac{2mU_0}{\hbar^2},$$

$$k^2q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\frac{2m\left(E + U_0\right)}{\hbar^2} = \frac{2mE\left(E + U_0\right)}{\hbar^4}.$$

В результате $D = \dfrac{1}{1 + \dfrac{U_0^2}{4E\left(E + U_0\right)}\sin^2\dfrac{\sqrt{2m\left(E + U_0\right)}}{\hbar}a}$.

$$R = \frac{\frac{U_0^2}{4E\left(E + U_0\right)}\sin^2\frac{\sqrt{2m\left(E + U_0\right)}}{\hbar}a}{1 + \frac{U_0^2}{4E\left(E + U_0\right)}\sin^2\frac{\sqrt{2m\left(E + U_0\right)}}{\hbar}a}.$$

Ответ: $D = \dfrac{1}{1 + \dfrac{U_0^2}{4E\left(E + U_0\right)}\sin^2\dfrac{\sqrt{2m\left(E + U_0\right)}}{\hbar}a}$,

$$R=\frac{\dfrac{U_0^2}{4E(E+U_0)}\sin^2\dfrac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}a}{1+\dfrac{U_0^2}{4E(E+U_0)}\sin^2\dfrac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}a}.$$

12. Для частицы из задачи 11 найдите возможные значения энергии E, при которых частица беспрепятственно проходит над ямой, и ширину ямы, при которой коэффициент прозрачности минимален.

Воспользуемся результатами задачи 11:

$$D=\frac{1}{1+\dfrac{U_0^2}{4E(E+U_0)}\sin^2\dfrac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}a},$$

в знаменателе может быть $\sin\dfrac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}a=0$, тогда коэффициент $D=1$.

$$\frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}a=\pi n,\ E=\frac{\pi^2 n^2\hbar^2}{2ma^2}-U_0.$$

Если λ_0 – де бройлевская длина волны частицы, то волновое число

$$\frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}=k_0=\frac{2\pi}{\lambda_0},\quad k_0a=\pi n,\quad a=\frac{n}{2}\lambda_0.$$

Это значит, что если ширина ямы равна целому числу полудлин волн де Бройля, то частица проходит яму беспрепятственно. Для фотона примером такой ямы может служить эффект «просветления оптики».

Коэффициент прозрачности минимален, если $\sin\dfrac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}a=\pm1$. При этом

$$\frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}a=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right),\ E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2-U_0.$$

$$D_{\min}=\frac{4E(E+U_0)}{4E(E+U_0)+U_0^2}=\frac{4E(E+U_0)}{(2E+U_0)^2}.$$

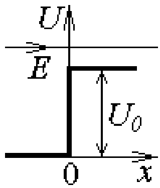
Ширина ямы с минимальным коэффициентом отражения

$$a=\frac{\lambda_0}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Для оптики это ширина так называемой «четвертьволновой» пленки.

Ответ: $E=\dfrac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2}-U_0$, $a=\dfrac{\lambda_0}{2}\left(n+\dfrac{1}{2}\right)$.

13. Частица массы m падает слева на потенциальный барьер высотой U_0. Энергия частицы $E>U_0$. Найдите коэффициент отражения частицы от барьера R и коэффициент прозрачности D.



Разобьем пространство на две области, где волновые функции

$$\psi(x)=\begin{cases}\psi_1 & x\le 0;\\ \psi_2 & x\ge a.\end{cases}$$

Уравнения Шредингера в одномерном случае

$$\psi_1''+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1=0,\qquad \psi_2''+\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\psi_2=0.$$

Условия непрерывности, гладкости и ограниченности функции

$$\psi_1(0)=\psi_2(0),\quad \psi_1'(0)=\psi_2'(0),\quad |\psi_1(-\infty)|<\infty,\quad |\psi_2(\infty)|<\infty.$$

Решение этих уравнений:

$$\psi_1(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx},\ \text{где}\ k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$$\psi_2(x)=Ce^{iqx}+Ge^{-iqx},\ \text{где}\ q=\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar},$$

– плоские волны, в функции $\psi_1(x)$ слагаемое Ae^{ikx} описывает волну, падающую на барьер, а Be^{-ikx} – отраженную, аналогично в $\psi_2(x)$ слагаемое Ce^{iqx} описывает прошедшую над барьером волну, а отраженной волны нет, поэтому $G=0$.

Из граничных условий

из $\psi_1(0)=\psi_2(0) \Rightarrow A+B=C$,

из $\psi_1'(0)=\psi_2'(0) \Rightarrow kA-kB=qC$, или $A-B=\dfrac{q}{k}C$.

Выразим коэффициенты $A=\dfrac{k+q}{2k}C$, $B=\dfrac{k-q}{2k}C$.

Коэффициент отражения частицы от барьера

$$R=\frac{w_{отр}}{w_{пад}}=\frac{|\psi_{отр}|^2}{|\psi_{пад}|^2}=\frac{|B|^2}{|A|^2}=\left|\frac{k-q}{k+q}\right|^2=\left|\frac{\sqrt{2mE}-\sqrt{2m(E-U_0)}}{\sqrt{2mE}+\sqrt{2m(E-U_0)}}\right|^2,$$

сокращая, получим:

$$R=\left|\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}}\right|^2=\left|\frac{\left(\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0}\right)^2}{E-E+U_0}\right|^2,$$

$$R=\left(2\frac{E}{U_0}-1-2\sqrt{\frac{E}{U_0}-1}\right)^2.$$

Коэффициент прозрачности

$$D=\frac{w_{прош}}{w_{пад}}=\frac{|\psi_{прош}|^2}{|\psi_{пад}|^2}=\frac{|C|^2}{|A|^2}=\left|\frac{2k}{k+q}\right|^2=\left|\frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}}\right|^2,$$

$$D=4\left(1-\frac{E}{U_0}-\left(2\frac{E}{U_0}+1\right)\sqrt{\frac{E}{U_0}-1}\right).$$

Ответ:

$$R=\left(2\frac{E}{U_0}-1-2\sqrt{\frac{E}{U_0}-1}\right)^2,\ D=4\left(1-\frac{E}{U_0}-\left(2\frac{E}{U_0}+1\right)\sqrt{\frac{E}{U_0}-1}\right).$$

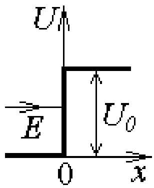
14. Для частицы из задачи 13 найдите приближенные значения коэффициента отражения частицы от барьера R и коэффициента прозрачности D для случаев: а) частица пролетает непосредственно над барьером $E \approx U_0$ и б) частица пролетает значительно выше над барьером $E >> U_0$.

Проанализируем полученные в задаче 13 результаты. При $E \approx U_0$, $\frac{E}{U_0} \approx 1$ коэффициент отражения близок к единице, а коэффициент прозрачности – к нулю. В обратном случае, когда $E >> U_0$, $\frac{U_0}{E} \approx 0$

$$R = \left| \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}} \right|^2 \approx 0, \quad D = \left| \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}} \right|^2 \approx 1$$

коэффициент отражения близок к нулю, а коэффициент прозрачности – к единице.

15. Частица массы m падает слева на потенциальный барьер высотой U_0. Энергия частицы $E < U_0$. Найдите эффективную глубину $\chi_{эф}$ проникновения частицы под барьер $\left(w(\chi_{эф}) = \frac{w_0}{e} \right)$. Вычислите $\chi_{эф}$ для электрона, если $E - U_0 = 1$ эВ.



Найдем решение уравнения Шредингера для частицы под барьером $x > 0$:

$$\psi'' - \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}\psi = 0.$$

Решение $\psi(x) = Be^{-qx} + Ce^{qx}$, где $q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$, в силу ограниченности $|\psi(\infty)| < \infty$ имеет вид $\psi(x) = Be^{-qx}$. Плотность вероятности нахождения частицы под барьером

$$w(x) = B^2 e^{-2qx},$$

вероятность иметь координату $x = 0$ $w(0) = B^2$. По определению $\chi_{эф}$ такое, что на глубине $\chi_{эф}$ вероятность частицы уменьшается в e раз по сравнению с вероятностью на границе:

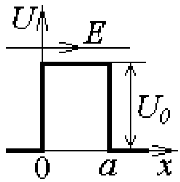
$$w(\chi_{эф}) = B^2 e^{-2q\chi_{эф}} = \frac{w(0)}{e} = \frac{B^2}{e}, \qquad \chi_{эф} = \frac{1}{2q} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}.$$

Для электрона

$$\chi_{эф} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}} = \frac{1{,}05 \cdot 10^{-34}}{2\sqrt{2 \cdot 0{,}9 \cdot 10^{-30} \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}}} = 10^{-10} \text{ м} = 0{,}1 \text{ нм}.$$

Ответ: $\chi_{эф} = \dfrac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}$, $\chi_{эф} = 10^{-10}$ м = 0,1 нм.

16. Частица массы m падает слева на симметричный потенциальный барьер высотой U_0.



$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le a; \\ -U_0 & x < 0; x > a. \end{cases}$$

Энергия частицы $E > U_0$. Найдите коэффициент отражения частицы от ямы R и коэффициент прозрачности D.

Воспользуемся результатами задачи 11, заменив в ответе U_0 на $-U_0$:

$$D = \frac{1}{1 + \dfrac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2 \dfrac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} a}.$$

$$R = \frac{\dfrac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2 \dfrac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} a}{1 + \dfrac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2 \dfrac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} a}.$$

Коэффициент прозрачности может равняться $D = 1$, если в знаменателе $\sin \dfrac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} a = 0$.

$$\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}a=\pi n\,,\ E=\frac{\pi^2n^2\hbar^2}{2ma^2}+U_0\,.$$

Если λ_0 – де бройлевская длина волны частицы, то волновое число

$$\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}=k_0=\frac{2\pi}{\lambda_0},\quad k_0a=\pi n\,,\quad a=\frac{n}{2}\lambda_0\,.$$

Это значит, что если ширина ямы равна целому числу полудлин волн де Бройля, то частица проходит яму беспрепятственно. Для фотона примером такой ямы может служить эффект «просветления оптики».

Коэффициент прозрачности минимален, если $\sin\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}a=\pm1$. При этом

$$\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}a=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right),\ E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2+U_0\,,$$

$$D_{\min}=\frac{4E(E-U_0)}{4E(E-U_0)+U_0^2}=\frac{4E(E-U_0)}{(2E-U_0)^2}\,.$$

Ширина ямы с минимальным коэффициентом отражения

$$a=\frac{\lambda_0}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Для оптики это толщина так называемой «четвертьволновой» пленки.

При $E\to U_0$ аргумент синуса в формуле коэффициента прозрачности

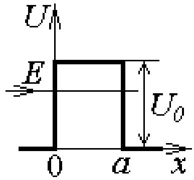
$$D=\left(1+\frac{2mU_0^2}{4E\hbar^2}\frac{\hbar^2}{2m(E-U_0)}\sin^2\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}a\right)^{-1},$$

$z=\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}\to0$. Найдем предел $\lim\limits_{z\to0}\frac{\sin^2z}{z^2}=1$, тогда

$$D=\left(1+\frac{mU_0^2}{2E\hbar^2}\right)^{-1}.$$

Ответ: $D = \dfrac{1}{1 + \dfrac{U_0^2}{4E(E-U_0)} \sin^2 \dfrac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} a}$.

17. Частица массы m падает слева на симметричный потенциальный барьер высотой U_0.



$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le a; \\ -U_0 & x < 0; x > a. \end{cases}$$

Энергия частицы $E < U_0$. Найдите коэффициент отражения частицы от ямы R и коэффициент прозрачности D.

Воспользуемся результатами задачи 75. В полученных коэффициентах выражение $\dfrac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$ на $i\dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$. Т.к. $\sin iy = \operatorname{sh} y$ – синус гиперболический, то

$$D = \frac{1}{1 + \dfrac{U_0^2}{4E(E-U_0)} \operatorname{sh}^2 \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} a}.$$

$$R = \frac{\dfrac{U_0^2}{4E(U_0-E)} \operatorname{sh}^2 \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} a}{1 + \dfrac{U_0^2}{4E(U_0-E)} \operatorname{sh}^2 \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} a}.$$

Ответ: $D = \dfrac{1}{1 + \dfrac{U_0^2}{4E(E-U_0)} \operatorname{sh}^2 \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} a}$,

$$R = \frac{\dfrac{U_0^2}{4E(U_0-E)} \operatorname{sh}^2 \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} a}{1 + \dfrac{U_0^2}{4E(U_0-E)} \operatorname{sh}^2 \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} a}.$$

18. Для частицы из задачи 76 найдите коэффициент прозрачности для случая $D \ll 1$, плотность вероятности и изобразите график этой функции.

Воспользуемся результатами задачи 75. В формуле

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(k^2+q^2)^2}{4k^2q^2}\operatorname{sh}^2 qa}, \quad \text{где} \quad q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar},$$

$D \ll 1$, если $\operatorname{sh} qa \to \infty$, т.е. $qa \to \infty$, то $\operatorname{sh} a \approx \frac{e^{qa}}{2}$, тогда

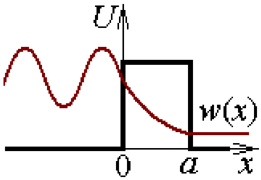
$$D \approx \left(\frac{(k^2+q^2)^2}{4k^2q^2}\operatorname{sh}^2 qa\right)^{-1} = \left(\frac{(k^2+q^2)^2}{4k^2q^2}\frac{e^{2qa}}{4}\right)^{-1} = \frac{16k^2q^2}{(k^2+q^2)^2}e^{-2qa},$$

$$D \approx \frac{16(E - U_0)E}{U_0{}^2}e^{-2qa}.$$

Чтобы найти плотность вероятности

$$w(x) = |\psi(x)|^2,$$

нужно обратиться к решению задачи 64. Аналогично можно найти волновые функции



$$\psi_1(x) = A_1e^{ikx} + B_1e^{-ikx}, \ \psi_3(x) = A_3e^{ikx}, \text{ где } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$$\psi_2(x) = A_2e^{qx} + B_2e^{-qx}, \text{ где } q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

$$A_2 = \frac{1}{2}e^{(ik-q)a}\left(\frac{q+k}{q}\right)A_3, \quad B_2 = \frac{1}{2}e^{i(k+q)a}\left(\frac{q-k}{q}\right)A_3$$

$$A_1 = \frac{A_3}{4kq}\left(e^{-iqa}(q+k)^2 - e^{iqa}(q-k)^2\right)e^{ika}.$$

$$B_1 = \frac{iA_3}{2kq}\left(q^2 - k^2\right)e^{ika}\sin qa.$$

19. Частица массы m с волновым числом k движется вдоль оси Ox на промежутке от $-l$ до l. Найдите волновую функцию частицы и ее среднюю энергию.

Воспользуемся результатом, полученном в задаче 77:

$$\psi = Ce^{ikx}.$$

Пронормируем функцию:

$$1 = \int_{-l}^{l} C^* e^{-ikx} Ce^{ikx} dx = |C|^2 \int_{-l}^{l} dx = 2l|C|^2, \quad C = \frac{1}{\sqrt{2l}},$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2l}} e^{ikx}.$$

По определению среднего значения физической величины

$$\langle E \rangle = \left(\psi; \hat{H}\psi\right),$$

где оператор Гамильтона свободной частицы в заданной области

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

тогда среднее значение:

$$\langle E \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-l}^{l} \frac{1}{\sqrt{2l}} e^{-ikx} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{1}{\sqrt{2l}} e^{ikx} dx = -\frac{\hbar^2}{2m \cdot 2l}\int_{-l}^{l} e^{-ikx} (ik)^2 e^{ikx} dx =$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m \cdot 2l}\int_{-l}^{l} dx = \frac{\hbar^2 k^2}{2m \cdot 2l} 2l = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Ответ: $\psi = \frac{1}{\sqrt{2l}} e^{ikx}$, $\langle E \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 7:

Задачи

1. Найдите уровни энергии и собственные функции одномерного гармонического осциллятора.

Будем искать решение уравнения Шредингера:

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

Сделаем обезразмеривающую замену $\xi=\frac{x}{x_0}$, $x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ и обозначим $\frac{2E}{\hbar\omega}=\varepsilon$. Уравнение примет вид:

$$\frac{\partial^2\psi(\xi)}{\partial\xi^2}+\left(\varepsilon-\xi^2\right)\psi(\xi)=0\,.$$

Легко убедиться, что при $\xi\to\infty$ волновая функция имеет вид $\psi=e^{-\frac{\xi^2}{2}}$. Это легко сделать, пренебрегая ε по сравнению с ξ^2. Тогда функция должна иметь вид $\psi(\xi)=f(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$. Будем искать решение уравнения

$$\frac{\partial^2 f(\xi)}{\partial\xi^2}-2\xi\frac{\partial f(\xi)}{\partial\xi}+(\varepsilon-1)f(\xi)=0$$

в виде степенного ряда $f(\xi)=\sum\limits_{k=k_0}^{\infty}a_k\xi^k$. Подставим этот ряд в уравнение и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях ξ, получим ряд соотношений

$$k_0(k_0-1)a_{k_0}=0 \quad \text{при} \quad \xi^{k_0-2},$$

$$k_0(k_0+1)a_{k_0+1}=0 \quad \text{при} \quad \xi^{k_0-1},$$

$$(k+2)(k+1)a_{k+2}+(\varepsilon-1-2k)a_k=0 \quad \text{при} \quad \xi^k\text{, если } k\ge k_0\,.$$

Первые два уравнения являются тождествами, если положить $k_0 = 0$, $a_0 \neq 0$, $a_1 \neq 0$. Из последнего уравнения получаем рекуррентную формулу для коэффициентов ряда

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2)(k+1)}.$$

Все четные a_k можно определить через a_0, а нечетные – через a_1.

Бесконечный степенной ряд в общем случае не является сходящимся. Следовательно, его следует сделать конечным, то есть оборвать на некотором члене. То есть в рекуррентной формуле следует положить некоторое $a_{n+2} = 0$. Откуда $\varepsilon = 2n+1$, $E = \frac{\hbar\omega}{2}\varepsilon$, уровни энергии $E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)$ дискретны, а уравнение на собственные функции примет вид:

$$\frac{\partial^2 f_n}{\partial\xi^2} - 2\xi\frac{\partial f_n}{\partial\xi} + nf_n = 0,$$

ему удовлетворяют полиномы Чебышева-Эрмита

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}.$$

Волновая функция имеет вид:

$$\psi_n(\xi) = Ce^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi).$$

Пронормируем ее.

$$\int|\psi_n(x)|^2 dx = x_0\int|\psi_n(\xi)|^2 d\xi = x_0|C_n|^2\int e^{-\xi^2} H_n^2(\xi)d\xi = 1$$

Один из полиномов представим в явном виде и проведем n раз интегрирование по частям, получим

$$1 = x_0|C_n|^2(-1)^n\int\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} H_n(\xi)d\xi = x_0|C_n|^2\int e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n}d\xi,$$

так как

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n \cdot n!, \text{ то } |C_n|^2 = \frac{x_0}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2^n \cdot n!}.$$

Ответ: $E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)$, $\psi_n(\xi) = \frac{x_0}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$.

2. Найдите уровни энергии и собственные функции трехмерного гармонического осциллятора вида

$$U(x,y,z)=\frac{m\omega_1^2x^2}{2}+\frac{m\omega_2^2y^2}{2}+\frac{m\omega_3^2z^2}{2}.$$

Рассмотрите случай изотропного осциллятора.

Будем искать решение трехмерного уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U\psi=E\psi,$$

в виде $\psi(x,y,z)=X(x)\cdot Y(y)\cdot Z(z)$. Уравнение примет вид:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)XYZ-\hbar^2\left(\omega_1^2x^2+\omega_2^2y^2+\omega_3^2z^2\right)XYZ+\frac{2mE}{\hbar^2}XYZ=0,$$

$$\frac{\partial^2X}{\partial x^2}YZ+\frac{\partial^2Y}{\partial y^2}XZ+\frac{\partial^2Z}{\partial z^2}XY-$$

$$-\left(\omega_1^2x^2+\omega_2^2y^2+\omega_3^2z^2\right)XYZ+\frac{2mE}{\hbar^2}XYZ=0,$$

разделим все уравнение на XYZ.

$$\left(\frac{1}{X}\frac{\partial^2X}{\partial x^2}-\omega_1^2x^2\right)+\left(\frac{1}{Y}\frac{\partial^2Y}{\partial y^2}-\omega_2^2y^2\right)+\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial^2Z}{\partial z^2}-\omega_3^2z^2\right)=-\frac{2mE}{\hbar^2},$$

каждое из слагаемых в левой части зависит только от одной переменной, их сумма – постоянная, следовательно, каждое из этих слагаемых тоже константа.

Тогда уравнения примут вид

$$\frac{\partial^2X}{\partial x^2}-\omega_1^2x^2X+\frac{2mE_1}{\hbar^2}X=0,$$

$$\frac{\partial^2Y}{\partial y^2}-\omega_2^2y^2Y+\frac{2mE_2}{\hbar^2}Y=0,$$

$$\frac{\partial^2Z}{\partial z^2}-\omega_3^2z^2Z+\frac{2mE_3}{\hbar^2}Z=0,$$

где $E=E_1+E_2+E_3$. Решения этих уравнений аналогичны решению уравнений для одномерного гармонического осциллятора:

$$X_{n_1}(\xi)=C_1e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_{n_1}(\xi),\ E_{n_1}=\hbar\omega_1\left(n_1+\frac{1}{2}\right),$$

$$Y_{n_2}(\eta) = C_2 e^{-\frac{\eta^2}{2}} H_{n_2}(\eta),\ E_{n_2} = \hbar\omega_2\left(n_2 + \frac{1}{2}\right),$$

$$Z_{n_3}(\zeta) = C_3 e^{-\frac{\zeta^2}{2}} H_{n_3}(\zeta),\ E_{n_3} = \hbar\omega_3\left(n_3 + \frac{1}{2}\right),$$

где $\xi = \sqrt{\frac{m\omega_1}{\hbar}} x$, $\eta = \sqrt{\frac{m\omega_2}{\hbar}} y$, $\zeta = \sqrt{\frac{m\omega_3}{\hbar}} z$.

Тогда волновая функция

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\xi, \eta, \zeta) = C e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}{2}} H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta) H_{n_3}(\zeta),$$

с учетом нормировки

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{\sqrt[4]{m^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3}\, e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}{2}}}{(\pi\hbar)^{\frac{3}{4}} \sqrt{2^{n_1 + n_3 + n_3} n_1! n_2! n_3!}} H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta) H_{n_3}(\zeta)$$

и энергия

$$E = \hbar\omega_1\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2\left(n_2 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_3\left(n_3 + \frac{1}{2}\right).$$

Заметим, что в случае изотропного осциллятора $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$ уровни энергии являются вырожденными:

$$E = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right).$$

Так, например, если $n_1 + n_2 + n_3 = 1$, то значению энергии $E = \frac{5}{2}\hbar\omega$ соответствуют три набора квантовых чисел $(n_1; n_2; n_3)$ – (1;0;0), (0;1;0), (0;0;1), а следовательно, три различные волновые функции. Если $n_1 + n_2 + n_3 = 2$, то $(n_1; n_2; n_3)$ могут быть (2;0;0), (1;1;0), (1;0;1), (0;2;0), (0;1;1), (0;0;2) – уровень энергии $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$ шесть раз вырожден, в общем случае если $n_1 + n_2 + n_3 = N$, то уровень энергии $E = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$ вырожден $\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$ раз.

Ответ: $E = \hbar\omega_1\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2\left(n_2 + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_3\left(n_3 + \frac{1}{2}\right)$,

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\xi,\eta,\zeta)=\frac{\sqrt[4]{m^3\omega_1\omega_2\omega_3}\,e^{-\frac{\xi^2+\eta^2+\zeta^2}{2}}}{(\pi\hbar)^{\frac{3}{4}}\sqrt{2^{n_1+n_3+n_3}n_1!n_2!n_3!}}H_{n_1}(\xi)H_{n_2}(\eta)H_{n_3}(\zeta).$$

3. Найдите возможные значения энергии E квантового гармонического осциллятора с частотой ω, находящегося в состоянии, описываемом волновой функцией:
а) $\psi(x)=Ae^{-a^2x^2}$ **, б)** $\psi(x)=Axe^{-a^2x^2}$ **.**

Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора с частотой ω:

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

даст значение энергии осциллятора: а)

$$E=-\frac{1}{\psi}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}=-\frac{\hbar^2Aa^2\left(4a^2x^2-2\right)e^{-a^2x^2}}{2mAe^{-a^2x^2}}+\frac{m\omega^2x^2}{2}=$$

$$=-\frac{2\hbar^2a^4x^2}{m}+\frac{\hbar^2a^2}{m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

Поскольку энергия не может зависеть от координаты, вероятно, слагаемые, содержащие координату, в сумме равны нулю:

$$\frac{2\hbar^2a^4x^2}{m}=\frac{m\omega^2x^2}{2},\quad a^2=\frac{m\omega}{2\hbar},$$

тогда

$$E=\frac{\hbar^2}{m}\frac{m\omega}{2\hbar}=\frac{\hbar\omega}{2};$$

б) $E=-\frac{1}{\psi}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}=-\frac{\hbar^2A\left(4a^4x^3-6a^2x\right)e^{-a^2x^2}}{2mAxe^{-a^2x^2}}+\frac{m\omega^2x^2}{2}=$

$$=-\frac{2\hbar^2a^4x^2}{m}+\frac{3\hbar^2a^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2},$$

аналогично $a^2=\dfrac{m\omega}{2\hbar}$, и

$$E=\frac{3\hbar^2}{m}\frac{m\omega}{2\hbar}=\frac{3\hbar\omega}{2}.$$

Ответ: а) $E = \dfrac{\hbar\omega}{2}$, б) $E = \dfrac{3\hbar\omega}{2}$.

4. Вычислите среднее значение квадрата координаты $\left\langle x^2 \right\rangle$ и среднюю потенциальную энергию одномерного гармонического осциллятора, находящегося на n-ом энергетическом уровне.

По определению среднего значения кинетическая энергия

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \int \psi^* x^2 \psi dx = \int x^2 \left|\psi\right|^2 dx .$$

При $\xi = \dfrac{x}{x_0}$, где $x_0 = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$

$$\psi_n = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \text{ где } C_n = \sqrt{\frac{x_0}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2^n \cdot n!}} .$$

Подставим явный вид функции в формулу

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \left|C_n\right|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} \int \xi^2 \left(e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)\right)^2 d\xi = \left|C_n\right|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} \int \xi^2 e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi .$$

Заменяя один из полиномов $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \dfrac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}$ и интегрируя

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \left|C_n\right|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} (-1)^n \int \xi^2 e^{-\xi^2} e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} H_n(\xi) d\xi =$$

$$= \left|C_n\right|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} \int e^{-\xi^2} \frac{d^n \left(H_n(\xi)\xi^2\right)}{d\xi^n} d\xi .$$

Очевидно,

$$\frac{d^n \left(H_n(\xi)\xi^2\right)}{d\xi^n} = \frac{d^n}{d\xi^n}\left(a_n \xi^{n+2} + a_{n-2}\xi^n + \ldots\right) = a_n \frac{(n+2)!}{2!} \xi^2 + n! a_{n-2} .$$

По рекуррентной формуле

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2)(k+1)},$$

$$a_n = 2^n\,,\quad a_{n-2} = -a_n\,\frac{n(n-1)}{4}\,.$$

Подставляя производную в интеграл, получаем

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \left|C_n\right|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} \int e^{-\xi^2}\left(a_n\,\frac{(n+2)!}{2!}\,\xi^2 + n!\,a_{n-2}\right)d\xi\,.$$

Эти интегралы легко взять при помощи интеграла Пуассона

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi} \quad \text{и} \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}:$$

$$\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \left|C_n\right|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} \left(2^n\,\frac{(n+2)!}{2}\,\frac{\sqrt{\pi}}{2} - 2^n\,\frac{n(n-1)}{4}\,n!\sqrt{\pi}\right) =$$

$$= \frac{\hbar}{m\omega\sqrt{\pi}}\,\frac{1}{2^n\cdot n!}\,2^n\,\frac{\sqrt{\pi}}{4}\,n!\big((n+2)(n+1) - n(n-1)\big) = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Тогда средняя потенциальная энергия

$$\left\langle U \right\rangle = \frac{m\omega^2\left\langle x^2 \right\rangle}{2} = \frac{m\omega^2}{2}\,\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{E_n}{2}\,.$$

Ответ: $\left\langle \hat{x}^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)$, $\left\langle U \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$.

5 Вычислите среднюю кинетическую энергию одномерного гармонического осциллятора, энергия которого равна $\frac{5}{2}\hbar\omega$.

Для одномерного осциллятора оператор кинетической энергии

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\,,$$

то средняя кинетическая энергия

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2}dx = \frac{\hbar^2}{2M}\int \left|\frac{d\psi}{dx}\right|^2 dx.$$

В данном случае энергия $\frac{5}{2}\hbar\omega$ соответствует номеру уровня $n = 2$, волновая функция осциллятора при $\xi = \frac{x}{x_0}$, где $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{x_0}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2^2 \cdot 2!}}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_2(\xi), \quad H_2 = 4\xi^2 - 2.$$

Подставим явный вид функции в формулу

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{16\sqrt{\pi}}\int \left\{\frac{d}{d\xi}\left[e^{-\frac{\xi^2}{2}}\left(4\xi^2 - 2\right)\right]\right\}^2 dx,$$

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4\sqrt{\pi}}\int e^{-\xi^2}\left(4\xi^6 - 20\xi^4 + 25\xi^2\right)dx.$$

Эти интегралы легко взять, если к интегралу Пуассона

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

применить интегрирование по параметру

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2k}e^{-\alpha x^2}dx = \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^k \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \frac{1\cdot 3\cdot\ldots\cdot(2k-1)}{2^k}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2k+1}}},$$

то

$$\left\langle \hat{T} \right\rangle = \frac{5\hbar\omega}{4} = \frac{E_2}{2}.$$

Ответ: $\left\langle \hat{T} \right\rangle = \frac{5\hbar\omega}{4}$.

6. Определите минимальную энергию одномерного квантового осциллятора, пользуясь соотношением неопределенностей.

Среднее значение энергии одномерного квантового осциллятора можно записать

$$\overline{E} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2\overline{x^2}}{2} \geq \frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2m} + \frac{m\omega^2\overline{(\Delta x)^2}}{2}.$$

Из соотношения неопределенностей $\overline{(\Delta x)^2} \geq \dfrac{\hbar^2}{4\overline{(\Delta p)^2}}$

$$\overline{E} \geq \frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2m} + \frac{m\omega^2\hbar^2}{8\overline{(\Delta p)^2}}.$$

Найдем минимум энергии, как функции $\overline{(\Delta p)^2}$:

$$\frac{1}{2m} - \frac{m\hbar^2\omega^2}{8\left(\overline{(\Delta p)^2}\right)^2} = 0, \quad \overline{(\Delta p)^2} = \frac{m\hbar\omega}{2},$$

тогда среднее значение энергии

$$\overline{E} \geq \frac{m\hbar\omega}{4m} + \frac{2m\omega^2\hbar^2}{8m\hbar\omega} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Ответ: $\overline{E} \geq \dfrac{\hbar\omega}{2}$.

7. Найдите уровни энергии и собственные функции одномерного заряженного гармонического осциллятора, помещенного в однородное электрическое поле напряженностью $\vec{\varepsilon}$, направленной вдоль оси колебаний. Заряд осциллятора q.

Потенциальная энергия такого осциллятора

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2} - q\varepsilon x.$$

Будем искать решение уравнения Шредингера:

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

Выделим в потенциальной энергии полный квадрат

$$U = \frac{m\omega^2}{2}\left(x^2 - \frac{2q\varepsilon}{m\omega^2}x + \left(\frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2\right) - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} =$$

$$= \frac{m\omega^2}{2}\left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} = \frac{m\omega^2}{2}x'^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2},$$

где сделана замена $x' = x - \dfrac{q\varepsilon}{m\omega^2}$, тогда уравнение с учетом замены $E' = E + \dfrac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$ примет вид:

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

решение которого известно:

$$E'_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1), \ \psi_n(\xi) = \frac{x_0}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi).$$

Уровни энергии осциллятора в электрическом поле смещены:

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1) - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2},$$

а в волновых функциях $\xi = \dfrac{x'}{x_0} = \left(x - \dfrac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)\Big/x_0$.

Ответ: $E_n = \dfrac{\hbar\omega}{2}(2n+1) - \dfrac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$, $\psi_n(\xi) = \dfrac{x_0}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi)$,

где $\xi = \dfrac{x'}{x_0} = \left(x - \dfrac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)\Big/x_0$.

Задачи

1. Найдите уровни энергии и собственные функции частицы массы M в бесконечной цилиндрической потенциальной яме радиуса a. Потенциальная энергия ямы в цилиндрических координатах:

$$U = \begin{cases} 0 & \rho \le a; \\ \infty & \rho > a. \end{cases}$$

Частица не может находиться вне потенциальной ямы, следовательно, волновая функция при $\rho > a$ равна нулю. Граничное условие для волновой функции:

$$\psi(a) = 0 .$$

Уравнение Шредингера для данной частицы

$$\hat{H}\psi = E\psi , \quad \text{где} \quad \hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2m\rho^2} .$$

Поскольку операторы $\hat{H}$ и $\hat{L}_z$ коммутируют, а от координаты z потенциальная энергия не зависит, то решение уравнения Шредингера в цилиндрических координатах

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial\psi}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right] = E\psi$$

ищем в виде

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \phi(\rho)e^{im\varphi} ,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial\phi}{\partial\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}\phi\right] = E\phi$$

или

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{2ME}{\hbar^2}\right]\phi = 0 .$$

Решение этого уравнения $\phi(\rho) = CJ_m\left(\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}\rho\right)$ – функция Бесселя.

Из граничного условия $J_m\left(\sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}a\right)=0$ получаем энергетический спектр частицы. Пусть λ_{km} – k-й корень функции Бесселя, тогда энергия

$$E_{km}=\frac{\hbar^2\lambda_{km}^2}{2Ma^2},$$

причем основное состояние соответствует квантовому числу $k=1$.

Ответ: $E_{km}=\dfrac{\hbar^2\lambda_{km}^2}{2Ma^2}$, $\psi(\rho,\varphi)=CJ_m\left(\sqrt{\dfrac{2ME}{\hbar^2}}\rho\right)e^{im\varphi}$.

2. Найдите уровни энергии и собственные функции свободного плоского ротатора с моментом инерции J. Какова кратность вырождения уровней?

Кинетическая энергия плоского ротатора

$$K=\frac{L_z^2}{2J},$$

где L_z – момент импульса ротатора, вращающегося относительно оси Oz. Оператор проекции момента импульса в сферических координатах

$$\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi},$$

тогда оператор Гамильтона

$$\hat{H}=\frac{\hat{L}_z^2}{2J}=-\frac{\hbar^2}{2J}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Уравнение Шредингера для ротатора

$$-\frac{\hbar^2}{2J}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}=E\psi$$

имеет решение

$$\psi_m(\varphi)=Ce^{im\varphi},$$

где $m^2=\dfrac{2JE}{\hbar^2}$. С учетом периодичности функции $\psi(\varphi)=\psi(\varphi+2\pi)$ $m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \ldots$ Тогда уровни энергии

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2J}.$$

Все уровни, кроме основного $m = 0$, являются дважды вырожденными. Каждому значению энергии соответствуют две функции

$$\psi_m(\varphi) = Ce^{im\varphi} \text{ и } \psi_{-m}(\varphi) = Ce^{-im\varphi}.$$

Пронормируем функцию

$$1 = \int_0^{2\pi} \left|\psi_m(\varphi)\right|^2 d\varphi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi|C|^2, \text{ откуда } C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Ответ: $E_m = \dfrac{\hbar^2 m^2}{2J}$, $\psi_m(\varphi) = \dfrac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$.

3. Найдите значения энергии квантового симметричного волчка. (Примером такого волчка может служить молекула аммиака, имеющая форму пирамиды с правильным треугольником в основании.)

Кинетическая энергия волчка, записанная через момент импульса,

$$\hat{H} = \frac{1}{2J_1}\left(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2\right) + \frac{1}{2J_3}\hat{L}_z^2.$$

Выразим моменты импульса через квадрат момента импульса и проекцию момента на ось Oz

$$\hat{H} = \frac{1}{2J_1}\left(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2\right) + \frac{1}{2J_3}\hat{L}_z^2 = \frac{\hat{L}^2}{2J_1} + \left(\frac{1}{2J_3} - \frac{1}{2J_1}\right)\hat{L}_z^2.$$

Тогда решение уравнения Шредингера даст

$$E = \frac{\hbar^2}{2J_1} l(l+1) + \frac{\hbar^2 m^2}{2}\left(\frac{1}{J_1} - \frac{1}{J_z}\right).$$

Ответ: $E = \dfrac{\hbar^2}{2J_1} l(l+1) + \dfrac{\hbar^2 m^2}{2}\left(\dfrac{1}{J_1} - \dfrac{1}{J_z}\right)$.

4. Пользуясь тем, что средние значения некоторой величины в том состоянии, которое является собственным для оператора, соответствующей этой величине, совпадают с собственными, покажите, что собственные значения квадрата момента импульса равны $\hbar^2 l(l+1)$.

Квадрат момента

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2,$$

его среднее значение

$$\left\langle \hat{L}^2 \right\rangle = \left\langle \hat{L}_x^2 \right\rangle + \left\langle \hat{L}_y^2 \right\rangle + \left\langle \hat{L}_z^2 \right\rangle.$$

Воспользуемся тем, что направления момента равновероятны,

$$\left\langle \hat{L}_x^2 \right\rangle = \left\langle \hat{L}_y^2 \right\rangle = \left\langle \hat{L}_z^2 \right\rangle, \quad \left\langle \hat{L}^2 \right\rangle = 3\left\langle \hat{L}_z^2 \right\rangle.$$

Найдем среднее значение квадрата любой проекции, легче всего – $\left\langle \hat{L}_z^2 \right\rangle$:

$$\left\langle \hat{L}_z^2 \right\rangle = \frac{1}{2l+1}\sum_{-l}^{l}(\hbar m)^2 = \frac{\hbar^2}{2l+1}\frac{l(l+1)(2l+1)}{3} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{3},$$

так как все состояния – собственные, то

$$\hat{L}^2 = \left\langle \hat{L}^2 \right\rangle = 3\left\langle \hat{L}_z^2 \right\rangle = 3\frac{\hbar^2 l(l+1)}{3} = \hbar^2 l(l+1).$$

5. Найдите среднее значение квадрата расстояния электрона от ядра в основном состоянии атома водорода.

Основное состояние электрона в атоме водорода описывается функцией

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}.$$

Среднее значение физической величины

$$\langle L \rangle = \left(\Psi; \hat{L}\Psi\right).$$

Тогда среднее значение оператора квадрата расстояния

$$\left\langle r^2 \right\rangle = \int \Psi^* \hat{r}^2 \Psi dV = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} r^4 \frac{1}{\pi a^3} e^{-2\frac{r}{a}} dr = \frac{4\pi}{\pi a^3}\int_0^{\infty} r^4 e^{-2\frac{r}{a}} dr.$$

Для нахождения интеграла сделаем замену $b = \dfrac{2}{a}$:

$$\int_0^\infty x^4 e^{-bx} dx = -\left(\frac{x^4}{b} + \frac{4x^3}{b^2} + \frac{12x^2}{b^3} + \frac{24x}{b^4} + \frac{24}{b^5} \right) e^{-bx} \Bigg|_0^\infty = \frac{24}{b^5} .$$

С учетом замены

$$\left\langle r^2 \right\rangle = \frac{4}{a^3} \frac{24a^5}{32} = 3a^2 .$$

Ответ: $\left\langle r^2 \right\rangle = 3a^2$.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
Решение задач по теме 10:
«Нестационарная теория возмущений»

Задачи

1. Система, стационарные состояния которой описываются функциями ψ_1 и ψ_2, находится в состоянии ψ_1. В момент времени $t=0$ включается возмущение, не зависящее от времени. Определите зависимость от времени функции $\psi(t)$, описывающую возмущенную систему.

Функции ψ_1 и ψ_2 удовлетворяют нестационарному уравнению Шредингера

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \text{ и } \psi_n = u(r)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, \quad \int\psi_n^*\psi_k dV = \delta_{nk},\ n,\ k\ = 1,2.$$

После включения возмущения $\hat{W}$ уравнение приобретает вид:

$$\left(\hat{H}+\hat{W}\right)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

Решение его следует искать в виде

$$\psi = a_1(t)\psi_1 + a_2(t)\psi_2,$$

где $|a_1|^2+|a_2|^2=1$ и начальные условия для коэффициентов $a_1(0)=1$ и $a_2(0)=0$. Подставим функцию в уравнение, умножим полученное уравнение на ψ_1 и ψ_2 и получим два уравнения на коэффициенты:

$$i\hbar\dot{a}_1 = a_1W_{11} + a_2W_{21}e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t}, \quad i\hbar\dot{a}_2 = a_1W_{21}e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t} + a_2W_{22},$$

где матричные элементы оператора возмущения $W_{ik} = \left(u_i(r); \hat{W}u_k(r)\right)$. Если ввести $\alpha_1(t)=a_1(t)$ и $\alpha_2(t) = a_2(t)e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t}$, то получим уравнения для α_i

$$i\hbar\dot{\alpha}_1 = \alpha_1W_{11}+\alpha_2W_{21}, \quad i\hbar\dot{\alpha}_2 = \alpha_1W_{12}+\alpha_2\left[W_{22}+E_2-E_1\right],$$

решения этих уравнений можно искать в виде $\alpha_1(t)=Ae^{-i\Omega t}$ и $\alpha_2(t)=Be^{-i\Omega t}$, подставив, получим уравнения на A и B:

$$\left(W_{11}-\hbar\Omega\right)A + W_{21}B = 0, \quad W_{12}A + \left[W_{22}+E_2-E_1-\hbar\Omega\right]B = 0,$$

решения которых существует, если система является совместной, т.е.

$$\begin{vmatrix} W_{11}-\hbar\Omega & W_{21} \\ W_{12} & W_{22}+E_2-E_1-\hbar\Omega \end{vmatrix} = 0,$$

откуда

$$\hbar\Omega_{1,2} = W_{11} + \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\left|W_{21}\right|^2 + \frac{\gamma^2}{4}}, \text{ где } \gamma = W_{22}-W_{11}+E_2-E_1.$$

Находим $\alpha_1(t) = A_1e^{-i\Omega_1 t} + A_2e^{-i\Omega_2 t}$, $\quad \alpha_2(t) = B_1e^{-i\Omega_1 t} + B_2e^{-i\Omega_2 t}$, причем

$$B_k = \frac{\hbar\Omega_k - W_{11}}{W_{21}}A_k.$$

Из начальных условий: $A_1+A_2=1$, $B_1+B_2=0$, тогда

$$A_1 = \frac{W_{11}-\hbar\Omega_2}{\hbar(\Omega_1-\Omega_2)},\ B_1 = \frac{W_{21}}{\hbar(\Omega_1-\Omega_2)},$$

следовательно,

$$\alpha_1(t) = A_1\left(e^{-i\Omega_1 t} + e^{-i\Omega_2 t}\right) + e^{-i\Omega_1 t},$$
$$\alpha_2(t) = B_1\left(e^{-i\Omega_1 t} - e^{-i\Omega_2 t}\right).$$

Ответ:

$$\psi = u(r)\left[\left(A_1\left(e^{-i\Omega_1 t}+e^{-i\Omega_2 t}\right)+e^{-i\Omega_1 t}\right)+B_1\left(e^{-i\Omega_1 t}-e^{-i\Omega_2 t}\right)\right]e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}.$$

2. На частицу, находящуюся в основном состоянии в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a, в момент времени $t=0$ накладывается слабое возмущение вида:

а) $\hat{V}(x,t) = -xF_0e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$; **б)** $\hat{V}(x,t) = -xF_0e^{-\frac{|t|}{\tau}}$.

Вычислите в первом приближении теории возмущений вероятности возбуждений различных состояний частицы при $t\to\infty$.

В начальный момент времени $t<0$ система описывается функциями $\psi_n^{(0)}$, удовлетворяющими стационарному уравнению $\hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$. После наложения возмущения уравнение

$$\left(\hat{H}^{(0)} + \hat{W}\right)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

решаем в виде

$$\Psi = \sum_j c_j(t)\psi_j^{(0)} e^{-\frac{i}{\hbar}E_j^{(0)}t},$$

при этом $c_j(0) = \delta_{jn}$ (в начальный момент $\Psi = \psi_n^{(0)}$), а для $c_j(t)$ получается уравнение

$$i\hbar\frac{\partial c_k(t)}{\partial t} = \sum_j W_{kj}(t)c_j(t)e^{i\omega_{kj}t},$$

где $W_{kj}(t) = \int \psi_k^{(0)*}\hat{W}\psi_j^{(0)}dV$ – матричный элемент оператора возмущения, $\omega_{kj} = \dfrac{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}}{\hbar}$. При условии, что $\hat{W} = 0$ при $t<0$ и $t>\tau$ решение этого уравнения в первом приближении

$$c_k(\tau) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^\tau W_{kj}(t)e^{i\omega_{kj}t}dt.$$

Вероятность перехода системы из состояния n в состояние k определяется как $|c_k(\tau)|^2$, т.е.

$$P_{n\to k} = |c_k(\tau)|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2}|W_{kn}(\omega_{kn})|^2,$$

где

$$W_{kn}(\omega_{kn}) = \frac{1}{2\pi}\int W_{kn}(t)e^{i\omega_{kn}t}dt$$

– коэффициент Фурье матричного элемента энергии возмущения.

Учтем, что $W = const$

$$c_k(\tau) = \frac{W_{kj}}{i\hbar}\int_0^\tau e^{i\omega_{kj}t}dt = \frac{W_{kj}}{i\hbar}\frac{e^{i\omega_{kj}\tau} - e^{i\omega_{kj}0}}{i\omega_{kj}} = \frac{W_{kj}}{i\hbar}e^{\frac{i\omega_{kj}\tau}{2}}\frac{e^{\frac{i\omega_{kj}\tau}{2}} - e^{-\frac{i\omega_{kj}\tau}{2}}}{i\omega_{kj}} =$$

$$= 2\frac{W_{kj}}{i\hbar}e^{\frac{i\omega_{kj}\tau}{2}}\frac{\sin\frac{\omega_{kj}\tau}{2}}{\omega_{kj}}.$$

Вероятность

$$P_{n\to k} = \frac{4|W_{kn}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2\frac{(E_k - E_n)\tau}{2\hbar}}{\left(\frac{E_k - E_n}{\hbar}\right)^2} = \frac{4|W_{kn}|^2}{\hbar^2}F(E_k - E_n).$$

По определению δ-функции $\delta(x) = \lim\limits_{A\to\infty}\delta(x,A) = \lim\limits_{A\to\infty}\dfrac{\sin^2 Ax}{\pi Ax^2}$, тогда $F(E_k - E_n) \to \dfrac{\pi\hbar\tau}{2}\delta(E_k - E_n)$, а следовательно,

$$P_{n\to k} = \frac{2\pi\tau}{\hbar}|W_{kn}|^2\delta(E_k - E_n).$$

Ответ: $P_{n\to k} = \dfrac{2\pi\tau}{\hbar}|W_{kn}|^2\delta(E_k - E_n)$.

3. На плоский ротатор с моментом инерции J и дипольным моментом $\vec{\mu}$ в момент времени $t=0$ накладывается слабое электрическое поле напряженностью:

а) $\vec{E}(x,t) = \vec{E}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$; **б)** $\vec{E}(x,t) = \vec{E}_0 e^{-\frac{|t|}{\tau}}$.

Вычислите в первом приближении теории возмущений вероятности возбуждений различных состояний частицы при $t\to\infty$, если при $t\to-\infty$ ротатор находился в состоянии с квантовым числом m.

Вероятность возбуждения k-го состояния:

$$W^{(1)}(n\to k) = \frac{1}{\hbar^2}|V_{kn}I|^2,$$

где n – квантовое число начального состояния, k – конечного, V_{kn} – матричные элементы оператора возмущения:

$$V_{kn} = \left(\psi_k(x); \hat{V}(x)\psi_n(x)\right),$$

интеграл I – Фурье-образ временной функции $f(t)$:

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega_{kn}t}f(t)dt,$$

где частота перехода $\omega_{kn}=\dfrac{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}{\hbar}$.

В задаче $n=1$, $\hat{V}(x)=\hat{x}$. Волновые функции и энергии частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a:

$$\psi_n^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a},\quad E_n^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2}.$$

Матричный элемент оператора возмущения:

$$V_{k1}=F_0\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi kx}{a}x\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}dx=\frac{2F_0}{a}\int_0^a x\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi kx}{a}dx=$$

$$=\frac{2F_0}{a}\int_0^a x\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi kx}{a}dx=\frac{F_0}{a}\int_0^a x\left(\cos\frac{\pi(k-1)x}{a}-\cos\frac{\pi(k+1)x}{a}\right)dx=$$

$$=\frac{F_0}{a}\int_0^a x\cos\frac{\pi(k-1)x}{a}dx-\frac{F_0}{a}\int_0^a x\cos\frac{\pi(k+1)x}{a}dx=$$

$$=\frac{F_0}{a}\frac{a^2}{\pi^2(k-1)^2}\left[\cos\frac{\pi(k-1)x}{a}+\frac{\pi(k-1)x}{a}\sin\frac{\pi(k-1)x}{a}\right]\Bigg|_0^a-$$

$$-\frac{F_0}{a}\frac{a^2}{\pi^2(k+1)^2}\left[\cos\frac{\pi(k+1)x}{a}+\frac{\pi(k+1)x}{a}\sin\frac{\pi(k+1)x}{a}\right]\Bigg|_0^a=$$

$$=\frac{aF_0}{\pi^2}\left[\frac{1}{(k-1)^2}\left((-1)^{k-1}-1\right)-\frac{1}{(n+1)^2}\left((-1)^{k+1}-1\right)\right]=$$

$$=\begin{cases}\dfrac{2aF_0}{\pi^2}\dfrac{4k}{(k^2-1)^2} & \text{при } k \text{ четном;}\\ 0 & \text{при } k \text{ нечетном.}\end{cases}$$

В случае а) $f(t)=e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega_{k1}t}e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}dt=\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega_{k1}t-\frac{t^2}{\tau^2}}dt.$$

В показателе экспоненты выделим полный квадрат

$$-\frac{t^2}{\tau^2}+i\omega t=-\frac{t^2}{\tau^2}+i\omega t+\frac{\omega^2\tau^2}{4}-\frac{\omega^2\tau^2}{4}=-\left(\frac{t}{\tau}-\frac{i\omega\tau}{2}\right)^2-\frac{\omega^2\tau^2}{4}.$$

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{\tau^2}\left(t-i\frac{\omega_{k1}\tau^2}{2}\right)^2}e^{-\frac{\omega_{k1}^2\tau^2}{4}}dt=e^{-\frac{\omega_{k1}^2\tau^2}{4}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{\tau^2}\left(t-i\frac{\omega_{k1}\tau^2}{2}\right)^2}dt=e^{-\frac{\omega_{k1}^2\tau^2}{4}}\tau\sqrt{\pi}.$$

Вероятность перехода:

$$W^{(1)}(1\to k)=\frac{1}{\hbar^2}\left|-\frac{2aF_0}{\pi^2}\frac{4k}{(k^2-1)^2}e^{-\frac{\omega_{k1}^2\tau^2}{4}}\tau\sqrt{\pi}\right|^2.$$

Для нечетных k:

$$W^{(1)}(1\to k)=\frac{64a^2\tau^2k^2F_0^2}{\hbar^2\pi^3(k^2-1)^4}e^{-\frac{\omega_{k1}^2\tau^2}{2}},$$

где частота перехода

$$\omega_{k1}=\frac{E_k^{(0)}-E_1^{(0)}}{\hbar}=\frac{\pi^2\hbar(k^2-1)}{2ma^2}.$$

В случае б) $f(t)=e^{-\frac{|t|}{\tau}}$

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega_{k1}t}e^{-\frac{|t|}{\tau}}dt=\int_{-\infty}^{0}e^{i\omega_{k1}t+\frac{t}{\tau}}dt+\int_0^{\infty}e^{i\omega_{k1}t-\frac{t}{\tau}}dt=$$

$$=\frac{e^{i\omega_{k1}t+\frac{t}{\tau}}}{i\omega_{k1}+\frac{1}{\tau}}\Bigg|_{-\infty}^0+\frac{e^{i\omega_{k1}t-\frac{t}{\tau}}}{i\omega_{k1}-\frac{1}{\tau}}\Bigg|_0^{\infty}=\frac{\tau}{i\omega_{k1}\tau+1}-\frac{\tau}{i\omega_{k1}\tau-1}=\frac{2\tau}{\omega_{k1}^2\tau^2+1}.$$

Вероятность перехода:

$$W^{(1)}(1\to k)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\frac{2aF_0}{\pi^2}\left[\frac{1}{(k-1)^2}-\frac{1}{(k+1)^2}\right]\frac{2\tau}{\omega_{k1}^2\tau^2+1}\right|^2.$$

Для нечетных k:

$$W^{(1)}(1\to k)=\frac{256a^2\tau^2k^2}{\hbar^2\pi^4(k^2-1)^4(\omega_{k1}^2\tau^2+1)^2}.$$

Общее условие применимости теории возмущений:

$$|V_{km}| << |E_k - E_m|,$$

для данной задачи при малых номерах уровней:

$$F_0 << \frac{\pi^4\hbar^2}{16ma^3}.$$

Ответ: а) $W^{(1)}(1\to k) = \dfrac{64a^2\tau^2k^2F_0^2}{\hbar^2\pi^3(k^2-1)^4}e^{-\frac{\omega_{k1}^2\tau^2}{2}}$,

б) $W^{(1)}(1\to k) = \dfrac{256a^2\tau^2k^2}{\hbar^2\pi^4(k^2-1)^4(\omega_{k1}^2\tau^2+1)^2}$.

4. На плоский ротатор с моментом инерции J и дипольным моментом $\vec{\mu}$ в момент времени $t=0$ накладывается слабое электрическое поле напряженностью:

а) $\vec{\mathrm{E}}(x,t) = \vec{\mathrm{E}}_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$**; б)** $\vec{\mathrm{E}}(x,t) = \vec{\mathrm{E}}_0 e^{-\frac{|t|}{\tau}}$**.**

Вычислите в первом приближении теории возмущений вероятности возбуждений различных состояний частицы при $t\to\infty$, если при $t\to-\infty$ ротатор находился в состоянии с квантовым числом *m*.

Вероятность возбуждения k-го состояния:

$$W^{(1)}(n\to k) = \frac{1}{\hbar^2}|V_{kn}I|^2,$$

где n – квантовое число начального состояния, k – конечного, V_{kn} – матричные элементы оператора возмущения:

$$V_{kn} = \left(\psi_k(x); \hat{V}(x)\psi_n(x)\right),$$

интеграл I – Фурье-образ временной функции $f(t)$:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{kn}t} f(t)dt,$$

где частота перехода $\omega_{kn} = \dfrac{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar}$.

Волновые функции и энергии частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a:

$$\psi_m^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \quad E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2m^2}{2J}.$$

Оператор возмущения $\hat{V}(\varphi) = -\vec{\mathrm{E}}_0\cdot\vec{\mu} = -\mathrm{E}_0\mu\cos\varphi$.

Матричный элемент оператора возмущения:

$$V_{km} = -\int_0^{2\pi}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ik\varphi}\mathrm{E}_0\mu\cos\varphi\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}d\varphi =$$

$$= -\frac{\mathrm{E}_0\mu}{4\pi}\int_0^{2\pi}e^{-ik\varphi}\left(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}\right)e^{im\varphi}d\varphi =$$

$$= -\frac{\mathrm{E}_0\mu}{4\pi}\left[\int_0^{2\pi}e^{i(m+1-k)\varphi}d\varphi + \int_0^{2\pi}e^{i(m-1-k)\varphi}d\varphi\right] = \begin{cases} -\dfrac{\mathrm{E}_0\mu}{2} & k = m\pm1; \\ 0 & k\neq m\pm1. \end{cases}$$

В случае а) $f(t) = e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$ (см. задачу 3):

$$I = e^{-\frac{\omega_{k1}^2\tau^2}{4}}\tau\sqrt{\pi}.$$

Вероятность перехода:

$$W^{(1)}(m\to m\pm1) = \frac{1}{\hbar^2}\left|-\frac{\mathrm{E}_0\mu}{2}e^{-\frac{\omega_{k1}^2\tau^2}{4}}\tau\sqrt{\pi}\right|^2.$$

Для нечетных k:

$$W^{(1)}(m\to m\pm1) = \frac{\mathrm{E}_0^2\mu^2\pi\tau^2e^{-\frac{\omega_{k1}^2\tau^2}{2}}}{4\hbar^2},$$

где частота перехода

$$\omega_{m\pm1,m} = \frac{E_{m\pm1}^{(0)} - E_m^{(0)}}{\hbar} = \frac{\hbar\left((m\pm1)^2 - m^2\right)}{2J} = \pm\frac{\hbar(2m\pm1)}{2J}.$$

В случае б) $f(t) = e^{-\frac{|t|}{\tau}}$ (см. задачу 3):

$$I = \frac{2\tau}{\omega_{k1}^2\tau^2+1}.$$

Вероятность перехода:

$$W^{(1)}(m\to m\pm1) = \frac{1}{\hbar^2}\left|-\frac{\mathrm{E}_0\mu}{2}\frac{2\tau}{\omega_{k1}^2\tau^2+1}\right|^2 = \frac{\mathrm{E}_0^2\mu^2\tau^2}{\hbar^2(\omega_{k1}^2\tau^2+1)^2}.$$

Общее условие применимости теории возмущений:

$$|V_{km}| << |E_k - E_m|,$$

для данной задачи

$$\mathrm{E}\mu << \frac{\hbar^2(2m+1)}{J}.$$

Ответ: а) $W^{(1)}(m \to m \pm 1) = \dfrac{\mathrm{E}_0^2 \mu^2 \pi \tau^2 e^{-\frac{\omega_{k1}^2 \tau^2}{2}}}{4\hbar^2}$,

б) $W^{(1)}(m \to m \pm 1) = \dfrac{\mathrm{E}_0^2 \mu^2 \tau^2}{\hbar^2 \left(\omega_{k1}^2 \tau^2 + 1\right)^2}$.

5. Частица массы m находится в основном состоянии в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a. В некоторый момент времени правая стенка ямы быстро смещается в точку $b > a$. Найдите вероятности возбуждения различных состояний частицы после остановки стенки.

Гамильтонианы системы при $t < 0$ и $t > 0$:

$$\hat{H}_0 \quad \text{и} \quad \hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

функции состояния этих гамильтонианов

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{-\frac{E_n t}{\hbar}} \quad \text{и} \quad \tilde{\psi}_n(x,t) = \tilde{\psi}_n(x) e^{-\frac{E_n t}{\hbar}}.$$

Тогда функцию начального состояния можно разложить по новым функциям в ряд:

$$\psi_n = \sum_k c_{nk} \tilde{\psi}_n e^{-\frac{E_k t}{\hbar}},$$

где $c_{nk} = \int \tilde{\psi}_k^* \psi_n dV$. Тогда вероятность перехода из начального состояния в конечное:

$$W(n \to k) = |c_{nk}|^2.$$

Применим эти рассуждения к бесконечно глубокой потенциальной яме, где функции начального состояния

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a},$$

для основного состояния

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$$

и конечного

$$\tilde{\psi}_k = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{\pi k x}{b}.$$

Коэффициент разложения в ряд:

$$c_{k1} = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{\pi k x}{b} dx = \frac{2}{\sqrt{ab}} \int_0^a \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi k x}{b} dx =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{ab}} \frac{1}{2} \int_0^a \left[\cos\left(\pi \frac{ka - b}{ab} x\right) - \cos\left(\pi \frac{ka + b}{ab} x\right) \right] dx =$$

$$= \frac{\sqrt{ab}}{\pi} \left[\frac{\sin\left(\pi \frac{ka - b}{ab} x\right)}{ka - b} - \frac{\sin\left(\pi \frac{ka + b}{ab} x\right)}{ka + b} \right]\Bigg|_0^a =$$

$$= \frac{\sqrt{ab}}{\pi} \left[\frac{\sin\left(\pi \frac{ka}{b} - \pi\right)}{ka - b} - \frac{\sin\left(\pi \frac{ka}{b} + \pi\right)}{ka + b} \right] =$$

$$= \frac{\sqrt{ab}}{\pi} \left[\frac{\sin\left(\pi \frac{ka}{b}\right) \cos \pi - \cos\left(\pi \frac{ka}{b}\right) \sin \pi}{ka - b} - \right.$$

$$\left. - \frac{\sin\left(\pi \frac{ka}{b}\right) \cos \pi + \cos\left(\pi \frac{ka}{b}\right) \sin \pi}{ka + b} \right] =$$

$$= \frac{\sqrt{ab}}{\pi} \sin\left(\pi \frac{ka}{b}\right) \left[-\frac{1}{ka - b} + \frac{1}{ka + b} \right] = \frac{2b\sqrt{ab}}{\pi\left(k^2 a^2 - b^2\right)} \sin\left(\pi \frac{ka}{b}\right).$$

$$W(1\to k)=\left|\frac{2b\sqrt{ab}}{\pi\left(k^2a^2-b^2\right)}\sin\left(\pi\frac{ka}{b}\right)\right|^2=\frac{4ab^3}{\pi^2\left(k^2a^2-b^2\right)^2}\sin^2\left(\pi\frac{ka}{b}\right).$$

При $b=2a$

$$W(1\to k)=\frac{32}{\pi^2\left(k^2-4\right)^2}\sin^2\left(\frac{\pi k}{2}\right),$$

при четных $k=2m$ $\sin\pi n=0$, при нечетных $k=2m+1$ $\sin\left(\pi m+\frac{\pi}{2}\right)=\pm1$, $W(1\to 2m+1)=\frac{32}{\pi^2\left((2m+3)(2m-1)\right)^2}$, то есть возможны переходы только на нечетные уровни.

Ответ: $W(1\to k)=\frac{4ab^3}{\pi^2\left(k^2a^2-b^2\right)^2}\sin^2\left(\pi\frac{ka}{b}\right)$.

6. На заряженный линейный гармонический осциллятор, находящийся в основном состоянии, внезапно накладывается однородное электрическое поле, направленное вдоль оси колебаний. Найдите вероятность возбуждения первого возбужденного состояния.

Гамильтонианы системы при $t<0$ и $t>0$:

$$\hat{H}_0 \quad \text{и} \quad \hat{H}_1=\hat{H}_0+\hat{V},$$

функции состояния этих гамильтонианов

$$\psi_n(x,t)=\psi_n(x)e^{-\frac{E_nt}{\hbar}} \quad \text{и} \quad \tilde{\psi}_n(x,t)=\tilde{\psi}_n(x)e^{-\frac{E_nt}{\hbar}}.$$

Тогда функцию начального состояния можно разложить по новым функциям в ряд:

$$\psi_n=\sum_k c_{nk}\tilde{\psi}_n e^{-\frac{E_kt}{\hbar}},$$

где $c_{nk}=\int\tilde{\psi}_k^*\psi_n dV$. Тогда вероятность перехода из начального состояния в конечное:

$$W(n\to k)=\left|c_{nk}\right|^2.$$

Применим эти рассуждения к бесконечно глубокой потенциальной яме, где функции начального состояния

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi nx}{a},$$

для основного состояния

$$\psi_0=\frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{x^2}{2a^2}}, \quad a=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

и первого возбужденного:

$$\psi_1=\frac{2x}{a\sqrt{2a\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{x^2}{2a^2}},$$

причем при наложении поля происходит смещение энергетических уровней и координат (см. задачу 7 темы 7):

$$\tilde{\psi}_1=\frac{2\left(x-\frac{qE}{m\omega^2}\right)}{a\sqrt{2a\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{\left(x-\frac{qE}{m\omega^2}\right)^2}{2a^2}}.$$

Коэффициент разложения в ряд:

$$c_{k1}=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{x^2}{2a^2}}\frac{2\left(x-\frac{qE}{m\omega^2}\right)}{a\sqrt{2a\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{\left(x-\frac{qE}{m\omega^2}\right)^2}{2a^2}}dx=$$

$$=\frac{2}{a^2\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(x-\frac{qE}{m\omega^2}\right)e^{-\frac{x^2+\left(x-\frac{qE}{m\omega^2}\right)^2}{2a^2}}dx.$$

Преобразуем показатель экспоненты:

$$x^2+\left(x-\frac{qE}{m\omega^2}\right)^2=2x^2-2x\frac{qE}{m\omega^2}+\frac{q^2E^2}{m^2\omega^4}=$$

$$=2\left(x^2-2x\frac{qE}{2m\omega^2}+\frac{q^2E^2}{4m^2\omega^4}\right)+\frac{q^2E^2}{2m^2\omega^4}=2\left(x-\frac{qE}{2m\omega^2}\right)^2+\frac{q^2E^2}{2m^2\omega^4},$$

тогда

$$c_{k1}=\frac{2}{a^2\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(x-\frac{qE}{m\omega^2}\right)e^{-\frac{2\left(x-\frac{qE}{2m\omega^2}\right)^2+\frac{q^2E^2}{2m^2\omega^4}}{2a^2}}dx=$$

$$= \frac{2}{a^2\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{q^2E^2}{4a^2m^2\omega^4}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(x - \frac{qE}{m\omega^2} \right) e^{-\frac{\left(x - \frac{qE}{2m\omega^2}\right)^2}{a^2}} dx =$$

$$= \left| t = x - \frac{qE}{2m\omega^2} \right| = \frac{2}{a^2\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{q^2E^2}{4a^2m^2\omega^4}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(t - \frac{qE}{2m\omega^2} \right) e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt =$$

$$= \frac{2}{a^2\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{q^2E^2}{4a^2m^2\omega^4}} \left[\int\limits_{-\infty}^{\infty} t e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt - \frac{qE}{2m\omega^2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{t^2}{a^2}} dt \right] =$$

$$= -\frac{qE}{a\sqrt{2}m\omega^2} e^{-\frac{q^2E^2}{4a^2m^2\omega^4}} .$$

Вероятность перехода

$$W(0 \to 1) = \left| -\frac{qE}{a\sqrt{2}m\omega^2} e^{-\frac{q^2E^2}{4a^2m^2\omega^4}} \right|^2 = \frac{q^2E^2}{2a^2m^2\omega^4} e^{-\frac{q^2E^2}{2a^2m^2\omega^4}} .$$

Ответ: $W(0 \to 1) = \frac{q^2E^2}{2a^2m^2\omega^4} e^{-\frac{q^2E^2}{2a^2m^2\omega^4}}$.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 11:

«Квазиклассическое приближение. Вариационный метод»

Задачи

1. Определите уровни энергии квантового линейного гармонического осциллятора в квазиклассическом приближении.

Вероятность частицы иметь координату z от z_1 до z_2

$$w=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dp_y\int_{z_1}^{z_2}dz\left|\Psi\left(x,p_y,z\right)\right|^2,$$

где $\Psi\left(x,p_y,z\right)=\int\frac{\exp\left(-\frac{ip_y y}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Psi\left(x,y,z\right)dy$ – функция состояния частицы в представлении оператора $\hat{p}_y$.

Ответ: $w=\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx\int\limits_{-\infty}^{\infty}dp_y\int\limits_{z_1}^{z_2}dz\left|\int\frac{\exp\left(-\frac{ip_y y}{\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Psi\left(x,y,z\right)dy\right|^2$.

2. Для частицы, находящейся в потенциальном поле $U=U_0|x|^{\nu}$, найдите в квазиклассическом приближении характер изменения расстояния между соседними энергетическими уровнями энергий с увеличением n в зависимости от ν.

В квазиклассическом приближении условие квантования:

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2m\left(E_n-U\right)}dx=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2m\left(E_n-U_0|x|^{\nu}\right)}dx=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

где точка поворота $x_0=\left|\frac{E_n}{U_0}\right|^{\frac{1}{\nu}}$. Найдем интеграл, сделав замену

$$|t|^{\nu}=\frac{U_0}{E_n}|x|^{\nu},\quad t_0=1,$$

$$\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}\left|\frac{E_n}{U_0}\right|^{\frac{1}{\nu}}\int_{-1}^{1}\sqrt{1-|t|^{\nu}}\,dt=E_n^{\frac{1}{\nu}+\frac{1}{2}}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}U_0^{-\frac{1}{\nu}}C(\nu)=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

$$E_n^{\frac{2+\nu}{2\nu}}=\frac{\hbar\pi}{C(\nu)\sqrt{2m}}U_0^{\frac{1}{\nu}}\left(n+\frac{1}{2}\right)=A(\nu)\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

$$E_n=\widetilde{A}(\nu)\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2\nu}{2+\nu}}.$$

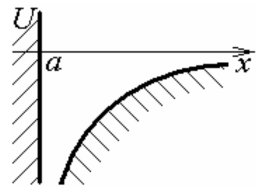
Расстояние между уровнями $\Delta n=1$:

$$\Delta E_n=\frac{\partial E_n}{\partial n}\Delta n=\widetilde{A}(\nu)\frac{2\nu}{\nu+2}\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{\nu-2}{\nu+2}}.$$

Если $\frac{\nu-2}{\nu+2}>0$, то $n^{\frac{\nu-2}{\nu+2}}>1$, тогда ΔE_n увеличивается, если $\frac{\nu-2}{\nu+2}<0$, то $n^{\frac{\nu-2}{\nu+2}}<1$, тогда ΔE_n уменьшается, при $\nu=2$ потенциальное поле совпадает с гармоническим осциллятором, для которого уровни энергии эквидистантны.

Ответ: уровни энергии разрежаются при $\nu>2$ и сгущаются при $\nu<2$, при $\nu=2$ расстояние между уровнями постоянно.

3. Используя квазиклассическое приближение, найдите верхние энергетические уровни энергии дискретного спектра частицы в поле



$$U(x)=\begin{cases}-\dfrac{\alpha}{x^2} & x>a;\\ \infty & x<a.\end{cases}$$

В квазиклассическом приближении условие квантования:

$$\frac{1}{\hbar}\int\limits_{-x_0}^{x_0}\sqrt{2m(E_n-U)}dx=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

$$\frac{1}{\hbar}\int\limits_{a}^{x_0}\sqrt{2m\left(E_n+\frac{\alpha}{x^2}\right)}dx=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

где точка поворота $x_0=\sqrt{\dfrac{\alpha}{E_n}}$. Верхние энергетические уровни дискретного спектра близки к нулю, при этом $n+\dfrac{1}{2}\approx n$. Найдем интеграл, положив в подынтегральном выражении $E_n=0$:

$$\frac{1}{\hbar}\int\limits_{a}^{x_0}\sqrt{\frac{2m\alpha}{x^2}}dx=\frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar}\int\limits_{a}^{x_0}\frac{dx}{x}=\frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar}\ln x\bigg|_a^{x_0},$$

$$\frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar}\ln\sqrt{\frac{\alpha}{a^2E_n}}=\pi n,\quad E_n=-\frac{\alpha}{a^2}e^{-\frac{\sqrt{2}\hbar\pi}{\sqrt{m\alpha}}n}.$$

Ответ: $E_n=-\dfrac{\alpha}{a^2}e^{-\frac{\sqrt{2}\hbar\pi}{\sqrt{m\alpha}}n}$.

4. Получите приближенное значение энергии основного состояния частицы массы m, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a, вариационным методом, используя пробные функции вида:

а) $\psi(x)=Ax(x-a)$, **б)** $\psi(x)=A\sin^2\dfrac{\pi x}{a}$,

в) $\psi(x)=A\left(\dfrac{a}{2}-\left|x-\dfrac{a}{2}\right|\right)$.

Энергия основного состояния равна минимуму от среднего значения оператора $\hat{H}$. Оператор Гамильтона

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Найдем среднее значение энергии

$$\overline{E}=\left(\psi;\hat{H}\psi\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx=$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\bigg|_{-\infty}^{\infty}+\frac{\hbar^2}{2m}\int\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2dx.$$

Воспользуемся полученным выражением для предложенных функций:

а) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int\limits_0^a x^2(x-a)^2dx=|A|^2\left(\int\limits_0^a x^4dx-2a\int\limits_0^a x^3dx+a^2\int\limits_0^a x^2dx\right)=$$

$$=|A|^2a^5\left(\frac{1}{5}-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}\right)=\frac{|A|^2a^5}{30}=1,$$

откуда $|A|=\sqrt{\dfrac{30}{a^5}}$.

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=A\frac{\partial}{\partial x}x(x-a)=A(2x-a)$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E}=\frac{\hbar^2|A|^2}{2m}\int\limits_0^a(2x-a)^2dx=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{30}{a^5}a^3\frac{1}{3}=\frac{5\hbar^2}{ma^2}.$$

б) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int\limits_0^a\sin^4\frac{\pi x}{a}dx=|A|^2\frac{1}{8}\int\limits_0^a\left(2-4\cos\frac{2\pi x}{a}+1+\cos\frac{4\pi x}{a}\right)dx=$$

$$=|A|^2\frac{1}{8}\left(3x-4\frac{a}{2\pi x}\sin\frac{2\pi x}{a}+\frac{a}{4\pi x}\sin\frac{4\pi x}{a}\right)\bigg|_0^a=\frac{3|A|^2a}{4}=1,$$

откуда $|A|=\sqrt{\dfrac{4}{3a}}$.

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = A\frac{\partial}{\partial x}\sin^2\frac{\pi x}{a} = A\frac{\pi}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a} = \frac{A\pi}{2a}\sin\frac{2\pi x}{a}.$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E} = \frac{\hbar^2|A|^2}{2m}\cdot\frac{\pi^2}{4a^2}\int_0^a \sin^2\frac{2\pi x}{a}dx = \frac{\hbar^2}{8m}\cdot\frac{4}{3a}\cdot\frac{\pi^2}{a^2}\cdot\frac{a}{2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{12ma^2}.$$

в) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int_0^a\left(\frac{a}{2}-\left|x-\frac{a}{2}\right|\right)^2dx = |A|^2\left(\int_0^{a/2}x^2dx + \int_{a/2}^a(a-x)^2dx\right) =$$

$$= |A|^2 a^3\frac{1}{12} = \frac{|A|^2a^3}{12} = 1,$$

откуда $$|A| = \sqrt{\frac{12}{a^3}}.$$

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = A\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{a}{2}-\left|x-\frac{a}{2}\right|\right) = A\begin{cases} A & \text{при } 0<x<a/2, \\ -A & \text{при } a/2<x<a. \end{cases}$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E} = \frac{\hbar^2|A|^2}{2m}\left(\int_0^{a/2}1^2dx + \int_{a/2}^a(-1)^2dx\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{12}{a^3}a = \frac{6\hbar^2}{ma^2}.$$

Из вариантов а) $\overline{E} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$, б) $\overline{E} = \frac{\pi^2\hbar^2}{12ma^2}$, в) $\overline{E} = \frac{6\hbar^2}{ma^2}$ минимальное значение энергии в случае б) $\overline{E} = \frac{\pi^2\hbar^2}{12ma^2}$. Это значит, что наиболее близка к волновой функции основного состояния функция $\psi(x) = \sqrt{\frac{4}{3a}}\sin^2\frac{\pi x}{a}$.

Ответ: а) $\overline{E} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$, б) $\overline{E} = \frac{\pi^2\hbar^2}{12ma^2}$, в) $\overline{E} = \frac{6\hbar^2}{ma^2}$.

5. Найдите приближенное значение энергии квантового гармонического осциллятора вариационным методом, используя пробные функции вида:

а) $\psi(x) = \frac{A}{1+\frac{x^2}{a^2}}$, **б)** $\psi(x) = \frac{A}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2}$,

где $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

Энергия основного состояния равна минимуму от среднего значения оператора $\hat{H}$. Оператор Гамильтона для гармонического осциллятора

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

Найдем среднее значение энергии

$$\overline{E} = \left(\psi;\hat{H}\psi\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\int\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx + \frac{m\omega^2}{2}\int\psi^*x^2\psi dx =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2dx + \frac{m\omega^2}{2}\int|x\psi|^2dx.$$

Воспользуемся полученным выражением для предложенных функций:

а) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2}dx = \begin{vmatrix} x = a\,\mathrm{tg}\,t \\ dx = \frac{adt}{\cos^2 t}\end{vmatrix} = |A|^2\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{adt}{\cos^2 t\left(1+\mathrm{tg}^2 t\right)^2} =$$

$$= a|A|^2\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos^2 t dt = \frac{a|A|^2}{2}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1+\cos 2t)dt = \frac{a\pi|A|^2}{2} = 1,$$

откуда $$|A| = \sqrt{\frac{2}{a\pi}}.$$

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\frac{A}{1+\frac{x^2}{a^2}}=-\frac{2Ax}{a^2\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2},$$

тогда

$$\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2=\frac{4|A|^2x^2}{a^4\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4},\quad |x\psi|^2=\frac{|A|^2x^2}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2}.$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E}=\frac{2|A|^2\hbar^2}{ma^4}\int\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}+\frac{|A|^2m\omega^2}{2}\int\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2},$$

где интегралы берутся от $-\infty$ до ∞:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}=\left|\begin{matrix}x=a\,\mathrm{tg}\,t\\ dx=\frac{adt}{\cos^2 t}\end{matrix}\right|=a^3\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathrm{tg}^2\,tdt}{\cos^2 t\left(1+\mathrm{tg}^2\,t\right)^4}=$$

$$=a^3\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sin^2 t\cos^4 tdt=\frac{a^3}{8}\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1-\cos 2t)(1+\cos 2t)^2dt=$$

$$=\frac{a^3}{8}\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\left(1+\cos 2t-\cos^2 2t-\cos^3 2t\right)dt=\frac{a^3}{8}\left(\pi+0-\frac{\pi}{2}-0\right)=\frac{\pi a^3}{16},$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2}=\left|\begin{matrix}x=a\,\mathrm{tg}\,t\\ dx=\frac{adt}{\cos^2 t}\end{matrix}\right|=a^3\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathrm{tg}^2\,tdt}{\cos^2 t\left(1+\mathrm{tg}^2\,t\right)^2}=$$

$$=a^3\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sin^2 t\cos^2 tdt=\frac{a^3}{4}\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sin^2 2tdt=\frac{a^3}{8}\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1-\cos 4t)dt=\frac{\pi a^3}{8}.$$

$$\overline{E}=\frac{2|A|^2\hbar^2}{ma^4}\frac{\pi a^3}{16}+\frac{|A|^2m\omega^2}{2}\frac{\pi a^3}{8}=\frac{|A|^2\pi a^3}{16}\left(2\frac{\hbar^2}{ma^4}+m\omega^2\right)$$

Учтем, что $a=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, а $|A|=\sqrt{\frac{2}{a\pi}}$, тогда

$$\overline{E}=\frac{\hbar}{8m\omega}\left(2\frac{\hbar^2m^2\omega^2}{m\hbar^2}+m\omega^2\right)=\frac{3}{8}\hbar\omega.$$

б) Пронормируем функцию

$$|A|^2\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}dx=\left|\begin{matrix}x=a\,\mathrm{tg}\,t\\ dx=\frac{adt}{\cos^2 t}\end{matrix}\right|=a|A|^2\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{dt}{\cos^2 t\left(1+\mathrm{tg}^2\,t\right)^4}=$$

$$=a|A|^2\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\cos^6 tdt=\frac{a|A|^2}{8}\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1+\cos 2t)^3dt=$$

$$=\frac{a|A|^2}{8}\int\limits_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\left(1+3\cos 2t+3\cos^2 2t+\cos^3 2t\right)dt=\frac{5\pi a|A|^2}{16}=1,$$

откуда $$|A|=\sqrt{\frac{16}{5\pi a}}.$$

Производная функции:

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\frac{A}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^2}=-\frac{4x}{a^2}\cdot\frac{A}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^3},$$

тогда

$$\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2=\frac{16|A|^2x^2}{a^4\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^6},\quad |x\psi|^2=\frac{16|A|^2x^2}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}.$$

Среднее значение энергии

$$\overline{E}=\frac{8|A|^2\hbar^2}{ma^4}\int\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^6}+8|A|^2m\omega^2\int\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4},$$

где интегралы берутся от $-\infty$ до ∞:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^6}=\left|\begin{array}{l}x=a\,\mathrm{tg}\,t\\ dx=\dfrac{adt}{\cos^2 t}\end{array}\right|=a^3\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathrm{tg}^2\,tdt}{\cos^2 t\left(1+\mathrm{tg}^2\,t\right)^6}=$$

$$=a^3\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sin^2 t\cos^8 tdt=\frac{a^3}{32}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}(1-\cos 2t)(1+\cos 2t)^4dt=\frac{5\pi a^3}{128}.$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2dx}{\left(1+\frac{x^2}{a^2}\right)^4}=\frac{\pi a^3}{16}.$$

$$\overline{E}=\frac{8|A|^2\hbar^2}{ma^4}\frac{5\pi a^3}{128}+8|A|^2m\omega^2\frac{\pi a^3}{16}=\frac{|A|^2\pi a^3}{16}\left(\frac{5\hbar^2}{ma^4}+8m\omega^2\right).$$

Учтем, что $a=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, а $|A|=\sqrt{\frac{16}{5\pi a}}$, тогда

$$\overline{E}=\frac{a^2}{5}\left(\frac{5\hbar^2}{ma^4}+8m\omega^2\right)=\frac{\hbar}{5m\omega}\left(\frac{5\hbar^2m^2\omega^2}{m\hbar^2}+8m\omega^2\right)=\frac{13}{5}\hbar\omega.$$

Из вариантов а) $\overline{E}=\frac{3}{8}\hbar\omega$, б) $\overline{E}=\frac{13}{5}\hbar\omega$, минимальное значение энергии в случае а) $\overline{E}=\frac{3}{8}\hbar\omega$. Это значит, что наиболее близка к волновой функции основного состояния функция $\psi(x)=\frac{A}{1+\frac{x^2}{a^2}}$.

Ответ: а) $\overline{E}=\frac{3}{8}\hbar\omega$, б) $\overline{E}=\frac{13}{5}\hbar\omega$.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 12:

«Атом водорода в магнитном поле. Спин»

Задачи

120. Определите уровни энергии и функции состояния свободного электрона в магнитном поле с индукцией $\vec{B}$, направленной по оси Oz.

Выберем координаты так, чтобы векторный потенциал магнитного поля имел компоненты

$$A_x = -By, \quad A_y = 0, \quad A_z = 0.$$

Уравнение Шредингера

$$\frac{\left(\vec{p} - e\vec{A}\right)^2}{2m}\psi = E\psi$$

приведем к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{i\hbar}{m}eBy\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{e^2}{2m}B^2y^2\psi = E\psi.$$

Так как коэффициенты его не зависят от x и z, то решение можно искать в виде

$$\psi = e^{iax}e^{ibz}f(y),$$

после подстановки и сокращения на экспоненты получим уравнение на $f(y)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f}{\partial y_1^2} + \frac{m\omega_0^2}{2}y_1^2 f = \varepsilon f,$$

где вводим обозначения $\omega_0 = \dfrac{eB}{m}$, $y_1 = y + \dfrac{\hbar a}{eB}$, $\varepsilon = E - \dfrac{\hbar^2 b^2}{2m}$.

Уравнение на $f(y)$ аналогично уравнению для квантового гармонического осциллятора. Его решение

$$f(y_1) = Ce^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi),$$

где $H_n(\xi)$ – полиномы Чебышева-Эрмита, $\xi = \sqrt{\dfrac{m\omega_0}{\hbar}}y_1$, собственные значения этого уравнения $\varepsilon = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$. Функция электрона в магнитном поле

$$\psi_{nab} = C_n e^{iax}e^{ibz}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi),$$

$$E_{nb} = \frac{\hbar^2 b^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0.$$

Электрон свободно движется в магнитном поле вдоль его индукции, в плоскости, перпендикулярной вектору магнитной индукции, спектр энергий дискретен.

Ответ: $E_{nb} = \dfrac{\hbar^2 b^2}{2m} + \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$, где $\omega_0 = \dfrac{eB}{m}$,

$\psi_{nab} = C_n e^{iax}e^{ibz}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi)$, при $\xi = \sqrt{\dfrac{m\omega_0}{\hbar}}\left(y + \dfrac{\hbar a}{eB}\right)$.

123. Составьте вектор плотности тока для частицы в электромагнитном поле.

Запишем временное уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\left(\vec{p} - e\vec{A}\right)^2}{2m}\psi + e\Phi\psi,$$

где $\vec{A}$ и Φ – скалярный и векторный потенциал электромагнитного поля. Раскроем скобки

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{i\hbar e}{m}\vec{A}\cdot\nabla\psi + \frac{i\hbar e}{2m}\operatorname{div}\vec{A}\psi + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2\psi + e\Phi\psi.$$

Сопряженное ему уравнение:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* - \frac{i\hbar e}{m}\vec{A}\cdot\nabla\psi^* - \frac{i\hbar e}{2m}\operatorname{div}\vec{A}\psi^* + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2\psi^* + e\Phi\psi^*.$$

Составим $\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \psi^* \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \cdot \psi$. Домножим первое уравнение на ψ^*, второе – на $-\psi$ и сложим, разделим на $i\hbar$.

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \cdot \Delta\psi - \Delta\psi^* \cdot \psi\right) + \frac{e}{m}\left(\psi^* \vec{A} \cdot \nabla\psi + \nabla\psi^* \cdot \vec{A}\psi + \psi^*\psi div\vec{A}\right).$$

так как

$$\mathrm{div}\left(\psi^* \cdot \nabla\psi - \nabla\psi^* \cdot \psi\right) = \psi^* \cdot \Delta\psi - \Delta\psi^* \cdot \psi ,$$

$$\mathrm{div}\left(\vec{A}\psi^*\psi\right) = \psi^* \vec{A} \cdot \nabla\psi + \nabla\psi^* \cdot \vec{A}\psi + \mathrm{div}\,\vec{A} \cdot \psi^*\psi ,$$

то правую часть равенства можно записать как

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -div\left(\frac{i\hbar}{2m}\left(\nabla\psi^* \cdot \psi - \psi^* \cdot \nabla\psi\right) - \frac{e}{m}\vec{A}|\psi|^2\right).$$

Сравнивая с уравнением непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \mathrm{div}\,\vec{j} = 0 ,$$

делаем вывод, что $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\nabla\psi^* \cdot \psi - \psi^* \cdot \nabla\psi\right) - \frac{e}{m}\vec{A}|\psi|^2$ – плотность тока.

Ответ: $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\nabla\psi^* \cdot \psi - \psi^* \cdot \nabla\psi\right) - \frac{e}{m}\vec{A}|\psi|^2$.

121. Вычислите магнитный момент атома водорода μ_L, обусловленный пространственным движением электрона.

Волновая функция электрона в атоме водорода

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi).$$

Плотность тока

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar e}{2m_e}\left(\psi^* \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)$$

в сферических координатах имеет проекции

$$j_r = -\frac{i\hbar e}{2m_e}\left(\psi^*_{nlm}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{nlm} - \psi_{nlm}\frac{\partial}{\partial r}\psi^*_{nlm}\right),$$

$$j_\theta = -\frac{i\hbar e}{2m_e}\left(\psi^*_{nlm}\frac{\partial}{r\partial\theta}\psi_{nlm} - \psi_{nlm}\frac{\partial}{r\partial\theta}\psi^*_{nlm}\right),$$

$$j_\varphi = -\frac{i\hbar e}{2m_e}\left(\psi^*_{nlm}\frac{\partial}{r\sin\theta\partial\varphi}\psi_{nlm} - \psi_{nlm}\frac{\partial}{r\sin\theta\partial\varphi}\psi^*_{nlm}\right).$$

Их средние значения:

$$\langle j_r \rangle = 0, \quad \langle j_\theta \rangle = 0, \quad \langle j_\varphi \rangle = -\frac{e\hbar}{m_e r\sin\theta}|\psi_{nlm}|^2 m .$$

Равенство нулю первых двух средних значений – следствие действительности той части волновой функции, которая зависит от r и θ. При вычислении последней проекции был использован явный вид зависимости от угла φ волновой функции.

Ток распределен по поверхности шара. Представим полный момент в виде суммы моментов от кольцевых трубок токов радиусов $r\sin\theta$ и площадью ds. Каждая трубка эквивалентна кольцевому току $dI = \langle j_\varphi \rangle ds$, обтекающему круг площади $S = \pi r^2 \sin^2\theta$, тогда этот ток создает магнитный момент

$$d\mu_L = \frac{1}{c}SdI = -\frac{\pi e\hbar r\sin\theta}{cm_e}|\psi_{nlm}|^2 mds .$$

Полный магнитный момент

$$\mu_L = -\frac{e\hbar m}{2m_e c}\int|\psi_{nlm}|^2 dV = -\frac{e\hbar m}{2m_e c} = g_L L_z ,$$

где $L_z = \hbar m$ – проекция момента импульса на ось Oz, а множитель

$$g_L = -\frac{e}{2m_e c}.$$

Ответ: $\mu_L = -\frac{e\hbar m}{2m_e c} = g_L L_z$.

122. Оцените минимальный размер электрона на основании наличия у него спина.

Будем считать электрон однородным шаром радиуса r. Момент инерции шара $I = \frac{2}{5}mr^2$, следовательно, момент импульса L равен

$$L = I\omega = \frac{2}{5}mr^2\omega = \frac{2}{5}mr\,\mathrm{v}.$$

Собственный момент электрона (спин)

$$J = \frac{\hbar}{2}.$$

Из равенства собственного и механического моментов:

$$\frac{2}{5} mr\,\mathrm{v} = \frac{\hbar}{2}, \quad r = \frac{5\hbar}{4m\,\mathrm{v}},$$

где v – максимальная скорость поверхности электрона не может превышать скорость света $\mathrm{v} < c$. Для предельного случая возьмем максимальное значение скорости $\mathrm{v} = c$

$$r = \frac{5\hbar}{4mc} = \frac{5 \cdot 1{,}1 \cdot 10^{-34}}{4 \cdot 3 \cdot 10^{8} \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31}} = 5 \cdot 10^{-13} \text{ м.}$$

Заметим, что радиус $r = 10^{-11}$ см принято называть классическим радиусом электрона.

Ответ: $r = 5 \cdot 10^{-13}$ м.

111. Найдите собственные значения и собственные функции операторов проекций спина $\hat{S}_x$ и $\hat{S}_y$, выраженных через матрицы Паули.

Операторы спина связаны с матрицами Паули

$$\hat{S}_{x,y,z} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_{x,y,z},$$

где матрицы Паули

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

Будем искать собственные функции этих операторов в виде столбца

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

где ψ_1 и ψ_2 – произвольные функции.

$$\hat{\sigma}_x \Psi = \sigma_x \Psi, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \sigma_x \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \psi_2 = \sigma_x \psi_1 \\ \psi_1 = \sigma_x \psi_2 \end{cases},$$

откуда $\sigma_x^2 = 1$, $\sigma_x = \pm 1$.

При $\sigma_x = 1$ $\psi_1 = \psi_2$, тогда

$$\Psi_{1x} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Пронормируем функцию

$$1 = \Psi_{1x}^* \Psi_{1x} = |a|^2 (1 \quad 1) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |a|^2 (1+1) = 2|a|^2, \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

С учетом нормировки

$$\Psi_{1x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

При $\sigma_x = -1$ $\psi_1 = -i\psi_2$, тогда с учетом нормировки

$$\Psi_{2x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Аналогично для $\hat{\sigma}_z$: при $\sigma_y = 1$ $\psi_1 = i\psi_2$, с учетом нормировки

$$\Psi_{1y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix},$$

при $\sigma_y = -1$ $\psi_1 = -i\psi_2$, с учетом нормировки

$$\Psi_{2y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Те же функции соответствуют и операторам спина $\hat{S}_x$ и $\hat{S}_y$, но с собственными значениями:

при $\quad S_x = \frac{\hbar}{2} \quad \Psi_{1x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad S_x = -\frac{\hbar}{2} \quad \Psi_{2x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$

при $\quad S_y = \frac{\hbar}{2} \quad \Psi_{1y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad S_y = -\frac{\hbar}{2} \quad \Psi_{2y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$

Ответ: $\quad S_{x,y} = \pm \frac{\hbar}{2}, \quad \Psi_{1x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{2x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$

$\Psi_{1y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \ \Psi_{2y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$

112. Найдите $\hat{\sigma}_x^n$, $\hat{\sigma}_y^n$, $\hat{\sigma}_z^n$, где $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ – матрицы Паули.

Покажем, что $\hat{\sigma}_x^n = \begin{cases} \hat{\sigma}_x & n = 2k+1; \\ \hat{I} & n = 2k. \end{cases}$

Воспользуемся методом математической индукции.

$$\hat{\sigma}_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I},$$

$$\hat{\sigma}_x^3 = \hat{\sigma}_x^2\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_x .$$

Пусть справедливо: $\hat{\sigma}_x^n = \hat{I}$, тогда

$$\hat{\sigma}_x^{n+1} = \hat{\sigma}_x^n\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_x ,$$

$$\hat{\sigma}_x^{n+2} = \hat{\sigma}_x^{n+1}\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I}, \text{ ч.т.д.}$$

Пусть справедливо: $\hat{\sigma}_x^n = \hat{\sigma}_x$, тогда

$$\hat{\sigma}_x^{n+1} = \hat{\sigma}_x^n\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I},$$

$$\hat{\sigma}_x^{n+2} = \hat{\sigma}_x^{n+1}\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_x, \text{ч.т.д.}$$

Аналогично $\hat{\sigma}_y^n = \begin{cases} \hat{\sigma}_y & n = 2k+1; \\ \hat{I} & n = 2k. \end{cases}$ $\hat{\sigma}_z^n = \begin{cases} \hat{\sigma}_z & n = 2k+1; \\ \hat{I} & n = 2k. \end{cases}$

Ответ: $\hat{\sigma}_x^n = \begin{cases} \hat{\sigma}_x & n = 2k+1; \\ \hat{I} & n = 2k. \end{cases}$ $\hat{\sigma}_y^n = \begin{cases} \hat{\sigma}_y & n = 2k+1; \\ \hat{I} & n = 2k. \end{cases}$

$\hat{\sigma}_z^n = \begin{cases} \hat{\sigma}_z & n = 2k+1; \\ \hat{I} & n = 2k. \end{cases}$

113. Рассматривая матрицы Паули как компоненты векторного оператора $\hat{\vec{\sigma}}$, найдите скалярное $(\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}})$, векторное $[\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}]$ и смешанное произведение $(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}})$ матриц-операторов.

По определению скалярного произведения

$$(\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}) = \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_z =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 3\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 3\hat{I}$$

,

где $\hat{I}$ – двумерная единичная матрица.

По определению векторного произведения

$$[\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}]_x = \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = 2i\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 2i\hat{\sigma}_x ;$$

$$[\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}]_y = \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 2i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = 2i\hat{\sigma}_y ;$$

$$[\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}]_z = \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = 2i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 2i\hat{\sigma}_z ;$$

$$[\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}] = 2i(\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_z) = 2i\hat{\vec{\sigma}} .$$

По определению смешанного произведения

$$(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}) = ([\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}];\hat{\vec{\sigma}}) = 2i(\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}) = 2i \cdot 3\hat{I} = 6i\hat{I} .$$

Ответ: $(\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}) = 3\hat{I}$, $[\hat{\vec{\sigma}};\hat{\vec{\sigma}}] = 2i\hat{\vec{\sigma}}$, $(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{\sigma}}) = 6i\hat{I}$.

114. Найдите коммутаторы операторов $\hat{\sigma}_x$ и $\hat{\sigma}_y$.

Коммутатор матриц Паули

$$[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_y] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =$$

$$=\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}=2i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=2i\hat{\sigma}_z .$$

Ответ: $\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_y\right]=2i\hat{\sigma}_z$.

115. Найдите операторы $\hat{\sigma}_+=\dfrac{\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y}{2}$ и $\hat{\sigma}_-=\dfrac{\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y}{2}$, коммутатор операторов $\hat{\sigma}_+^2$ и $\hat{\sigma}_-^2$, коммутатор этих операторов с операторами $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$.

Найдем коммутатор операторов:

$$\left[\hat{\sigma}_+;\hat{\sigma}_-\right]=\left[\frac{\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y}{2};\frac{\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y}{2}\right]=\frac{1}{4}\left(\left[\hat{\sigma}_x;\left(\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y\right)\right]+i\left[\hat{\sigma}_y;\left(\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y\right)\right]\right)=$$

$$=\frac{1}{4}\left(\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_x\right]-i\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_y\right]+i\left[\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_x\right]+\left[\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_y\right]\right)=\frac{i}{4}\left(\left[\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_x\right]-\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_y\right]\right)=$$

$$=-\frac{i}{2}\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_y\right]=-\frac{i}{2}\cdot 2i\hat{\sigma}_z=\hat{\sigma}_z .$$

$$\left[\hat{\sigma}_+;\hat{\sigma}_x\right]=\left[\frac{\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y}{2};\hat{\sigma}_x\right]=\frac{1}{2}\left(\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_x\right]+i\left[\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_x\right]\right)=-\frac{i}{2}\cdot 2i\hat{\sigma}_z=\hat{\sigma}_z$$

.

$$\left[\hat{\sigma}_+;\hat{\sigma}_y\right]=\left[\frac{\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y}{2};\hat{\sigma}_y\right]=\frac{1}{2}\left(\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_y\right]+i\left[\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_y\right]\right)=\frac{1}{2}\cdot 2i\hat{\sigma}_z=i\hat{\sigma}_z$$

.

$$\left[\hat{\sigma}_+;\hat{\sigma}_z\right]=\left[\frac{\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y}{2};\hat{\sigma}_z\right]=\frac{1}{2}\left(\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_z\right]+i\left[\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_z\right]\right)=$$

$$=\frac{1}{2}\cdot\left(-2i\hat{\sigma}_y+i2i\hat{\sigma}_x\right)=-\hat{\sigma}_+ .$$

Аналогично

$$\left[\hat{\sigma}_-;\hat{\sigma}_x\right]=\left[\frac{\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y}{2};\hat{\sigma}_x\right]=\frac{1}{2}\left(\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_x\right]-i\left[\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_x\right]\right)=\frac{i}{2}\cdot 2i\hat{\sigma}_z=-\hat{\sigma}_z$$

.

$$\left[\hat{\sigma}_-;\hat{\sigma}_y\right]=\left[\frac{\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y}{2};\hat{\sigma}_y\right]=\frac{1}{2}\left(\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_y\right]-i\left[\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_y\right]\right)=-\frac{1}{2}\cdot 2i\hat{\sigma}_z=-i\hat{\sigma}_z$$

.

$$\left[\hat{\sigma}_-;\hat{\sigma}_z\right]=\left[\frac{\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y}{2};\hat{\sigma}_z\right]=\frac{1}{2}\left(\left[\hat{\sigma}_x;\hat{\sigma}_z\right]-i\left[\hat{\sigma}_y;\hat{\sigma}_z\right]\right)=$$

$$=\frac{1}{2}\cdot\left(-2i\hat{\sigma}_y-i2i\hat{\sigma}_x\right)=\hat{\sigma}_- .$$

$$\hat{\sigma}_+^2=\frac{\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y}{2}\cdot\frac{\hat{\sigma}_x+i\hat{\sigma}_y}{2}=\frac{1}{4}\left(\hat{\sigma}_x^2+i\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+i\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x-\hat{\sigma}_y^2\right)=$$

$$=\frac{1}{4}\left(\hat{\sigma}_x^2+i\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+i\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x-\hat{\sigma}_y^2\right).$$

Найдем произведение матриц:

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}=i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=i\hat{\sigma}_z .$$

$$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}=-i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=-i\hat{\sigma}_z .$$

$$\hat{\sigma}_+^2=\frac{1}{4}\left(\hat{I}-\hat{\sigma}_z+\hat{\sigma}_z-\hat{I}\right)=0 .$$

$$\hat{\sigma}_-^2=\frac{\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y}{2}\cdot\frac{\hat{\sigma}_x-i\hat{\sigma}_y}{2}=\frac{1}{4}\left(\hat{\sigma}_x^2-i\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-i\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x-\hat{\sigma}_y^2\right)=$$

$$=\frac{1}{4}\left(\hat{\sigma}_x^2-i\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-i\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x-\hat{\sigma}_y^2\right)=\frac{1}{4}\left(\hat{I}+\hat{\sigma}_z-\hat{\sigma}_z-\hat{I}\right)=0 .$$

Ответ: $\left[\hat{\sigma}_+;\hat{\sigma}_-\right]=\hat{\sigma}_z$, $\left[\hat{\sigma}_+;\hat{\sigma}_x\right]=\hat{\sigma}_z$, $\left[\hat{\sigma}_+;\hat{\sigma}_y\right]=i\hat{\sigma}_z$, $\left[\hat{\sigma}_+;\hat{\sigma}_z\right]=-\hat{\sigma}_+$, $\left[\hat{\sigma}_-;\hat{\sigma}_x\right]=-\hat{\sigma}_z$, $\left[\hat{\sigma}_-;\hat{\sigma}_y\right]=-i\hat{\sigma}_z$, $\left[\hat{\sigma}_-;\hat{\sigma}_z\right]=\hat{\sigma}_-$,

$\hat{\sigma}_+^2 = 0$,
$\hat{\sigma}_-^2 = 0$.

116. Для операторов $\hat{\sigma}_+ = \dfrac{\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y}{2}$ и $\hat{\sigma}_- = \dfrac{\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y}{2}$ покажите, что для любых целых n справедливо $\left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right)^n = \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-$.

Воспользуемся методом математической индукции. Для $n=1$ $\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- \equiv \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-$ – тождество.

Вычислим

$$\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- = \frac{1}{4}\left(\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y\right)\left(\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y\right) = \frac{1}{4}\left(\hat{\sigma}_x^2 + i\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y^2\right) =$$
$$= \frac{1}{4}\left(2\hat{I} - i2i\hat{\sigma}_z\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{I} + \hat{\sigma}_z\right).$$

Проверим для $n=2$

$$\left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right)^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{I} + \hat{\sigma}_z\right)\frac{1}{2}\left(\hat{I} + \hat{\sigma}_z\right) = \frac{1}{4}\left(\hat{I}^2 + \hat{I}\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z\hat{I} + \hat{\sigma}_z^2\right) =$$
$$= \frac{1}{4}\left(2\hat{I} + 2\hat{\sigma}_z\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{I} + \hat{\sigma}_z\right) = \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-.$$

Пусть для n справедливо $\left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right)^n = \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-$, покажем, что это верно для $n+1$:

$$\left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right)^{n+1} = \left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right)^n\left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right) = \left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right)\left(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-\right) = \hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-,$$

это верно для любых n, что требовалось доказать.

117. Найдите собственные значения скалярного произведения $\left(\hat{\vec{\sigma}}_1;\hat{\vec{\sigma}}_2\right)$ двух электронов, пользуясь тем, что $\hat{\vec{\sigma}}_1$ и $\hat{\vec{\sigma}}_2$ перестановочны.

Так как $\hat{\vec{\sigma}}_1$ и $\hat{\vec{\sigma}}_2$ перестановочны, то

$$\left(\hat{\vec{\sigma}}_1 + \hat{\vec{\sigma}}_2\right)^2 = \hat{\sigma}_1^2 + \hat{\sigma}_2^2 + 2\hat{\vec{\sigma}}_1\hat{\vec{\sigma}}_2.$$

Сумма двух моментов изменяется от их суммы до разности, так что суммарный спин принимает значения 1 и 0. Так как $\hat{\vec{\sigma}}$ – удвоенный оператор спинового момента, то соответствующие максимальные проекции вдвое больше. Поэтому, когда спины складываются как параллельные векторы, собственное значение квадрата $\left(\hat{\vec{\sigma}}_1 + \hat{\vec{\sigma}}_2\right)^2$ в четыре раза больше, чем соответствующего квадрата момента, т.е. равно $4\cdot 1\cdot 2 = 8$, когда же спины антипараллельны, оно равно 0.

Итак, собственное значение $\left(\hat{\vec{\sigma}}_1;\hat{\vec{\sigma}}_2\right)$ при параллельных спинах равно $\dfrac{8-6}{2} = 1$ и при антипараллельных спинах $\dfrac{0-6}{2} = -3$.

Ответ: 1, –3.

118. Докажите справедливость равенства:
а) $\sin\left(\hat{\sigma}_x\psi\right) = \hat{\sigma}_x\sin\psi$, **б)** $\cos\left(\hat{\sigma}_z\psi\right) = \cos\psi$.

а) Разложим в ряд

$$\sin\hat{\sigma}_x\psi = \left(\hat{\sigma}_x\psi + \frac{\left(\hat{\sigma}_x\psi\right)^3}{3!} + \frac{\left(\hat{\sigma}_x\psi\right)^5}{5!} + \ldots\right) =$$
$$= \left(\hat{\sigma}_x\psi + \frac{\hat{\sigma}_x^3\psi^3}{3!} + \frac{\hat{\sigma}_x^5\psi^5}{5!} + \ldots\right) = \hat{\sigma}_x\sin\psi, \text{ ч.т.д.}$$

б) Аналогично

$$\cos\hat{\sigma}_z\psi = \left(1 - \frac{\left(\hat{\sigma}_x\psi\right)^2}{2!} + \frac{\left(\hat{\sigma}_x\psi\right)^4}{4!} - \ldots\right) = \cos\psi, \text{ ч.т.д.}$$

119. Докажите справедливость равенства $e^{i\hat{\sigma}_z\psi} = \cos\psi + i\hat{\sigma}_z\sin\psi$.

Аналогично решению задачи 85 разложением в ряд экспоненты.

$$e^{i\hat{\sigma}_z\psi} = 1 + \frac{i\hat{\sigma}_z\psi}{1!} + \frac{\left(i\hat{\sigma}_z\psi\right)^2}{2!} + \frac{\left(i\hat{\sigma}_z\psi\right)^3}{3!} + \frac{\left(i\hat{\sigma}_z\psi\right)^4}{4!} + \frac{\left(i\hat{\sigma}_z\psi\right)^5}{5!} + \ldots =$$
$$= 1 + i\frac{\hat{\sigma}_z\psi}{1!} - \frac{\left(\hat{\sigma}_z\psi\right)^2}{2!} - i\frac{\left(\hat{\sigma}_z\psi\right)^3}{3!} + \frac{\left(\hat{\sigma}_z\psi\right)^4}{4!} + i\frac{\left(\hat{\sigma}_z\psi\right)^5}{5!} + \ldots =$$
$$= 1 - \frac{\left(\hat{\sigma}_z\psi\right)^2}{2!} + \frac{\left(\hat{\sigma}_z\psi\right)^4}{4!} + \ldots + i\left(\frac{\hat{\sigma}_z\psi}{1!} - \frac{\left(\hat{\sigma}_z\psi\right)^3}{3!} + \frac{\left(\hat{\sigma}_z\psi\right)^5}{5!} + \ldots\right).$$

Так как

$$\sin\hat{\sigma}_z\psi=\left(\hat{\sigma}_z\psi+\frac{(\hat{\sigma}_z\psi)^3}{3!}+\frac{(\hat{\sigma}_z\psi)^5}{5!}+\ldots\right)=\hat{\sigma}_z\sin\psi\,,$$

$$\cos\hat{\sigma}_z\psi=\left(1-\frac{(\hat{\sigma}_x\psi)^2}{2!}+\frac{(\hat{\sigma}_x\psi)^4}{4!}-\ldots\right)=\hat{I}\cos\psi\,,$$

то $e^{i\hat{\sigma}_z\psi}=\cos\psi+i\hat{\sigma}_z\sin\psi$, ч. т. д.

124. Проверьте, являются ли матрицы Дирака эрмитовыми.

Матрицы Дирака связаны с матрицами Паули соотношением:

$$\hat{\gamma}_k=\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix},\quad k=1,2,3;\quad \hat{\gamma}_4=\begin{pmatrix}\hat{I} & 0\\ 0 & -\hat{I}\end{pmatrix},$$

где матрицы Паули

$$\hat{\sigma}_1=\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \hat{\sigma}_2=\hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},$$

$$\hat{\sigma}_3=\hat{\sigma}_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\hat{I}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\hat{\gamma}_1=\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&-i&0\\0&i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix},\quad \hat{\gamma}_2=\begin{pmatrix}0&0&0&-1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\-1&0&0&0\end{pmatrix},$$

$$\hat{\gamma}_3=\begin{pmatrix}0&0&-i&0\\0&0&0&i\\i&0&0&0\\0&-i&0&0\end{pmatrix},\quad \hat{\gamma}_4=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}.$$

Условие эрмитовости:

$$(\psi;\hat{\gamma}_1\varphi)=(\hat{\gamma}_1\psi;\varphi),$$

где $\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}$, $\varphi=\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\\ \varphi_3\\ \varphi_4\end{pmatrix}$,

первый множитель в скалярном произведении – транспонированный и комплексно сопряженный вектор.

$$\hat{\gamma}_1\varphi=\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&-i&0\\0&i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\\ \varphi_3\\ \varphi_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-i\varphi_4\\ -i\varphi_3\\ i\varphi_2\\ i\varphi_1\end{pmatrix},$$

$$(\psi;\gamma_1\varphi)=\begin{pmatrix}\psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \psi_4^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-i\varphi_4\\ -i\varphi_3\\ i\varphi_2\\ i\varphi_1\end{pmatrix}=$$

$$=-i\psi_1^*\varphi_4-i\psi_2^*\varphi_3+i\psi_3^*\varphi_2+i\psi_4^*\varphi_1\,. \qquad (1)$$

Теперь найдем

$$\hat{\gamma}_1\psi=\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&-i&0\\0&i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-i\psi_4\\ -i\psi_3\\ i\psi_2\\ i\psi_1\end{pmatrix},$$

транспонируем и возьмем комплексное сопряжение:

$$(\hat{\gamma}_1\psi)^{T*}=\begin{pmatrix}i\psi_4^* & i\psi_3^* & -i\psi_2^* & -i\psi_1^*\end{pmatrix},$$

найдем скалярное произведение:

$$(\hat{\gamma}_1\psi;\varphi)=\begin{pmatrix}i\psi_4^* & i\psi_3^* & -i\psi_2^* & -i\psi_1^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\\ \varphi_3\\ \varphi_4\end{pmatrix}=$$

$$=i\psi_4^*\varphi_1+i\psi_3^*\varphi_2-i\psi_2^*\varphi_3-i\psi_1^*\varphi_4\,,$$

что совпадает с (1).

Аналогично можно доказать эрмитовость остальных матриц Дирака:

$$\left(\psi;\hat{\gamma}_2\varphi\right)=\left(\hat{\gamma}_2\psi;\varphi\right)=-\psi_4^*\varphi_1+\psi_3^*\varphi_2+\psi_2^*\varphi_3-\psi_1^*\varphi_4\,,$$
$$\left(\psi;\hat{\gamma}_3\varphi\right)=\left(\hat{\gamma}_3\psi;\varphi\right)=-\psi_4^*\varphi_1+\psi_3^*\varphi_2+\psi_2^*\varphi_3-\psi_1^*\varphi_4\,,$$
$$\left(\psi;\hat{\gamma}_4\varphi\right)=\left(\hat{\gamma}_4\psi;\varphi\right)=-\psi_4^*\varphi_1+\psi_3^*\varphi_2+\psi_2^*\varphi_3-\psi_1^*\varphi_4\,.$$

125. Найдите произведения матриц Дирака:

$$\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_4,\quad \hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_4,\quad \hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_4,\quad \hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_2,\quad \hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_3,\quad \hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3\,.$$

Матрицы Дирака:

$$\hat{\gamma}_k=\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix},\quad k=1,2,3;\quad \hat{\gamma}_4=\begin{pmatrix}\hat{I} & 0\\ 0 & -\hat{I}\end{pmatrix}.$$

Найдем для $k=1,2,3$:

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_4=\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{I} & 0\\ 0 & -\hat{I}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}=\hat{\gamma}_k\,.$$

Найдем для $k,n=1,2,3$:

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_n=\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_n\\ i\hat{\sigma}_n & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n & 0\\ 0 & \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n\end{pmatrix}.$$

Учитывая, что $\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n=i\hat{\sigma}_m$ для $(knm)=(123)=(231)=(312)$, и $\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n=-i\hat{\sigma}_m$ для $(knm)=(321)=(213)=(132)$,

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_n=\begin{pmatrix}i\hat{\sigma}_m & 0\\ 0 & i\hat{\sigma}_m\end{pmatrix}\text{ для }(knm)=(123)=(231)=(312),$$

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_n=\begin{pmatrix}-i\hat{\sigma}_m & 0\\ 0 & -i\hat{\sigma}_m\end{pmatrix}\text{ для }(knm)=(321)=(213)=(132).$$

Ответ: $\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_4=\hat{\gamma}_1$, $\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_4=\hat{\gamma}_2$, $\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_4=\hat{\gamma}_3$,

$$\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_2=\begin{pmatrix}i\hat{\sigma}_3 & 0\\ 0 & i\hat{\sigma}_3\end{pmatrix},\qquad \hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_3=\begin{pmatrix}-i\hat{\sigma}_2 & 0\\ 0 & -i\hat{\sigma}_2\end{pmatrix},$$

$$\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3=\begin{pmatrix}i\hat{\sigma}_1 & 0\\ 0 & i\hat{\sigma}_1\end{pmatrix}.$$

126. Покажите, что матрицы Дирака антикоммутируют.

Найдем произведение матриц для $k,n\neq 4$:

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_n=\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_n\\ i\hat{\sigma}_n & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n & 0\\ 0 & \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n\end{pmatrix},$$

$$\hat{\gamma}_n\hat{\gamma}_k=\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_n\\ i\hat{\sigma}_n & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k & 0\\ 0 & \hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k\end{pmatrix}.$$

Найдем сумму произведений, учитывая, что матрицы Паули антикоммутируют, т.е. $\hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k+\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n=0$,

$$\hat{\gamma}_n\hat{\gamma}_k+\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_n=\begin{pmatrix}\hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k & 0\\ 0 & \hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n & 0\\ 0 & \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n\end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix}\hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k+\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n & 0\\ 0 & \hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k+\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n\end{pmatrix}=0\,.$$

Аналогично

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_4=\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{I} & 0\\ 0 & -\hat{I}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix},$$

$$\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_k=\begin{pmatrix}\hat{I} & 0\\ 0 & -\hat{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ -i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}.$$

Найдем сумму произведений

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_4+\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_k=\begin{pmatrix}0 & i\hat{\sigma}_k\\ i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & -i\hat{\sigma}_k\\ -i\hat{\sigma}_k & 0\end{pmatrix}=0\,.$$

Вывод: матрицы Дирака антикоммутируют.

127. Найдите собственные значения матриц Дирака.

Матрицы Дирака:

$$\hat{\gamma}_1=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & -i\\ 0 & 0 & -i & 0\\ 0 & i & 0 & 0\\ i & 0 & 0 & 0\end{pmatrix},\quad \hat{\gamma}_2=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & -1\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix},$$

$$\hat{\gamma}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\gamma}_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Уравнение на собственные функции и собственные значения

$$\hat{\gamma}_1\psi = \lambda\psi$$

$$\hat{\gamma}_1\psi = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\psi_4 \\ -i\psi_3 \\ i\psi_2 \\ i\psi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\psi_1 \\ \lambda\psi_2 \\ \lambda\psi_3 \\ \lambda\psi_4 \end{pmatrix}.$$

Получаем систему уравнений на λ:

$$\begin{cases} -i\psi_4 = \lambda\psi_1, \\ -i\psi_3 = \lambda\psi_2, \\ i\psi_2 = \lambda\psi_3, \\ i\psi_1 = \lambda\psi_4, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \begin{cases} -i\psi_3 = \lambda\psi_2, \\ i\psi_2 = \lambda\psi_3, \end{cases} \\ \begin{cases} -i\psi_4 = \lambda\psi_1, \\ i\psi_1 = \lambda\psi_4, \end{cases} \end{cases} \Rightarrow \lambda^2 = 1.$$

При $\lambda = 1$ $\psi_3 = i\psi_2$, $\psi_4 = i\psi_1$, волновая функция:

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ i\psi_2 \\ i\psi_1 \end{pmatrix}.$$

При $\lambda = -1$ $\psi_3 = -i\psi_2$, $\psi_4 = -i\psi_1$, волновая функция:

$$\psi_- = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ -i\psi_2 \\ -i\psi_1 \end{pmatrix}.$$

Для $\hat{\gamma}_2$: $$\hat{\gamma}_2\psi = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\psi_4 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ -\psi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\psi_1 \\ \lambda\psi_2 \\ \lambda\psi_3 \\ \lambda\psi_4 \end{pmatrix}.$$

Получаем систему уравнений на λ:

$$\begin{cases} -\psi_4 = \lambda\psi_1, \\ \psi_3 = \lambda\psi_2, \\ \psi_2 = \lambda\psi_3, \\ -\psi_1 = \lambda\psi_4, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \begin{cases} \psi_3 = \lambda\psi_2, \\ \psi_2 = \lambda\psi_3, \end{cases} \\ \begin{cases} -\psi_4 = \lambda\psi_1, \\ -\psi_1 = \lambda\psi_4, \end{cases} \end{cases} \Rightarrow \lambda^2 = 1.$$

При $\lambda = 1$ $\psi_3 = \psi_2$, $\psi_4 = -\psi_1$, волновая функция:

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_2 \\ -\psi_1 \end{pmatrix}.$$

При $\lambda = -1$ $\psi_3 = -\psi_2$, $\psi_4 = \psi_1$, волновая функция:

$$\psi_- = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ -\psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix}.$$

Для $\hat{\gamma}_3$: $$\hat{\gamma}_3\psi = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\psi_3 \\ i\psi_4 \\ i\psi_1 \\ -i\psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\psi_1 \\ \lambda\psi_2 \\ \lambda\psi_3 \\ \lambda\psi_4 \end{pmatrix}.$$

Получаем систему уравнений на λ:

$$\begin{cases} -i\psi_3 = \lambda\psi_1, \\ i\psi_4 = \lambda\psi_2, \\ i\psi_1 = \lambda\psi_3, \\ -i\psi_2 = \lambda\psi_4, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \begin{cases} -i\psi_3 = \lambda\psi_1, \\ i\psi_1 = \lambda\psi_3, \end{cases} \\ \begin{cases} i\psi_4 = \lambda\psi_2, \\ -i\psi_2 = \lambda\psi_4, \end{cases} \end{cases} \Rightarrow \lambda^2 = 1.$$

При $\lambda = 1$ $\psi_3 = i\psi_1$, $\psi_4 = -i\psi_2$, волновая функция:

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ i\psi_1 \\ -i\psi_2 \end{pmatrix}.$$

При $\lambda = -1$ $\psi_3 = -i\psi_1$, $\psi_4 = i\psi_2$, волновая функция:

$$\psi_- = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ -i\psi_1 \\ i\psi_2 \end{pmatrix}.$$

Для $\hat{\gamma}_4$: $\hat{\gamma}_4\psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ -\psi_3 \\ -\psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\psi_1 \\ \lambda\psi_2 \\ \lambda\psi_3 \\ \lambda\psi_4 \end{pmatrix}.$

Получаем систему уравнений на λ:

$$\begin{cases} \psi_1 = \lambda\psi_1, \\ \psi_2 = \lambda\psi_2, \\ -\psi_3 = \lambda\psi_3, \\ -\psi_4 = \lambda\psi_4. \end{cases}$$

При $\lambda = 1$ $\psi_4 = \psi_3 = 0$, волновая функция: $\psi_+ = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$

При $\lambda = -1$ $\psi_2 = \psi_1 = 0$, волновая функция: $\psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$

Ответ: $\lambda = \pm 1$.

128. Найдите коммутаторы матриц Дирака.
Найдем произведение матриц для $k, n \neq 4$:

$$\hat{\gamma}_n\hat{\gamma}_k = \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_n \\ i\hat{\sigma}_n & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_k \\ i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k \end{pmatrix},$$

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_n = \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_k \\ i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_n \\ i\hat{\sigma}_n & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n \end{pmatrix}.$$

Найдем разность произведений, учитывая, что коммутаторы матриц Паули $\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n = i\hat{\sigma}_m$ для $(knm) = (123) = (231) = (312)$, и $\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n = -i\hat{\sigma}_m$ для $(knm) = (321) = (213) = (132)$,

$$\hat{\gamma}_n\hat{\gamma}_k - \hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_n = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k - \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_n\hat{\sigma}_k - \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_n \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{cases} \begin{pmatrix} -i\hat{\sigma}_m & 0 \\ 0 & -i\hat{\sigma}_m \end{pmatrix} & \text{для } (knm) = (123) = (231) = (312), \\ \begin{pmatrix} i\hat{\sigma}_m & 0 \\ 0 & i\hat{\sigma}_m \end{pmatrix} & \text{для } (knm) = (321) = (213) = (132). \end{cases}$$

Аналогично

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_4 = \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_k \\ i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\hat{\sigma}_k \\ i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_k = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_k \\ i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_k \\ -i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix}.$$

Найдем сумму произведений

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_4 - \hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_k = \begin{pmatrix} 0 & i\hat{\sigma}_k \\ i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_k \\ -i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2i\hat{\sigma}_k \\ 2i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix}.$$

Ответ:

$$\hat{\gamma}_n\hat{\gamma}_k - \hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_n == \begin{cases} \begin{pmatrix} -i\hat{\sigma}_m & 0 \\ 0 & -i\hat{\sigma}_m \end{pmatrix} & \text{для } (knm) = (123) = (231) = (312), \\ \begin{pmatrix} i\hat{\sigma}_m & 0 \\ 0 & i\hat{\sigma}_m \end{pmatrix} & \text{для } (knm) = (321) = (213) = (132). \end{cases}$$

$$\hat{\gamma}_k\hat{\gamma}_4 - \hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_k = \begin{pmatrix} 0 & 2i\hat{\sigma}_k \\ 2i\hat{\sigma}_k & 0 \end{pmatrix}.$$

129. Докажите, что свободный квант не может образовать пару электрон-позитрон в пустом пространстве без дополнительного внешнего поля.

Воспользуемся законом сохранения энергии и импульса в отсутствие поля:

$$-\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}+\hbar\omega=\sqrt{m^2c^4+c^2p_1^2}\,, \quad \vec{p}+\frac{\hbar\omega}{c}\vec{n}=\vec{p}_1\,.$$

Здесь $\vec{p}$ – импульс электрона в состоянии с отрицательной энергией, $\vec{n}$ – единичный вектор направления импульса кванта, $\vec{p}_1$ – импульс электрона в состоянии с положительной энергией.

Подставим $\vec{p}_1$ в закон сохранения энергии и возведем в квадрат обе части

$$m^2c^4+c^2p^2-2\hbar\omega\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}+\hbar^2\omega^2=m^2c^4+c^2\left(\vec{p}+\frac{\hbar\omega}{c}\vec{n}\right)^2,$$

$$c^2p^2-2\hbar\omega\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}+\hbar^2\omega^2=c^2\left(p^2+2\frac{\hbar\omega}{c}(\vec{p};\vec{n})+\frac{\hbar^2\omega^2}{c^2}\right),$$

$$-\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}=c(\vec{p};\vec{n})\,.$$

Правая часть равенства может быть отрицательной, но ее модуль не больше cp, тогда, возведя в квадрат,

$$m^2c^4+c^2p^2\le c^2p^2\,,$$

что невыполнимо. Следовательно, электрон-позитронная пара не может быть возбуждена квантом энергии в отсутствие внешнего поля.

130. Покажите, что если ψ – решение уравнения Дирака с положительной энергией E, то $\hat{\rho}_2\psi$ – решение уравнения с отрицательной энергией $-E$.

Уравнение для собственной функции:

$$E\psi=c\left(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{p}}\right)\psi+\hat{\beta}mc^2\psi\,.$$

Отсюда

$$E\hat{\rho}_2\psi=c\hat{\rho}_2\left(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{p}}\right)\psi+mc^2\hat{\rho}_2\hat{\beta}\psi=-c\left(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{p}}\right)\hat{\rho}_2\psi-\hat{\beta}mc^2\hat{\rho}_2\psi=$$
$$=-\left[c\left(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{p}}\right)+\hat{\beta}mc^2\right]\hat{\rho}_2\psi\,,$$

тогда

$$-E\hat{\rho}_2\psi=c\left(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{p}}\right)\hat{\rho}_2\psi+\hat{\beta}mc^2\hat{\rho}_2\psi\,.$$

Это доказывает, что решений с отрицательной энергией нельзя избежать.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 13:

«Элементы теории рассеяния»

Задачи

131. Получите общее выражение дифференциального сечения рассеяния неполяризованных тождественных частиц со спином $s = 1/2$ через амплитуду рассеяния, вычисленную без учета тождественности частиц.

Рассеяние происходит равновероятно в любом состоянии с полным спином S и проекцией S_z. В синглетном состоянии $(S = 0)$ координатная часть волновой функции должна быть симметричной относительно перестановки частиц, что соответствует симметричной амплитуде рассеяния

$$f_{S=0}(\theta) = f(\theta) + f(\pi - \theta).$$

В триплетном состоянии $(S = 1)$ амплитуда антисимметрична и не зависит от S_z:

$$f_{S=1}(\theta) = f(\theta) - f(\pi - \theta).$$

Усредняя по различным спиновым состояниям, получаем дифференциальное сечение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = w_{S=0}\left|f_{S=0}(\theta)\right|^2 + w_{S=1}\left|f_{S=1}(\theta)\right|^2 =$$

$$= \frac{1}{4}\left|f(\theta) + f(\pi - \theta)\right|^2 + \frac{3}{4}\left|f(\theta) - f(\pi - \theta)\right|^2.$$

Ответ: $\dfrac{d\sigma}{d\Omega} = \dfrac{1}{4}\left|f(\theta) + f(\pi - \theta)\right|^2 + \dfrac{3}{4}\left|f(\theta) - f(\pi - \theta)\right|^2$.

132. Вычислите в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния частиц, взаимодействующих по закону Кулона $U(r) = \dfrac{\alpha}{r}$.

Амплитуда рассеяния в первом порядке теории возмущений на потенциале $U(r)$ может быть определена по формуле

$$f(\theta) \approx f^{(1)}(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\vec{r}\,'}U(r')dV',$$

где $\vec{q} = \vec{k}\,' - \vec{k}$.

Вычисление интеграла дает

$$f(\theta) = -\frac{2\alpha m_{12}}{\hbar^2 q^2}.$$

Дифференциальное сечение равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|f^{(1)}(\theta)\right|^2 = \left(\frac{2\alpha m_{12}}{q^2\hbar^2}\right)^2.$$

Ответ: $\dfrac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\dfrac{2\alpha m_{12}}{q^2\hbar^2}\right)^2$.

133. Вычислите в борновском приближении сечение рассеяния частиц, взаимодействующих по закону $U(r) = \dfrac{\alpha e^{-\beta r}}{r}$ (потенциал Юкавы).

Амплитуда рассеяния в первом порядке теории возмущений на потенциале $U(r)$ может быть определена по формуле

$$f(\theta) \approx f^{(1)}(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\vec{r}\,'}U(r')dV',$$

где $\vec{q} = \vec{k}\,' - \vec{k}$.

Вычисление интеграла дает

$$f(\theta) = -\frac{2\alpha m_{12}}{\hbar^2\left(q^2 + \beta^2\right)}.$$

Полное сечение равно

$$\sigma = \int\left|f(\theta)\right|^2 d\Omega = \left(\frac{\alpha m_{12}}{\beta\hbar^2}\right)^2\frac{16\pi}{4k^2 + \beta^2}.$$

Ответ: $\sigma = \left(\dfrac{\alpha m_{12}}{\beta\hbar^2}\right)^2\dfrac{16\pi}{4k^2 + \beta^2}$.

134. Вычислите в борновском приближении сечение рассеяния частиц, взаимодействующих по закону

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} -U_0 \text{ при } & 0 < r < R, \\ 0 \quad \text{при} & r > R. \end{cases}$$

Амплитуда рассеяния в первом порядке теории возмущений на потенциале $U(r)$ может быть определена по формуле

$$f(\theta) \approx f^{(1)}(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\vec{r}\,'}U(r')dV',$$

где $\vec{q} = \vec{k}\,' - \vec{k}$.

При интегрировании

$$f(\theta) = -\frac{m_{12}}{2\pi\hbar^2}\int_0^R e^{-iqr}U_0 r^2 dr = -\frac{2m_{12}U_0}{\hbar^2}\cdot\frac{\sin qR - qR\cos qR}{q^3}.$$

При малых энергиях рассеяние изотропно и не зависит от энергии, а при высоких энергиях $(kR >> 1)$ рассеяние происходит в узком конусе углов шириной $\Delta\theta \sim 1/kR << 1$. Полное сечение получается интегрированием квадрата амплитуды по углам:

$$\sigma = \frac{2\pi}{\hbar^2}\left(\frac{m_{12}U_0R^2}{\hbar^2}\right)^2\left[1 - \frac{1}{(2kR)^2} + \frac{\sin 4kR}{(2kR)^3} - \frac{\sin^2 2kR}{(2kR)^4}\right].$$

В пределе при очень малых и очень больших энергиях имеем

$$\sigma = \begin{cases} \dfrac{16\pi R^2}{9}\left(\dfrac{m_{12}U_0R^2}{\hbar^2}\right)^2 & \text{при} \quad kR << 1, \\ \dfrac{2\pi}{k^2}\left(\dfrac{m_{12}U_0R^2}{\hbar^2}\right)^2 & \text{при} \quad kR >> 1. \end{cases}$$

Ответ: $\sigma = \begin{cases} \dfrac{16\pi R^2}{9}\left(\dfrac{m_{12}U_0R^2}{\hbar^2}\right)^2 & \text{при} \quad kR << 1, \\ \dfrac{2\pi}{k^2}\left(\dfrac{m_{12}U_0R^2}{\hbar^2}\right)^2 & \text{при} \quad kR >> 1. \end{cases}$

135. Вычислите в борновском приближении сечение рассеяния частицы на потенциале вида $U(\vec{r}) = U_0\delta(\vec{r})$.

Амплитуда рассеяния в первом порядке теории возмущений на потенциале $U(r)$ может быть определена по формуле

$$f(\theta) \approx f^{(1)}(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\vec{r}\,'}U(r')dV',$$

где $\vec{q} = \vec{k}\,' - \vec{k}$.

При интегрировании

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\vec{q}\vec{r}\,'}U_0\delta(r')dV' = -\frac{mU_0}{2\pi\hbar^2}.$$

Амплитуда не зависит от угла рассеяния, тогда сечение рассеяния

$$\sigma = \int\left|f(\theta)\right|^2 d\Omega = \left|-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right|^2\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi = \frac{m^2U_0^2}{4\pi^2\hbar^4}4\pi = \frac{m^2U_0^2}{\pi\hbar^4}.$$

Ответ: $\sigma = \dfrac{m^2U_0^2}{\pi\hbar^4}$.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Решение задач по теме 14:

«Многоэлектронные системы»

Задачи

1. Вычислите скалярное произведение спинов двух частиц в синглетном и триплетном состояниях. Спин частиц $\frac{\hbar}{2}$.

Пусть спинам частиц соответствуют операторы $\hat{\vec{S}}_1 = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}_1$ и $\hat{\vec{S}}_2 = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}_2$, причем $\hat{\vec{\sigma}}_i^2 = 3$, т.к. $\hat{\sigma}_{ix}^2 = \hat{\sigma}_{iy}^2 = \hat{\sigma}_{iz}^2 = 1$.

Найдем квадрат суммы операторов

$$\hat{\vec{S}}^2 = \left(\hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2\right)^2 = \hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + 2\left(\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2\right),$$

$$\left(\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{\vec{S}}^2 - \hat{\vec{S}}_1^2 - \hat{\vec{S}}_2^2\right).$$

Значение $\vec{S}^2 = \hbar^2 s(s+1)$, для синглетного состояния $s = 0$, для триплетного – $s = 1$, тогда для синглетного состояния:

$$\left(\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2\right) = \frac{1}{2}\left(0 - \frac{3\hbar^2}{4} - \frac{3\hbar^2}{4}\right) = -\frac{3\hbar^2}{4},$$

для триплетного состояния:

$$\left(\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2\right) = \frac{1}{2}\left(2\hbar^2 - \frac{3\hbar^2}{4} - \frac{3\hbar^2}{4}\right) = \frac{\hbar^2}{4}.$$

Ответ: $-\frac{3\hbar^2}{4}$, $\frac{\hbar^2}{4}$.

2. Укажите нормальный терм атома с электронной конфигурацией $(nd)^2$ в незаполненной оболочке.

По правилу Хунда нормальный терм имеет максимальное значение спина, т.е. является в данном случае триплетом. Кроме того, полный орбитальный момент L должен иметь максимально возможное значение. По правилу сложения моментов два d-электрона могут находиться в состояниях с L = 4, 3, 2, 1, 0. При $L = 4$ координатная функция симметрична, поэтому она запрещена принципом Паули для триплетных состояний (симметричная спиновая функция). Максимально возможное значение L, совместимое с принципом Паули, равно 3. Оболочка с двумя d-электронами заполнена менее чем наполовину, поэтому для полного момента имеем: $J = L - S = 2$. Значит, нормальный терм атома есть $^3F_2$. Рассмотренный случай имеет место, например, у титана, циркония, графита (Z = 22, 40, 72).

Ответ: $^3F_2$.

3. Атом с квантовыми числами $j = \frac{1}{2}$ и $m_j = \frac{1}{2}$ находится в однородном магнитном поле, которое в некоторый момент мгновенно поворачивается на угол $60°$. Найдите вероятность того, что после этого поворота атом окажется в одном из состояний $m_{j'} = \frac{1}{2}$ или $m_{j'} = -\frac{1}{2}$ относительно нового направления поля.

Ориентируем ось Oz с первоначальным направлением поля. Волновые функции до и после мгновенного поворота поля одинаковы. До поворота поля

$$\psi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

После поворота поля при диагональном j' волновая функция будет иметь вид:

$$\psi = \alpha\psi_0 = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix},$$

где матрица поворота

$$\alpha = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}.$$

После поворота вероятность обнаружить частицу в состоянии с $m_{j'} = +\frac{1}{2}$ равна

$$P_+ = \cos^2 \varphi = \frac{1}{4},$$

для $m_{j'} = -\frac{1}{2}$ равна

$$P_- = \sin^2 \varphi = \frac{3}{4}.$$

Ответ: $\frac{1}{4}$, $\frac{3}{4}$.

4. Атом с одним $2p$-электроном помещен в электрическое поле с потенциалом $\hat{V} = Ax^2 + By^2 - (A+B)z^2$. Определите среднее значение L_z. Спин электрона не следует учитывать. Потенциал поля считать малым по сравнению с потенциалом электрона в атоме.

При отсутствии поля электрон имеет квантовые числа $L = 1$ и $L_z = 0, \pm 1$. Волновые функции электрона имеют вид: в отсутствие поля

$$\psi_0 = \left| L = 1, L_z = 0 \right\rangle,$$

при наличии поля:

$$\psi_\pm = \left| L = 1, L_z = +1 \right\rangle \pm \left| L = 1, L_z = -1 \right\rangle.$$

Так как состояния $L_z = +1$ и $L_z = -1$ равновероятны, то среднее значение L_z равно нулю, при этом ψ_+ и ψ_- являются невырожденными.

Ответ: 0.

5. Опишите движение электрона в поле периодического потенциала.

Пусть период потенциального поля равен p, то есть параллельный перенос вдоль линии одномерной решетки на величину T, кратную p, приведет к самосовпадению. Такая операция называется трансляцией $T = tp$ (t – целое число), а $\hat{T}_p$ – оператор трансляции, удовлетворяющий условию

$$\hat{T}_p \psi(x) = \psi(x + tp),$$

причем

$$\hat{T}_p \psi(x) = \psi(x + tp) = C_p \psi(x),$$

где C_p – собственное значение оператора $\hat{T}_p$.

Из условия

$$\hat{T}_{p'} \hat{T}_p \psi(x) = \hat{T}_{p'} C_p \psi(x) = C_{p'} C_p \psi(x),$$

но

$$\hat{T}_{p'} \hat{T}_p = \hat{T}_{p'+p} = C_{p'+p},$$

то есть должно выполняться условие:

$$C_{p'+p} = C_{p'} \cdot C_p,$$

которому удовлетворяет функция

$$C_p = e^{2\pi i k p},$$

следовательно,

$$\hat{T}_p \psi(x) = e^{2\pi i k p} \psi(x),$$

а также

$$\hat{T}_p \hat{H} \psi(x) = \hat{T}_p E \psi(x) = E e^{2\pi i k p} \psi(x).$$

Следовательно, при движении электрона в поле периодического потенциала волновая функция имеет тот же вид, что и в уравнении Шредингера

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

только при этом появляется экспоненциальный множитель периодичностью трансляции. Это утверждение для трехмерного случая известно как теорема Блоха, а для одномерного – как теорема Флоке.

6. Покажите, что при наличии поверхностного потенциала любого вида состояние приповерхностных электронов описывается волновыми функциями, отличными от тех, которые характеризуют электрон в объемном кристалле.

Оператор Гамильтона в объемном кристалле $\hat{H}^{(0)}$ отличается от гамильтониана в поверхностном слое $\hat{H}$, так как имеется приповерхностный потенциал. Пусть решениями уравнений Шредингера являются волновые функции $\psi_k^{(0)}$ и ψ_n дискретного спектра:

$$\hat{H}^{(0)}\psi_k^{(0)} = E_k^{(0)}\psi_k^{(0)},$$

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n .$$

Так как $\hat{H}^{(0)} \neq \hat{H}$, то

$$\left(\psi_n;\hat{H}^{(0)}\psi_k^{(0)}\right) \neq \left(\hat{H}\psi_n;\psi_k^{(0)}\right).$$

Так как

$$\left(\psi_n;\hat{H}^{(0)}\psi_k^{(0)}\right) = \left(\psi_n;E_k^{(0)}\psi_k^{(0)}\right) = E_k^{(0)}\left(\psi_n;\psi_k^{(0)}\right),$$

$$\left(\hat{H}\psi_n;\psi_k^{(0)}\right) = \left(E_n\psi_n;\psi_k^{(0)}\right) = E_n\left(\psi_n;\psi_k^{(0)}\right),$$

то

$$\left(E_k^{(0)} - E_n\right)\left(\psi_n;\psi_k^{(0)}\right) \neq 0 .$$

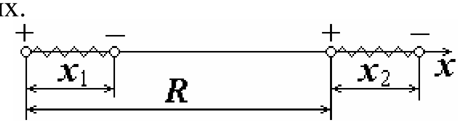
Следовательно, при любых k и n

$$\left(\psi_n;\psi_k^{(0)}\right) \neq 0 .$$

Значит, волновые функции $\psi_k^{(0)}$ и ψ_n не образуют линейно связанных решений, а принадлежат к различным системам волновых функций, спектры которых отличаются как собственными значениями, так и числом решений.

7. Выведите выражение для взаимодействия Ван-дер-Ваальса.

Рассмотрим систему двух одинаковых линейных осцилляторов 1 и 2, расстояние между которыми R, $\pm e$ – заряды на каждом осцилляторе, x_1 и x_2 – отклонения отрицательных зарядов от положительных.



Полагаем, что колебания происходят вдоль оси x, так что импульсы отрицательных зарядов $p_1 = m\dfrac{dx_1}{dt}$ и $p_2 = m\dfrac{dx_2}{dt}$. Гамильтониан такой системы $\hat{H}_0$ в отсутствие взаимодействия между осцилляторами

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\beta\hat{x}_1^2}{2} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{\beta\hat{x}_2^2}{2}, \qquad (1)$$

где β – коэффициент упругости осцилляторов. При достаточно

большом R, когда можно пренебречь взаимодействием между осцилляторами, их резонансные частоты одинаковы и зависят от коэффициента упругости:

$$\omega_0^{(1)} = \omega_0^{(2)} = \omega_0 = \sqrt{\frac{\beta}{m}} . \qquad (2)$$

Используя геометрию системы, запишем энергию взаимодействия между осцилляторами

$$\hat{H}_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R + \hat{x}_1 - \hat{x}_2} - \frac{e^2}{R + \hat{x}_1} - \frac{e^2}{R - \hat{x}_2} .$$

При $|\hat{x}_1|, |\hat{x}_2| << R$ получаем

$$\hat{H}_1 \approx -\frac{2e^2\hat{x}_1\hat{x}_2}{R^3} . \qquad (3)$$

Полный гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, если для $\hat{H}_1$ использовать его приближенное выражение (3), может быть диагонализован путем линейного преобразования к нормальным модам. Введем нормальные координаты $\hat{x}_s$ и $\hat{x}_a$:

$$\hat{x}_s = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x}_1 + \hat{x}_2\right) \quad \text{и} \quad \hat{x}_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x}_1 - \hat{x}_2\right).$$

Выразим через них x_1 и x_2:

$$\hat{x}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x}_s + \hat{x}_a\right) \quad \text{и} \quad \hat{x}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x}_s - \hat{x}_a\right). \qquad (4)$$

Индексы s и a соответствуют симметричной и антисимметричной модам соответственно. Соответствующие этим модам импульсы имеют вид:

$$\hat{p}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{p}_s + \hat{p}_a\right) \quad \text{и} \quad \hat{p}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{p}_s - \hat{p}_a\right). \qquad (5)$$

С учетом (4) и (5) полный гамильтониан преобразуется таким образом:

$$\hat{H} = \left[\frac{\hat{p}_s^2}{2m} + \frac{1}{2}\left(\beta - \frac{2e^2}{R^3}\right)\hat{x}_s^2\right] + \left[\frac{\hat{p}_a^2}{2m} + \frac{1}{2}\left(\beta + \frac{2e^2}{R^3}\right)\hat{x}_a^2\right]. \qquad (6)$$

Сравнивая (6) с (1), получаем выражения для частот (2) связанных осцилляторов

$$\omega_{\pm} = \sqrt{\frac{\beta}{m} \pm \frac{2e^2}{mR^3}} \approx \omega_0 \left(1 \pm \frac{1}{2}\frac{2e^2}{\beta R^3} - \frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{\beta R^3}\right)^2 + \ldots\right),$$

здесь используется разложение в ряд по малому слагаемому $\frac{2e^2}{\beta R^3}$.

Взаимодействие таких осцилляторов приводит к уменьшению энергии системы

$$\Delta U = \frac{1}{2}\hbar\left(\Delta\omega_s - \Delta\omega_a\right) = -\hbar\omega_0 \frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{\beta R^3}\right)^2.$$

Видно, что взаимодействие осцилляторов выражается в притяжении, сила которого обратно пропорциональна R^7. Это притяжение носит квантовый характер, так как при $\hbar \to 0$ добавочная энергия $\Delta U \to 0$.

Введем поляризуемость осциллятора

$$\alpha = \frac{\text{электрический дипольный момент}}{\text{напряженность электрического поля}} = \frac{e^2}{\beta},$$

получим для ΔU:

$$\Delta U = -\hbar\omega_0 \frac{\alpha^2}{2R^6} = -\frac{const}{R^6},$$

где $const = \frac{\hbar\omega_0\alpha^2}{2}$. Полученное выражение для ΔU есть энергия взаимодействия Ван-дер-Ваальса.

Ответ: $\Delta U = -\hbar\omega_0 \frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{\beta R^3}\right)^2$.

8. На основе данных о потенциале ионизации атомов водорода и гелия оцените энергию взаимодействия электронов в атоме гелия.

Потенциал ионизации атома водорода $U_{u,H} = 13{,}539$ В.

Энергия, необходимая для отрыва электрона от ядра:

$$W_H = eU_{u,H}.$$

Это энергия взаимодействия электрона с ядром, состоящим из одного протона. Она равна

$$W_H = e\varphi_H,$$

где потенциал ядра атома водорода – $\varphi_H = \frac{e^2}{r} = U_{u,H}$.

Потенциал ионизации атома гелия $U_{u,He} = 24{,}45$ В. Энергия, необходимая для отрыва одного из электронов от ядра

$$W_{He} = eU_{u,He}.$$

Это энергия взаимодействия электрона с ядром, состоящим из двух протонов, и с другим электроном. Она равна

$$W_{He} = e\varphi_{He} - W_e,$$

где потенциал ядра атома гелия – $\varphi_{He} = \frac{2e^2}{r} = 2\varphi_H$, а W_e –энергия взаимодействия электронов. Тогда

$$eU_{u,He} = e\varphi_{He} - W_e = 2e\varphi_H - W_e,$$

откуда энергия взаимодействия электронов:

$$W_e = 2e\varphi_H - eU_{u,He} = e\left(2\varphi_H - U_{u,He}\right),$$

то есть

$$W_e = 2 \cdot 13{,}539 - 24{,}45 \text{ эВ} = 2{,}628 \text{ эВ}.$$

Ответ: 2,628 эВ.

9. На основе анализа порядка заполнения электронных уровней атомов оцените энергию спин-орбитального взаимодействия.

До определенного номера атома в таблице Менделеева электронные уровни заполняются последовательно. Однако, начиная с 19 атома (калия) девятнадцатый электрон попадает не на $3d$ уровень, а заполняет $4s$ уровень. Это значит, что $4s$-состояние оказывается энергетически более выгодным. Это значит, что

Потенциал ионизации атома калия $U_{u,H} = 13{,}539$ В.

Энергия, необходимая для отрыва электрона от ядра:

$$W_H = eU_{u,H}.$$

Это энергия взаимодействия электрона с ядром, состоящим из одного протона. Она равна

$$W_H = e\varphi_H,$$

где потенциал ядра атома водорода – $\varphi_H = \frac{e^2}{r} = U_{u,H}$.