<u>Лекція № 11</u>

ЗАКОН ЗБЕРЕЖЕННЯ ПАРНОСТІ

У квантовій механіці є ще один особливий закон збереження, пов'язаний з комутацією гамільтоніана з оператором інверсії (дзеркального відбиття). Гамільтоніан замкненої системи інваріантний відносно операції інверсії $\hat{I}\psi(\vec{r})=\psi(-\vec{r})$:

$$\left[\hat{H},\hat{I}\right]=0,\quad \left[\hat{\vec{L}},\hat{I}\right]=0,\quad \vec{L}=-i\hbar\vec{r}\times\frac{\partial}{\partial\vec{r}};$$

Оператор інверсії – це ермітов, унітарний оператор. Його ВФ – це будь-які парні й непарні функції відповідно зі ВЗ +1 і –1:

$$\hat{I}\psi(\vec{r})=\lambda\psi(\vec{r});\quad \hat{I}^2=1,\Rightarrow,\hat{I}^2\psi(\vec{r})=\lambda^2\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r});$$
$$\lambda^2=1,\lambda=\pm1;$$
$$\lambda=+1,\psi(-\vec{r})=\psi(\vec{r});$$
$$\lambda=-1,\psi(-\vec{r})=-\psi(\vec{r}).$$

Якщо стан замкненої системи мав певну парність, то ця парність зберігається в часі. Існують правила відбору по парності. Одночасно можуть зберігатися l,m й парність. Інверсія в сферичних координатах: $r\to r,\theta\to\pi-\theta,\varphi\to\varphi+\pi.$ Правило відбору для переходу між станами $(-1)^l a$ (a – внутрішня симетрія частинки)

СПІВВІДНОШЕННЯ НЕВИЗНАЧЕНОСТИ ДЛЯ ЧАСУ ТА ЕНЕРГІЇ

Знайдемо співвідношення між невизначеністю в енергії та часом вимірювання.

Скористаємося нерівностями Гейзенберга для двох некомутуючих операторів $\delta A\delta B\ge\frac{1}{2}\left\|\overline{\left[A,B\right]}\right\|$ та визначенням похідній за часом від оператора фізичної величини $\overline{\frac{d\hat{A}}{dt}}=\frac{d}{dt}\left(\overline{A}\right),\ \frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{A}\right].$

Для оператора Гамільтона $\hat{H}$ й довільного оператора $\hat{R}$ за умови, що $\hat{R}$ явно не залежить від часу, маємо:

$$\delta E\delta R\ge\frac{1}{2}\overline{\left[\hat{H},\hat{R}\right]};\quad \overline{\frac{d\hat{R}}{dt}}=\dot{\overline{R}}=\frac{i}{\hbar}\overline{\left[\hat{H},\hat{R}\right]};$$
$$\delta E\delta R\ge\frac{1}{2}\dot{\overline{R}}.$$

Похідна від середнього значення $\dot{\bar{R}}$ визначає швидкість зміни середнього значення. Зв'яжемо її із середньоквадратичним відхиленням δR (зміною R за час δt):

$$\delta R = \dot{\bar{R}}\delta t.$$

Отримаємо співвідношення для часу та енергії

$$\delta E \delta t \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Таким чином, існує певна залежність між неточністю виміру енергії δE й швидкістю зміни довільних величин, які відносяться до розглянутої системи. Наприклад, для хвильового пакета $\delta R = \delta x$ – ширина пакета, а δt – час проходження пакета через певну точку простору. Час істотно залежить від невизначеності енергії. Зі співвідношення невизначеності для часу й енергії випливає формула для часу життя збудженого стану:

$$\Gamma \sim \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\tau}$$

Γ – невизначеність енергії в початковому стані (ширина рівня), τ – період напіврозпаду.

РУХ У ЦЕНТРАЛЬНОМУ ПОЛІ

Задача двох тіл у нерелятивістській квантовій механіці (як і в класичній механіці) вирішується переходом у систему центру інерції двох взаємодіючих частинок.

Задача двох тіл, які взаємодіють, описується гамільтоніаном

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\hat{\vec{p}}_2^{\,2}}{2m_2} + U\left(|\hat{\vec{r}}_1 - \hat{\vec{r}}_2|\right)$$

Така система має 6 ступенів свободи (6 незалежних кординат. Для розділу змінних вводимо нові координати:

$\vec{R} = \dfrac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}$ – радіус-вектор центру інерції двох частинок,

$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}$ – радіус вектор відносного руху двох частинок. Гамільтоніан в таких змінних розділяється на дві частини (вільного руху центру інерції й руху в центральному полі)

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\Delta_R}_{\textit{вільний рух ц.і.}} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r + U(r)}_{\textit{рух в центр.полі}},$$

де $\mu = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ – приведена маса двох частинок. Розв'язок шукаємо у вигляді

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \to \psi(\vec{R}, \vec{r}) = \psi(\vec{R})\psi(\vec{r}), \quad \psi(\vec{R}) = \exp(i\vec{K}\vec{R}).$$

Хвильова функція $\psi(\vec{R}) = \exp(i\vec{K}\vec{R})$ – це плоска хвиля, яка описує вільний рух частинки з масою $m_1 + m_2$ з певним значенням хвильового числа $\vec{K}$ та радіус-вектором $\vec{R}$.

Якщо помістити початок відліку в центр інерції, тобто покласти $\vec{R} = 0,$ то залишається тільки рух осно центру інерції в центральному полі. Гамільтоніан частинки, яка рухається в центральному полі має вигляд

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta\varphi}\right] + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2\hat{\vec{l}}^{\,2}}{2\mu r^2} + U(r);$$

$$\Delta_{\theta\varphi} = \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] = -\hat{\vec{l}}^{\,2}.$$

Комутаційні співвідношення для $\hat{H}, \hat{\vec{l}}^{\,2}, \hat{l}_z$:

$$\left[\hat{H}, \hat{\vec{l}}^{\,2}\right] = 0, \quad \left[\hat{H}, \hat{l}_z\right] = 0, \quad \left[\hat{\vec{l}}^{\,2}, \hat{l}_z\right] = 0.$$

Одночасно зберігаються енергія, квадрат кутового моменту й проекція кутового моменту на вісь z. Це означає, що існують спільні ВФ у оператора Гамільтона, оператора квадрата моменту й оператора проекції моменту на вісь z. Як відомо, спільні ВФ $\vec{l}^{\,2}, l_z$ – це сферичні функції, отже, розв'язок РШ для руху в центральному полі можна шукати у вигляді

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Рівняння для радіальної частини хвильової функції $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + U_{eff.}(r)R(r) = ER(r);$$

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

ХФ $R(r)$ повинна бути скінченною при $r = 0.$

Ефективна енергія складається із власно потенціальної енергії $U(r)$ та відцентрової енергії $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$. Відцентрова енергія виникла завдяки неінерціальності системи відліку, яка обертається. Перетворимо радіальну частину оператора Лапласа

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) = R'' + \frac{2}{r}R' = \frac{1}{r}(rR)''$$

і введемо допоміжну функцію $\chi(r) = R(r)r$. РШ для функції $\chi(r)$ – це одновимірне РШ для частинки масою μ, що рухається в ефективному полі $U_{eff.}$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi''(r) + U_{eff.}(r)\chi(r) = E\chi(r), \quad 0 \le r < \infty$$

Рух обмежений з одного боку, отже, рівні енергії не вироджені, а гранична умова в нулі

$$\chi(0) = 0$$

забезпечить скінченність ХФ у нулі.

Повний набір фізичних величин для руху в центральному полі – це E, l, m (енергія, орбітальне квантове число й магнітне квантове число). Радіальна ХФ залежить від двох квантових чисел E, l, тобто стану із заданими E, l $2l+1$-кратно виродженi за значеннями магнітного квантового числа. Повна ХФ

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R_{El}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi).$$

Сферична функція Y_{lm} визначається операторами $\vec{L}^2, L_z$, а вигляд радіальної частини ХФ залежить від потенціальної енергії $U(r)$.

Прийняті наступні позначення для станів із заданим l:

$$\begin{array}{llllll} l = 1, & 2, & 3, & 4, & 5, & 7, \ldots \\ \quad s, & p, & d, & f, & g, & h, \ldots \end{array}$$

Spherical, polar, diffuse state – сферичний, полярний дифузійний стани. Імовірність виявити частинку в елементі об'єму

$$dW(r,\theta,\varphi) = |\psi(r,\theta,\varphi)|^2\, dV, \quad dV = r^2 dr do, \quad do = \sin\theta d\theta d\varphi.$$

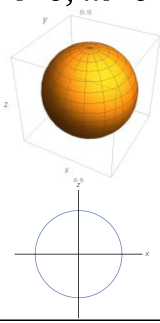
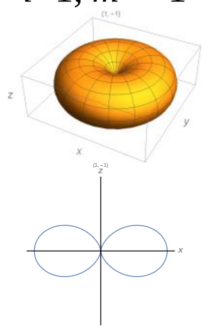
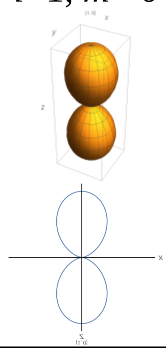
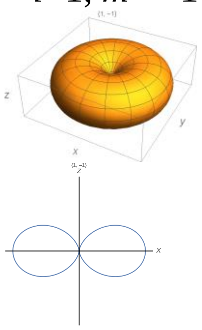
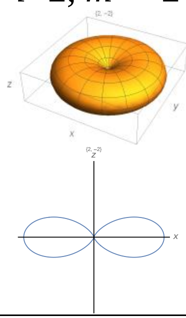
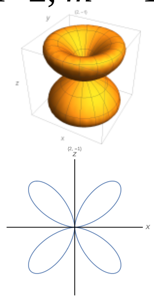
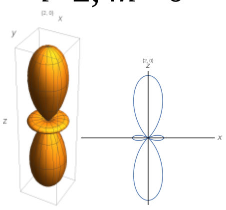
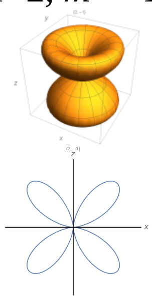
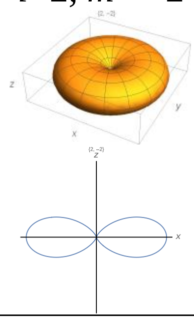
У сферичному шарі dV

$$dW = |\mathrm{R}(r)|^2\, r^2 dr$$

В елементі тілесного кута do

$$dW = |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2\, do$$

Нижче наведені полярні діаграми dW/do розподілу по кутах для різних значень l і m

l=0, m=0 				
l=1, m= –1 	l=1, m= 0 	l=1, m= +1 		
l=2, m= –2 	l=2, m= –1 	l=2, m= 0 	l=2, m= +1 	l=2, m= +2 

В наступній лекції розглянемо загальні особливості руху в центральному полі (див початок лекції № 12):

1. Дослідимо поведінку $R(r)$ при $r \to 0$ за умови, що $U(r)r^2 \to 0$. Наближене рівняння для $\chi(r)$ – це рівняння Ейлера вигляду

$$r^2\chi'' - l(l+1)\chi = 0, \quad \chi = r^\gamma;$$
$$\gamma(\gamma-1) = l(l+1); \quad \gamma_1 = -l, \gamma_2 = l+1.$$

Граничній умові $\chi(0) = 0$ задовольняє розв'язок r^{l+1}. Радіальна частина ХФ

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \sim r^{l}$$

Імовірність перебування в сферичному шарі

$$dW \sim r^{2(l+1)} dr.$$

Відцентрова сила, з якою зв'язана відцентрова енергія, виштовхує частинку з поля.

2. Дослідимо поведінку на великих відстанях від центра поля. Граничний випадок великих значень r за умови, що потенціальна енергія $U(r \to \infty) \to 0$ дає наближене РШ для $\chi(r)$

$$\chi'' + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\chi = 0.$$

При $E > 0$ $\chi(r) = A\mathrm{e}^{ikr} + B\mathrm{e}^{-ikr}$, $\quad R(r) = \frac{A\mathrm{e}^{ikr}}{r} + \frac{B\mathrm{e}^{-ikr}}{r}$. Це інфінітний рух, з безперервним спектром. Розв'язок – це розбіжні та збіжні сферичні хвилі. При $E < 0$ $\chi(r) = A\mathrm{e}^{-\kappa r}$, $\quad R(r) = \frac{A\mathrm{e}^{-\kappa r}}{r}$. Це фінітний рух з дискретним спектром.