1. Лінійні оператори

1.1. Для перетворення оператора (операторного виразу), який містить оператори у явному вигляді, потрібно подіяти таким оператором на довільну функцію f.
Комутатор двох операторів: $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$.

(a) $\left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+x\right)^2 f(x)=\left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+x\right)\Big[\left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+x\right)f(x)\Big]=\left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+x\right)\Big[\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}+xf(x)\Big]=$
$=\dfrac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2}+\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\big[xf(x)\big]+x\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}+x^2f(x)=\dfrac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2}+2x\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}+f(x)+x^2f(x)$,
звідки $\left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+x\right)^2=\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+2x\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+1+x^2$

(b) $\Big[x^2,\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big]f(x)=x^2\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}-\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\big[x^2f(x)\big]=x^2\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}-2xf(x)-x^2\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}=-2xf(x)$;

(c) $\Big[x\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x},\dfrac{1}{x}\Big]f(x)=x\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\dfrac{f(x)}{x}-\dfrac{x}{x}\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}=-\dfrac{f(x)}{x}+\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}-\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}=-\dfrac{f(x)}{x}$.

1.2. За допомогою комутаційного співвідношення $[\hat{M},\hat{L}]=1$ виразимо $\hat{M}\hat{L}=1+\hat{L}\hat{M}$.

(a) $[\hat{M}^n,\hat{L}]=\hat{M}^n\hat{L}-\hat{L}\hat{M}^n=\hat{M}^{n-1}\hat{M}\hat{L}-\hat{L}\hat{M}^n=\hat{M}^{n-1}(1+\hat{L}\hat{M})-\hat{L}\hat{M}^n=$
$=\hat{M}^{n-1}+\hat{M}^{n-1}\hat{L}\hat{M}-\hat{L}\hat{M}^n=\hat{M}^{n-1}+\hat{M}^{n-2}(1+\hat{L}\hat{M})\hat{M}-\hat{L}\hat{M}^n=$
$=2\hat{M}^{n-1}+M^{n-2}\hat{L}\hat{M}^2-\hat{L}\hat{M}^n=\ldots=n\hat{M}^{n-1}+\hat{L}\hat{M}^n-\hat{L}\hat{M}^n=n\hat{M}^{n-1}.$;

(b) Скористаємося рядом Тейлора для функції $f(x)$:
$f(x)=f(x_0)+\dfrac{f'(x_0)}{1!}(x-x_0)+\dfrac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\ldots+\dfrac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n+\ldots.$
Підставляючи $x_0=0$ та $x=\hat{M}$ до умови, маємо
$[f(\hat{M}),\hat{L}]=f(0)[1,\hat{L}]+\dfrac{f'(0)}{1!}[\hat{M},\hat{L}]+\dfrac{f''(0)}{2!}[\hat{M}^2,\hat{L}]+\ldots\dfrac{f^{(n)}(0)}{n!}[\hat{M}^n,\hat{L}]+\ldots=$
$=f'(0)+\dfrac{f''(0)}{1!}\hat{M}+\ldots\dfrac{f^{(n)}(0)}{(n-1)!}M^{n-1}+\ldots=f'(\hat{M}).$

1.3. Запишемо ряд Тейлора $\mathrm{e}^x=1+\dfrac{x}{1!}+\dfrac{x^2}{2!}+...+\dfrac{x^n}{n!}$. Тоді
$\exp\Big[a\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big]f(x)=\Big(1+\dfrac{a}{1!}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+\dfrac{a^2}{2!}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\ldots+\dfrac{a^n}{n!}\dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^2}+\ldots\Big)f(x)=$
$=f(x)+\dfrac{a}{1!}f'(x)+\dfrac{a^z}{2!}f''(x)+\ldots+\dfrac{a^n}{n!}f^{(n)}(x)+\ldots=f(x+a).$
Звідси випливає, що $\exp\Big[a\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big]=\hat{T}_a$ — оператор зсуву, $\hat{T}_af(x)=f(x+a)$.

2. Ермітово-спряжені оператори.

Скалярний добуток векторів: $(\vec{x},\vec{y}) = x_1^* y_1 + x_2^* y_2 + ... = \sum\limits_k x_k^* y_k$.

Скалярний добуток функцій: $(f,g) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) g(x) \mathrm{d}x$.

Властивості скалярного добутку: $(f+g,h) = (f,h)+(g,h)$; $(\alpha f, \beta g) = \alpha^* \beta (f,g)$; $(f,g) = (g,f)^*$.
Визначення 1: Оператор $\hat{A}^\dagger$ називається спряженим (ермітово-спряженим) до оператора $\hat{A}$, якщо для довільних векторів (функцій) f і g виконується рівність $(\hat{A}f,g) = (f,\hat{A}^\dagger g)$.
Визначення 2: Оператор $\hat{A}^\dagger$ називається самоспряженим (ермітовим), якщо $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.

2.1. Візьмемо оператори $\hat{M}$ и $\hat{N}$ у наступному вигляді: $\hat{M} = (\hat{L}+\hat{L}^\dagger)/2$ и $\hat{N} = i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})/2$. Очевидно, що $\hat{M} + i\hat{N} = (\hat{L}+\hat{L}^\dagger)/2 - (\hat{L}^\dagger - \hat{L})/2 = \hat{L}$.

Перевіримо, що $\hat{N}^\dagger = \hat{N}$ (для $\hat{M}$ аналогічно), тобто $(\widehat{N}f,g) \stackrel{?}{=} (f,\widehat{N}g)$. Проведемо перетворення скориставшись властивостями скалярного добутку:
$\big(i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})f/2, g\big) \stackrel{?}{=} \big(f, i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})g/2\big) \Leftrightarrow -i\big(\hat{L}^\dagger f, g\big)/2 + i\big(\hat{L}f,g\big)/2 \stackrel{?}{=} i\big(f,\hat{L}^\dagger g\big)/2 - i\big(f,\hat{L}g\big)/2$.
Остання рівність вірна, бо за визначенням спряженого оператора та властивістю скалярного добутку виконані такі рівності: $\big(\hat{L}f,g\big) = \big(f,\hat{L}^\dagger g\big)$ та $\big(\hat{L}^\dagger f, g\big)^* = \big(f,\hat{L}g\big)^*$.

2.2. (a) Запишемо визначення спряженого оператора: $(\hat{L}f,g) = (f,\hat{L}^\dagger g)$. Підставимо сюди оператор $\hat{L} = ix$ та вираз для скалярного добутку:
$\int\limits_{-\infty}^{\infty} [ixf(x)]^* g(x) \mathrm{d}x = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \hat{L}^\dagger g(x)^* \mathrm{d}x$. Перетворимо ліву частину так, щоб вона стала схожа на праву: $\int\limits_{-\infty}^{\infty} [ixf(x)]^* g(x) \mathrm{d}x = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f^*(x)[-ixg(x)]\mathrm{d}x$.

Звідси ми робимо висновок, що $\hat{L}^\dagger = -ix$.

(b) $\hat{L}\varphi(x) = \dfrac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x}$;

Аналогічно попередній задачі запишемо визначення спряженого оператора, підставляючи оператор $\hat{L} = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$: $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \left[\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\right]^* g(x)\mathrm{d}x = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\hat{L}^\dagger g(x)^* \mathrm{d}x$.

Перетворимо ліву частину так, щоб вона стала схожа на праву:
$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \left[\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\right]^* g(x)\mathrm{d}x = \cancel{f^*(x)g(x)\Big|_{-\infty}^{\infty}}^{\,0} - \int\limits_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \dfrac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x$.

Звідси ми робимо висновок, що $\hat{L}^\dagger = -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

3. Власні вектори (функції) і числа: рішення

3.1. *Визначення*: якщо для деякого вектора (функції) $\vec{a}_L \neq 0$ і числа L виконана рівність $\hat{L}\vec{a}_L = L\vec{a}_L$, то вектор (функція) $\vec{a}_L$ називається власним вектором (функцією), а число L — власним числом оператора $\hat{L}$.

(a) За визначенням маємо: $\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = L\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$. Перемножуючи матрицю на вектор приходимо до системи рівнянь $\begin{cases} 0x + iy = Lx, \\ -ix + 0y = Ly. \end{cases}$ Виключаємо невідому y за допомогою першого рівняння і маємо $x(L^2 - 1) = 0$. Звідки $x = 0$ або $L^2 = 1$. У першому випадку $x = y = 0$, тобто $\vec{a}_L = 0$ — не є власним вектором. У другому випадку отримаємо два власних числа $L = \pm 1$.

Для обох чисел повертає до системи рівнянь і отримуємо власні вектори:
$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} x \\ -ix \end{pmatrix} = x\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$, $\vec{a}_{-1} = \begin{pmatrix} x \\ ix \end{pmatrix} = x\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$.

Значення довільної величини x знайдемо з умови нормування:
$|\vec{a}_{\pm 1}|^2 = |x|^2 + |y|^2 = |x|^2 + |\mp ix|^2 = |x|^2\sqrt{2} = 1$, звідки $x = 1/\sqrt{2}$.

(b) За визначенням маємо: $\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right)\psi(x) = L\psi(x)$. Розкриваючи дужки та перетворюючи отримаємо диференціальне рівняння: $\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} = \psi(x)(L - x)$. Це рівняння може бути розв'язане за допомогою розділення змінних: $\int \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\psi(x)} = \int (L - x)\mathrm{d}x$. Інтегруючи його $\ln\psi(x) = Lx - x^2/2 + \ln C$, отримуємо власну функцію у вигляді: $\psi_L(x) = Ce^{Lx - x^2/2}$.
Можливі власні числа L — це всі комплексні числа, тому представимо $L = L_1 + iL_2$.
Невідому константу C визначимо з умови нормування: $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\mathrm{d}x = 1$. Перетворюємо: $|\psi(x)|^2 = |Ce^{Lx - x^2/2}|^2 = |C|^2|e^{2L_1x - x^2}||e^{2iL_2x}| = |C|^2e^{2L_1x - x^2} = |C|^2e^{-(x-L_1)^2}e^{L_1^2}$,
та інтегруємо $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\mathrm{d}x = |C|^2e^{L_1^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2}\mathrm{d}(x - L_1) = |C|^2e^{L_1^2}\sqrt{\pi} = 1$.

Остаточно: $\psi_L(x) = \pi^{-1/4}e^{iL_2x}e^{-(x-L_1)^2/2}$.

Зауваження 1: Формула Ейлера $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$, звідки $|e^{i\varphi}|^2 = \cos^2\varphi + \sin^2\varphi = 1$.

Зауваження 2: Інтеграл Ейлера-Пуассона $\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}$.

3.2. *Середнє значення оператора (фізичної величини)*: $\overline{F} = \langle F\rangle = (\psi, \hat{F}\psi) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{F}\psi(x)\mathrm{d}x$.

(a) Оператор квантовомеханічного імпульсу визначається як $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$. Тоді середнє значення імпульсу: $\langle p_x\rangle = -i\hbar\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi'(x)\mathrm{d}x$. Підставляючи в останнє рівняння функцію ψ із задачі 3.1b проводимо наступні розрахунки:

$$\langle p_x\rangle = -i\hbar\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \pi^{-\frac{1}{4}}e^{-iL_2x-(x-L_1)^2/2}\pi^{-\frac{1}{4}}e^{iL_2x-(x-L_1)^2/2}(iL_2 - x + L_1)\mathrm{d}x =$$

$$= -i\hbar\pi^{-\frac{1}{2}}\left[iL_2\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2}\mathrm{d}x - \cancelto{0}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2}(x - L_1)\mathrm{d}x}\right] = -i\hbar\pi^{-\frac{1}{2}}iL_2\sqrt{\pi} = \hbar L_2.$$

Зауваження 3: Інтеграл $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} xe^{-x^2}\mathrm{d}x = 0$ завдяки непарності функції xe^{-x^2}.

(b) Аналогічно попередній задачі проводимо наступні розрахунки:
$\langle x^2 \rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)x^2\psi(x)\mathrm{d}x = \pi^{-\frac{1}{2}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2} x^2 \mathrm{d}x = \pi^{-\frac{1}{2}} \Big[\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2}(x-L_1)^2\mathrm{d}x + \cancelto{0}{2L_1 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2}(x-L_1)\mathrm{d}x} + L_1^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2}\mathrm{d}x \Big] = \frac{1}{2} + L_1^2.$

Зауваження 4: Інтеграл $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2}\mathrm{d}x = -\frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} x\mathrm{d}e^{-x^2} = \cancelto{0}{-\frac{1}{2}xe^{-x^2}\Big|_{-\infty}^{+\infty}} + \frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ розрахований «по частинах».

4. Імпульсне представлення.

4.1. *Імпульсне представлення хвильової функції:* $\psi(p) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \displaystyle\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} \mathrm{d}x.$

Обернене перетворення: $\psi(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \displaystyle\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(p) e^{ipx/\hbar} \mathrm{d}p.$

(a) Нормуємо хвильову функцію: $1 = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = |C|^2 \int\limits_0^{x_0} \sin^2 \dfrac{\pi n x}{x_0} \mathrm{d}x =$

$= \dfrac{|C|^2}{2} \int\limits_0^{x_0} \big(1 - \cos \dfrac{2\pi n x}{x_0}\big) \mathrm{d}x = \dfrac{|C|^2}{2} \big(x_0 - \cancelto{0}{\dfrac{x_0}{2\pi n} \sin^2 \dfrac{\pi n x}{x_0}\Big|_0^{x_0}}\big) = \dfrac{x_0}{2}|C|^2$. Звідки $C = \sqrt{\dfrac{2}{x_0}}$.

Імпульсне представлення хвильової функції: $\psi(p) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_0^{x_0} \sqrt{\dfrac{2}{x_0}} \sin \dfrac{\pi n x}{x_0} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \mathrm{d}x =$

$= \dfrac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar x_0}} \Big(\int\limits_0^{x_0} e^{\frac{i\pi n x}{x_0}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \mathrm{d}x - \int\limits_0^{x_0} e^{-\frac{i\pi n x}{x_0}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \mathrm{d}x \Big) = \dfrac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar x_0}} \Big[\dfrac{e^{ix(\frac{\pi n}{x_0} - \frac{p}{\hbar})}}{i[\frac{\pi n}{x_0} - \frac{p}{\hbar}]} + \dfrac{e^{-ix(\frac{\pi n}{x_0} + \frac{p}{\hbar})}}{i(\frac{\pi n}{x_0} + \frac{p}{\hbar})} \Big] \Big|_0^{x_0} =$

$= \dfrac{1 - (-1)^n e^{-\frac{ipx_0}{\hbar}}}{\sqrt{\pi\hbar x_0}} \dfrac{\pi n / x_0}{(\pi n / x_0)^2 - (p/\hbar)^2}.$

Зауваження 1: З формули Ейлера: $\sin\varphi = \dfrac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}$ та $e^{\pm i\pi n} = \cos\pi n \pm i \sin\pi n = (-1)^n$.

(b) Нормуємо хвильову функцію: $1 = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = |C|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} \mathrm{d}x = |C|^2 a\sqrt{\pi}.$

Звідки $C = \pi^{-1/4} a^{-1/2}$. Імпульсне представлення хвильової функції:

$\psi(p) = \dfrac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp\Big[\dfrac{ip_0 x}{\hbar} - \dfrac{(x-x_0)^2}{2a^2}\Big] \exp\Big(\dfrac{ipx}{\hbar}\Big) dx =$

$= \dfrac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp\Big[- \dfrac{(x-x_0)^2}{2a^2} + \dfrac{i(p_0 - p)x}{\hbar} \Big] \mathrm{d}x =$

$= \dfrac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\Big[- \dfrac{a^2 (p_0 - p)^2}{2\hbar^2} + \dfrac{i(p_0 - p)x_0}{\hbar} \Big] \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp\Big\{ - \Big[\dfrac{x - x_0}{\sqrt{2}a} - \dfrac{a}{\sqrt{2}} \dfrac{i}{\hbar}(p_0 - p) \Big]^2 \Big\} \mathrm{d}x.$

Виконуючи заміну $y = \dfrac{x - x_0}{\sqrt{2}a} - \dfrac{a}{\sqrt{2}} \dfrac{i}{\hbar}(p_0 - p)$ та $\mathrm{d}y = \dfrac{\mathrm{d}x}{\sqrt{2}a}$, ми остаточно отримуємо:

$\psi(p) = \dfrac{Ca}{\sqrt{\hbar}} \exp\Big[-\dfrac{a^2}{2\hbar^2}(p_0 - p)^2 + \dfrac{x_0 i}{\hbar}(p_0 - p) \Big].$

$$C \exp[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}]$$

4.2. *Імпульсне представлення оператора:* Нехай оператор $\hat{L}_x$ заданий у координатному представленні, тобто $\hat{L}_x \psi(x) = \varphi(x)$, де функції $\psi(x)$ та $\varphi(x)$ задані у координатному представленні. Тоді відповідний оператор $\hat{L}_p$ у імпульсному представленні діє, як $\hat{L}_p \psi(p) = \varphi(p)$, де $\psi(p)$ та $\varphi(p)$ — відповідні функції імпульсному представленні.

(a) Підставимо умову $\hat{L}_x = \dfrac{d}{dx}$ до рівності $\hat{L}_x \psi(x) = \varphi(x)$, замінюючи $\psi(x)$ та $\varphi(x)$ відповідними перетвореннями з імпульсного представлення:

$\dfrac{d}{dx} \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi(p) e^{ipx/\hbar} \mathrm{d}p = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) e^{ipx/\hbar} \mathrm{d}p.$

Оператор $\hat{L}_x = \dfrac{d}{dx}$ діє тільки на функцію від x, тобто на $e^{ipx/\hbar}$, тоді приходимо до рівності $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \dfrac{ip}{\hbar}\psi(p)e^{ipx/\hbar}\mathrm{d}p = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p)e^{ipx/\hbar}\mathrm{d}p$, з якої очевидно випливає наступна рівність $\dfrac{ip}{\hbar}\psi(p) = \varphi(p)$. В результаті отримуємо імпульсне представлення $\hat{L}_p = \dfrac{ip}{\hbar}$.

Зауваження 2: Зауважимо, що останній результат визначає оператор імпульсу у імпульсному представленні: $\hat{p}_p = p$ (порівняйте з оператором координати у координатному представленні: $\hat{x}_x = x$). Також зауважимо, що оператор координати у імпульсному представленні схожий з оператором імпульсу у координатному представленні: $\hat{x}_p = -\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$.

5. Момент імпульсу

5.1. *Оператор моменту імпульсу* $\hat{\vec{L}} = [\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}]$, має наступні компоненти:
$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\Big(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\Big)$, $\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\Big(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\Big)$, $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\Big(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\Big)$.

(a) Діємо даним оператором на функцію $\psi(x, y, z)$ та перетворюємо:
$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y]\psi(x,y,z) = -\hbar^2\Big(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\Big)\Big(z\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial z}\Big) + \hbar^2\Big(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\Big)\Big(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\Big) =$$
$$= \hbar^2\Big(- y\frac{\partial\psi}{\partial x} - \cancel{yz\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial z}} + \cancel{yx\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}} + \cancel{z^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}} - \cancel{xz\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial z}} + \cancel{zy\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial z}} - \cancel{z^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}} - \cancel{xy\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}} +$$
$$+x\frac{\partial\psi}{\partial y} + \cancel{xz\frac{\partial^2\psi}{\partial z\partial y}}\Big) = \frac{i\hbar^2}{i}\Big(x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big) = i\hbar\hat{L}_z\psi, \text{ отже } [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z.$$

5.2. Нехай функції $\psi_m^\pm$ — це результат дії оператора $\hat{l}_\pm$ на власні функції ψ_m оператора $\hat{l}_z$: $\psi_m^\pm = \hat{l}_\pm\psi_m$. Подіємо на них оператором $\hat{l}_z$: $\hat{l}_z\psi_m^\pm = \hat{l}_z\hat{l}_\pm\psi_m = \hat{l}_z(\hat{l}_x \pm \hat{l}_y)\psi_m = \hat{l}_z\hat{l}_x\psi_m \pm i\hat{l}_z\hat{l}_y\psi_m$. Використаємо результат задачі 5.1: $[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = \hat{l}_z\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z = i\hat{l}_y$, $[\hat{l}_z, \hat{l}_y] = \hat{l}_z\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_z = -i\hat{l}_x$, та продовжимо перетворення: $\hat{l}_z\psi_m^\pm = (i\hat{l}_y + \hat{l}_x\hat{l}_z)\psi_m \pm i(-i\hat{l}_x + \hat{l}_y\hat{l}_z)\psi_m =$
$= i\hat{l}_y\psi_m + \hat{l}_x\hat{l}_z\psi_m \pm \hat{l}_x\psi_m \pm i\hat{l}_y\hat{l}_z\psi_m = i\hat{l}_y\psi_m + \hat{l}_x m\psi_m \pm \hat{l}_x\psi_m \pm i l_y m\psi_m =$
$= (l_x \pm i l_y)\, m\psi_m \pm (\hat{l}_x \pm i l_y)\psi_m = m\hat{l}_\pm\psi_m \pm \hat{l}_\pm\psi_m = (m \pm 1)\hat{l}_\pm\psi_m = (m \pm 1)\psi_m^\pm$.

5.3. Проведемо розрахунки у зворотньому порядку, перетворюючи оператор $\partial/\partial\varphi$ з сферичних координат до декартових ($x = r\cos\varphi\cos\theta$, $y = r\sin\varphi\cos\theta$, $z = r\sin\theta$):
$\frac{\partial}{\partial\varphi} = \frac{\partial x}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial z} = -r\sin\varphi\cos\theta\frac{\partial}{\partial x} + r\cos\varphi\cos\theta\frac{\partial}{\partial y} + 0 = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}$. Звідси випливає, що оператор $\hat{L}_z$ у сферичних координатах має вигляд $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$.

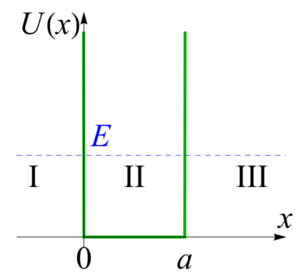
6. Нескінченно-глибока потенційна яма

6.1. Рух одновимірної частинки маси m описується рівнянням Шредінгера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + U(x,t)\psi(x,t).$$

(a) Хвилеві функції стаціонарних станів мають вигляд $\psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$. Підставляючи цей вираз у рівняння Шредингера отримуємо для функції $\psi(x)$ стаціонарне рівняння Шредингера:

$$E\psi(x) = \hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U(x)\psi(x).$$



Потенційна енергія частинки у нескінченно-глибокій потенційній ямі зображена на рисунку. Розглянемо окремо три випадки для значення енергії частинки:
1) $E < 0$; **2)** $E = 0$; **3)** $E > 0$.

1) $E < 0$. Будемо розв'язувати рівняння Шредингера окрема для кожної області, що позначена римською цифрою, окремо.

I. У цій області $x < 0$, тому потенційна енергія $U(x) = \infty$. Підставляючи до рівняння Шредингера маємо $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \infty\cdot\psi(x) = E\psi(x)$. Очевидно, що розв'язок цього рівняння може бути тільки $\psi_I(x) = 0$.

III. $x > a$ та $U(x) = \infty$, тому $\psi_{III}(x) = 0$.

II. $0 < x < a$ та $U(x) = 0$, тому маємо рівняння $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x)$. Шукаємо розв'язок у вигляді $\psi(x) = \mathrm{e}^{kx}$. Підставляючи у рівняння маємо $-\frac{\hbar^2}{2m}k^2\cancel{\mathrm{e}^{kx}} = E\cancel{\mathrm{e}^{kx}}$, звідки $k = \pm\sqrt{-2mE/\hbar^2}$. Звернемо увагу, що підкореневий вираз додатній, бо $E < 0$, тому k — дійсне число. Позначимо, $\gamma = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$, тоді загальний розв'язок рівняння Шредингера приймає вигляд $\psi_{II}(x) = c_1\mathrm{e}^{\gamma x} + c_2{}^{-\gamma x}$.

Запишемо граничні умови — умови неперервності хвильової функції на границі, та знайдемо невідомі константи c_1 та c_2:

$$\begin{cases} \psi_{II}(0) = \psi_I(0), \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \end{cases} \quad \begin{cases} c_1 + c_2 = 0, \\ c_1\mathrm{e}^{\gamma a} + c_2\mathrm{e}^{-\gamma a} = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} c_2 = -c_1, \\ c_1\left(\mathrm{e}^{\gamma a} - \mathrm{e}^{-\gamma a}\right) = 0. \end{cases}$$

Оскільки $\gamma > 0$ та $a > 0$, то вираз $\mathrm{e}^{\gamma a} - \mathrm{e}^{-\gamma a}$ не дорівнює нулю. Тоді ми отримаємо єдиний розв'язок $c_1 = c_2 = 0$. Звідси випливає, що хвильова функція тотожно дорівнює нулю $\psi(x) = 0$, тобто частинка не може існувати при таких енергіях.

2) $E = 0$.

I. $\psi_I(x) = 0$. III. $\psi_{III}(x) = 0$.

II. $0 < x < a$ та $U(x) = 0$, тому рівняння Шредингера зводиться до простого рівняння $\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = 0$. Його розв'язок $\psi_{II} = c_1 x + c_2$.

Запишемо граничні умови, та знайдемо невідомі константи c_1 та c_2:

$$\begin{cases} \psi_{II}(0) = \psi_I(0), \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \end{cases} \quad \begin{cases} c_2 = 0, \\ c_1 a + c_2 = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} c_2 = 0, \\ c_1 a = 0. \end{cases}$$

Оскільки $a > 0$, то ми отримаємо єдиний розв'язок $c_1 = c_2 = 0$. Звідси випливає, що частинка не може існувати при енергії $E = 0$.

2) $E > 0$.

I. $\psi_I(x) = 0$. III. $\psi_{III}(x) = 0$.

II. $0 < x < a$ та $U(x) = 0$, тому рівняння Шредингера має вигляд $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x)$, та його розв'язок $\psi_{II}(x) = c_1 \mathrm{e}^{igx} + c_2{}^{-igx}$, де $g = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

Запишемо граничні умови — умови неперервності хвильової функції на границі, та знайдемо невідомі константи c_1 та c_2:
$\begin{cases} \psi_{II}(0) = \psi_I(0), \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \end{cases}$ $\begin{cases} c_1 + c_2 = 0, \\ c_1\mathrm{e}^{iga} + c_2\mathrm{e}^{-iga} = 0, \end{cases}$ $\begin{cases} c_2 = -c_1, \\ 2ic_1\sin(ga) = 0. \end{cases}$
Ця система рівнянь має або тотожно нульовий розв'язок ($c_1 = c_2 = 0$, тобто частинка не існує), або ненульовий розв'язок, коли $\sin(ga) = 0$, або $g = \pi n/a$, де n — натуральне число. В останньому випадку отримуємо значення енергії та відповідні хвильові функції: $E_n = \dfrac{(\pi n\hbar)^2}{2ma^2}$, $\psi_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0,\ x > a, \\ \sqrt{2/a}\sin(\pi n x/a), & 0 < x < a, \end{cases}$ $n = 1, 2, 3....$

(b) Хвильова функція нестаціонарного стану $\psi(x,t)$ може бути записана у вигляді $\psi(x,t) = \sum\limits_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x)\exp(-iE_n t/\hbar)$, де коефіцієнти c_n пов'язані з хвильовою функцією у початковий момент часу $\psi(x, t=0)$ наступним чином $c_n = \big(\psi_n(x), \psi(x, t=0)\big)$.
Виконаємо розрахунки за допомогою інтегрування частинами для заданої початкової хвильової функції:

$$c_n = \int\limits_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n x}{a} A x(x-a)\mathrm{d}x = -A\frac{\sqrt{2a}}{\pi n}\int\limits_0^a x(x-a)\mathrm{d}\cos\frac{\pi n x}{a} =$$
$$= -A\frac{\sqrt{2a}}{\pi n}\left[\cancelto{0}{x(x-a)\cos\frac{\pi n x}{a}\Big|_0^a} - \int\limits_0^a \cos\frac{\pi n x}{a} d(x^2 - ax)\right] = A\frac{a\sqrt{2a}}{\pi^2 n^2}\left[\cancelto{0}{(2x-a)\sin\frac{\pi n x}{a}\Big|_0^a} - \right.$$
$$\left. -2\int\limits_0^a \sin\frac{\pi n x}{a}\mathrm{d}x\right] = A\frac{2a^2\sqrt{2a}}{\pi^3 n^3}\cos\left(\frac{\pi n x}{a}\right)\Big|_0^a = [(-1)^n - 1]A\frac{2a^2\sqrt{2a}}{\pi^3 n^3}.$$

Виконуючи нормування початкової умови, знаходимо невідому константу A:
$1 = \int\limits_0^a A^2 x^2 (x-a)^2 \mathrm{d}x = A^2\Big(\dfrac{x^5}{5} - \dfrac{2ax^4}{4} + \dfrac{a^2x^3}{3}\Big)\Big|_0^a = \dfrac{a^5 A^2}{120}$, звідки $A = \sqrt{\dfrac{120}{a^5}}$.
Остаточно для хвильової функції нестаціонарного стану маємо:
$\psi(x,t) = -\sum\limits_{m=0}^{\infty}\dfrac{16\sqrt{15}}{\pi^3(2m+1)^3}\psi_{2m+1}(x)\exp(-iE_{2m+1}t/\hbar)$.

7. Потенційна δ-яма.

Нехай потенційна енергія представляється у вигляді двох доданків: $U(x) = U_0(x) - \alpha\delta(x - x_0)$, де $\delta(x - x_0)$ — дельта-функція Дірака, яка може бути означена за допомогою таких двох рівностей:

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0, & x \neq x_0, \\ \infty, & x = x_0, \end{cases} \qquad \int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\mathrm{d}x = 1.$$

а $U_0(x)$ — регулярна функція, яка не містить у своєму складі дельта-функцій. Тоді можна розв'язувати рівняння Шредингера за наступним алгоритмом:

- Розглянути дві області I ($x < x_0$) та II ($x > x_0$).
- В кожній з цих областей окремо розв'язати рівняння Шредингера при $U(x) = U_0(x)$ (без доданку $-\alpha\delta(x - x_0)$, тому що у цих областях $\delta(x - x_0) = 0$).
- Отримані функції $\psi_I(x)$ та $\psi_{II}(x)$ повинні задовольняти граничним умовам: умові неперервності $\psi_I(x_0) = \psi_{II}(x_0)$, та специфічній умові, яка враховує дельта-функцію (виведено нижче).

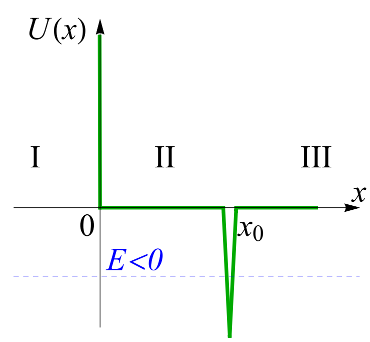
Виведемо, цю специфічну граничну умову. Для цього проінтегруємо рівняння Шредингера на інтервалі від $x_0 - \varepsilon$ до $x_0 + \varepsilon$:

$$E\int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \psi(x)\mathrm{d}x = -\frac{\hbar^2}{2m}\int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x + \int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} U_0(x)\psi(x)\mathrm{d}x - \alpha\int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \delta(x - x_0)\psi(x)\mathrm{d}x.$$

Для подальшого спрощення припустимо, що $\varepsilon \to 0$. Тоді перший та третій інтеграли у попередньому виразі перетворюються на 0 тому, що довжина інтервалу інтегрування $2\varepsilon \to 0$, а під знаком інтегралу стоять регулярні функції. Останній інтеграл, що містить дельта-функцію обчислюється за використання очевидної рівності $\delta(x - x_0)\psi(x) = \delta(x - x_0)\psi(x_0)$. Остаточно отримуємо: $0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\Big|_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} - \alpha\psi(x_0)$. Враховуючи, що $x_0 - 0$ належить I області, а $x_0 + 0$ — II області, отримуємо шукану граничну умову: $\psi'_{II}(x_0) - \psi'_I(x_0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(x_0)$.

7.1. На рисунку представлено дану потенційну енергію

$$U(x) = \begin{cases} -\alpha\delta(x - x_0), & x \geqslant 0,\ x_0 > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$



Будемо розв'язувати рівняння Шредингера для кожної області, що позначена римською цифрою, окремо.

I. У цій області $x < 0$, тому потенційна енергія $U(x) = \infty$. Розв'язок може бути тільки $\psi_I(x) = 0$ (див. розв'язання задачі 6.1).

II. $0 < x < x_0$ та $U(x) = 0$, тому маємо рівняння $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x)$. Шукаючи розв'язок у вигляді $\psi(x) = \mathrm{e}^{kx}$ (див. розв'язання задачі 6.1), знаходимо $k = \pm\sqrt{-2mE/\hbar^2}$. Оскільки $E < 0$, то підкореневий вираз додатній, тобто k — дійсне число. Позначимо, $\gamma = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$, тоді загальний розв'язок рівняння Шредингера приймає вигляд $\psi_{II}(x) = c_1\mathrm{e}^{\gamma x} + c_2\mathrm{e}^{-\gamma x}$.

III. $x > x_0$ та $U(x) = 0$, тому розв'язок рівняння Шредингера приймає вигляд $\psi_{III}(x) = c_3 \mathrm{e}^{\gamma x} + c_4 \mathrm{e}^{-\gamma x}$.

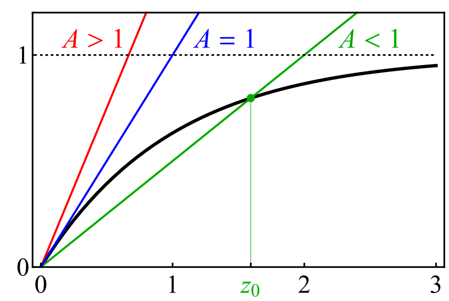
Звернемо увагу, що квадрат модуля хвильової функції визначає густину ймовірності, тому ця функція повинна бути обмеженою при $x \to \pm\infty$. Ця умова може бути записана у вигляді $|\psi(\pm\infty)| < \infty$. Враховуючи, що $\mathrm{e}^{\gamma x} \to +\infty$ при $x \to +\infty$, можна зробити висновок, що $c_3 = 0$, тобто $\psi_{III}(x) = c_4 \mathrm{e}^{-\gamma x}$.

Запишемо граничні умови та підставимо у них знайдені функції:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0), \\ \psi_{II}(x_0) = \psi_{III}(x_0), \\ \psi'_{III}(x_0) - \psi'_{II}(x_0) = -\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_{III}(x_0), \end{cases} \qquad \begin{cases} 0 = c_1 + c_2, \\ c_1 \mathrm{e}^{\gamma x_0} + c_2 \mathrm{e}^{-\gamma x_0} = c_4 \mathrm{e}^{-\gamma x_0}, \\ -\gamma c_4 \mathrm{e}^{-\gamma x_0} - \gamma c_1 \mathrm{e}^{\gamma x_0} + \gamma c_2 \mathrm{e}^{-\gamma x_0} = -\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2} c_4 \mathrm{e}^{-\gamma x_0}. \end{cases}$$

Виключаючи з останнього рівняння змінні c_2 та c_4 за допомогою двох перших рівнянь, отримуємо рівняння $c_1 \mathrm{e}^{\gamma x_0}\left[1 - \dfrac{m\alpha}{\gamma\hbar^2}(1 - \mathrm{e}^{-2\gamma x_0})\right] = 0$. Це рівняння задовольняється, якщо $c_1 = 0$ (тоді $c_1 = c_2 = c_3 = c_4 = 0$, тобто $\psi(x) = 0$, значить квантова частинка не може існувати) або якщо виконана рівність: $\dfrac{\gamma\hbar^2}{m\alpha} = 1 - \mathrm{e}^{-2\gamma x_0}$. Остання рівність визначає можливі значення параметра γ, а отже і можливі значення енергії квантової частинки.

Оскільки рівняння трансцендентне, то розв'яжемо його графічно. Введемо для зручності змінну $z = 2\gamma x_0$ та параметр $A = \dfrac{\hbar^2}{2m\alpha x_0}$, тоді рівняння перепишеться у вигляді: $Az = 1 - \mathrm{e}^{-z}$. На рисунку зображені графіки правої та лівої частини рівняння.

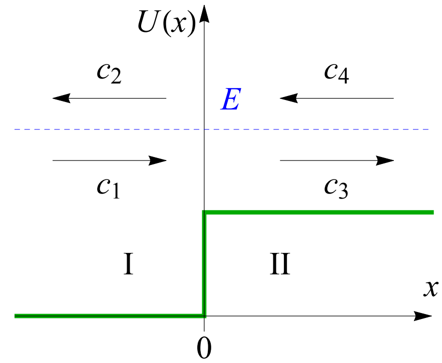


Похилі прямі представляють графік функції $f_1(z) = Az$ при різних значеннях параметру A, а крива — графік функції $f_2(z) = 1 - \mathrm{e}^{-z}$. Очевидно, що пряма $f_1(z) = z$ (при $A = 1$) представляє собою дотичну до графіка $f_2(z) = 1 - \mathrm{e}^{-z}$. Тому при $A \geqslant 1$ рівняння не має додатніх коренів, а при значеннях $A < 1$ рівняння має єдиний розв'язок, позначений z_0. Тобто при $2m\alpha x_0 \leqslant \hbar^2$ квантова частинка з енергією $E < 0$ не може існувати, а при $2m\alpha x_0 > \hbar^2$ частинка може існувати лише при значенні енергії: $E = -\dfrac{\hbar^2 z_0^2}{8m x_0^2}$.

8. Проходження частинок крізь потенційний бар'єр.

8.1. Потенційна енергія частинки

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \geqslant 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$



зображена на рисунку. Розглянемо окремо два випадки для значення енергії частинки:
1) $E > U_0$; **2)** $U_0 > E > 0$.
1) $E > U_0$. Будемо розв'язувати рівняння Шредингера для кожної області, що позначена римською цифрою, окремо.

I. У цій області $x < 0$, тому потенційна енергія $U(x) = 0$. Підставляючи до рівняння Шредингера маємо $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x)$. Шукаючи розв'язок у вигляді $\psi(x) = \mathrm{e}^{kx}$ (див. розв'язання задачі 6.1), знаходимо $k = \pm i\beta_1$, де $\beta_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Оскільки $E > 0$, то підкореневий вираз додатній, тобто β_1 — додатне число. Тоді загальний розв'язок рівняння Шредингера приймає вигляд $\psi_I(x) = c_1\mathrm{e}^{i\beta_1 x} + c_2\mathrm{e}^{-i\beta_1 x}$.

II. У цій області $x < 0$, тому потенційна енергія $U(x) = U_0$. Підставляючи до рівняння Шредингера маємо $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + U_0\psi(x) = E\psi(x)$. Шукаючи розв'язок у вигляді $\psi(x) = \mathrm{e}^{kx}$, знаходимо $k = \pm i\beta_2$, де $\beta_2 = \sqrt{2m(E-U_0)/\hbar^2}$. Оскільки $E > U_0$, то підкореневий вираз додатній, тобто β_2 — додатне число. Тоді загальний розв'язок рівняння Шредингера приймає вигляд $\psi_{II}(x) = c_3\mathrm{e}^{i\beta_2 x} + c_4\mathrm{e}^{-i\beta_2 x}$.

Хвильова функція повинна бути обмеженою при $x \to \pm\infty$: $|\psi(\pm\infty)| < \infty$, див. розв'язок задачі 7.1. Однак, функція $\psi_I(x)$ при $x \to -\infty$, а функція $\psi_{II}(x)$ при $x \to +\infty$, обмежені при довільних значеннях коефіцієнтів. Тому для визначення невідомих коефіцієнтів розглянемо стаціонарну хвильову функцію у першій області $\psi_I(x,t) = c_1\mathrm{e}^{i(\beta_1 x - Et/\hbar)} + c_2\mathrm{e}^{-i(\beta_1 x + Et/\hbar)}$. Вона представляє собою суму хвиль, що біжать: перша експонента — у напрямку осі x, а друга — у протилежному напрямі. Тому така хвильова функція описує не єдину частинку, а потік частинок із певним значенням енергії E.
Припустимо, що потік частинок налітає на потенційний бар'єр із $x = -\infty$. Тоді густина цього потоку повинна визначатися амплітудою c_1, а амплітуда c_2 визначає густину потоку частинок, що відбилися від бар'єру. Розрахуємо цю густину. Для цього скористаємося виразом для потоку ймовірності: $j(x) = (\hbar/m)\,\mathrm{Im}[\psi^*(x)\psi'(x)]$. Підставляючи у цей вираз $\psi_I(x)$ отримуємо: $j_I = (\hbar/m)\,\mathrm{Im}[(c_1^*\mathrm{e}^{-i\beta_1 x} + c_2^*\mathrm{e}^{i\beta_1 x})i\beta_1(c_1\mathrm{e}^{i\beta_1 x} - c_2\mathrm{e}^{-i\beta_1 x})] = (\hbar\beta_1/m)[|c_1|^2 - |c_2|^2 + \mathrm{Re}(c_1c_2^*\mathrm{e}^{2i\beta_1 x} - c_1^*c_2\mathrm{e}^{-2i\beta_1 x})] = (\hbar\beta_1/m)|c_1|^2 - (\hbar\beta_1/m)|c_2|^2$. Перший доданок має зміст потоку частинок, що рухаються у напрямі осі x, а другий (із знаком мінус) — у протилежному. Аналогічно можна визначити, що $j_{II} = (\hbar\beta_2/m)|c_3|^2 - (\hbar\beta_2/m)|c_4|^2$. У цьому випадку перший доданок визначає потік частинок, що пройшли крізь бар'єр, а другий доданок повинен бути рівний нулю, бо немає частинок, що рухаються із $x = +\infty$. Звідси можна розрахувати коефіцієнти відбиття R та проходження T:

$$R = \frac{(\hbar\beta_1/m)|c_2|^2}{(\hbar\beta_1/m)|c_1|^2} = \frac{|c_2|^2}{|c_1|^2}, \qquad T = \frac{(\hbar\beta_2/m)|c_3|^2}{(\hbar\beta_1/m)|c_1|^2} = \frac{\beta_2|c_3|^2}{\beta_1|c_1|^2}.$$

Перейдемо до визначення невідомих констант. Задамо значення $c_1 = 1$, що означає визначення величини потоку частинок, що налітають на бар'єр, та $c_4 = 0$, бо немає частинок, що рухаються із $x = +\infty$. Інші коефіцієнти треба знайти з граничних умов:

$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0), \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0), \end{cases}$ $\begin{cases} 1 + c_2 = c_3, \\ i\beta_1 - i\beta_1 c_2 = i\beta_2 c_3, \end{cases}$ $\begin{cases} c_2 = (\beta_1 - \beta_2)/(\beta_2 + \beta_1), \\ c_3 = 2\beta_1/(\beta_1 + \beta_2), \end{cases}$
Звідки коефіцієнти відбиття R та проходження T:
$R = \dfrac{|c_2|^2}{|c_1|^2} = \dfrac{(\beta_1 - \beta_2)^2}{(\beta_2 + \beta_1)^2}, \qquad T = \dfrac{\beta_2 |c_3|^2}{\beta_1 |c_1|^2} = \dfrac{2\beta_1\beta_2}{(\beta_2 + \beta_1)^2}.$
2) $U_0 > E > 0$. Будемо розв'язувати рівняння Шредингера окрема для кожної області, що позначена римською цифрою, окремо.

I. Розв'язання ідентично до попереднього пункту.

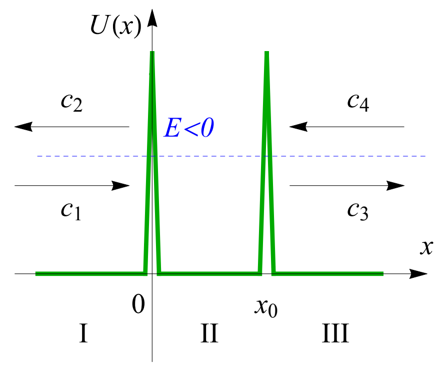
II. У цій області $x < 0$, тому потенційна енергія $U(x) = U_0$. Підставляючи до рівняння Шредингера маємо $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + U_0\psi(x) = E\psi(x)$. Шукаючи розв'язок у вигляді $\psi(x) = \mathrm{e}^{kx}$, знаходимо $k = \pm\gamma$, де $\gamma = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$. Оскільки $E < U_0$, то підкореневий вираз додатній, тобто γ — дійсне число. Тоді загальний розв'язок рівняння Шредингера приймає вигляд $\psi_{II}(x) = c_3\mathrm{e}^{\gamma x} + c_4\mathrm{e}^{-\gamma x}$.

Хвильова функція повинна бути обмеженою при $x \to \pm\infty$: $|\psi(\pm\infty)| < \infty$, див. розв'язок задачі 7.1. Враховуючи, що $\mathrm{e}^{\gamma x} \to +\infty$ при $x \to +\infty$, можна зробити висновок, що $c_3 = 0$, тобто $\psi_{II}(x) = c_4\mathrm{e}^{-\gamma x}$.
Перейдемо до визначення невідомих констант. Задамо значення $c_1 = 1$, що означає визначення величини потоку частинок, що налітають на бар'єр. Інші коефіцієнти треба знайти з граничних умов:
$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0), \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0), \end{cases}$ $\begin{cases} 1 + c_2 = c_4, \\ i\beta_1 - i\beta_1 c_2 = -\gamma c_4, \end{cases}$ $\begin{cases} c_2 = (\beta_1 - i\gamma)/(\beta_1 + i\gamma), \\ c_4 = 2\beta_1/(\beta_1 + i\gamma), \end{cases}$
Звідки коефіцієнти відбиття R та проходження T:
$R = \dfrac{|c_2|^2}{|c_1|^2} = \dfrac{|\beta_1 - i\gamma|^2}{|\beta_1 + i\gamma|^2} = \dfrac{\beta_1^2 + \gamma^2}{\beta_1^2 + \gamma^2} = 1, \qquad T = 1 - R = 0.$

9. Потенційний δ-бар'єр.

9.1. Потенційна енергія частинки

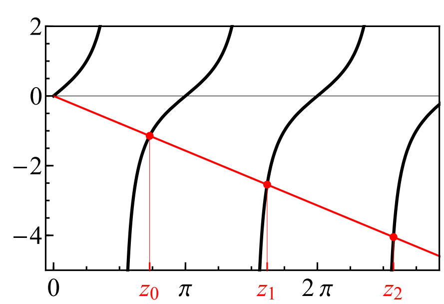
$$U(x) = \alpha\big[\delta(x) + \delta(x - x_0)\big], \quad \alpha > 0.$$



зображена на рисунку. Очевидно, що енергія частинки повинна бути $E > 0$, бо 0 — найменше можливе значення потенційної енергії. Будемо розв'язувати рівняння Шредингера для кожної області, окремо. Зауважимо, що у всіх областях, позначених римською цифрою, значення потенційної енергії $U(x) = 0$, тому можемо записати однакові рівняння Шредингера для кожної області: $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x)$. Шукаючи розв'язок у вигляді $\psi(x) = \mathrm{e}^{kx}$ при $E > 0$ отримуємо: $\psi_I(x) = c_1\mathrm{e}^{igx} + c_2\mathrm{e}^{-igx}$, $\psi_{II}(x) = c_3\mathrm{e}^{igx} + c_4\mathrm{e}^{-igx}$, $\psi_{III}(x) = c_5\mathrm{e}^{igx} + c_6\mathrm{e}^{-igx}$, де $g = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Перейдемо до визначення невідомих констант. Задамо значення $c_1 = 1$, що означає визначення величини потоку частинок, що налітають на бар'єр із $x = -\infty$, та $c_6 = 0$, бо немає частинок, що рухаються із $x = +\infty$. Також задамо значення $c_2 = 0$, бо за умовою задачі частинки не відбиваються від бар'єра. Інші коефіцієнти треба знайти з граничних умов:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0), \\ \psi'_{II}(0) - \psi'_I(0) = \dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_I(0), \\ \psi_{II}(x_0) = \psi_{III}(x_0), \\ \psi'_{III}(x_0) - \psi'_{II}(x_0) = \dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_{III}(x_0), \end{cases} \qquad \begin{cases} 1 = c_3 + c_4, \\ igc_3 - igc_4 - ig = \dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}, \\ c_3\mathrm{e}^{igx_0} + c_4\mathrm{e}^{-igx_0} = c_5\mathrm{e}^{igx_0}, \\ igc_5\mathrm{e}^{igx_0} - igc_3\mathrm{e}^{igx_0} + igc_4\mathrm{e}^{-igx_0} = \dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}c_5\mathrm{e}^{igx_0}. \end{cases}$$

Знаходимо з перших двох рівнянь невідомі c_3 та c_4: $c_3 = 1 - A$, $c_4 = A$, де $A = \dfrac{im\alpha}{\hbar^2 g}$. Потім виключаємо з двох останніх рівнянь невідому c_5 та отримуємо рівняння на невідому g, $igc_3\mathrm{e}^{igx_0} + igc_4\mathrm{e}^{-igx_0} - igc_3\mathrm{e}^{igx_0} + igc_4\mathrm{e}^{-igx_0} = \dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}(c_3\mathrm{e}^{igx_0} + c_4\mathrm{e}^{-igx_0})$, та підставляємо знайдені значення для c_3 та c_4 отримуємо рівняння для невідомої g: $A\mathrm{e}^{-igx_0} = -A[(1-A)\mathrm{e}^{igx_0} + A\mathrm{e}^{-igx_0}]$. Перетворюємо останнє рівняння: $\mathrm{e}^{-igx_0} = -(1-A)\mathrm{e}^{igx_0} - A\mathrm{e}^{-igx_0}$ $\Rightarrow \mathrm{e}^{igx_0} + \mathrm{e}^{-igx_0} = A(\mathrm{e}^{igx_0} - \mathrm{e}^{-igx_0}) \Rightarrow 2\cos(gx_0) = 2iA\sin(gx_0) \Rightarrow \tan(gx_0) = 1/(iA)$. Останнє рівняння задає значення енергії E, при яких можливе повне проходження частинок крізь бар'єр без відбиття.



Оскільки рівняння трансцендентне, то проаналізуємо графічно чи має корені це рівняння. Введемо для зручності змінну $z = gx_0$ та параметр $B = \dfrac{\hbar^2}{m\alpha x_0}$, тоді рівняння перепишеться у вигляді: $\tan(z) = -Bz$. На рисунку зображені графіки правої та лівої частини рівняння.

Очевидно, що рівняння при довільному значенні $B > 0$ має нескінченну кількість розв'язків, по одному для кожної гілки функції $\tan(z)$. Позначимо корені рівняння через z_n, де $n = 0, 1, 2, \ldots$, див. рисунок. Тоді значення енергії можна записати у вигляді: $E_n = \dfrac{\hbar^2 z_n^2}{2mx_0^2}$.

10. Теорія збурень

10.1. Нехай оператор Гамильтона $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ складається з двох доданків: оператора незбуреної системи $\hat{H}_0$, та оператора збурення $\hat{H}'$, та стаціонарне рівняння Шредингера для незбуреної системи розв'язане, $\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$, та отримані значення для рівнів енергії $E_n^{(0)}$ та відповідних хвильових функцій $\psi_n^{(0)}$. Припустимо, що оператор збурення $\hat{H}'$ призводить до малої зміни цих значень, тобто $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \cancel{E_n^{(2)} + \ldots}$ та $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \cancel{\psi_n^{(2)} + \ldots}$, де $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$, … — поправки першого, другого, ... порядку до незбурених рівнів енергії, а $\psi_n^{(1)}$, $\psi_n^{(2)}$, … — поправки першого, другого, ... порядку до відповідних хвильових функцій. Надалі ми будемо нехтувати поправками поправками другого та старших порядків та розрахуємо поправки першого порядку. Нагадаємо, що сукупність $\{\psi_n^{(0)}\}$ представляє собою ортонормований базис у просторі функцій, оскільки оператор Гамільтона ермітовий, тобто ми можемо розкласти невідомі функції $\psi_n^{(1)}$ за цим базисом: $\psi_n^{(1)} = \sum_k c_{nk}^{(1)}\psi_k^{(0)}$, та шукати надалі невідомі коефіцієнти $c_{nk}^{(1)}$.

Підставимо вирази для $\hat{H}$, E_n та ψ_n у стаціонарне рівняння Шредингера, $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$, для збуреної системи: $(\hat{H}_0 + \hat{H}')(\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}) = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)})(\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)})$. Розкриємо дужки та знехтуємо поправками другого порядку (добутку двох поправок першого порядку): $\cancel{\hat{H}_0\psi_n^{(0)}} + \hat{H}'\psi_n^{(0)} + \hat{H}_0\sum_k c_{nk}^{(1)}\psi_k^{(0)} + \cancel{\hat{H}'\psi_k^{(1)}} = \cancel{E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(0)}\sum_k c_{nk}^{(1)}\psi_k^{(0)} + \cancel{E_n^{(1)}\psi_k^{(1)}}$. Перші доданки у правій та лівій частинах скоротилися завдяки тому, що виконується стаціонарне рівняння Шредингера для незбуреної системи, $\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$. Також це дозволяє у третьому доданку замінити $\hat{H}_0\psi_k^{(0)}$ на $E_k^{(0)}\psi_k^{(0)}$. Помножуючи скалярно отримане рівняння на $\psi_m^{(0)}$, маємо: $H'_{mn} + \sum_k c_{nk}^{(1)}E_k^{(0)}\delta_{mk} = E_n^{(1)}\delta_{mn} + E_n^{(0)}\sum_k c_{nk}^{(1)}\delta_{mk}$, де $H'_{mn} = (\psi_m^{(0)}, \hat{H}'\psi_n^{(0)})$. Тут ми скористалися тим, що для елементів ортонормованого базису виконується наступне співвідношення $(\psi_m^{(0)}, \psi_k^{(0)}) = \delta_{mk}$. Завдяки δ_{mk} сума по k зводиться до одного доданку при $k = m$: $E_n^{(1)}\delta_{mn} + c_{nm}^{(1)}[E_n^{(0)} - E_m^{(0)}] = H'_{mn}$. Підставляючи $m = n$ отримуємо поправку до значення енергії: $E_n^{(1)} = H'_{nn}$. При $m \neq n$ отримуємо невідомі коефіцієнти: $c_{nm}^{(1)} = H'_{mn}/[E_n^{(0)} - E_m^{(0)}]$. Зауважимо, що значення $c_{nn}^{(1)} = 0$ не можливо знайти з вищенаведених рівнянь, необхідно проводити додатковий аналіз, який ми тут не приводимо.
Оскільки ми припустили, що оператор збурення $\hat{H}'$ призводить до малої зміни значень енергії та хвильових функцій, то відзначимо, що це припущення вірне, якщо $|c_{nm}^{(1)}| \ll 1$, тобто $|H'_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$.

10.2. Звернемо увагу, що при $U_0 \to 0$ потенційна енергія приймає вигляд з задачі 6.1. Тому ми можемо записати, що рівні енергії та хвильові функції незбуреної задачі мають вигляд:

$$E_n^{(0)} = \frac{(\pi n\hbar)^2}{2ma^2}, \quad \psi_n^{(0)}(x) = \begin{cases} 0, & x < 0,\ x > a, \\ \sqrt{2/a}\sin(\pi n x/a), & 0 < x < a, \end{cases} \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

а оператор збурень: $\hat{H}' = U_0\cos^2(\pi x/a)$. Тому ми можемо розрахувати H'_{mn}:

$$H'_{mn} = (\psi_m^{(0)}, \hat{H}'\psi_n^{(0)}) = \int_{-\infty}^{+\infty}[\psi_m^{(0)}(x)]^*\hat{H}'\psi_n^{(0)}(x)\mathrm{d}x = \frac{2U_0}{a}\int_0^a \sin\tfrac{\pi m x}{a}\cos^2\tfrac{\pi x}{a}\sin\tfrac{\pi n x}{a}\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{U_0}{2a}\int_0^a \Big[\cos\tfrac{\pi x(m-n)}{a} - \cos\tfrac{\pi x(m+n)}{a}\Big]\Big[1 + \cos\tfrac{2\pi x}{a}\Big] = \frac{U_0}{2a}\int_0^a \Big\{\cos\tfrac{\pi x(m-n)}{a} - \cos\tfrac{\pi x(m+n)}{a} +$$

$$+ \frac{1}{2}\Big[\cos\tfrac{\pi x(m-n+2)}{a} + \cos\tfrac{\pi x(m-n-2)}{a} - \cos\tfrac{\pi x(m+n+2)}{a} - \cos\tfrac{\pi x(m+n-2)}{a}\Big]\Big\}\mathrm{d}x =$$

$$= \frac{U_0}{2}\Big\{\delta_{m-n,0} - \cancelto{0}{\delta_{m+n,0}} + \frac{1}{2}\Big[\delta_{m-n+2,0} + \delta_{m-n-2,0} - \cancelto{0}{\delta_{m+n+2,0}} - \delta_{m+n-2,0}\Big]\Big\}.$$

Тут ми розрахували шість однакових інтегралів наступним способом:

$$\int_0^a \cos\tfrac{\pi x k}{a}dx = \left\{ \begin{array}{rcl} \tfrac{a}{\pi k}\sin\tfrac{\pi k x}{a}\Big|_0^a & = & 0, \quad k \neq 0, \\ x\Big|_0^a & = & a, \quad k = 0 \end{array} \right\} = a\delta_{k,0}.$$

Оскільки m та n у розрахунку H'_{mn} можуть приймати лише натуральні значення, тому $\delta_{m+n,0}$ та $\delta_{m+n+2,0}$ завжди рівні нулю. Розрахуємо першу поправку к енергії при $m = n$: $E_n^{(1)} = H'_{nn} = \dfrac{U_0}{2}\left\{\delta_{0,0} + \dfrac{1}{2}\left[\delta_{2,0} + \delta_{-2,0} - \delta_{2n-2,0}\right]\right\} = \dfrac{U_0}{2}\left[1 - \dfrac{\delta_{n,1}}{2}\right]$, тобто $E_1^{(1)} = \dfrac{U_0}{4}$, $E_{n\geqslant 2}^{(1)} = \dfrac{U_0}{2}$.
Далі розрахуємо коефіцієнти $c_{nm}^{(1)}$, при $m \neq n$: $c_{nm}^{(1)} = \dfrac{U_0}{4}\left[\delta_{m,n-2} + \delta_{m,n+2} - \cancelto{0}{\delta_{m+n,2}}\right] / [E_n^{(0)} - E_m^{(0)}]$.
Звернемо увагу, що $\delta_{m+n,2}$ може не дорівнювати 0 лише при $m = n = 1$. Тепер можемо розрахувати хвильові функції, зводячи суму лише до двох (або одного) доданків, завдяки $\delta_{m,n-2}$ та $\delta_{m,n+2}$: $\psi_{n\geqslant 3}^{(1)} = \dfrac{U_0}{8}\dfrac{ma^2}{(\pi\hbar)^2}\left[\dfrac{\psi_{n-2}^{(0)}}{n-1} - \dfrac{\psi_{n+2}^{(0)}}{n+1}\right]$, $\quad \psi_{n=1,2}^{(1)} = -\dfrac{U_0}{8}\dfrac{ma^2}{(\pi\hbar)^2}\dfrac{\psi_{n+2}^{(0)}}{n+1}$.
Аналогічно при розрахунку поправки, $E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} |H'_{mn}|^2 / [E_n^{(0)} - E_m^{(0)}]$, другого порядку до енергії, зводимо суму лише до двох (або одного) доданків:
$E_{n\geqslant 3}^{(2)} = \dfrac{U_0^2}{32}\dfrac{ma^2}{(\pi\hbar)^2}\left[\dfrac{1}{n-1} - \dfrac{1}{n+1}\right] = \dfrac{U_0^2}{16}\dfrac{ma^2}{(\pi\hbar)^2}\dfrac{1}{n^2-1}$, $\quad E_{n=1,2}^{(2)} = -\dfrac{U_0^2}{32}\dfrac{ma^2}{(\pi\hbar)^2}\dfrac{1}{n+1}$.

11. Квазікласичне наближення

11.1. Розглянемо одновимірне стаціонарне рівняння Шредингера, $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+U(x)\psi(x)=E\psi(x)$. Якщо ми покладемо $\hbar\to 0$ безпосередньо у цьому рівнянні, то прийдемо до тривіального рівняння, яке не має фізичного змісту. Тому в першу чергу треба записати його в іншому вигляді. Введемо до розгляду нову функцію $S(x)$, як: $\psi(x)=\exp\big[iS(x)/\hbar\big]$. Розрахуємо першу, $\psi'(x)=\exp\big[iS(x)/\hbar\big]iS'(x)/\hbar$, та другу, $\psi''(x)=\exp\big[iS(x)/\hbar\big]\big\{-[S'(x)]^2/\hbar^2+iS''(x)/\hbar\big\}$, похідні та підставимо у рівняння Шредингера. Скорочуючи на $\exp\big[iS(x)/\hbar\big]$, маємо: $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Big\{-\dfrac{1}{\hbar^2}[S'(x)]^2+\dfrac{i}{\hbar}S''(x)\Big\}+U(x)=E$, або $[S'(x)]^2-i\hbar S''(x)=2m\big[E-U(x)\big]$. Останнє рівняння може бути розв'язане наближено наступним чином. Розкладемо $S(x)$ в ряд за малим параметром $\hbar$ та знехтуємо поправками другого та старших порядків: $S(x)=S_0(x)+(\hbar/i)S_1(x)+\cancel{(\hbar/i)^2S_1(x)+\ldots}$. Підставляючи такий розклад до рівняння Шредингеру, маємо: $[S_0'(x)]^2+2(\hbar/i)S_0'(x)S_1'(x)-\cancel{\hbar^2[S_1'(x)]^2}-i\hbar S_0''(x)-\cancel{\hbar^2S_1''(x)}=p^2(x)$, де позначено $p(x)=\sqrt{2m\big[E-U(x)\big]}$. Покладемо $\hbar\to 0$ та знаходимо: $S_0'(x)=\pm p(x)$. Далі, повертаючись до попереднього рівняння, знаходимо: $S_1'(x)=-S_0(x)/\big[2S_0'(x)\big]$. Інтегруючи два останні рівняння, маємо: $S_0(x)=\pm\displaystyle\int p(x)\mathrm{d}x$, $S_1(x)=-\dfrac{1}{2}\displaystyle\int\dfrac{p'(x)}{p(x)}\mathrm{d}x=-\dfrac{1}{2}\ln p(x)+\ln C$. Підставляючи отримані вирази для $S_0(x)$ та $S_1(x)$ у $\psi(x)$ знаходимо остаточно:

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{p(x)}}\exp\Big[\frac{i}{\hbar}\int p(x)\mathrm{d}x\Big]+\frac{C_2}{\sqrt{p(x)}}\exp\Big[-\frac{i}{\hbar}\int p(x)\mathrm{d}x\Big].$$

11.2. Розрахуємо точки повороту для даного потенціалу, $U(x)=m\omega^2x^2/2$. Для цього прирівняємо $U(x)=E$, та знаходимо $x=\pm\sqrt{2E/m\omega^2}$. За правилом квантування Бора-Зомерфельда маємо: $\int\limits_a^b p(x)\mathrm{d}x=\pi\hbar\big(n+1/2\big)$, де $p(x)=\sqrt{2m\big[E-U(x)\big]}$, a та b — точки повороту, $a=-\sqrt{2E/m\omega^2}$, $b=\sqrt{2E/m\omega^2}$. Перетворимо інтеграл та зробимо заміну змінної: $\int\limits_a^b\sqrt{2m\big[E-m\omega^2x^2/2\big]}\mathrm{d}x=\sqrt{2mE}\int\limits_a^b\sqrt{1-(m\omega^2/2E)x^2}\mathrm{d}x=\sqrt{2mE}\sqrt{\dfrac{2E}{m\omega^2}}\int\limits_{-1}^{1}\sqrt{1-y^2}\mathrm{d}y$. Останній інтеграл може бути легко розрахований, користуючись його геометричним змістом. Розглянемо функцію $z(y)=\sqrt{1-y^2}$. Ця функція задає півколо $z^2+y^2=1$ з центром у нулі та радіусом 1. Тому інтеграл, який є площею під графіком функції дорівнює площі півкруга, $\pi/2$. Тоді за правилом квантування маємо: $\pi E/\omega=\pi\hbar\big(n+1/2\big)$, та остаточно: $E_n=\hbar\omega\big(n+1/2\big)$. Зауважимо, що це наближене значення для рівнів енергії співпадає із точним значенням. Але у загальному випадку квазікласичне наближення вірне для високих рівнів енергії, $n\gg 1$.

11.3. Коефіцієнт прозорості $T(E)$ для частинок з енергією E в квазікласичному наближенні визначається як $T(E)\approx\exp\Big[-\dfrac{2}{\hbar}\int\limits_a^b|p(x)|\mathrm{d}x\Big]$, де $p(x)=\sqrt{2m\big[E-U(x)\big]}$, a та b — точки повороту. Для даної потенційної енергії маємо такі точки повороту: 0 та $b=a(1-E/U_0)$. Тоді розрахуємо інтеграл: $\int\limits_0^b\sqrt{2m\big[U_0(1-x/a)-E\big]}\mathrm{d}x=\sqrt{2mU_0/a}\int\limits_0^b\sqrt{b-x}\mathrm{d}x=-\dfrac{2}{3}\sqrt{2mU_0/a}\big(b-x\big)^{3/2}\big|_0^b=-\dfrac{2}{3}b^{3/2}\sqrt{2mU_0/a}$. Підставляючи результат в вираз для $T(E)$, остаточно отримуємо: $T(E)\approx\exp\Big[-\dfrac{4a}{3\hbar}\sqrt{2mU_0}\big(1-E/U_0\big)^{3/2}\Big]$. Зауважимо, що квазікласичне наближення вірне лише тоді, коли коефіцієнт прозорості малий, $T(E)\ll 1$.

12. Рух в центральному полі

Стаціонарне рівняння Шредингера для однієї частинки маси μ у тривимірному просторі може бути записане у вигляді $-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\Big(\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\Big)+U(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$. Якщо потенційна енергія має центральну симетрію, $U(x,y,z)=U(r)$, де $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ — відстань від центра координат, то для подальшого розв'язування зручно перейти до сферичних координат: $-\dfrac{\hbar^2}{2\mu r^2}\Big[\dfrac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\dfrac{\partial\psi}{\partial r}\Big)-\dfrac{\hat{L}^2\psi}{\hbar^2}\Big]+\big[U(r)-E\big]\psi(r,\theta,\varphi)=0$, де $\hat{L}^2$ — оператор квадрату моменту імпульсу: $\hat{L}^2\psi=-\hbar^2\Big[\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\dfrac{\partial\psi}{\partial\theta}\Big)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\Big]$. Відомо, що власними функціями оператора $\hat{L}^2$ є сферичні функції: $\hat{L}^2Y_{lm}(\theta,\varphi)=\hbar^2l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi)$, де $l=0,1,2,\ldots$ та $m=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l$ називаються азимутальним та магнітним квантовими числами, відповідно. Скористаємося методом розділення змінних у рівнянні з частковими похідними та представимо хвилеву функцію у вигляді $\psi(r,\theta,\varphi)=\psi(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$. Тоді рівняння Шредингеру спроститься: $-\dfrac{\hbar^2}{2\mu r^2}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big(r^2\dfrac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\Big)+\Big[U(r)+\dfrac{\hbar^2l(l+1)}{2\mu r^2}-E\Big]\psi(r)=0$, де другий доданок у квадратних дужках називається відцентровою потенційною енергією. Припустимо, що потенційна енергія $U(r)$ — це енергія притягання, $U(r)<0$ та $U(r\to\infty)\to0$. Тоді, в залежності від знаку енергії E, ми отримаємо різний характер руху: при $E>0$ частинка рухається не локалізована, а при $E<0$ — локалізована поблизу центра координат. Зосередимося на другому випадку, $E<0$. Для подальшого розв'язання рівняння Шредингера представимо хвильову функцію у вигляді: $\psi(r)=g(r)r^l\exp(-kr)$, де $k=\sqrt{2\mu|E|/\hbar^2}$. Підставляючи цей вираз у рівняння Шредингера приходимо до наступного рівняння для невідомої функції $g(r)$: $rg''(r)+2g'(r)(l-kr+1)-g(r)\big[2k(l+1)+ru(r)\big]=0$, де $u(r)=2\mu U(r)/\hbar^2$.

12.1. Розглянемо потенційну енергію у вигляді кулонівського потенціалу (електрон поблизу ядра атома): $u(r)=-\alpha/r$, де $\alpha>0$. Представимо $g(r)=\sum\limits_{n=0}^{\infty}a_nr^n$ у вигляді степеневого ряду та підставимо до рівняння:
$\sum\limits_{n=0}^{\infty}a_nn(n-1)r^{n-1}+2(l+1)\sum\limits_{n=0}^{\infty}a_nnr^{n-1}-2k\sum\limits_{n=0}^{\infty}a_nnr^n-\big[2k(l+1)-\alpha\big]\sum\limits_{n=0}^{\infty}a_nr^n=0.$
У перших двох сумах зробимо заміну $n-1$ на m, а в двох останніх — n на m. Тоді у всіх сумах буде о дна і та ж степінь r^m: $\sum\limits_{m=0}^{\infty}r^m\big\{a_{m+1}(m+1)[m+2(l+1)]-a_m[2k(m+l+1)-\alpha]\big\}=0$.
Степеневий ряд дорівнює нулю тоді і лише тоді, коли всі його коефіцієнти рівні нулю, тобто отримуємо рекурентне співвідношення для a_m: $\boxed{a_{m+1}=a_m\dfrac{2k(m+l+1)-\alpha}{(m+1)[m+2(l+1)]}}$. За його допомогою можна знайти послідовно всі значення a_m: $a_0\xrightarrow{m=0}a_1\xrightarrow{m=1}a_2\xrightarrow{m=2}\ldots$, за умови, що a_0 — відомо. З'ясуємо, чи може степеневий ряд бути нескінченним. Припустимо, що це можливо, тоді спростимо рекурентне співвідношення за умови $m\to\infty$: $a_{m+1}\approx a_m\dfrac{2k}{m+1}$. Використовуючи його послідовно, знаходимо a_m через a_0: $a_{m+1}\approx a_m\dfrac{2k}{m+1}\approx a_{m-1}\dfrac{(2k)^2}{(m+1)m}\approx a_{m-2}\dfrac{(2k)^3}{(m+1)m(m-1)}\approx\ldots\approx a_0\dfrac{(2k)^{m+1}}{(m+1)!}$. Тепер обчислимо $g(r)$ при таких a_m: $g(r)=\sum\limits_{m=0}^{\infty}a_mr^m\sim a_0\sum\limits_{m=0}^{\infty}\dfrac{(2kr)^m}{m!}=a_0\exp(2kr)$. Тоді функція $\psi(r)\sim\exp(kr)$, тобто зростає до ∞ при $r\to\infty$, що суперечить фізичному змісту хвильової функції. Таким чином, степеневий ряд повинен скінченим, тобто має існувати таке значення n_r,

яке називається радіальним квантовим числом, таке, що $a_{n_r} \neq 0$, а $a_{n_r+1} = 0$. Це можливо лише за умови, що чисельник у рекурентному співвідношенні обертається на нуль: $2k(n_r + l + 1) - \alpha = 0$, звідки знаходимо значення $k = \alpha/2n$, де $n = n_r + l + 1$ називається головним квантовим числом. Тоді значення рівнів енергії приймають вигляд: $E_n = -\alpha^2\hbar^2/(8n^2\mu)$.

12.2. Якщо нам відомі головне $n = 4$ та азимутальне $l = 1$ квантові числа, то ми можемо розрахувати значення $k = \alpha/8$, та радіальне квантове число $n_r = n - l - 1 = 2$. Це значить, що старша степінь $g(r)$ має бути $n_r = 2$, тобто: $g(r) = \sum\limits_{n=0}^{n_r} a_n r^n = a_0 + a_1 r + a_2 r^2$.
Розрахуємо коефіцієнти a_1 та a_2 з рекурентного співвідношення (див. рівність у рамочці у розв'язанні задачі 12.1), підставляючи послідовно $m = 0$ та $m = 1$:
$a_1 = a_0 \dfrac{2k(l+1) - \alpha}{2(l+1)} = a_0 \dfrac{4k - 8k}{4} = -a_0 k, \quad a_2 = a_1 \dfrac{2k(l+2) - \alpha}{2[1 + 2(l+1)]} = a_1 \dfrac{6k - 8k}{10} = a_0 \dfrac{k^2}{5}.$
Таким чином, хвильова функція приймає вигляд: $\psi(r) = a_0 r[1 - kr + (kr)^2/5]e^{-kr}$.
В першу чергу потрібно нормувати хвильову функцію, тобто знайти a_0. Зауважимо, що нормувати функцію потрібно у тривимірному просторі. Оскільки ми розглядаємо функцію у сферичних координатах, то ми повинні інтегрувати по координатам (r, θ, φ), для яких $\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = r^2 \cos\theta \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$. Залишаючи лише координату r та інтегруючи по ній від 0 до ∞, отримуємо такий вираз для норми функції $\psi(x)$: $\int_0^\infty |\psi(r)|^2 r^2 \mathrm{d}r = 1$. Підставляючи сюди вираз для $\psi(r)$, отримуємо наступний результат:
$\int\limits_0^\infty |\psi(r)|^2 r^2 \mathrm{d}r = a_0^2 \int\limits_0^\infty \left[1 - kr + \dfrac{(kr)^2}{5}\right]^2 e^{-2kr} r^4 \mathrm{d}r = a_0^2[I_4 + k^2 I_6 + \dfrac{k^4 I_8}{25} - 2kI_5 + \dfrac{2k^2 I_6}{5} - \dfrac{2k^3 I_7}{5}] =$
$= \dfrac{a_0^2}{(2k)^5}[4! + \dfrac{6!}{2^2} + \dfrac{8!}{25 \cdot 2^4} - \dfrac{2 \cdot 5!}{2} + \dfrac{2 \cdot 6!}{5 \cdot 2^2} - \dfrac{2 \cdot 7!}{5 \cdot 2^3}] = \dfrac{3}{20} \dfrac{a_0^2}{k^5} = 1$, де ми позначили через I_s наступний інтеграл, який може бути розрахований за допомогою інтегрування частинами: $I_s = \int\limits_0^\infty r^s \exp(-2kr) \mathrm{d}r = \dfrac{s}{2k} I_{s-1} = \cdots = \dfrac{s!}{(2k)^s} I_0 = \dfrac{s!}{(2k)^{s+1}}$. Звідси отримуємо значення константи $a_0 = \sqrt{20k^5/3}$.
Аналогічним чином можуть бути розраховані:

(a) радіус электронної хмари $\overline{r} = \int\limits_0^\infty \psi^*(r) r \psi(r) r^2 \mathrm{d}r = \dfrac{69 a_0^2}{80 k^6} = \dfrac{23}{4k} = \dfrac{46}{\alpha}$;

(b) товщіна электронної хмари $\Delta r = \sqrt{\overline{(r - \overline{r})^2}} = \left[\int\limits_0^\infty \psi^*(r)(r - \overline{r})^2 \psi(r) r^2 \mathrm{d}r\right]^{1/2} = \dfrac{2\sqrt{71}}{\alpha}$.