



МЕТОДИЧНА
ЛІТЕРАТУРА

Міністерство освіти і науки України

Харківський
національний
університет
імені В. Н. Каразіна

С. С. Апостолов

О. В. Єзерська

ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

ТЕОРІЯ ТА ПРАКТИЧНІ ЗАВДАННЯ

Навчально-методичний посібник

Харків – 2021

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

С. С. Апостолов

О. В. Єзерська

**ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ.
ТЕОРІЯ ТА ПРАКТИЧНІ ЗАВДАННЯ**

Навчально-методичний посібник

Харків – 2021

УДК 530.145 (072)

А 76

Рецензенти:

В. О. Ямпольський – доктор фіз.-мат. наук, головний науковий співробітник ІРЕ НАН України, професор кафедри теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна, член-кореспондент НАН України;

Г. І. Рашба – кандидат фіз.-мат. наук, завідувач кафедри теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна.

*Затверджено до друку рішенням Науково-методичної ради
Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна
(протокол № 5 від 10 червня 2021 р.)*

Апостолов С. С.

А 76 Основи квантової механіки. Теорія та практичні завдання : навч.-метод. посіб. / С. С. Апостолов, О. В. Єзерська. – Харків : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2021. – 140 с.

Навчально-методичний посібник призначений для студентів фізичних спеціальностей, які вивчають квантову механіку, і містить конспекти основних лекцій та практичні задачі, розв'язок яких сприяє більш глибокому розумінню фізичних ідей квантової механіки, розвитку необхідних практичних навичок у розв'язанні сучасних задач теоретичної фізики.

УДК 530.145 (072)

© Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2021
© Апостолов С. С., Єзерська О. В., 2021
© Дончик І. М., макет обкладинки, 2021

Зміст

Передмова	7
1. Конспект лекцій	8
1.1. Вступ	8
1.1.1. Фізичні основи квантової механіки	8
1.1.2. Електромагнітні кванти	9
1.1.3. Дискретні значення фізичних величин	10
1.1.4. Дифракція електронів, атомів, молекул	11
1.2. Принципи квантової механіки. Рівняння Шредінгера	11
1.2.1. Гіпотеза де Бройля (1924)	11
1.2.2. Хвильова функція. Статистичне трактування хвильової функції	13
1.2.3. Принцип суперпозиції	14
1.2.4. Хвильові пакети. Співвідношення невизначеності.	14
1.2.5. Час розпливання хвильового пакета. Уточнене співвідношення невизначеності	16
1.2.6. «Принципи» квантової механіки	16
1.2.7. Хвильове рівняння Шредінгера (РШ)	17
1.2.8. Вектор густини потоку імовірності. Рівняння неперервності	19
1.3. Розв'язання стаціонарного рівняння Шредінгера	21
1.3.1. Поділ змінних в декартових координатах	21
1.3.2. Частинка в одновимірній прямокутній нескінченно глибокій потенціальній ямі	22
1.3.3. Частинка у тривимірній потенціальній ямі нескінченної глибини (тривимірний потенціальний ящик)	25
1.3.4. Квантовий гармонічний осцилятор (лінійний осцилятор)	26
1.3.5. Відбиття та проходження через потенціальний бар'єр	30
1.3.6. Загальні властивості одновимірного руху	35
1.4. Математичний апарат квантової механіки	36
1.4.1. Основні відомості з теорії лінійних просторів та теорії лінійних операторів	36

1.4.2.	Елементи теорії зображень	40
1.4.3.	Властивості дельта-функції Дірака	41
1.4.4.	Неперервне зображення	42
1.4.5.	Фізичні величини та оператори	43
1.4.6.	Середні значення фізичних величин	44
1.5.	Оператор Гамільтона. Стаціонарні стани	45
1.5.1.	Власні функції (ВФ) та власні значення (ВЗ) операторів \hat{r} , \hat{p} у координатному та в імпульсному зображенні	45
1.5.2.	Оператор Гамільтона, стаціонарні стани	47
1.5.3.	Рівняння Шредінгера в імпульсному зображенні	47
1.5.4.	Розв'язання задачі про рух частинки у полі дельта-ями в імпульсному зображенні для від'ємних енергій (фінітний рух)	49
1.6.	Фізичний зміст комутації операторів	50
1.6.1.	Комутація операторів та результати вимірювань	50
1.6.2.	Нерівності Гейзенберга	51
1.6.3.	Повний набір фізичних величин	53
1.7.	Оператор кутового моменту	53
1.7.1.	Комутаційні співвідношення	54
1.7.2.	Власні функції та власні значення операторів \hat{l}_z та $(\hat{l})^2$. «Сходінкові» оператори	54
1.8.	Оператори у гейзенбергівському зображенні	57
1.8.1.	Похідна по часу від оператора	57
1.8.2.	Гейзенбергівське зображення операторів	59
1.8.3.	Теореми Еренфеста	61
1.8.4.	Інтеграл руху (закони збереження)	61
1.8.5.	Закон збереження парності	64
1.8.6.	Співвідношення невизначеності для часу та енергії	64
1.9.	Рух у центральному полі	65
1.9.1.	Зведення задачі двох тіл до задачі про рух у центральному полі	65
1.9.2.	Аналіз особливостей руху у центральному полі	69
1.9.3.	Рух вільної частинки із певним значенням моменту імпульсу. Сферичні хвилі	70
1.9.4.	Одноелектронний атом	71
1.9.5.	Випадкове виродження	74
1.10.	Когерентні стани гармонічного осцилятора	75
1.10.1.	Гармонічний осцилятор. Розв'язок методом факторизації	75
1.10.2.	Когерентні стани осцилятора	78
1.11.	Рівняння Шредінгера у магнітному полі	79

1.11.1.	Рух електрона в однорідному постійному магнітному полі. Рівні Ландау (1930)	80
1.12.	Теорія збурень (ТЗ)	81
1.12.1.	Стаціонарна теорія збурень без виродження	82
1.12.2.	Стаціонарна ТЗ при наявності виродження. Секулярне рівняння	83
1.12.3.	Теорія збурень для дворівневої системи	84
1.12.4.	Нестационарна теорія збурень	86
1.13.	Квазікласичне наближення	88
1.13.1.	Правило квантування Бора–Зомерфельда	90
1.13.2.	Квазікласичний коефіцієнт прозорості бар'єра	93
1.13.3.	Теорія альфа-розпаду	94
2.	Конспект практичних занять	97
2.1.	Математичний апарат квантової механіки	97
2.1.1.	Лінійні оператори. Комутатор операторів	97
	Приклади завдань з розв'язками	97
	Завдання для самостійної роботи	99
2.1.2.	Ермітово-спряжені та ермітові оператори	99
	Приклади завдань з розв'язками	100
	Завдання для самостійної роботи	101
2.1.3.	Власні функції і власні числа операторів. Середні значення	102
	Приклади завдань з розв'язками	102
	Завдання для самостійної роботи	105
2.1.4.	Імпульсне зображення	105
	Приклади завдань з розв'язками	106
	Завдання для самостійної роботи	108
2.2.	Одновимірний рух	108
2.2.1.	Нескінченно-глибока потенціальна яма	108
	Приклади завдань з розв'язками	109
	Завдання для самостійної роботи	112
2.2.2.	Потенціальна δ -яма	112
	Приклади завдань з розв'язками	113
	Завдання для самостійної роботи	115
2.2.3.	Проходження частинок через потенціальний бар'єр	115
	Приклади завдань з розв'язками	115
	Завдання для самостійної роботи	118
2.2.4.	Потенціальний δ -бар'єр	118
	Приклади завдань з розв'язками	119
	Завдання для самостійної роботи	120
2.3.	Наближені методи у квантовій механіці	121
2.3.1.	Теорія збурення	121

Приклади завдань з розв'язками	121
Завдання для самостійної роботи	125
2.3.2. Квазікласичне наближення	125
Приклади завдань з розв'язками	125
Завдання для самостійної роботи	128
2.4. Тривимірний рух	129
2.4.1. Момент імпульсу	129
Приклади завдань з розв'язками	129
Завдання для самостійної роботи	130
2.4.2. Рух в центральному полі	131
Приклади завдань з розв'язками	132
Завдання для самостійної роботи	135
2.5. Приклади індивідуальних завдань	135
2.5.1. Одновимірний рух	135
2.5.2. Використання теорії збурень	138

Бібліографія**139**

Передмова

Навчально-методичний посібник «Основи квантової механіки. Теорія та практичні завдання» призначений для студентів 3-го та 4-го курсів фізичного факультету та студентів інших факультетів, які вивчають квантову механіку та атомну фізику.

Сучасний розвиток фундаментальної науки та новітніх нанотехнологій неможливо уявити без квантових процесів та явищ. Квантова механіка є найважливішим в сучасних умовах інструментом досліджень як теоретиків, так і експериментаторів. Дуже важливо, щоб майбутні дослідники опанували цей складний матеріал. Сучасні підручники охоплюють великий об'єм матеріалу, у якому інколи важко виділити найважливіші моменти для першого знайомства з квантовою механікою. Даний посібник має ціллю допомогти студентам самостійно опанувати найважливіші поняття квантової механіки та навчитися розв'язувати практичні завдання.

Автори кілька років поспіль читали лекції та проводили практичні заняття з курсу «Квантова механіка» на радіофізичному факультеті (нині РБЕКС) та багато років ведуть практичні заняття на фізичному факультеті.

Посібник складається з двох розділів. Перший розділ – це конспект основних лекцій, в якому послідовно викладаються основні положення квантової механіки, формули детально виводяться так саме, як зазвичай це робить лектор на дошці.

Другий розділ складається з практичних завдань, розв'язання яких ставить за мету навчити студентів «техніці» – методам розв'язання квантово-механічних задач. Для частини задач наведені докладні розв'язання з усіма необхідними поясненнями та коментарями. У кожному пункті наводиться коротка теоретична довідка та основні формули з лекцій, які треба використовувати при розв'язанні, а також низка задач для самостійного виконання. Окремо в кінці другого розділу розміщено завдання, які можуть бути використані для індивідуальних розрахунково-графічних завдань, самостійних та контрольних робіт тощо.

Сподіваємося, що даний посібник буде корисним як викладачам фізичних спеціальностей для підготовки до лекцій і практичних занять, так і студентам для самостійного оволодіння основами квантової механіки.

Розділ 1

Конспект лекцій

1.1. Вступ

1.1.1. Фізичні основи квантової механіки

Квантова механіка виникла в 20-ті роки ХХ-го століття. Це теорія атомних явищ. Квантова механіка вивчає поведінку мікрочастинок (електронів, протонів, нейтронів, атомів і молекул).

Мікроскопічні явища $\sim 10^{-10}$ м = 1 Ангстрем (приблизно таку довжину хвилі мають x -гаус (рентгенівські промені), γ -кванти).

Макроскопічні явища від $\sim 10^{-6}$ м = 1мкм (те, що можна побачити в оптичний мікроскоп).

В останні десятиліття виникла фізика мезоскопічних явищ, яка вивчає об'єкти розмірами від 10 до 100 нанометрів (10^{-8} – 10^{-7} м). Цей розділ фізики бурхливо розвивається завдяки сучасним технологіям, які створюють нано-об'єкти. Квантова механіка успішно застосовується для опису властивостей наноструктур.

Ньютонова механіка (1685) встановила закони механічного руху макроскопічних тіл.

Хвильові властивості електромагнітного випромінювання, дифракція та інтерференція: Юнг (1803) світло, фон Лауе (1912) рентгенівські промені.

Теорія електромагнітного поля Максвелла (1857) встановила закони електромагнітного поля. Були відкриті електромагнітні хвилі й установлено, що видиме світло – це електромагнітні хвилі певного діапазону (4000-8000А).

У 1905 з'явилася релятивістська механіка – механіка об'єктів, що швидко рухаються (Лоренц, Пуанкаре, Ейнштейн). Відкритий в 1897 електрон при русі в електромагнітному полі підкорявся законам цієї нової механіки.

Хвилі та речовина фізикою вивчалися окремо!

До початку ХХ-го століття на обрії класичної фізики було 2 хмаринки: негативний результат досліду Майкельсона з вимірювання швидкості світла

та ультрафіолетова (УФ) катастрофа – нескінченна енергія випромінювання абсолютно чорного тіла.

1.1.2. Електромагнітні кванти

Теплове випромінювання абсолютно чорного тіла, Макс Планк (14.12.1900). Доповідь у німецькому фізичному товаристві: «До теорії закону розподілу енергії в нормальному спектрі». *Поглинання й випромінювання енергії світла відбувається порціями, квантами.*

Формула Планка (1900) для спектральної щільності теплового випромінювання й закон Стефана–Больцмана для повної щільності потужності випромінювання

$$\rho(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}; \quad W = \int_0^\infty \rho(\omega, T) d\omega = \sigma T^4; \quad (1.1.1)$$

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega; \quad h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}; \quad c = 3 \times 10^8 \text{ м/с}; \quad (1.1.2)$$

$$\omega = 2\pi\nu; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (1.1.3)$$

Фотоелектричний ефект, Ейнштейн (1905). Поглинання фотонів електронами.

Фотоефект – це емісія електронів з речовини у вакуум або в іншу речовину під дією електромагнітного випромінювання. Явище відкрив Герц у 1887 році, закони встановили Столетов в 1888 і Ленард в 1899.

У 1905 році Ейнштейн запропонував пояснення, засноване на гіпотезі про те, що світло не тільки поглинається й випромінюється, але й поширюється «квантами», тобто фактично ввів поняття фотона. Формула Ейнштейна для фотоефекту (закон збереження енергії при взаємодії фотона з електроном)

$$\hbar\omega = A_{\text{вих.}} + \frac{mv^2}{2}. \quad (1.1.4)$$

Імпульс фотона

$$\begin{aligned} \varepsilon = \hbar\omega; \quad \varepsilon &= \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}; \quad m_{\text{фот.}} = 0; \quad \varepsilon = cp; \\ cp &= \hbar\omega; \quad p = \hbar \frac{\omega}{c} = \hbar k; \\ \vec{p} &= \hbar \vec{k}. \end{aligned}$$

Поширення світла відбувається дискретно, квантами світла!

Термін «фотон» був введений у 1926 році американським хіміком Льюїсом.

Ефект Комптона (1923). Пружне розсіювання фотонів (γ -квантів) на вільних електронах (графіт, Li, Be, Na, K, Fe, Ni, Cu). Нове підтвердження гіпотези фотонів. Використовуємо закони збереження енергії та імпульсу

$$\begin{cases} \hbar\omega + mc^2 = \hbar\omega' + \varepsilon'_e; \\ \hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}'_e \end{cases}$$

й отримуємо формулу для зміни (зменшення) частоти фотона після розсіювання на вільному нерухливому електроні

$$\omega' = \frac{\omega}{1 + \frac{2\hbar\omega}{mc^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (1.1.5)$$

Комбінаційний принцип Ритберга–Ритца (1908) підтверджує як теорію електромагнітних квантів (корпускулярну теорію світла), так і дискретність значень енергій атомів. Нижче наводиться формула Бальмера–Ритберга (1885) для лінійчатого спектра атома водню

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad m > n. \quad (1.1.6)$$

1.1.3. Дискретні значення фізичних величин

Дискретність енергії атомів

Комбінаційний принцип Ритберга–Ритца (1908) (різниці термів).

Питомі теплоємності твердих тіл. Ейнштейн (1907), Дебай (1912) розглянули атоми як гармонічні осцилятори з дискретним набором енергій. Більш точна теорія теплоємності «за Дебаєм» дає при низьких температурах залежність

$$C \sim T^3, \quad T \ll T_D.$$

Дослід Франка–Герца (1913) з пропускання пучка електронів з певною енергією через пари ртуті підтверджує дискретність стійких енергетичних станів атомів. Розсіювання стає непружним за умови, що $eU = \Delta E$. Електрон віддає свою енергію атому, який переходить у збуджений стан з наступним випромінюванням фотона, а струм при цьому падає.

Дослід Штерна–Герлаха (1922). Проліт парамагнітних атомів через неоднорідне магнітне поле, просторове квантування магнітного й механічного моментів

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \vec{r} \times \vec{p}; \\ F &= \mu_z \frac{\partial H_z}{\partial Z} \sim L_z. \end{aligned}$$

Пучок атомів розбивається на ряд пучків. Дослід також підтверджує існування у електрона власного механічного моменту – спіну.

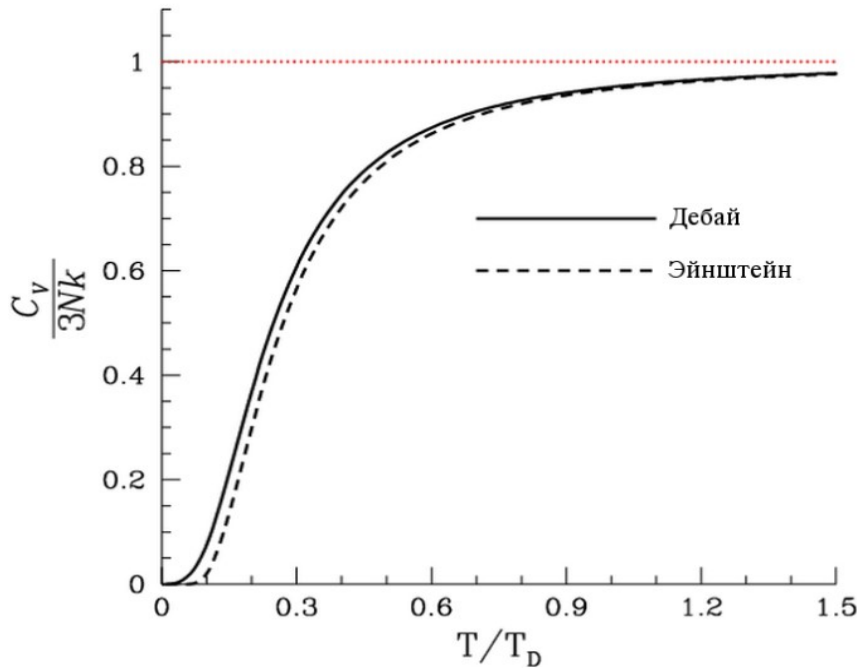


Рис. 1.1: Температурна залежність теплоємності за теорією Дебая та за теорією Ейнштейна. T_D – температура Дебая

1.1.4. Дифракція електронів, атомів, молекул

Дослід Девідсона–Джермера (1927). Відбиття пучка електронів від поверхні монокристалів нікелю.

Дослід Томсона (1928). Пропускання електронів через тонку полікристалічну пластинку.

Дослід Фабриканта–Бібермана–Сушкіна (1947). Пропускання електронів по одному через тонку полікристалічну пластинку.

У 80-ті роки минулого століття поставлений класичний дослід з дифракції електронів на двох щілинах за допомогою скануючого тунельного мікроскопа (СТМ). Спостерігалися дифракційні явища атомів, молекул.

1.2. Принципи квантової механіки. Рівняння Шредінгера

1.2.1. Гіпотеза де Бройля (1924)

В геометричній оптиці розглядаються промені світла. В хвильовій оптиці світло – це електромагнітні хвилі. Це корпускулярно-хвильовий дуалізм. При поширенні світло поводить себе як хвиля, а при взаємодії з речовиною світло поводить себе як потік частинок – квантів світла, названих пізніше (в 1926 році) «фотонами». Маса спокою фотона дорівнює нулю. Енергія фотона до-

рівнює $\varepsilon = \hbar\omega = cp$, отже, імпульс фотона

$$p = \frac{\hbar\omega}{c}, \quad \frac{\omega}{c} = k = \frac{2\pi}{\lambda}, \\ \vec{p} = \hbar\vec{k}.$$

Довжина хвилі

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}.$$

Це плоска монохроматична хвиля

$$f = Ae^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}.$$

Фазова швидкість фотона $v_{phase} = \omega/k = \varepsilon/p = c$. Групова швидкість фотона $v_{group} = \partial\omega/\partial k = \partial\varepsilon/\partial p = c$. Для фотона групова й фазова швидкості збігаються й не залежать від довжини хвилі. Немає дисперсії електромагнітних хвиль.

Отже, є класична механіка, у якій частинки матерії рухаються певними траєкторіями, але немає хвильової механіки!

Де Бройль висунув гіпотезу, згідно з якою руху частинки зіставляється якесь хвильове поле (хвильовий процес). Це і є хвильова механіка, яку ми тепер називаємо квантовою механікою.

Гіпотеза де Бройля: руху вільної частинки з енергією ε та імпульсом \vec{p} зіставляється плоска монохроматична хвиля з частотою ω й хвильовим вектором \vec{k} :

$$\begin{cases} \varepsilon = \hbar\omega; \\ \vec{p} = \hbar\vec{k}; \end{cases} \quad \psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{p}\vec{r}-\varepsilon t)},$$

$\psi(\vec{r}, t)$ – хвильова функція частинки. За припущенням де Бройля, довжина хвилі, яка зіставляється частинці, визначається так само, як і для електромагнітних хвиль

$$\lambda_D = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}.$$

Для хвиль матерії фазова й групова швидкості різні!

Нерелятивістська частинка:

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}; \quad v_{\text{фазова}} = \frac{p}{2m}; \quad v_{\text{групова}} = \frac{p}{m} = 2v_{\text{фазова}}.$$

Релятивістська частинка:

$$\varepsilon = \sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}; \quad v_{\text{фазова}} = c \left[1 + \left(\frac{mc}{p} \right)^2 \right]^{1/2} > c!!!$$

Для релятивістської частинки фазова швидкість виявляється більше, ніж швидкість світла. Хвилі де Бройля не мають фізичного змісту.

$$v_{\text{групова}} = \frac{c^2 p}{\sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}} = \frac{c^2 p}{\varepsilon} < c.$$

1.2.2. Хвильова функція. Статистичне трактування хвильової функції

Квантовій частинці зіставляється деяке хвильове поле (хвильовий процес), який описується, загалом кажучи, комплексною функцією. Цю функцію називають хвильовою функцією та позначають зазвичай $\psi(\vec{r}, t)$. У 1926 році німецький фізик Макс Борн запропонував статистичне трактування хвильової функції (ХФ):

$$dW \sim |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV.$$

Квадрат модуля ХФ пропорційний імовірності виявити частинку в елементі об'єму dV в момент часу t . Сама ж ХФ фізичного змісту не має. Якщо нормувати ХФ на одиницю $\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$, то

$$dW = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV.$$

Щільність імовірності (розподіл імовірності по координатах, partition function) запишеться так:

$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2.$$

Імовірність виявити частинку в кінцевому об'ємі V у момент t визначається як

$$W(V) = \int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV.$$

ХФ визначається з точністю до фазового множника $e^{i\alpha}$, тому функція $\psi(\vec{r}, t)$ та функція $e^{i\alpha}\psi(\vec{r}, t)$ описують один і той самий квантовий стан (має фізичний сенс тільки квадрат модуля ХФ!)

Узагальнимо поняття ХФ на багаточастинкову систему – $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$. Квантовій системі з багатьма ступенями вільності зіставляється одна ХФ! Статистичне трактування

$$\begin{aligned} dW(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) &= |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N; \\ dW(\vec{r}_1, t) &= dV_1 \int |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|_1^2 dV_2 \dots dV_N. \end{aligned}$$

ХФ системи незваємодіючих частинок – добуток одночастинкових ХФ.

Для ХФ, заданої в узагальнених координатах з N ступенями вільності, маємо

$$dW = |\psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)|^2 dq_1 dq_2 \dots dq_N; \int |\psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t)|^2 dq_1 dq_2 \dots dq_N = 1.$$

1.2.3. Принцип суперпозиції

Якщо квантова система може перебувати в станах із ХФ $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$, то ХФ, що є лінійною комбінацією (суперпозицією) ХФ $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$ вигляду $\psi = \sum_{i=1}^N C_i \psi_i$, також є ХФ, що описує один з можливих станів квантової системи. Принцип суперпозиції означає, що диференціальне рівняння квантової механіки – лінійне. Одним випадком застосування принципу суперпозиції є розклад довільної функції на плоскі монохроматичні хвилі. Плоска хвиля з певним імпульсом і енергією

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = A(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)}.$$

Загальний вид розв'язку хвильового рівняння – це суперпозиція плоских монохроматичних хвиль із усіма можливими значеннями хвильового вектора $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int A(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)} d^3\vec{p}.$$

Це теж ХФ вільної частинки, але такої, що не має певного значення імпульсу. З математичної точки зору – це перетворення Фур'є (інтеграл Фур'є). Обернене перетворення Фур'є визначає амплітуди

$$A(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)} d^3\vec{r}.$$

Перетворення Фур'є можна записати симетрично

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int A(\vec{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)} d^3\vec{p}; \quad A(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)} d^3\vec{r}.$$

1.2.4. Хвильові пакети. Співвідношення невизначеності.

Нехай хвиля поширюється уздовж осі x

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - \varepsilon t)} dp.$$

Розглянемо прямокутний імпульс (прямокутний хвильовий пакет)

$$A(p) = \begin{cases} A_0, & |p - p_0| \leq \frac{\Delta p}{2}; \\ 0, & |p - p_0| > \frac{\Delta p}{2}. \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \frac{A_0}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{p_0 - \frac{\Delta p}{2}}^{p_0 + \frac{\Delta p}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}[px - \varepsilon(p)t]} dp = \left\{ \begin{array}{l} p' = p - p_0; \quad dp' = dp; \\ \varepsilon(p) \approx \varepsilon(p_0) + v_0(p - p_0) = \varepsilon_0 + v_0 p' \end{array} \right\} = \\
&= \frac{A_0}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - \varepsilon_0 t)} \int_{-\frac{\Delta p}{2}}^{\frac{\Delta p}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}[x - v_0 t]p'} dp' = \frac{A_0}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - \varepsilon_0 t)} \frac{e^{\frac{i(x-v_0 t)\Delta p}{2\hbar}} - e^{-\frac{i(x-v_0 t)\Delta p}{2\hbar}}}{\frac{i}{\hbar}[x - v_0 t]} = \\
&= \frac{A_0 \Delta p}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 x - \varepsilon_0 t)} \frac{\sin \left[\frac{(x-v_0 t)\Delta p}{2\hbar} \right]}{\left[\frac{(x-v_0 t)\Delta p}{2\hbar} \right]}.
\end{aligned}$$

Маємо

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \left[\frac{A_0 \Delta p}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \right]^2 \left(\frac{\sin \xi}{\xi} \right)^2; \quad \xi = \frac{(x - v_0 t)\Delta p}{2\hbar}.$$

У лінійному наближенні прямокутний імпульс рухається як єдине ціле (див. рис. 1.2).

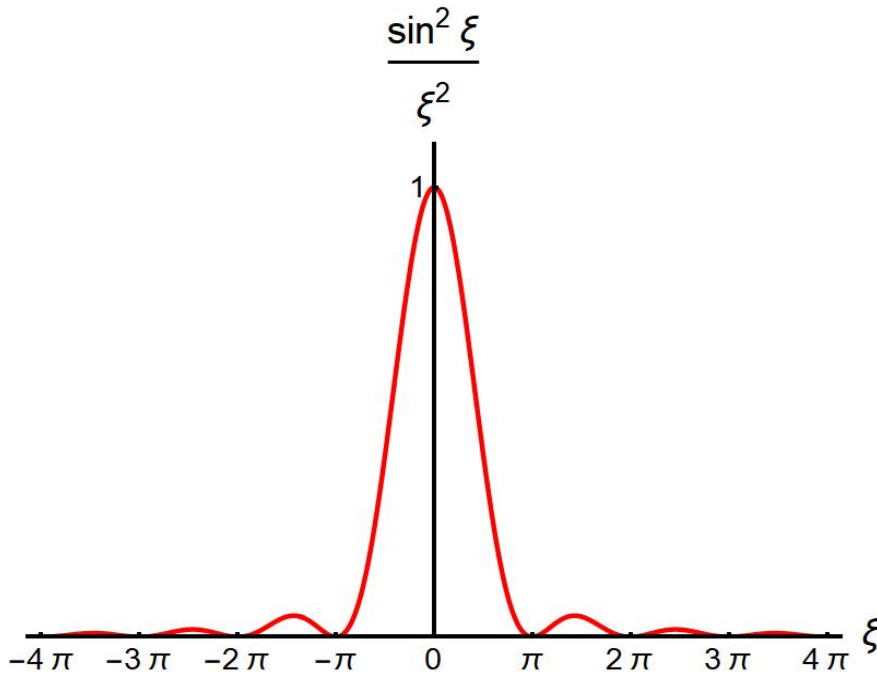


Рис. 1.2: Форма хвильового пакета у лінійному (без розпливання) наближенні

Нехай $t = 0$, $\xi_0 = \frac{x\Delta p}{2\hbar}$. Ймовірність суттєво відмінна від нуля при $-\pi < \xi_0 < \pi$. Маємо таку оцінку для добутку невизначеностей координати та імпульсу

$$\Delta\xi_0 \sim \pi; \quad \frac{\Delta x \Delta p}{2\hbar} \sim \pi;$$

$$\Delta x \Delta p \sim 2\pi\hbar; \quad \Delta x \Delta p \sim h. \quad (1.2.1)$$

До чого приводить врахування наступного доданка в розкладанні $\varepsilon(p)$, розглянемо в наступній лекції.

1.2.5. Час розпливання хвильового пакета. Уточнене співвідношення невизначеності

На минулій лекції розглянули хвильовий пакет (прямокутний імпульс) та вивели в лінійному наближенні співвідношення $\Delta x \Delta p \sim h$. Це є оцінка розміру хвильового пакета або співвідношення невизначеності Гейзенберга.

Врахуємо наступний доданок у розкладанні енергії в ряд Тейлора

$$\varepsilon(p) \approx \varepsilon_0 + v_0(p - p_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p^2} \right)_0 (p - p_0)^2; \quad p - p_0 = \Delta p.$$

Для нерелятивістської частинки

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}; \quad \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p^2} \right)_0 = \frac{1}{m}.$$

Фаза хвилі (показник експоненти $\frac{px - \varepsilon(p)t}{\hbar}$) суттєво зміниться при

$$\frac{1}{2\hbar} \frac{1}{m} \Delta t (\Delta p)^2 \sim \pi; \quad \Delta p \sim \frac{h}{\Delta x}.$$

Час розпливання хвильового пакета

$$\Delta t \sim \frac{m(\Delta x)^2}{h}.$$

Для мікрочастинок хвильовий пакет через дисперсію розпливається практично миттєво, а для макрочастинок – існує нескінченно довго (Δt більше часу життя Всесвіту).

Співвідношення невизначеності з урахуванням розпливання хвильового пакета треба записати у вигляді нерівності

$$\Delta x \Delta p \geq h. \quad (1.2.2)$$

1.2.6. «Принципи» квантової механіки

Квантова механіка базується на наступних твердженнях.

Принцип відповідності (Н.Бор, 1923). Це третій постулат Бора

При " $\hbar \rightarrow 0$ " закони та співвідношення квантової механіки переходять у закони й співвідношення класичної механіки. Цей принцип використовується для знаходження квантових аналогів класичних величин.

Принцип доповнюваності (Н.Бор, 1927)

Сформульований Бором в 1927 році. Відповідно до принципу доповнюваності хвильовий та корпускулярний описи мікропроцесів не виключають і не замінюють, а доповнюють один одного. Для формування уявлення про мікрооб'єкт необхідний синтез цих двох описів.

Принцип суперпозиції

Якщо квантова система може перебувати в станах із ХФ $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$, то ХФ, що є лінійною комбінацією (суперпозицією) ХФ $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$ вигляду $\psi = \sum_{i=1}^N C_i \psi_i$, також є ХФ, що описує один з можливих станів квантової системи. Принцип суперпозиції означає, що диференціальне рівняння квантової механіки – лінійне.

Принцип причинності

Ми вивчаємо властивості мікрочастинок за допомогою макроскопічних приладів. Опис мікрочастинок повинний хоча б частково включати класичні поняття. Вплив приладу принципово не може бути зроблений малим, а результат взаємодії приладу з електроном (при дифракції) однозначним. Можна лише говорити про ймовірність того або іншого значення імпульсу електрона після проходження ним щілини. Можна говорити тільки про ймовірність того або іншого результату вимірювання. Така природа мікрочастинок: поведінка мікрочастинок характеризується статистичними закономірностями.

Поведінка окремої частинки, а не тільки ансамблю частинок, підкоряється статистичним закономірностям!

Сформулюємо закон причинності математично. Нехай відомий квантовий стан частинки в початковий момент часу $t = t_0$, тобто відома її хвильова функція (ХФ) $\Psi(\vec{r}, t_0)$. Якщо відомі всі впливи на частинку, то можна однозначно визначити ХФ при $t \geq t_0$. Зі змісту ХФ випливає, що тим самим ми можемо передбачити ймовірності того, що величини, які характеризують частинку (енергія, імпульс, радіус-вектор), будуть мати те або інше значення в будь-який момент $t > t_0$. Іншими словами, можемо визначити $dW = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$, знайти ймовірності отримання при вимірюванні того або іншого значення імпульсу, координати, енергії та ін., обчислити середні значення імпульсу, координати, енергії та ін.

1.2.7. Хвильове рівняння Шредінгера (РШ)

Принцип причинності + принцип суперпозиції + принцип відповідності дозволяють «вивести» основне рівняння квантової механіки – хвильове рів-

няння Шредінгера (1926).

Рівняння Шредінгера (РШ) – це рівняння руху квантової частинки. Задати закон руху – визначити ХФ квантової частинки.

Отже, завдання ХФ у початковий момент t_0 і завдання всіх взаємодій квантової системи дозволяє знайти еволюцію квантової системи. Еволюція визначається зміною ХФ з часом $\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$. Рівняння, яке ми шукаємо, повинне бути першого порядку по t . Повинне бути лінійним та однорідним. Зміну хвильової функції задамо дією на неї лінійного оператора $\hat{H}\Psi(\vec{r}, t)$.

Сконструюємо найпростіше диференціальне рівняння, якому задовольняє плоска монохроматична хвиля та суперпозиція плоских монохроматичних хвиль. Далі ми узагальнимо рівняння на випадок частинки в зовнішньому полі та на випадок довільної квантової системи.

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}; \quad \vec{p}\vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z;$$

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi(\vec{r}, t); \quad \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}, t); \quad E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = \frac{p^2}{2m};$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = E \Psi(\vec{r}, t); \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) = \frac{p^2}{2m} \Psi(\vec{r}, t).$$

РШ для вільної частинки

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t). \quad (1.2.3)$$

Як і повинно бути, це рівняння не містить енергії, імпульсу частинки, йому також задовольняє й суперпозиція плоских монохроматичних хвиль

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int A(\vec{p}, E) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)} d^3 \vec{p} dE.$$

Рівняння (1.2.3) – першого порядку по t , так що йому задовольняє тільки комплексна ХФ. Серед розв'язків (1.2.3) є й монохроматичні хвилі (частинка з певною енергією)

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}.$$

Замість (1.2.3) пишемо

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}); \quad E = \frac{p^2}{2m}. \quad (1.2.4)$$

Енергія вільної частинки зберігається. Зберігається сума кінетичної й потенційної енергії для частинки в потенціальному зовнішньому полі

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}); \quad \frac{p^2}{2m} = E - U(\vec{r}).$$

Замінімо в (1.2.4) $E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow E - U(\vec{r})$. У результаті такої підстановки отримуємо *стаціонарне РШ для частинки в постійному зовнішньому полі*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (1.2.5)$$

Повернемося до ХФ, що залежить від часу, у правій частині (1.2.5) замінімо $E\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$ та знайдемо *хвильове РШ для частинки в зовнішньому полі*

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t). \quad (1.2.6)$$

Рівняння (1.2.6) називають також нестаціонарним РШ. В англійській мові використовуються терміни «time-dependent» and «time-independent» для нестаціонарного (хвильового) та стаціонарного РШ відповідно.

Для розв'язку РШ потрібно:

1. Задати початкову умову $\Psi(\vec{r}, t_0)$.

2. Задати граничні умови. У загальному випадку ця вимога скінченності (умови нормування), безперервності й однозначності ХФ та її перших похідних (всюди, крім особливих точок).

Обернення часу в РШ

$$t \rightarrow -t, \quad \Psi_{\text{оберн.}}(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi^*(\vec{r}, -t).$$

1.2.8. Вектор густини потоку імовірності. Рівняння неперервності

Це закон збереження числа частинок у квантовій механіці. Зміна ВФ у часі й просторі підкоряється певному закону збереження. Ймовірність виявити частинку в об'ємі V у момент t

$$\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV.$$

Диференціюємо цю величину за часом

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV &= \int_V \frac{\partial}{\partial t} [\Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)] dV = \\ &= \int_V \left[\frac{\partial\Psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) + \Psi^*(\vec{r}, t)\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \right] dV. \end{aligned} \quad (1.2.7)$$

З РШ (1.2.6) випливає, що

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \right); \\ \frac{\partial \Psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -\frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^*(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) \right).\end{aligned}$$

Перетворимо (1.2.7)

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV &= \int_V \frac{\hbar}{2mi} [\Psi(\vec{r}, t) \Delta \Psi^*(\vec{r}, t) - \Psi^*(\vec{r}, t) \Delta \Psi(\vec{r}, t)] dV \\ \Delta &= \nabla \cdot \nabla; \quad \Delta \Psi^*(\vec{r}, t) = \nabla \cdot \nabla \Psi^*(\vec{r}, t); \\ \operatorname{div} (\Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t)) &= \Psi(\vec{r}, t) \Delta \Psi^*(\vec{r}, t) + \nabla \Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t); \\ \operatorname{div} (\Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t)) &= \Psi^*(\vec{r}, t) \Delta \Psi(\vec{r}, t) + \nabla \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t).\end{aligned}$$

Різниця

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}, t) \Delta \Psi^*(\vec{r}, t) - \Psi^*(\vec{r}, t) \Delta \Psi(\vec{r}, t) &= \operatorname{div} (\Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t) - \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t)) \\ -\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV &= \oint_S \frac{\hbar}{2mi} \operatorname{div} [\Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t)] d\vec{S}.\end{aligned}$$

Введемо вектор густини потоку ймовірності

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t)] = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} [\Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t)].$$

Згадаємо, що щільність імовірності – це $\rho = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$, й запишемо рівняння неперервності в інтегральній формі

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \oint_S \vec{j} d\vec{S}. \quad (1.2.8)$$

Зменшення в одиницю часу ймовірності виявити квантову частинку в об'ємі V дорівнює ймовірності того, що частинка перетне за одиницю часу замкнену поверхню S . В диференціальній формі маємо рівняння неперервності

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (1.2.9)$$

Обчислимо вектор щільності потоку ймовірності для вільної частинки для ХФ $\Psi(\vec{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 \left[\frac{i}{\hbar} \vec{p} - \left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \right) \right] = \frac{\vec{p}}{m} |A|^2 = \vec{v} |A|^2.$$

Для дійсної хвильової функції $\psi^* = \psi$, тому $\vec{j} = 0$. Потоку частинок немає.

1.3. Розв'язання стаціонарного рівняння Шредінгера для деяких важливих квантових моделей

Розглянемо кілька простих прикладів розв'язку стаціонарного РШ для частинки в постійному зовнішньому полі, яке має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (1.3.1)$$

Це рівняння в частинних похідних. Такі рівняння розв'язують методом поділу змінних. Виконаємо поділ змінних у декартових координатах.

1.3.1. Поділ змінних в декартових координатах

Нехай потенціальна енергія – сума трьох доданків

$$U(\vec{r}) = U(x) + U(y) + U(z).$$

Виділимо спочатку в рівнянні (1.3.1) частину, яка залежить тільки від координати x :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U(x)\psi = E\psi - \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + U(y)\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + U(z)\psi \right];$$

$$\psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y, z).$$

Ділимо обидві частини на $\psi(x)\psi(y, z)$:

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi}{\psi(x)} = E - \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(y,z)}{dy^2} + U(y)\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial z^2} + U(z)\psi(y,z) \right]}{\psi(y,z)} = E_1. \quad (1.3.2)$$

Ліва та права частини (1.3.2) розділилися. Ліва частина (1.3.2) залежить тільки від координати x , права – тільки від координат y, z . Ці вирази дорівнюють одне одному при будь-яких значеннях x, y, z . Отже, обидві частини є сталими. Позначили константу E_1 . Маємо:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E_1\psi(x);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial y^2} + U(y)\psi(y,z) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(y,z)}{\partial z^2} + U(z)\psi(y,z) = (E - E_1)\psi(y,z).$$

Можна продовжити поділ координат y та z . Ми просто «здогадаємося», як треба розділяти змінні далі. Оскільки усі координати рівноправні, то повинно бути так:

$$E = E_1 + E_2 + E_3; \quad \psi(x, y, z) = \psi(x)\psi(y)\psi(z). \quad (1.3.3)$$

Отримуємо три незалежні рівняння, які описують одновимірний рух уздовж відповідної координати:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x_i)}{dx_i^2} + U(x_i)\psi(x_i) = E_i\psi(x_i); \quad (1.3.4)$$

Тут $i = 1, 2, 3$, $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$.

1.3.2. Частинка в одновимірній прямокутній нескінченно глибокій потенціальній ямі

Стационарне РШ для одновимірного руху в декартових координатах

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

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

Ця задача має пряме відношення до поведінки електронів у металі й нуклонів у ядрі. В область з нескінченною потенціальною енергією частинка потрапити не може. Імовірність її виявити в цих областях дорівнює 0. ХФ зобов'язана бути безперервною, отже, у точках 0 та a ХФ обертається в нуль. Розв'язуємо РШ в області $0 \leq x \leq a$

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad E \geq 0 \quad (1.3.5)$$

із двома граничними умовами

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0. \quad (1.3.6)$$

Маємо нескінченний розрив потенціальної енергії, тому безперервна тільки хвильова функція, а перша похідна в точках розриву потенціальної енергії має стрибок.

Рівняння (1.3.5) – це лінійне однорідне диференціальне рівняння другого порядку з постійними коефіцієнтами. Воно має два лінійно незалежні розв'язки та містить дві довільні сталі. Ці розв'язки можна записати різними способами:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = A_1 \sin kx + B_1 \cos kx = \\ &= C_1 \sin(kx + \varphi_1) = C_2 \cos(kx + \varphi_2). \end{aligned} \quad (1.3.7)$$

Важливо, що в цьому випадку число довільних сталих дорівнює числу граничних умов. Так сталося через те, що рух відбувається в обмеженій області простору (фінітний рух). Виберемо, наприклад, розв'язок у вигляді $C_1 \sin(kx + \varphi_1)$. Із граничних умов (1.3.6) випливає, що

$$\begin{aligned} C_1 \sin \varphi_1 &= 0, & C_1 \neq 0, & \varphi_1 = 0; \\ \sin(ka) &= 0, & ka &= \pi(n + 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

При $n = -1$ ми мали б $k = 0$ та $\psi(x) = 0$, що означало б відсутність частинки у всьому просторі. З $ka = \pi(n + 1)$ випливає, що

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n + 1)^2. \quad (1.3.8)$$

Ми бачимо, що РШ має розв'язок, який задовольняє граничним умовам, тільки при дискретних значеннях квантового числа n . Таким чином, енергія частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі виявляється квантовою. Дискретність енергії виникла природно, без будь-яких додаткових припущень. У цьому випадку вона впливає безпосередньо із граничних умов, які накладаються на хвильову функцію на кінцях проміжку інтегрування. Стан частинки з найменшою можливою енергією буде надалі називатися нормальним або основним, усі інші стани – збудженими. Енергія основного стану частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі виходить із формули (1.3.8) при $n = 0$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (1.3.9)$$

Повторюємо, що основний стан (ground state) – це стан з мінімальною енергією.

Нормуємо ХФ на одиницю:

$$\begin{aligned} \int_0^a |\psi(x)|^2 dx &= 1, & |C_1|^2 \int_0^a \sin^2 kx dx &= 1, \\ |C_1|^2 \frac{1}{2} \int_0^a (1 - \cos 2kx) dx &= 1; & |C_1| &= \sqrt{\frac{2}{a}}. \end{aligned}$$

Розв'язок

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n + 1)^2; \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n + 1)x}{a}. \quad (1.3.10)$$

Загальні висновки:

1. E_n пробігає в потенціальній ямі ряд дискретних значень;
2. При E_0 – в основному стані – частинка продовжує рух;

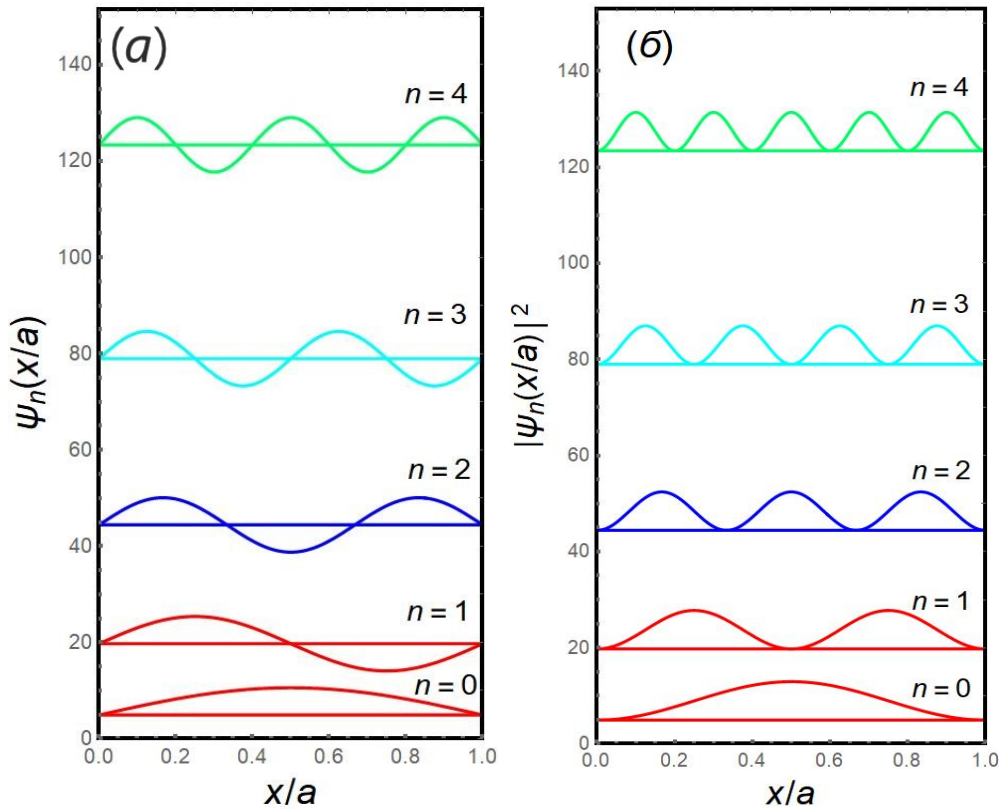


Рис. 1.3: Графіки (а) хвильової функції $\psi(x)$ та (б) розподілу по координаті $|\psi|^2$. Маса частинки та стала Планка покладені рівними 1

3. Енергія частинки обернено пропорційна масі та обернено пропорційна квадрату ширини ями (області локалізації частинки). Дискретність проявляється для частинок малої маси у випадку сильної локалізації.

У класичній механіці частинка, яка рухається в потенціальній ямі, з рівною ймовірністю може перебувати в будь-якій точці усередині ями (пряма на рис.1.3(б)). Дійсно, ймовірність $dW_{\text{класич.}}$ виявлення частинки в інтервалі dx пропорційна часу dt знаходження частинки в цьому інтервалі $dW_{\text{класич.}} \sim dt = \frac{1}{v} dx$.

Оскільки на частинку усередині ями жодні сили не діють, вона рухається з постійною швидкістю v й, отже, $dW_{\text{класич.}}$ не залежить від x . При збільшенні квантового числа n (енергії частинки) максимуми розподілу ймовірностей зближуються. У граничному випадку $n \rightarrow \infty$ розподіл ймовірностей, який виведено із квантовомеханічного розрахунку, приводить до тих же результатів, що й класичний розподіл. Це впливає з того, що функція $\sin^2 \frac{\pi n x}{a}$ швидко осцилює при зміні x та при інтегруванні по будь-якому кінцевому інтервалу може бути замінена на $1/2$.

Хвильова функція (1.3.10) має певну парність відносно точки $x = \frac{a}{2}$:

$$\psi_n(x) = (-1)^n \psi_n(a - x); \quad x' = x - \frac{a}{2}; \quad \psi_n(-x') = (-1)^n \psi_n(x').$$

Основному стану завжди відповідає парна ХФ.

При $n \gg 1$ відстань між сусідніми рівнями йде до нуля, і дискретність рівнів зникає в класичній границі (правило відповідності)

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{n+3}{(n+1)^2} \sim \frac{1}{n} \rightarrow 0, \quad n \gg 1.$$

1.3.3. Частинка у тривимірній потенціальній ямі нескінченної глибини (тривимірний потенціальний ящик)

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a_1, 0 \leq y \leq a_2, 0 \leq z \leq a_3; \\ \infty, & x < 0, x > a_1, y < 0, y > a_2, z < 0, z > a_3. \end{cases}$$

На рис. 1.4 показано схематичне зображення тривимірного потенціального ящика. Задача нами фактично вже розв'язана. Після поділу змінних у

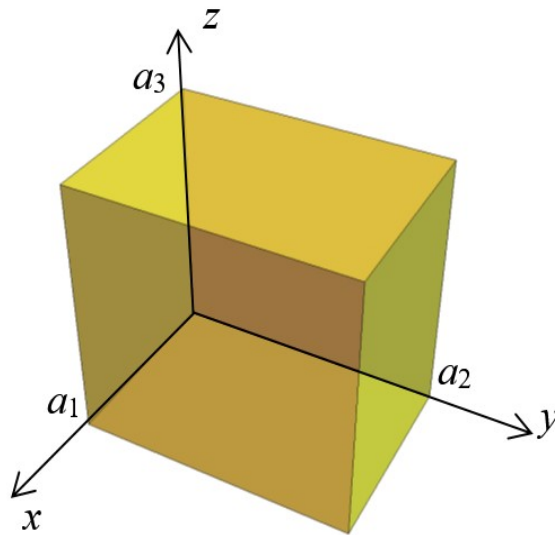


Рис. 1.4: Потенціальний ящик зі сторонами a_1 , a_2 , a_3

декартових координатах

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_i(x_i)}{dx_i^2} + U(x_i) \psi_i(x_i) = E_i \psi_i(x_i).$$

розв'язуємо задачу про одновимірну яму нескінченної глибини

$$\begin{aligned}\psi_i''(x_i) + k_i^2 \psi_i(x_i) &= 0; \quad k_i^2 = \frac{2mE_i}{\hbar^2}; \\ \psi_i(0) &= \psi_i(a_i); \quad i = 1, 2, 3. \\ \psi_{n_i}(x_i) &= \sqrt{\frac{2}{a_i}} \sin \frac{\pi(n'_i + 1)x_i}{a_i} = \sqrt{\frac{2}{a_i}} \sin \frac{\pi n_i x_i}{a_i}; \quad n'_i + 1 = n_i \\ n_i &= 1, 2, 3, \dots\end{aligned}$$

і записуємо розв'язок

$$\begin{aligned}\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) &= \psi_{n_1}(x) \cdot \psi_{n_2}(y) \cdot \psi_{n_3}(z) = \\ &= \left(\frac{2^3}{a_1 a_2 a_3} \right)^{1/2} \sin \frac{\pi n_1 x_1}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 x_2}{a_2} \sin \frac{\pi n_3 x_3}{a_3}; \\ E_{n_1 n_2 n_3} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} + \frac{n_3^2}{a_3^2} \right); \quad n_i = 1, 2, 3, \dots\end{aligned}$$

Нехай $a_1 = a_2 = a_3 = a$ – «кубічний ящик»

$$\begin{aligned}\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) &= \psi_{n_1}(x) \cdot \psi_{n_2}(y) \cdot \psi_{n_3}(z) = \left(\frac{2}{a} \right)^{3/2} \sin \frac{\pi n_1 x_1}{a} \sin \frac{\pi n_2 x_2}{a} \sin \frac{\pi n_3 x_3}{a}; \\ E_{n_1 n_2 n_3} &= \frac{\hbar^2}{2ma} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2); \quad n_i = 1, 2, 3, \dots\end{aligned}$$

Основний стан із квантовими числами $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ є не виродженим.

У випадку кубічного ящика значенням квантових чисел $n_1 = n_2 = 1, n_3 = 2$ або $n_1 = 1, n_2 = 2, n_3 = 1$ або $n_1 = 2, n_2 = n_3 = 1$ відповідає одна і та сама енергія, але три різні хвильові функції. Рівень енергії трикратно вироджений. Випадкове виродження в кубічному ящику – збіг енергій станів з різною симетрією. Наприклад, $n_1 = n_2 = 1; n_3 = 5; n_1 = n_2 = n_3 = 3, 5^2 + 1 + 1 = 3 \times 3^2 = 27$.

1.3.4. Квантовий гармонічний осцилятор (лінійний осцилятор)

Малі гармонічні коливання зустрічаються у всіх розділах фізики. Розглянемо наближено рух у полі потенціальної ями поблизу точки стійкої рівноваги за умови, що розкладання $U(x)$ має вигляд

$$U(x) \approx U(x_0) + \left(\frac{dU}{dx} \right)_0 (x - x_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2U}{dx^2} \right)_0 (x - x_0)^2;$$

$$\left(\frac{dU}{dx}\right)_0 = 0; \quad \left(\frac{d^2U}{dx^2}\right)_0 = k > 0.$$

Прикладами малих коливань є: коливання атомів у молекулі, тепловий рух у кристалах. Гармонічні коливання, вони ж малі коливання, вони ж лінійні коливання. Це малі коливання поблизу положення стійкої рівноваги в гармонічному наближенні, якщо потенціальна енергія має мінімум у точці $x=x_0$ і розкладання поблизу точки мінімуму починається із квадратичного по $x-x_0$ доданка. Вважаємо далі для зручності $U_0=0, x_0=0$

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}; \quad \omega^2 = \frac{k}{m},$$

ω^2 – власна частота (відома із класичної механіки):

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0; \quad \omega^2 = \frac{k}{m} - \text{класичне рівняння малих коливань.}$$

Розв'язуємо стаціонарне РШ

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

Жодних особливостей потенціальна енергія не має, тому до ХФ пред'являється тільки умова згасання при $x \rightarrow \pm\infty$. Зручно перейти до безрозмірних змінних

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

$$z = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x; \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}.$$

$$\psi''(z) + (2\varepsilon - z^2)\psi(z) = 0. \quad (1.3.11)$$

Розглядаємо граничний випадок великих за модулем значень z , щоб знайти асимптотику ХФ. Наближене РШ

$$\psi''(z) - z^2\psi(z) \approx 0$$

розв'язуємо наближено, тому відкинемо деякі доданки, як показано нижче. Шукаємо розв'язок у вигляді

$$\psi \approx e^{\alpha z^2}; \quad \psi' \approx 2\alpha z e^{\alpha z^2}; \quad \psi'' \approx [4\alpha^2 z^2 + 2\alpha] e^{\alpha z^2}; \\ (4\alpha^2 - 1) z^2 \approx 0; \quad \alpha = \pm \frac{1}{2}.$$

Вибираємо тільки $\alpha = -\frac{1}{2}$ з урахуванням умови згасання ХФ при $z \rightarrow \pm\infty$.

З урахуванням асимптотики $\psi(z) \sim \exp(-z^2/2)$ розв'язок точного РШ (1.3.11) шукаємо у вигляді

$$\psi(z) = e^{-\frac{z^2}{2}} f(z).$$

Обчислюємо другу похідну

$$\begin{aligned}\psi' &= -ze^{-\frac{z^2}{2}}f(z) + e^{-\frac{z^2}{2}}f'(z); \\ \psi'' &= [(z^2 - 1)f(z) - 2zf'(z) + f''(z)]e^{-\frac{z^2}{2}}.\end{aligned}$$

Отримаємо рівняння для функції $f(x)$:

$$f''(z) - 2zf'(z) + (2\varepsilon - 1)f(z) = 0. \quad (1.3.12)$$

Рівняння (1.3.12) – це рівняння для поліномів Ерміта. Його розв'язок шукаємо у вигляді полінома по ступенях z

$$\begin{aligned}f(z) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k \Big| \times (2\varepsilon - 1); \\ f'(z) &= \sum_{k=0}^{\infty} k a_k z^{k-1} \Big| \times (-2z); \\ f''(z) &= \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)a_k z^{k-2} = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k z^{k-2} = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1)a_{k+2} z^k \Big| \times 1; \\ \sum_{k=0}^{\infty} [(k+2)(k+1)a_{k+2} - (2k+1-2\varepsilon)a_k] z^k &= 0; \\ a_{k+2} &= \frac{(2k+1-2\varepsilon)}{(k+2)(k+1)} a_k.\end{aligned} \quad (1.3.13)$$

З (1.3.13) видно, що зв'язані між собою тільки a_k з k однакової парності. Два коефіцієнти a_0 та a_1 – це довільні сталі. Як і повинно бути для лінійного диференціального рівняння другого порядку, їх дві: a_0 та a_1 . Досліджуємо асимптотичну поведінку (1.3.13) при $k \gg 1$. Наприклад, для парних $k = 2l$ маємо

$$\begin{aligned}a_{k+2} &\approx \frac{2}{k} a_k = \frac{2}{2l} a_{2l} = \frac{1}{l} a_{2l} = \frac{1}{l(l-1)} a_{2(l-1)} = \dots = \frac{1}{l!} a_0; \\ f(z) &\approx a_0 \left(1 + z^2 + \frac{1}{2!} z^4 + \dots + \frac{1}{l!} z^{2l} + \dots \right) = a_0 e^{z^2}.\end{aligned}$$

ХФ $\psi(z) \approx a_0 e^{+\frac{z^2}{2}} \rightarrow \infty$, if $z \rightarrow \pm\infty$! Ряд треба обірвати, щоб задовольнити умові скінченності ХФ при $z \rightarrow \pm\infty$.

Нехай при $k = n$ $a_n \neq 0$, а $a_{n+2} = 0$. З рекурентного співвідношення (1.3.13) знаходимо спектр можливих значень енергії

$$2n + 1 - 2\varepsilon = 0; \quad \varepsilon = n + \frac{1}{2};$$

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

Стану з найменшою енергією відповідає $n = 0$. Енергія «нульових» коливань

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Поліноми Ерміта та деякі рекурентні співвідношення та інтеграли:

$$H_n''(z) - 2zH_n'(z) + 2nH_n(z) = 0;$$

$$a_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+2)(k+1)}a_k;$$

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} \left(e^{-z^2} \right) = (2z)^n - \frac{n(n-1)}{1} (2z)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{1 \cdot 2} (2z)^{n-4} - \dots$$

$$H_0 = 1; \quad H_1 = 2z; \quad H_2 = 4z^2 - 2; \quad H_3 = 8z^3 - 12z; \quad H_4 = 16z^4 - 48z^2 + 12;$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_m(z) H_n(z) dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}.$$

Нормована на одиницю ХФ має вигляд

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n \left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right). \quad (1.3.14)$$

Енергія:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.3.15)$$

«Нульові коливання» відбуваються при $n=0$ в основному стані. ХФ не обертається у нуль при $n=0$ усередині ями жодного разу, при $n=1$ обертається в нуль один раз, при $n=2$ – два рази і т.д. Число нулів хвильової функції дорівнює квантовому числу. Це загальна властивість одномірного руху. Це і є *осциляційна теорема*: число нулів ХФ усередині ями дорівнює квантовому числу.

Дуже важливо, що ХФ відмінна від нуля й у класично недоступній області, у якій кінетична енергія класичної частинки від'ємна.

На рис. 1.5 показані хвильові функції для перших 10 рівнів осцилятора.

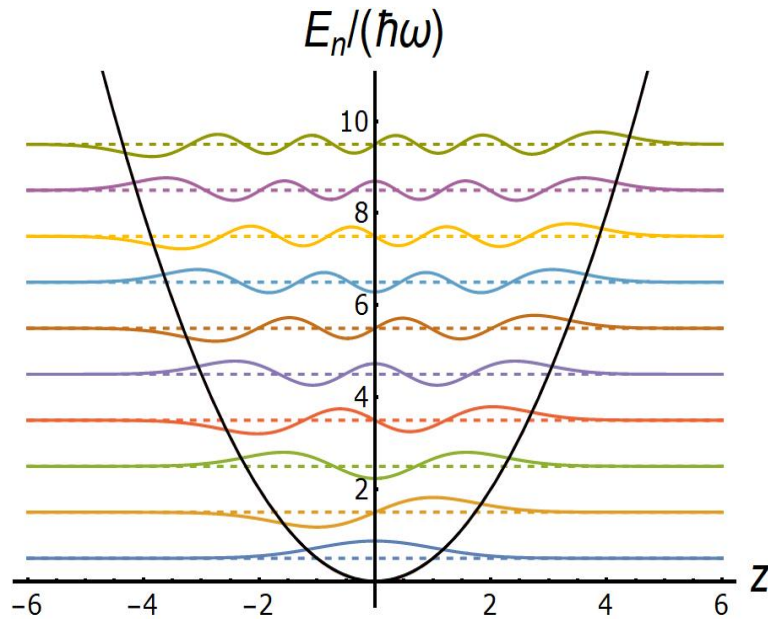


Рис. 1.5: Рівні енергії та хвильові функції осцилятора у безрозмірних одиницях

1.3.5. Відбиття та проходження через потенціальний бар'єр

Прямокутна сходинка (Potential Step)

У класичній механіці частинка рухається тільки в області $E - U(x) \geq 0$, тобто безперешкодно проходить над бар'єром зі зменшеною кінетичною енергією, а при $E - U(x) < 0$ відбивається повністю від сходинки.

Розглянемо рух в полі прямокутної потенціальної сходинки (див. рис. 1.6):

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0; \\ U_2, & x \geq 0. \end{cases}$$

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

На рис. 1.6 вибрали $0 < U_1 < U_2$ та виділили 2 області, у яких РШ має різний вигляд, тому що в точці $x = 0$ стрибком змінюється потенціальна енергія. У РШ входить друга похідна від ХФ. У точці $x = 0$ вона має скінченний стрибок. Отже, перша похідна в цій точці змінюється безперервно. ХФ – завжди безперервна. Маємо такі граничні умови в точці стрибка (індексами 1 і 2 відзначили ХФ в областях 1 і 2 відповідно):

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0). \quad (1.3.16)$$

Плюс умови скінченності ХФ при $x \rightarrow \pm\infty$.

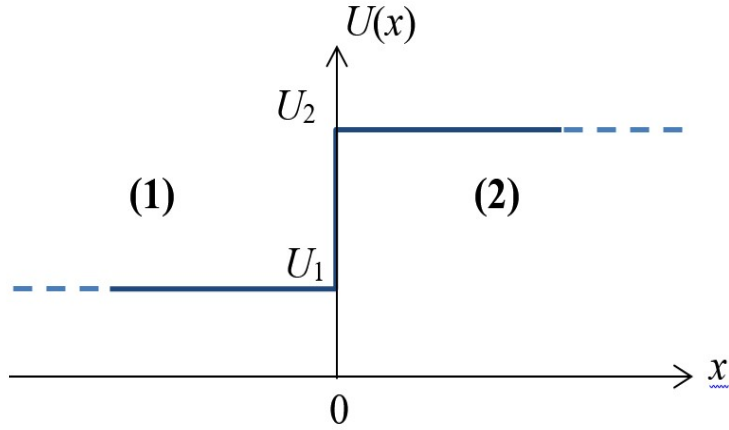


Рис. 1.6: Прямокутна сходинка

Розглядаємо окремо два випадки: а) $U_1 < E < U_2$ і б) енергія частинки вище висоти сходинки $E > U_2$.

Спочатку вивчимо тунельний ефект – проникнення квантової частинки в класично недоступну область $U_1 < E < U_2$ (випадок (а)):

$$\begin{aligned} (1) \quad \psi'' + k_1^2 \psi &= 0; & k_1^2 &= \frac{2m(E-U_1)}{\hbar^2}; \\ (2) \quad \psi'' - \kappa_2^2 \psi &= 0; & \kappa_2^2 &= \frac{2m(U_2-E)}{\hbar^2}. \end{aligned} \quad (1.3.17)$$

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \\ \psi_2 = A_2 e^{\kappa_2 x} + B_2 e^{-\kappa_2 x}; & A_2 = 0! \end{cases}$$

Скінченність ХФ при $x \rightarrow +\infty$ вимагає, щоб $A_2 = 0$. Умова скінченності ХФ при $x \rightarrow -\infty$ виконана автоматично. Залишається 3 невідомі коефіцієнти та 2 граничні умови:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = B_2; \\ ik_1(A_1 - B_1) = -\kappa_2 B_2; \end{cases} \quad \begin{cases} B_1 - B_2 = -A_1; \\ B_1 + i\frac{\kappa_2}{k_1} B_2 = A_1. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 \left(e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2} e^{-ik_1 x} \right) = A_1 \left(e^{ik_1 x} + e^{-ik_1 x + \delta} \right); \\ \psi_2 &= \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa_2} A_1 e^{-\kappa_2 x}; & \left| \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2} \right| &= 1; \\ e^{i\delta} &= \cos \delta + i \sin \delta = \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2}; & \text{tg} \delta &= \frac{2k_1 \kappa_2}{k_1^2 - \kappa_2^2}. \end{aligned} \quad (1.3.18)$$

З (1.3.18) видно, що частинка проникає в класично недоступну область із імовірністю

$$|\psi_2|^2 \sim \frac{k_1^2}{(k_1^2 + \kappa_2^2)} e^{-2\kappa_2 x},$$

а відбита хвиля має зміщення фази δ щодо падаючої хвилі.

Глибина проникнення $\Delta x \sim 1/\kappa_2$. Зі співвідношення невизначеності:

$$\Delta x \cdot \Delta p > \sim \hbar; \quad \Delta p > \sim \hbar \kappa_2; \quad \Delta E_{\text{кін.}} \sim \frac{\Delta p^2}{2m} > \sim \frac{\hbar^2 \kappa_2^2}{2m} > U_2 - E.$$

Невизначеність кінетичної енергії більше, ніж та енергія, якої не вистачає, щоб подолати бар'єр при $U_1 < E < U_2$. Частинка проникає «за бар'єр», але потоку частинок немає:

$$D = 0, \quad R = 1.$$

У випадку сходинки (бар'єра нескінченної ширини) є повне відбиття хвилі. Амплітуди у падаючої та відбитої хвиль однакові. Спектр енергій безперервний. Рух інфінітний (обмежений тільки з однієї сторони). Виродження рівнів немає.

Надбар'єрне відбиття $E > U_2$ (випадок (б)):

$$(1) \quad \psi'' + k_1^2 \psi = 0; \quad k_1^2 = \frac{2m(E-U_1)}{\hbar^2};$$

$$(2) \quad \psi'' + k_2^2 \psi = 0; \quad k_2^2 = \frac{2m(E-U_2)}{\hbar^2}.$$

Розв'язки в обох областях мають однаковий вигляд, але з різними $k_{1,2}$

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}; \\ \psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}; \end{cases}$$

і задовольняють автоматично умові скінченності на плюс-мінус нескінченності. 4 довільні коефіцієнти пов'язано 2 граничними умовами. Це означає, що 2 коефіцієнти залишаються довільними. Даному значенню енергії буде відповідати 2 різні ХФ. Рух є інфінітним в обидві сторони. Рівні енергії в цій області енергій дворазово вироджені. Не обмежуючи загальності, можемо вважати, що $B_2 = 0$ – немає потоку частинок праворуч від сходинки. Із граничних умов (1.3.11) випливає, що

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2; \\ A_1 - B_1 = \frac{k_2}{k_1} A_2; \end{cases} \quad \begin{cases} -B_1 + A_2 = A_1; \\ B_1 + \frac{k_2}{k_1} A_2 = A_1; \end{cases} \quad A_2 = \frac{2}{1 + \frac{k_2}{k_1}}; \quad B_1 = \frac{1 - \frac{k_2}{k_1}}{1 + \frac{k_2}{k_1}}.$$

Визначимо коефіцієнт прозорості як

$$D = \frac{|\vec{j}_{transmitted}|}{|\vec{j}_{incidental}|} \quad (1.3.19)$$

та коефіцієнт відбиття як

$$R = \frac{|\vec{j}_{reflected}|}{|\vec{j}_{incidental}|}. \quad (1.3.20)$$

Знаходимо коефіцієнт прозорості та коефіцієнт відбиття

$$D = \frac{k_2 |A_2|^2}{k_1 |A_1|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}; \quad R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

Граничні випадки: $E \rightarrow U_1 + 0$, $D \rightarrow 0$, $R \rightarrow 1$; $E \rightarrow \infty$, $D \rightarrow 1$, $R \rightarrow 0$.

Коефіцієнти прозорості та відбиття не залежать від напрямку потоку частинок (ліворуч праворуч або праворуч ліворуч). Це справедливо завжди, а не тільки для сходинки.

In English: Incidental wave, transmitted wave, reflected wave
Transmission coefficient, Reflection coefficient

Прямокутний бар'єр (Rectangular barrier) скінченної ширини

Розглянемо прямокутний потенційний бар'єр (див. рис. 1.7). Його потен-

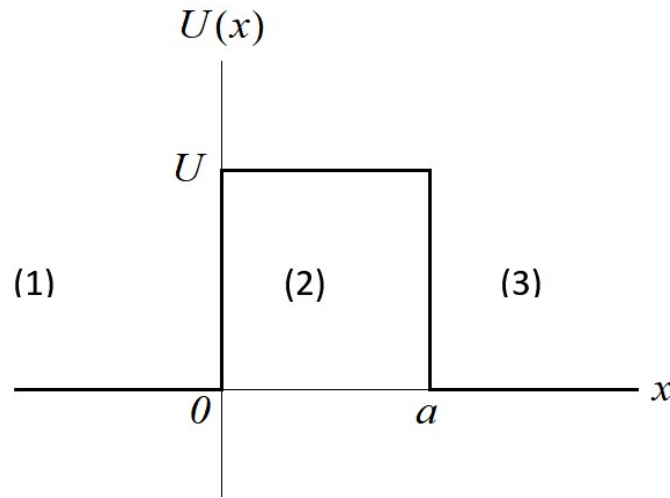


Рис. 1.7: Прямокутний бар'єр

ціальна енергія запишеться як

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

Розглянемо спочатку **тунелювання через бар'єр** при $0 < E < U$. У першій та третій областях маємо РШ для вільної частинки:

$$(1), (3) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad \psi'' + k^2\psi = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

і такі його розв'язки:

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}; \\ \psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}. \end{cases}$$

В області (1.3.12) маємо рівняння:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U\psi = E\psi, \quad \psi'' - \kappa^2\psi = 0, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$$

і наступний розв'язок:

$$\psi_2(x) = A_2 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x}.$$

У ХФ в області (2) можна й потрібно залишити обидва коефіцієнти, тому що це скінченна область $0 \leq x \leq a$. Таким чином, 6 коефіцієнтів зв'язані 4 граничними умовами в точках 0 та a :

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

На нескінченності умови ХФ $\psi(x \rightarrow \pm\infty)$ – скінченна – виконані автоматично. Як і раніше будемо вважати, що немає потоку частинок справа від бар'єра, і покладемо $B_3 = 0$.

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & x < 0 \\ A_2 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x} & 0 \leq x \leq a \\ A_3 e^{ik(x-a)} & x > a \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2; \\ ik(A_1 - B_1) = \kappa(A_2 - B_2); \end{cases} \quad \begin{cases} A_2 e^{\kappa a} + B_2 e^{-\kappa a} = A_3 e^{ika}; \\ \kappa(A_2 e^{\kappa a} - B_2 e^{-\kappa a}) = ik A_3 e^{ika}. \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_2 + B_2 = A_1 + B_1; \\ A_2 - B_2 = \frac{\kappa}{ik}(A_1 - B_1); \end{cases} \quad \begin{cases} A_2 e^{\kappa a} + B_2 e^{-\kappa a} = A_3; \\ A_2 e^{\kappa a} - B_2 e^{-\kappa a} = \frac{ik}{\kappa} A_3. \end{cases}$$

$$\begin{cases} \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) A_1 + \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) B_1 = \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{\kappa a} A_3; \\ \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) A_1 + \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) B_1 = \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{-\kappa a} A_3; \end{cases}$$

$$\frac{2ik}{\kappa} A_1 = \left(\frac{k^2 - \kappa^2}{\kappa^2} \text{sh} \kappa a + \frac{2ik}{\kappa} \text{ch} \kappa a \right) A_3;$$

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k^2}{\kappa^2} \frac{1}{\left(\frac{k^2 - \kappa^2}{\kappa^2}\right)^2 \text{sh}^2 \kappa a + \frac{4k^2}{\kappa^2} \text{ch}^2 \kappa a}; \quad \text{ch}^2 \kappa a = 1 + \text{sh}^2 \kappa a;$$

$$D = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa}\right)^2 \text{sh}^2 \kappa a}. \quad (1.3.21)$$

Для слабко прозорого бар'єра $\kappa a \gg 1$, $\text{sh} \kappa a \approx \frac{1}{2} e^{\kappa a}$, тому коефіцієнт прозорості

$$D \approx \frac{16k^2 \kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa a}.$$

Нехай $\kappa \rightarrow 0$ в (1.3.21). До якого значення наближається коефіцієнт прозорості? Відповідь: $D \rightarrow \frac{1}{1 + \frac{(ka)^2}{4}}$.

З тунельним проходженням через бар'єр зв'язаний альфа-розпад, явище спонтанного розпаду ядер, холодна емісія електронів з поверхні металу в сильному електричному полі.

Надбар'єрне відбиття. При $E > U$ в другій області розв'язок має вигляд

$$\psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad \kappa = ik_2.$$

Коефіцієнт прозорості отримаємо заміною в (1.3.21) $\kappa \rightarrow ik_2$

$$D = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - k_2^2}{2kk_2}\right)^2 \sin^2 k_2 a}. \quad (1.3.22)$$

При надбар'єрному відбитті можливо повне (резонансне) проходження за умови, що в (1.3.15) знаменник дорівнює 1:

$$\begin{aligned} \sin k_2 a &= 0, \quad k_2 a = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \\ E_n &= U + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}; \quad D = 1; \quad R = 0. \end{aligned} \quad (1.3.23)$$

Віртуальні рівні – повна прозорість прямокутного бар'єра при нескінченному дискретному наборі енергій. На рис. 1.8 показані графіки залежності коефіцієнта прозорості та коефіцієнта відбиття прямокутного бар'єра від енергії у довільних одиницях.

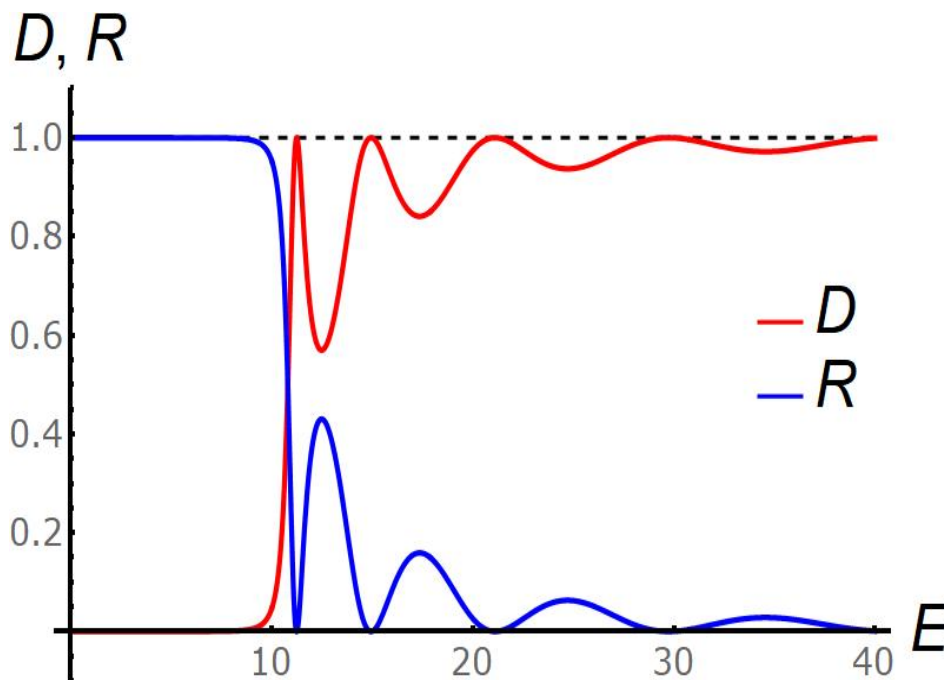


Рис. 1.8: Коефіцієнти прозорості D та відбиття R для прямокутного бар'єра. Енергія – в довільних одиницях

1.3.6. Загальні властивості одновимірного руху

При одновимірному русі енергетичний спектр може бути як дискретним, так і неперервним.

Якщо спектр *дискретний*, то ХФ квадратично інтегрувальна на дійсній осі $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1, \Rightarrow, \psi(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$. Рух є **фінітним**. Це випадок потенціальної ями. Рівні енергії невироджені.

В разі *дискретного спектра виконується осциляційна теорема*: число вузлів (нулів) ХФ = номеру рівня ($n=0,1,2,\dots$).

Якщо частинка може рухатися **інфінітно**, то спектр енергій **неперервний**, а ХФ квадратично неінтегрувальна. Це випадок тунелювання, а також надбар'єрного відбиття, як від ями, так і від бар'єра (сходинки).

Якщо рух інфінітний в одному напрямку, то рівні енергії невироджені. Якщо рух інфінітний у двох напрямках, то рівні енергії дворазово вироджені.

1.4. Математичний апарат квантової механіки

1.4.1. Основні відомості з теорії лінійних просторів та теорії лінійних операторів

1. Визначення лінійного простору. Задано дві дії: додавання й множення на число, які не виводять за межі множини елементів M та задовольняють 4-м аксіомам кожне.

Додавання

$$f + g = w; \quad f, g, w \in M;$$

$$1). f + g = g + f; \quad 2). (f + g) + h = f + g + h; \quad 3). f + 0 = f; \quad 4). f + (-f) = 0.$$

Множення на число

$$g = \lambda f; \quad f, g \in M;$$

$$1). 1 \cdot f = f; \quad 2). \alpha(\beta f) = (\alpha\beta)f; \quad 3). \alpha(f + g) = \alpha f + \alpha g;$$

$$4). (\alpha + \beta)f = \alpha f + \beta f.$$

Декілька прикладів лінійних просторів:

V_3 – тривимірний простір векторів, K_n – простір впорядкованих числових послідовностей

$$f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}; \quad f^* = (f_1^*, f_2^*, \dots, f_n^*),$$

$R(a, b)$ – простір функцій дійсної змінної x , неперервних на відрізку $a \leq x \leq b$,

P_n – простір поліномів ступеня не вище n .

2. Лінійна комбінація векторів:

$$f = \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 + \dots + \alpha_k f_k.$$

Лінійна залежність системи векторів: існує такий набір α_i , $i = 1, 2, \dots, k$, серед яких є нерівні нулю, а лінійна комбінація $f = 0$.

Лінійна незалежність системи векторів: лінійна комбінація $f = 0$ тоді й тільки тоді, коли всі $\alpha_i = 0$, $i = 1, 2, \dots, k$. Розмірність лінійного простору – максимальна кількість лінійно незалежних векторів. Базис – будь-яка система з n лінійно незалежних векторів.

3. Простір називається **метричним**, якщо в ньому заданий скалярний добуток. Кожній парі векторів ставиться у відповідність комплексне число: $(\varphi, \psi) = \lambda$, яке називається скалярним добутком двох векторів. Якщо цей добуток задовольняє 4 аксіомам:

(а) $(f, g) = (g, f)^*$;

(б) $(f_1 + f_2, g) = (f_1, g) + (f_2, g)$;

(в) $(f, \alpha g) = \alpha(f, g)$;

(г) $(f, f) \geq 0$, $(f, f) = 0$, тоді і тільки тоді, коли $f = 0$,

простір називається евклідовим.

4. Два важливі приклади скалярних добутків

Евклідів простір впорядкованих числових послідовностей K_n .

$$(f, g) = \sum_{i=1}^n f_i^* g_i.$$

Має розмірність n . Його ортонормований базис:

$$(e_i, e_k) = \delta_{ik} = \begin{cases} 1, & i = k; \\ 0, & i \neq k; \end{cases} \quad i, k = 1, 2, \dots, n.$$

Гільбертів простір – це нескінченновимірний евклідів простір. Позначається як L^2 . Це простір функцій, квадратично інтегрованих на дійсній осі $-\infty < x < \infty$:

$$(\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\psi(x)dx; \quad (\varphi, \varphi) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx < \infty.$$

Поняття повної системи функцій для нескінченновимірних просторів (узгалянення поняття базису): це система функцій, по якій довільну функцію, яка належить даному простору, можна розкласти в ряд Фур'є.

5. Визначення лінійного оператора $\hat{L}(\alpha f + \beta g) = \alpha \hat{L}f + \beta \hat{L}g$. Лінійність операторів квантової механіки забезпечує виконання принципу суперпозиції.

6. Способи завдання лінійних операторів: правило відповідності, інтегральна форма, матрична форма.

Правило відповідності (приклади лінійних операторів):

(а) $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$ – оператор інверсії (відбиття);

(б) $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x + a)$ – оператор трансляції (зсуву);

(в) $\hat{M}_c\psi(x) = \sqrt{C}\psi(Cx)$, $C > 0$ – оператор зміни масштабу;

(г) $\hat{K}\psi(x) = \psi^*(x)$ – оператор комплексного спряження;

(д) $\hat{P}_{12}\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$ – оператор перестановки двох координат;

(е) $\hat{x} = x$; $\hat{d} = \frac{d}{dx}$ – оператор диференціювання;

(ж) $\nabla = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}$ – оператор «набла»;

(и) $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа.

Оператори-матриці: $\tilde{f}_i = \sum_{k=1}^n L_{ik}f_k$, L_{ik} – матриця оператора.

Інтегральні оператори: $\tilde{\varphi}(x) = \hat{L}\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} L(x, x')\varphi(x')dx'$, $L(x, x')$ – ядро оператора.

7. Дії з операторами

(а) Одиничний оператор: $\hat{1} = 1$; $\hat{1}f = 1 \cdot f = f$,

нульовий оператор: $\hat{0} = 0$; $\hat{0}f = 0 \cdot f = 0$.

(б) Сума операторів:

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi = \hat{B}\psi + \hat{A}\psi = (\hat{B} + \hat{A})\psi; \quad \hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}.$$

(в) Добуток операторів:

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi); \quad \hat{B}\hat{A}\psi = \hat{B}(\hat{A}\psi); \quad \hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}!$$

(г) Комутатор двох операторів: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$,

і антикомутатор: $[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$.

(д) Обернений оператор: $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = 1$.

Нормальний оператор – оператор, що має обернений, який комутує з вихідним оператором: $[\hat{A}^{-1}, \hat{A}] = 0$.

Оператор, обернений до добутку операторів: \hat{A} та \hat{B}

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}.$$

(е) Визначення ермітово-спряженого оператора:

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\psi, \hat{A}^\dagger\varphi)^* = (\hat{A}^\dagger\varphi, \psi).$$

З самого визначення ермітово-спряженого оператора випливає, що:

$$(\hat{L}^\dagger)^\dagger = \hat{L}; \quad (\alpha\hat{L})^\dagger = \alpha^*\hat{L}^\dagger; \quad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger.$$

Матриця ермітово-спряженого оператора – це транспонована комплексно-спряжена матриця $(A^\dagger)_{ik} = A_{ki}^*$.

Аналогічно для ядра довільного оператора: $L^\dagger(x, x') = L^*(x', x)$.

(ж) Визначення ермітового (самоспряженого) оператора: $\hat{L}^\dagger = \hat{L}$. Анти-ермітів оператор: $\hat{L}^\dagger = -\hat{L}$.

Будь-який оператор можна представити у вигляді суми ермітової та антиермітової частин

$$\hat{A} = \hat{M} + i\hat{N}; \quad \hat{M} = \frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{A}^\dagger); \quad \hat{N} = \frac{i}{2}(\hat{A}^\dagger - \hat{A}).$$

Матриця ермітового оператора має дійсні елементи по головній діагоналі, а всі інші елементи задовольняють рівності $L_{ki} = L_{ik}^*$.

Для ядра ермітового оператора виконується співвідношення $L(x, x') = L^*(x', x)$.

(и) Визначення унітарного оператора $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$, $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$.

Для унітарних матриць виконується співвідношення

$$(\hat{U}^\dagger)_{ik}\hat{U}_{kl} = U_{ki}^*U_{kl} = \delta_{il}; \quad U_{ik}^*U_{lk} = \delta_{il}$$

– сума добутків різних рядків (стовпців) дорівнює 0, а сума квадратів модулів елементів одного рядка (стовпця) дорівнює 1. Визначник унітарної матриці $|\text{Det}\hat{U}| = 1$.

8. Рівняння на власні функції (ВФ) і власні значення (ВЗ)

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi$$

(а) Властивості ВЗ і ВФ ермітового оператора. ВЗ – дійсні, ВФ – ортонормовані. Наведемо доведення.

$$\begin{aligned} \hat{L}\psi_n &= \lambda_n\psi_n; & \hat{L}\psi_m &= \lambda_m\psi_m; \\ (\psi_m, \hat{L}\psi_n) &= (\psi_n, \hat{L}\psi_m)^*; & (\psi_m, \lambda_n\psi_n) &= (\psi_n, \lambda_m\psi_m)^*; \\ \lambda_n(\psi_m, \psi_n) &= \lambda_m^*(\psi_m, \psi_n); & (\lambda_n - \lambda_m^*)(\psi_m, \psi_n) &= 0; \\ m = n, & (\psi_n, \psi_n) > 0, \Rightarrow \lambda_n = \lambda_n^*; \\ m \neq n, & \lambda_n - \lambda_m \neq 0, (\lambda_n - \lambda_m)(\psi_m, \psi_n) = 0, \Rightarrow (\psi_m, \psi_n) = 0. \end{aligned}$$

З урахуванням нормування на одиницю маємо ортонормовану систему власних функцій $(\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn}$. Умова ортонормування – це умова повноти системи функцій.

(б) Властивості ВФ унітарного оператора. ВЗ за модулем дорівнюють 1.

$$\begin{aligned} \hat{U}\psi &= \lambda\psi; \\ (\psi, \hat{U}^\dagger\hat{U}\psi) &= (\psi, \psi); \quad (\hat{U}\psi, \hat{U}\psi) = (\psi, \psi); \\ (\lambda\psi, \lambda\psi) &= (\psi, \psi); \quad |\lambda|^2 = 1; \quad \lambda = e^{i\alpha}, \quad \alpha - \text{дійсне число.} \end{aligned}$$

(в) Унітарне перетворення (аналог канонічного перетворення в класичній механіці):

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}; \quad \varphi = \hat{U}^\dagger\psi; \\ \hat{A} &= \hat{U}\hat{a}\hat{U}^\dagger; \quad \psi = \hat{U}\varphi. \end{aligned}$$

Унітарне перетворення зберігає ермітовість:

$$\hat{L}^\dagger = \hat{L}; \quad \hat{l} = \hat{U}^\dagger\hat{L}\hat{U}; \quad \hat{l}^\dagger = (\hat{U}^\dagger\hat{L}\hat{U})^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{L}^\dagger\hat{U} = \hat{U}^\dagger\hat{L}\hat{U} = \hat{l}.$$

Зберігає ВЗ:

$$\begin{aligned} \hat{L}\psi &= \lambda\psi; \\ (\hat{U}^\dagger\hat{L}\psi) &= \lambda(\hat{U}^\dagger\psi); \quad (\hat{U}^\dagger\hat{L}\hat{U})(\hat{U}^\dagger\psi) = \lambda(\hat{U}^\dagger\psi); \\ \hat{l}\varphi &= \lambda\varphi. \end{aligned}$$

Зберігає комутаційні співвідношення

$$\begin{aligned} [\hat{L}, \hat{M}] &= \hat{N}; \quad \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = \hat{N}; \\ \hat{U}^\dagger\hat{L}\hat{M}\hat{U} - \hat{U}^\dagger\hat{M}\hat{L}\hat{U} &= \hat{U}^\dagger\hat{N}\hat{U}; \quad \hat{U}^\dagger\hat{L}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{M}\hat{U} - \hat{U}^\dagger\hat{M}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{L}\hat{U} = \hat{U}^\dagger\hat{N}\hat{U}; \\ \hat{l}\hat{m} - \hat{m}\hat{l} &= \hat{n}; \quad [\hat{l}, \hat{m}] = \hat{n}. \end{aligned}$$

Зберігає матричні елементи операторів

$$(\psi_1, \hat{L}\psi_2) = (\psi_1, \hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{L}\hat{U}\hat{U}^\dagger\psi_2) = (\hat{U}^\dagger\psi_1, \hat{U}^\dagger\hat{L}\hat{U}\hat{U}^\dagger\psi_2) = (\varphi_1, \hat{l}\varphi_2).$$

1.4.2. Елементи теорії зображень

Ермітові оператори з дискретним спектром мають повну систему функцій

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n\psi_n, \quad \lambda_n = \lambda_n^*, \quad (\psi_m, \psi_n) = \delta_{mn}. \quad (1.4.1)$$

Довільну функцію простору L^2 можна представити у вигляді розкладання в ряд Фур'є по ВФ ермітового оператора з дискретним спектром

$$\psi(x) = \sum_n C_n\psi_n(x); \quad C_n = (\psi_n, \psi) = \int \psi_n^*(x)\psi(x)dx. \quad (1.4.2)$$

Набір коефіцієнтів $\{C_n\}$ «містить» ту ж інформацію про властивості квантової системи, що й вихідна хвильова функція $\psi(x)$. Можна довести, що коефіцієнти C_m віднормовані на 1 (це ще один зі способів запису умови повноти системи функцій):

$$1 = (\psi, \psi) = \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} (\psi_n, \psi_{n'}) = \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} \delta_{nn'} = \sum_n |C_n|^2;$$

$$\sum_n |C_n|^2 = 1.$$

Підставимо коефіцієнти C_n в розкладання $\psi(x)$. Отримаємо

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_n (\psi_n, \psi) \psi_n(x) = \sum_n \left(\int \psi_n(x') \psi(x') dx' \right) \psi_n(x) = \\ &= \int \left(\sum_n \psi_n(x') \psi_n(x) \right) \psi(x') dx'; \\ \hat{L}\psi &= \int L(x, x') \psi(x') dx'. \end{aligned}$$

Сума $\sum_n \psi_n(x') \psi_n(x)$ являє собою ядро одиничного оператора:

$$\sum_n \psi_n(x') \psi_n(x) = \delta(x - x'). \quad (1.4.3)$$

Це знов-таки умова повноти системи власних функцій ермітововго оператора. *Ядро одиничного оператора називають дельта-функцією Дірака.*

1.4.3. Властивості дельта-функції Дірака

Дельта-функція відноситься до класу так званих узагальнених функцій. Поводиться незвичайним чином:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0; \\ 0, & x \neq 0; \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1.$$

Увага! Нам важливо тільки те, щоб точка $x=0$ була усередині границь інтегрування. Самі границі можуть бути кінцевими.

1. Парна функція: $\delta(-x) = \delta(x)$.

2. $f(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx$ (можна розглядати як визначення дельта-функції).

3. $\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x)$.

4. $\delta(\vec{r}) = \delta(x) \delta(y) \delta(z)$.

Апроксимація дельта-функції

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \left(\frac{\alpha}{x^2 + \alpha^2} \right) = \pi \delta(x).$$

Знайдемо матрицю оператора \hat{M} в дискретному \hat{L} -зображенні

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_n C_n \psi_n(x); & \hat{M}\psi(x) &= \sum_n C_n \hat{M}\psi_n(x) = \sum_n \tilde{C}_n \psi_n(x); \\ \tilde{C}_n &= (\psi_n, \hat{M}\psi(x)) = \sum_{n'} C_{n'} (\psi_n, \hat{M}\psi_{n'}) = \sum_{n'} M_{nn'} C_{n'}; \\ \tilde{C}_n &= M_{nn'} C_{n'}, & M_{nn'} &= (\psi_n, \hat{M}\psi_{n'}).\end{aligned}$$

$M_{nn'}$ – матричні елементи оператора \hat{M} в дискретному L -зображенні (зображенні ВФ оператора \hat{L}).

Матриця оператора у своєму власному зображенні діагональна. По головній діагоналі стоять ВЗ

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n \psi_n; \quad L_{mn} = (\psi_m, \hat{L}\psi_n) = \lambda_n (\psi_m, \psi_n) = \lambda_n \delta_{mn}.$$

1.4.4. Неперервне зображення

У ермітового оператора з неперервним спектром $\hat{L}\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$ ВФ нормуються на дельта-функцію (умова повноти)

$$(\psi_\lambda, \psi_{\lambda'}) = \int \psi_\lambda^*(x) \psi_{\lambda'}(x) dx = \delta(\lambda - \lambda').$$

Розкладання по ВФ оператора з безперервним спектром – це розкладання в інтеграл Фур'є

$$\psi(x) = \int C(\lambda) \psi_\lambda(x) d\lambda; \quad C_\lambda = C(\lambda) = (\psi_\lambda, \psi) = \int \psi_\lambda^*(x) \psi(x) dx.$$

Ще одна умова повноти:

$$\int \psi_\lambda^*(x) \psi_\lambda(x') d\lambda = \delta(x - x').$$

$\psi(x)$ та $C(\lambda)$ – «рівноправні» способи опису хвильової функції. ХФ $C(\lambda)$, нормована на 1: $\int |C(\lambda)|^2 d\lambda = 1$ за умови, що $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$.

Ядро оператора \hat{M} в неперервному L -зображенні

$$\begin{aligned}\hat{M}\psi(x) &= \int C(\lambda) \hat{M}\psi_\lambda(x) d\lambda = \int \tilde{C}(\lambda) \psi_\lambda(x) d\lambda; \\ \tilde{C}(\lambda) &= (\psi_\lambda, \hat{M}\psi) = \int \psi_\lambda^*(x) \left(\int C(\lambda') \hat{M}\psi_{\lambda'}(x) d\lambda' \right) dx = \\ &= \int C(\lambda') \left(\int \psi_\lambda^*(x) \hat{M}\psi_{\lambda'}(x) dx \right) d\lambda' = \int M(\lambda, \lambda') C(\lambda') d\lambda' \\ M(\lambda, \lambda') &= \int \psi_\lambda^*(x) \hat{M}\psi_{\lambda'}(x) dx.\end{aligned}$$

Ядро оператора у власному зображенні

$$L(\lambda, \lambda') = (\psi_\lambda, \hat{L}\psi_{\lambda'}) = \lambda'(\psi_\lambda, \psi_{\lambda'}) = \lambda'\delta(\lambda - \lambda').$$

Оператор у своєму власному зображенні – це оператор множення

$$\hat{L}C(\lambda) = \int L(\lambda, \lambda')C(\lambda')d\lambda' = \int \lambda'\delta(\lambda - \lambda')C(\lambda')d\lambda' = \lambda C(\lambda).$$

Оператор координати в координатному зображенні, очевидно, є $\hat{x} = x$.

Перехід від одного зображення до іншого – це унітарне перетворення. Воно виконується у випадку дискретного зображення за допомогою унітарної матриці (оператора) \hat{U} .

$$C_n = \hat{U}^\dagger\psi = (\psi_n, \psi) = \int \psi_n^*(x)\psi(x)dx;$$

$$\hat{a} = \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}; \quad a_{mn} = \int \psi_m^*(x)\hat{A}\psi_n(x)dx.$$

Якщо вдається знайти таке унітарне перетворення, яке діагоналізує матрицю оператора, то ми знаходимо ВЗ та ВФ оператора \hat{A} . Унітарне перетворення – це квантовий аналог канонічного перетворення в класичній механіці.

1.4.5. Фізичні величини та оператори

1. Кожній квантовомеханічній величині A ставиться у відповідність ермітов оператор \hat{A} . Спектр оператора \hat{A} – це спектр усіх можливих (вимірюваних) значень фізичної (квантовомеханічної) величини A .

2. Власні функції (ВФ) ψ_A оператора \hat{A} ($\hat{A}\psi_A = A\psi_A$) – це ВФ системи в стані, у якому фізична величина A має дане значення A .

Імовірність результату вимірювання

Нехай квантова система описується хвильовою функцією $\psi(x)$ у координатному зображенні. Імовірність отримати при вимірюванні координату x в інтервалі $x, x + dx$ дорівнює

$$dW = |\psi(x)|^2 dx; \quad \rho(x, t) = \frac{dW}{dx} = |\psi(x)|^2. \quad (1.4.4)$$

У дискретному зображенні ВФ оператора \hat{L} хвильова функція – це набір коефіцієнтів $\{C_n\}$, $\psi(x) = \sum_n C_n\psi_n(x)$. Імовірність одержати при вимірюванні власне значення λ_n :

$$W_n = |C_n|^2. \quad (1.4.5)$$

Нагадаємо, що $\sum_n |C_n|^2 = 1$.

У неперервному зображенні імовірність отримати при вимірюванні фізичну величину λ в інтервалі $\lambda, \lambda + d\lambda$

$$dW = |C(\lambda)|^2 d\lambda. \quad (1.4.6)$$

1.4.6. Середні значення фізичних величин

Використовуємо звичайне визначення середнього значення з теорії ймовірностей

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n\psi_n; \quad \psi(x) = \sum_n C_n\psi_n(x); \quad W_n = |C_n|^2;$$

$$\bar{L} = \sum_n \lambda_n W_n = \sum_n \lambda_n |C_n|^2 = \sum_n \lambda_n C_n C_n^*$$

$$\begin{aligned} C_n &= (\psi_n, \psi), \quad C_n^* = (\psi, \psi_n); \quad \bar{L} = \sum_n \lambda_n C_n (\psi, \psi_n) = \sum_n C_n (\psi, \lambda_n \psi_n) \\ &= \sum_n C_n (\psi, \hat{L}\psi_n) = (\psi, \sum_n \hat{L}C_n\psi_n) = (\psi, \hat{L} \sum_n C_n\psi_n). \end{aligned}$$

Середнє значення оператора фізичної величини в стані, який описується хвильовою функцією ψ , визначається так:

$$\bar{L} = (\psi, \hat{L}\psi). \quad (1.4.7)$$

Скористаємося принципом відповідності та перейдемо від класичної функції Гамільтона до квантового оператора Гамільтона (гамільтоніана) Hamiltonian. Оператор Гамільтона – ермітовий. Для нерелятивістської частинки в зовнішньому полі функція Гамільтона є сумою кінетичної та потенціальної енергії

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

Оператор Гамільтона матиме вигляд

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}; \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla \cdot \nabla = \frac{(\pm i\hbar)^2}{2m}\nabla \cdot \nabla; \quad \hat{U} = U(\vec{r}).$$

Стационарне РШ (яке «вивели» раніше) – це рівняння на ВФ і ВЗ оператора \hat{H}

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (1.4.8)$$

Оператор радіуса-вектора та оператор імпульсу в координатному зображенні:

$$\begin{aligned} \hat{\vec{r}} &= \vec{r} = (x, y, z); \quad \hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z; \\ \hat{\vec{p}} &= -i\hbar\nabla = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}; \quad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \end{aligned}$$

Гамільтоніан системи взаємодіючих частинок у зовнішньому полі

$$\hat{H} = \sum_a \frac{\hat{p}_a^2}{2m_a} + \sum_a U_a(\vec{r}_a, t) + U_{int}. \quad (1.4.9)$$

У нерелятивістській механіці в присутності магнітного поля гамільтоніан записують через скалярний та векторний потенціали поля у вигляді

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi; \quad \vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}; \quad \vec{H} = \text{rot} \vec{A}.$$

1.5. Оператор Гамільтона. Стаціонарні стани

1.5.1. Власні функції (ВФ) та власні значення (ВЗ) операторів \hat{r} , \hat{p} у координатному та в імпульсному зображенні

Відшукаємо ВФ і ВЗ оператора координати у координатному зображенні. Скористаємося визначенням дельта-функції Дірака

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') \delta(x - x') dx'.$$

Цей вираз можемо розглядати як розкладання довільної функції за ВФ оператора координати, тобто ВФ оператора координати – це дельта-функція $C\delta(x - x_0)$. Нормувальна константа

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) \delta(x - x'_0) dx = \delta(x_0 - x'_0); \quad |C|^2 \delta(x_0 - x'_0) = \delta(x_0 - x'_0); \\ |C|^2 = 1.$$

Власні значення та власні функції оператора координати

$$\lambda_x = x_0; \quad -\infty < x_0 < \infty; \quad \psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0). \quad (1.5.1)$$

Спектр оператора координати – неперервний.

Відшукаємо ВФ та ВЗ оператора проекції імпульсу \hat{p}_x в координатному зображенні

$$\hat{p}_x \psi(x) = \lambda_p \psi(x); \\ -i\hbar \frac{d\psi}{dx} = p\psi(x); \quad \frac{d\psi}{\psi} = \frac{ip}{\hbar} dx; \quad \psi_p(x) = C e^{\frac{ipx}{\hbar}};$$

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x} dx = \delta(p - p'); \quad |C|^2 2\pi\hbar \delta(p - p') = \delta(p - p').$$

Скористаємося формулою

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx = 2\pi\delta(k).$$

Отримаємо нормувальну сталу $|C| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$.

Таким чином, ВЗ та ВФ оператора імпульсу в координатному зображенні

$$\lambda_p = p_0; \quad -\infty < p_0 < \infty; \quad \psi_{p_0}(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x}. \quad (1.5.2)$$

Перехід в імпульсне зображення також виконаємо для проекцій операторів \hat{x} , \hat{p}_x

$$x(p, p') = (\psi_p, x\psi_{p'}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} x e^{\frac{i}{\hbar} p' x} dx;$$

$$\hat{x}C(p) = \int_{-\infty}^{\infty} x(p, p') C(p') dp'.$$

Змінюємо двічі порядок інтегрування та знаходимо спочатку ядро оператора координати, а потім і сам оператор координати

$$x(p, p') = (\psi_p, x\psi_{p'}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} x e^{\frac{i}{\hbar} p' x} dx;$$

$$\begin{aligned} \hat{x}C(p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dp'} \left(e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \right) C(p') dp' = \\ &= -\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \right) \frac{dC}{dp'} dp' = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dp' \frac{dC}{dp'} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (p' - p) x} dx = \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dp' \frac{dC}{dp'} \delta(p' - p) = i\hbar \frac{dC}{dp}. \end{aligned}$$

Оператор координати в імпульсному зображенні

$$\hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp}. \quad (1.5.3)$$

Оператор проекції імпульсу на будь-яку вісь декартової системи координат, як і будь-який оператор у своєму власному безперервному зображенні, – це просто оператор множення на p , а його ядро

$$p(p, p') = p' \delta(p - p').$$

Узагальнимо отримані результати у вигляді таблиці.

Зображення	Оператор радіуса-вектора	Оператор імпульсу
Координатне (position representation)	$\hat{\vec{r}} = \vec{r}; \quad \vec{r} = (x, y, z);$ $\hat{x}_j = x_j; \quad j = 1, 2, 3;$	$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}};$ $\hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}; \quad j = 1, 2, 3;$
Імпульсне (momentum representation)	$\hat{\vec{r}} = i\hbar \nabla_{\vec{p}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}};$ $\hat{r}_j = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j}; \quad j = 1, 2, 3;$	$\hat{\vec{p}} = \vec{p}; \quad \vec{p} = (p_x, p_y, p_z);$ $\hat{p}_j = p_j; \quad j = 1, 2, 3;$

1.5.2. Оператор Гамільтона, стаціонарні стани

Нагадаємо, що ці викладки вже були частково наведені у параграфі 1.2.7.

«Виведемо» ще раз РШ. Залежне від часу (нестационарне) РШ можна розглядати як наслідок принципу причинності у квантовій механіці: завдання ХФ у початковий момент часу $t = t_0$ й усіх взаємодій квантової системи дозволяє описати еволюцію квантової системи, тобто знайти ХФ при $t > t_0$. «Еволюція» означає зміну згодом, тобто похідну за часом від ХФ:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(q, t),$$

яка визначається самою ХВ. Оператор \hat{H} перетворив ХФ так, що $\hat{H} \Psi(q, t)$ дорівнює похідній від ХФ. Стала Планка забезпечує потрібну розмірність, а уявна одиниця – ермітовість оператора диференціювання.

Нехай гамільтоніан явно не залежить від часу $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$. Розділимо змінні в нестационарному РШ:

$$\Psi(q, t) = \psi(q)\chi(t); \quad i\hbar\psi(q) \frac{d\chi(t)}{dt} = \chi(t)\hat{H}\psi(q);$$

$$\frac{d\chi(t)}{\chi(t)} = \frac{\hat{H}\psi(q)}{\psi(q)} = E; \quad \chi(t) = Ce^{-\frac{iEt}{\hbar}}.$$

Для координатної частини ХФ отримуємо рівняння на ВФ та ВЗ гамільтоніана

$$\hat{H}\psi(q) = E\psi(q).$$

ХФ стаціонарних станів

$$\Psi(q, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(q).$$

У стаціонарному стані імовірність не залежить від часу:

$$|\Psi(q, t)|^2 = |\psi(q)|^2.$$

Будь-яку ХФ можна розкласти в ряд Фур'є по ХФ стаціонарних станів:

$$\Psi(q, t) = \sum_n C_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n(q).$$

1.5.3. Рівняння Шредінгера в імпульсному зображенні

Перехід в імпульсне зображення – це унітарне перетворення ХФ та операторів. Безвідносно до зображення РШ записують за допомогою запропонованих Діраком векторів стану «бра» $\langle \psi |$ та «кет» $|\psi \rangle$

$$\hat{H}|\psi \rangle = E|\psi \rangle.$$

Гамільтоніан частинки в зовнішньому полі в координатному зображенні

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

Ядро оператора кінетичної енергії

$$\begin{aligned} T(p, p') &= (\psi_p, T\psi_{p'}) = \frac{1}{2m} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} (-i\hbar)^2 \left(\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\right)^2 e^{\frac{i\vec{p}'\vec{r}}{\hbar}} d\vec{r} = \\ &= \frac{\vec{p}'^2}{2m} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i(\vec{p}'-\vec{p})\vec{r}}{\hbar}} d\vec{r} = \frac{p'^2}{2m} \delta(\vec{p}' - \vec{p}), \quad (d\vec{r} \equiv dV). \end{aligned}$$

Оператор кінетичної енергії в імпульсному зображенні – це оператор множення

$$\hat{T}\psi(\vec{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} T(\vec{p}, \vec{p}')\psi(\vec{p}')d\vec{p}' = \frac{p^2}{2m}\psi(\vec{p}).$$

Ядро оператора потенціальної енергії

$$U(\vec{p}, \vec{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i(\vec{p}'-\vec{p})\vec{r}}{\hbar}} U(\vec{r})d\vec{r}.$$

Стационарне РШ в імпульсному зображенні

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\vec{p}) + \int_{-\infty}^{\infty} U(\vec{p}, \vec{p}')\psi(\vec{p}')d\vec{p}' = E\psi(\vec{p}). \quad (1.5.4)$$

Формально можемо записати

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\vec{p}) + U\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\right)\psi(\vec{p}) = E\psi(\vec{p}). \quad (1.5.5)$$

Зазвичай залежність $U(\vec{r})$ досить складна, тому простіше розв'язувати РШ у координатному зображенні.

Наведемо два приклади запису гамільтоніана в координатному та імпульсному зображенні.

Гамільтоніан гармонічного осцилятора має вигляд, симетричний по координаті та імпульсу

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2};$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}; \quad (\text{position representation})$$

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{d^2}{dp^2}. \quad (\text{momentum representation})$$

Гамільтоніан частинки в однорідному полі

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + mg\hat{x};$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + mgx; \text{ (position representation)}$$

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + img\hbar \frac{d}{dp}. \text{ (momentum representation)}$$

1.5.4. Розв'язання задачі про рух частинки у полі дельта-ями в імпульсному зображенні для від'ємних енергій (фінітний рух)

В якості прикладу розв'язку РШ в імпульсному зображенні знайдемо рівні енергії ($E < 0$) частинки в дельта-ямі $U(x) = -\alpha\delta(x)$.

Одновимірне РШ в імпульсному зображенні

$$\frac{p^2}{2m}\psi(p) + \int_{-\infty}^{\infty} U(p, p')\psi(p')dp' = -|E|\psi(p);$$

$$U(p, p') = (\psi_p, U\psi_{p'}) = -\frac{\alpha}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i(p'-p)x}{\hbar}} \delta(x)dx = -\frac{\alpha}{2\pi\hbar}.$$

$$\frac{p^2}{2m}\psi(p) - \frac{\alpha}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p')dp' = -|E|\psi(p);$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + |E|\right)\psi(p) = \frac{\alpha}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p')dp'.$$

В імпульсному зображенні РШ стало інтегральним рівнянням

$$\psi(p) = \left(\frac{1}{p^2 + 2m|E|}\right) \left(\frac{\alpha m}{2\pi\hbar}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p')dp'.$$

Умова «самоузгодження» – аналог граничних умов у координатному зображенні дозволяє знайти рівні енергії

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(p)dp = \frac{\alpha m}{2\pi\hbar} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{p^2 + 2m|E|}\right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi(p')dp'\right);$$

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{p^2 + 2m|E|}\right) = \frac{2\pi\hbar}{\alpha m}; \quad \oint \frac{dz}{(z + ip_0)(z - ip_0)} = \frac{2\pi\hbar}{\alpha m}; \quad p_0 = \sqrt{2m|E|}.$$

Обчислюємо інтеграл за допомогою теорії лишків¹. Згідно з формулою Коші, інтеграл по замкненому контуру дорівнює $2\pi i \times \sum \text{Res}$. Замикаємо

¹ *Лишок* (від фр. Résidu – *лишок*, англ. residue, рос. вычет).

контур у верхній напівплощині. Тут є один простий полюс у точці $z = ip_0$

$$\frac{2\pi i}{2ip_0} = \frac{2\pi\hbar}{\alpha m}; \quad p_0 = \frac{\alpha m}{\hbar}; \quad E = -\frac{p_0^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}.$$

ХФ в імпульсному зображенні (без нормування) вже знайдена:

$$\psi(p) = \frac{C}{p^2 + 2m|E|} = \frac{C}{p^2 + p_0^2} = \frac{C}{p^2 + \left(\frac{\alpha m}{\hbar}\right)^2}.$$

Зручніше знайти спочатку ХФ у координатному зображенні й нормувати її.

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p)\psi_p(x)dp = \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp}{p^2 + p_0^2} = \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{ip|x|}{\hbar}} dp}{p^2 + p_0^2} = \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \oint \frac{e^{\frac{iz|x|}{\hbar}} dz}{z^2 + p_0^2} = \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \oint \frac{e^{\frac{iz|x|}{\hbar}} dz}{(z + ip_0)(z - ip_0)} = \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} 2\pi i \frac{e^{-\frac{p_0|x|}{\hbar}}}{ip_0} = C \left(\frac{\pi}{2\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{p_0} e^{-\frac{p_0|x|}{\hbar}} = A e^{-\frac{p_0|x|}{\hbar}}; \\ \psi(x) &= A e^{-\kappa|x|}; \quad \kappa = \frac{p_0}{\hbar}; \quad C \left(\frac{\pi}{2\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{p_0} = A. \end{aligned}$$

Перша похідна від ХФ має скінченний скачок при $x=0$. Нормування

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\kappa|x|} dx = 1; \quad 2|A|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx = 1; \quad 2|A|^2 \frac{1}{2\kappa} = 1;$$

$$|A| = \sqrt{\kappa}.$$

$$C = A \left(\frac{2\hbar}{\pi}\right)^{1/2} \hbar\kappa = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} (\hbar\kappa)^{3/2}.$$

Відповідь:

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}; \tag{1.5.6}$$

$$\psi(x) = \left(\frac{\sqrt{\alpha m}}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{\alpha m}|x|}{\hbar}\right); \quad \psi(p) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{\alpha m}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{p^2 + \left(\frac{\alpha m}{\hbar}\right)^2}. \tag{1.5.7}$$

1.6. Фізичний зміст комутації операторів

1.6.1. Комутація операторів та результати вимірювань

Нагадаємо визначення комутатора двох операторів

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \tag{1.6.1}$$

Доведемо дві важливі теореми.

1. Якщо два оператори мають спільну систему власних функцій (ВФ), то вони між собою комутують. Нехай $\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n$, $\hat{B}\psi_n = B_n\psi_n$. Для ХФ виконується умова

$$\begin{aligned}\hat{A}\hat{B}\psi_n &= B_n\hat{A}\psi_n = B_nA_n\psi_n; & \hat{B}\hat{A}\psi_n &= A_n\hat{B}\psi_n = A_nB_n\psi_n. \\ (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_n &= 0.\end{aligned}$$

Це ж справедливо й для довільної функції, розкладеної в ряд Фур'є по спільним ВФ операторів \hat{A}, \hat{B} :

$$\psi = \sum_n C_n\psi_n; \quad [\hat{A}, \hat{B}]\psi = \sum_n C_n[\hat{A}, \hat{B}]\psi_n = 0.$$

2. Якщо два оператори між собою комутують, то вони мають спільну систему власних функцій. Нехай $\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n$. Тоді

$$\begin{aligned}\hat{B}\hat{A}\psi_n &= \hat{B}A_n\psi_n = A_n\hat{B}\psi_n; & \hat{B}\hat{A} &= \hat{A}\hat{B}; \\ \hat{A}\hat{B}\psi_n &= A_n\hat{B}\psi_n, \Rightarrow, & \hat{B}\psi_n &= B_n\psi_n,\end{aligned}$$

оскільки $\hat{B}\psi_n$ – це теж ВФ оператора \hat{A} , як і ψ_n , з одним і тим же ВЗ A_n . Ці дві функції можуть відрізнитися тільки чисельним множником, отже, $\hat{B}\psi_n = B_n\psi_n$, тобто ψ_n – ВФ оператора \hat{B} .

Таким чином, фізичні величини, що відповідають двом комутуючим операторам, вимірювані одночасно – одночасно мають певні значення. Наприклад, комутатор

$$[x_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}.$$

Різномірні компоненти координат і імпульсів одночасно вимірні, а одноіменні – ні. Це вже знаємо зі співвідношення невизначеності Гейзенберга.

Комутатор – це квантовий аналог дужок Пуассона в класичній механіці, а комутаційні співвідношення для координат і імпульсів аналогічні співвідношенням для дужок Пуассона канонічно сполучених величин.

Перехід до класичних дужок Пуассона здійснюється таким чином:

$$\{f, g\} = - \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial x_i} - \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right); \quad [\hat{f}, \hat{g}] = \frac{\hbar}{i} \{f, g\}.$$

1.6.2. Нерівності Гейзенберга

Якщо два оператори не комутують, то відповідні їм фізичні величини не можуть мати одночасно певні значення. Знайдемо нерівності, які зв'язують неточності (невизначеності) виміру таких двох величин.

Нагадаємо визначення середнього значення фізичної величини

$$\bar{A} = (\psi, \hat{A}\psi).$$

Середнє квадратичне

$$\overline{A^2} = (\psi, \hat{A}^2\psi).$$

Відхилення від середнього значення в теорії ймовірностей визначається за допомогою поняття дисперсії:

$$\overline{\Delta A^2} = \overline{(\hat{A} - \bar{A})^2} = (\psi, \hat{A}^2\psi) - 2\bar{A}(\psi, \hat{A}\psi) + (\bar{A})^2 = \overline{A^2} - (\bar{A})^2.$$

Нехай комутатор операторів фізичних величин \hat{A}, \hat{B} дорівнює $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. Уявна одиниця забезпечує антиермітовість комутатора двох некомуруючих ермітових операторів. Вводимо неермітів допоміжний оператор

$$\hat{L} = (\hat{A} - \bar{A}) + i\gamma(\hat{B} - \bar{B}).$$

Ермітово-спряжений до \hat{L} оператор \hat{L}^\dagger дорівнює

$$\hat{L}^\dagger = (\hat{A} - \bar{A}) - i\gamma(\hat{B} - \bar{B}).$$

Побудуємо ермітів оператор $\hat{L}^\dagger\hat{L}$ і знайдемо його середнє значення

$$\overline{\hat{L}^\dagger\hat{L}} = (\psi, \hat{L}^\dagger\hat{L}\psi) = (\hat{L}\psi, \hat{L}\psi) = |\hat{L}\psi|^2 \geq 0.$$

Виконаємо необхідні перетворення

$$\begin{aligned} \overline{\hat{L}^\dagger\hat{L}} &= \overline{\left((\hat{A} - \bar{A}) - i\gamma(\hat{B} - \bar{B})\right) \left((\hat{A} - \bar{A}) + i\gamma(\hat{B} - \bar{B})\right)} = \\ &= \overline{\Delta A^2} + i\gamma\overline{[\hat{A}, \hat{B}]} + \gamma^2\overline{\Delta B^2} \geq 0. \\ \gamma^2\overline{\Delta B^2} - \gamma\bar{C} + \overline{\Delta A^2} &\geq 0. \end{aligned}$$

Тут $\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}]$.

Квадратне рівняння не має дійсного кореня, якщо його дискримінант менше нуля:

$$\begin{aligned} \bar{C}^2 - 4\overline{\Delta A^2}\overline{\Delta B^2} &\leq 0; \quad \overline{\Delta A^2}\overline{\Delta B^2} \geq \frac{\bar{C}^2}{4}. \\ \delta A\delta B &\geq \frac{|\bar{C}|}{2}; \quad \delta A = \sqrt{\overline{\Delta A^2}}; \quad \delta B = \sqrt{\overline{\Delta B^2}}. \end{aligned}$$

Таким чином маємо

$$\delta A\delta B \geq \frac{|[\hat{A}, \hat{B}]|}{2}. \quad (1.6.2)$$

Для однойменних координати й проекції імпульсу $[\hat{x}_j, \hat{p}_j] = i\hbar$. Отже, співвідношення невизначеності Гейзенберга для середньоквадратичних відхилень набуває вигляду

$$\delta x_j \delta p_j \geq \frac{\hbar}{2}, \quad j = 1, 2, 3 \ (x, y, z). \quad (1.6.3)$$

1.6.3. Повний набір фізичних величин

Стан заданий, якщо задана його ХФ. ХФ виміряти не можна. Фізичний зміст має тільки квадрат модуля ХФ. Ми говоримо, що стан заданий, якщо задана певна сукупність квантовомеханічних (фізичних) величин.

Сукупність квантовомеханічних величин, завдання яких повністю визначає стан квантової системи, називається **повним набором** квантовомеханічних величин.

У класичній механіці для системи з N ступенями вільності потрібно задати $2N$ величин (координат і імпульсів). У квантовій механіці для системи з N ступенями вільності потрібно задати N величин (наприклад, N координат або N імпульсів) або будь-які N одночасно вимірних величин. ХФ системи, що описує даний стан, буде ВФ операторів величин, що входять у повний набір, що відповідають даним ВЗ.

«Чистий» стан задається ХФ, яка є ВФ для повного набору.

«Змішаний» стан – стан без певної ХФ. У ньому задані лише ймовірності реалізації того або іншого «чистого» стану. Це неповний опис.

1.7. Оператор кутового моменту

Скористаємося принципом відповідності та перетворимо момент імпульсу (кутовий момент) класичної механіки в оператор кутового моменту, замінивши радіус-вектор та імпульс на відповідні оператори радіуса-вектора та імпульсу.

Визначення оператора кутового моменту (angular momentum) \hat{L} в декартових координатах:

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix}; \quad \hat{r} = \vec{r}, \quad \hat{p} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}.$$

У тензорних позначеннях:

$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k,$$

ε_{ijk} – символ Леві-Чівіта. Символ ε_{ijk} – це одиничний, повністю антисиметричний тензор 3-го рангу:

$$\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{jik}; \quad \varepsilon_{iik} = 0; \quad \varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = +1; \quad \varepsilon_{213} = \varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = -1.$$

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

Оператор квадрата кутового моменту

$$(\hat{L})^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2.$$

1.7.1. Комутаційні співвідношення

Наведемо комутаційні співвідношення між компонентами операторів \hat{x}_i , \hat{p}_k та \hat{L}_k :

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{x}_k; \quad [\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k \quad (1.7.1)$$

й між компонентами оператора кутового моменту

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k; \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0. \quad (1.7.2)$$

В деяких випадках зручно користуватися безрозмірним оператором кутового моменту \hat{l} .

Комутаційні співвідношення для нього є такими:

$$\hat{l} = \frac{1}{\hbar}\hat{L}; \quad [\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{l}_k; \quad [(\hat{l})^2, \hat{l}_i] = 0.$$

Оператори \hat{l}_z й $(\hat{l})^2$ у сферичних координатах:

$$\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}; \quad (\hat{l})^2 = -\Delta_{\theta\varphi} = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \quad (1.7.3)$$

1.7.2. Власні функції та власні значення операторів \hat{l}_z та $(\hat{l})^2$. «Сходінкові» оператори

ВФ та ВЗ оператора l_z знаходимо, розв'язавши рівняння

$$-i\frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = l_z\Phi(\varphi)$$

із урахуванням вимоги періодичності ВФ

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi).$$

Отримуємо нормовані на одиницю ВФ і ВЗ оператора \hat{l}_z

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad l_z = m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.7.4)$$

Тут m – це магнітне квантове число. Залежність від кута θ поки є довільною.

Використовуємо для знаходження ВЗ оператора \hat{l}^2 «сходінкові оператори» \hat{l}_\pm :

$$\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y. \quad (1.7.5)$$

Це два неермітові, ермітово-спряжені оператори. Сходінкові оператори задовольняють комутаційним співвідношенням (перевірити самостійно)

$$[l_z, l_\pm] = \pm l_\pm; \quad [l_+, l_-] = 2l_z. \quad (1.7.6)$$

Покажемо, що $\hat{l}_\pm \psi_m$, де ψ_m – це власні функції оператора z-проекції кутового моменту ($\hat{l}_z \psi_m = m\psi_m$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), також є власними функціями оператора \hat{l}_z із власними значеннями $m + 1$ або $m - 1$ для \hat{l}_+ й \hat{l}_- відповідно. Скористаємося для цього комутаційними співвідношеннями

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = \pm \hat{l}_\pm.$$

Побудуємо функцію $\hat{l}_\pm \psi_m$, де $\hat{l}_z \psi_m = m\psi_m$, й подіємо на неї оператором \hat{l}_z :

$$\hat{l}_z(\hat{l}_\pm \psi_m) = (\hat{l}_z \hat{l}_\pm) \psi_m = \hat{l}_\pm(\hat{l}_z \pm 1) \psi_m = \hat{l}_\pm(m \pm 1) \psi_m = (m \pm 1) \hat{l}_\pm \psi_m \sim \psi_{m \pm 1}.$$

Знайдемо власні значення оператора \hat{l}^2 . Використовуємо комутаційні співвідношення

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_z.$$

Спочатку покажемо, що якщо зафіксоване ВЗ оператора $(\hat{l})^2$, то ВЗ оператора \hat{l}_z не можуть перевищити максимального значення.

$$(\hat{l})^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2; \quad \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2.$$

У оператора $\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2$, який є сума квадратів двох ермітових операторів, ВЗ ≥ 0 , отже, у оператора $(\hat{l})^2 - \hat{l}_z^2$ теж ВЗ ≥ 0 . Якщо задати ВЗ \hat{l}^2 як λ_{l^2} , то ВЗ $\lambda_{l_z} = m$ оператора \hat{l}_z при зафіксованому значенні λ_{l^2} не можуть перевищити певного максимального значення, для якого їхня різниця $\lambda_{l^2} - \lambda_{l_z}^2 \geq 0$. Позначимо $\lambda_{l_{\max}} = m_{\max} = l$. Це означає, що далі підвищувати ВЗ оператор \hat{l}_+ не може, тому $\hat{l}_+ \psi_l = 0$.

Перетворимо оператор $(\hat{l})^2$, виразивши його через сходинокві оператори

$$\begin{aligned} (\hat{l})^2 &= \frac{1}{2} \left[(\hat{l}_x + i\hat{l}_y) (\hat{l}_x - i\hat{l}_y) + (\hat{l}_x - i\hat{l}_y) (\hat{l}_x + i\hat{l}_y) \right] + \hat{l}_z^2 = \\ &= \frac{1}{2} (\hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_- \hat{l}_+) + \hat{l}_z^2 = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z + \hat{l}_z^2. \end{aligned}$$

Дія оператора ВФ оператора $(\hat{l})^2$ на ВФ \hat{l}_z із максимальним ВЗ λ_{l^2} зводиться до множення ВФ на число

$$(\hat{l})^2 \psi_l = l(l+1) \psi_l. \quad (1.7.7)$$

Отже, ψ_l – це ВФ оператора $(\hat{l})^2$ зі ВЗ $\lambda_{l^2} = l(l+1)$.

Усі ВФ оператора $(\hat{l})^2$ – це певним чином нормовані сферичні функції. Спільні власні функції та власні значення операторів \hat{l}_z та \hat{l}^2 :

$$(\hat{l})^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots;$$

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l,$$

l – орбітальне квантове число, m – магнітне квантове число.

Сферичні функції:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} P_l^m(\theta) e^{im\varphi};$$

$$P_l^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \frac{d^m}{(d \cos \theta)^m} P_l(\cos \theta); \quad P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{(d \cos \theta)^l} (\cos^2 \theta - 1)^l,$$

де $P_l^m(\theta)$ – приєднані поліноми Лежандра, $P_l(\cos \theta)$ – поліноми Лежандра, C_{lm} – нормувальна константа

$$C_{lm} = (-1)^k \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{4\pi(l+|m|)!}}, \quad k = m, m \geq 0, k = 0, m < 0.$$

Покажемо, що оператор кутового моменту пов'язаний з оператором нескінченно малого повороту на кут $\delta\varphi \ll 1$. Поворот у площині xOy задається так:

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \delta\varphi + y \sin \delta\varphi \approx x + y\delta\varphi; \\ y' &= -x \sin \delta\varphi + y \cos \delta\varphi \approx -x\delta\varphi + y. \end{aligned}$$

Обернене перетворення

$$\begin{aligned} x &\approx x' - y'\delta\varphi; \\ y &\approx x'\delta\varphi + y'. \end{aligned}$$

Розкладання в ряд Тейлора функції трьох просторових змінних

$$\begin{aligned}\psi(x, y, z) &= \psi(x' - y'\delta\varphi, y' + x'\delta\varphi, z) \approx \\ &\approx \psi(x', y', z') - \delta\varphi y' \frac{\partial\psi(x', y', z')}{\partial x'} + \delta\varphi x' \frac{\partial\psi(x', y', z')}{\partial y'} = \\ &= \left(1 + \delta\varphi \left(x' \frac{\partial}{\partial y'} - y' \frac{\partial}{\partial x'}\right)\right) \psi(x', y', z'); \\ \hat{W}_z &= 1 + \delta\varphi \left(x' \frac{\partial}{\partial y'} - y' \frac{\partial}{\partial x'}\right) = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \hat{L}_z; \\ \hat{L}_z &= x' \hat{p}_{y'} - y' \hat{p}_{x'}.\end{aligned}$$

Також скажемо про те, що оператор імпульсу – це оператор нескінченно малого зсуву

$$\begin{aligned}\hat{T}_{\delta x} &= e^{\delta x \frac{d}{dx}} \approx 1 + \delta x \frac{d}{dx} = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta x \hat{p}_x; \\ \hat{T}_{\delta \vec{r}} &= 1 + \frac{i}{\hbar} \delta \vec{r} \hat{\vec{p}}.\end{aligned}$$

1.8. Оператори у гейзенбергівському зображенні

1.8.1. Похідна по часу від оператора

Введемо поняття похідної за часом від фізичної величини. Скористаємося визначенням середнього значення оператора фізичної величини

$$\overline{\frac{d\hat{A}}{dt}} = \frac{d}{dt} (\bar{A}). \quad (1.8.1)$$

(Середнє значення від похідної дорівнює похідній від середнього значення.)

$$\begin{aligned}(\psi, \frac{d\hat{A}}{dt} \psi) &= \frac{d}{dt} (\psi, \hat{A} \psi) = \frac{d}{dt} \int \psi^*(q, t) \hat{A} \psi(q, t) dq = \\ &= \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dq.\end{aligned}$$

З хвильового (залежного від часу) РШ випливає, що

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi; \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi^*,$$

$$\frac{d}{dt} (\bar{A}) = \int \left(-\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi^* \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \right) dq.$$

З урахуванням ермітовості оператора Гамільтона

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\bar{A}) &= \int \left(\psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{H} \hat{A} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi \right) dq = \\ &= \int \left(\psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \frac{i}{\hbar} \psi^* (\hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H}) \psi \right) dq = \\ &= \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] \right) \psi dq. \end{aligned}$$

Знаходимо вираз для повної похідної за часом від оператора

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]. \quad (1.8.2)$$

У класичній механіці повна похідна від функції координат, імпульсів і часу обчислюється за формулою

$$\frac{dA(q, p, t)}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{H, A\}; \quad \{H, A\} = - \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial A}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right).$$

Тут $\{H, f\}$ – це дужки Пуассона. Вже згадувалося, що комутатор – це квантовий аналог дужок Пуассона:

$$[\hat{H}, \hat{A}] \rightarrow \frac{\hbar}{i} \{H, A\}; \quad \hbar \rightarrow 0, \Rightarrow, [\hat{H}, \hat{A}] \rightarrow 0.$$

Якщо оператор явно не залежить від часу, то повна похідна визначається комутатором гамільтоніана з даним оператором

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]. \quad (1.8.3)$$

Якщо оператор \hat{A} комутує з гамільтоніаном, тобто

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0,$$

то

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = 0, \Rightarrow, \bar{A} = \text{const.}$$

Середнє значення фізичної величини не залежить від часу й залишається постійним. Якщо фізична величина A у даному стані має певне значення, то в усі моменти часу вона буде мати певне значення.

1.8.2. Гейзенбергівське зображення операторів

Введемо унітарний оператор $\hat{S} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)$. Він має ті ж ВЗ, що й оператор \hat{H} :

$$\hat{H}\psi_n(q) = E_n\psi_n(q).$$

Отже,

$$\hat{S}\psi_n(q) = \exp\left(-\frac{iE_nt}{\hbar}\right)\psi_n(q).$$

Довільний стан із ХФ $\Psi(q, t)$ можна розкласти в ряд Фур'є по ХФ стаціонарних станів

$$\Psi(q, t) = \sum_n C_n e^{-iE_nt/\hbar} \psi_n(q) = \sum_n C_n \hat{S}\psi_n(q) = \hat{S} \sum_n C_n \psi_n(q) = \Psi(q, 0).$$

Оператор \hat{S} переводить $\Psi(q, 0)$ в $\Psi(q, t)$. Обернене перетворення

$$\Psi(q, 0) = \hat{S}^\dagger \Psi(q, t)$$

призводить до незалежної від часу ХФ. Додамо перетворення операторів за звичайним правилом унітарного перетворення й отримаємо перехід від зображення Шредінгера до зображення Гейзенберга

$$\Psi(q, 0) = \hat{S}^\dagger \Psi(q, t); \quad \hat{A}(t) = \hat{S}^\dagger \hat{A} \hat{S}. \quad (1.8.4)$$

$$\hat{A}(t) = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right). \quad (1.8.5)$$

Якщо оператор явно не залежить від часу (це й передбачається у зобра-

женні Шредінгера), то

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}(t)}{dt} &= \frac{i\hat{H}}{\hbar} \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) - \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \frac{i\hat{H}}{\hbar} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \hat{H} \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) - \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{H} = \\ &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)]. \end{aligned}$$

Отримуємо рівняння руху оператора фізичної величини

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}(t)]. \quad (1.8.6)$$

Отже, у зображенні Шредінгера основне рівняння квантової механіки – це залежне від часу РШ, а у зображенні Гейзенберга – це рівняння руху для оператора.

Запишемо рівняння руху для операторів координати й імпульсу. Нам потрібно знайти комутатори $[\hat{H}, \hat{x}_i]$, $[\hat{H}, \hat{p}_i]$, де $\hat{H} = \hat{H}(\hat{p}, \hat{x})$ – довільна функція узагальнених координат і імпульсів.

Функцію від оператора треба розуміти як степеневий ряд. Для обчислення комутатора $[\hat{H}, \hat{x}_i]$ розкладання беремо у вигляді

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n H}{\partial p_i^n} p_i^n$$

й враховуємо, що комутатор

$$[\hat{p}_k^n, \hat{x}_i] = n(-i\hbar)\delta_{ik}\hat{p}_k^{n-1}.$$

Далі

$$[\hat{H}, \hat{x}_i] = -i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \frac{\partial^{n-1}}{\partial p_i^{n-1}} \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \right) p_i^{n-1} = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i}.$$

Аналогічно

$$[\hat{H}, \hat{p}_i] = i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \frac{\partial^{n-1}}{\partial x_i^{n-1}} \left(\frac{\partial H}{\partial x_i} \right) x_i^{n-1} = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i}.$$

Рівняння руху для операторів координати та імпульсу

$$\dot{\hat{x}}_i = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i}; \quad \dot{\hat{p}}_i = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i}. \quad (1.8.7)$$

У гейзенбергівському зображенні вся залежність від часу переноситься на оператори. Наприклад, обчислення середніх значень

$$\begin{aligned}\bar{A} &= \int \psi^*(q, t) \hat{A} \psi(q, t) dq = \int \left(\hat{S} \psi(q, 0) \right)^\dagger \hat{A} \hat{S} \psi(q, 0) dq = \\ &= (\hat{S} \psi, \hat{A} \hat{S} \psi) = (\psi, \hat{S}^\dagger \hat{A} \hat{S} \psi) = (\psi \hat{A}(t) \psi).\end{aligned}$$

1.8.3. Теорема Еренфеста

Якщо $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{r})$, похідні за часом від операторів координати й імпульсу (вони ж рівняння руху відповідних операторів у гейзенбергівському зображенні) набувають вигляду

$$\dot{\hat{x}}_i = \frac{\hat{p}_i}{m}; \quad \dot{\hat{p}}_i = -\frac{\partial U}{\partial \hat{x}_i}.$$

Усреднення за часом дає теорема Еренфеста

$$\dot{\bar{x}}_i = \frac{\bar{p}_i}{m}; \quad \dot{\bar{p}}_i = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{x}_i}.$$

З них можна отримати рівняння руху для середніх значень координат у формі Ньютона

$$\begin{aligned}m\ddot{\bar{x}}_i &= -\frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{x}_i}; & m\ddot{\bar{x}}_i &= \bar{F}_i; \\ m\ddot{\bar{r}} &= \bar{F}.\end{aligned}$$

1.8.4. Інтеграл руху (закони збереження)

Повна похідна за часом від оператора

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}].$$

Якщо повна похідна за часом від оператора дорівнює нулю

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = 0,$$

то

$$\bar{A} = \text{const},$$

і при цьому оператор явно не залежить від часу, тобто $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$, то дорівнює нулю комутатор

$$\left[\hat{H}, \hat{A} \right] = 0.$$

Крім того, імовірність отримати при вимірюванні певне значення A_n теж не залежить від часу

$$W(A_n) = |C_n(t)|^2 = |C_n(0)|^2.$$

Фізична величина зберігається, тобто є інтегралом руху, якщо

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0, \quad \left[\hat{H}, \hat{A} \right] = 0. \quad (1.8.8)$$

Збереження імпульсу, моменту імпульсу, енергії тісно зв'язані із властивостями симетрії простору й часу.

Однорідність простору (еквівалентність усіх точок простору) для замкненої системи) означає, що гамільтоніан системи не змінюється при нескінченно малому зсуві, тобто

$$\left[\hat{H}, \hat{T}_{\delta x} \right] = 0, \quad \hat{T}_{\delta x} = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta x \hat{p}_x, \quad \left[\hat{H}, \hat{p}_x \right] = 0.$$

Одночасно вимірні енергія й імпульс системи (*закон збереження імпульсу для замкненої системи*):

$$\left[\hat{H}, \hat{p}_i \right] = 0, \quad \left[\hat{H}, \hat{\vec{p}} \right] = 0.$$

Збереження у квантовій механіці означає, що не змінюється з часом середнє значення й імовірність результату вимірювання не залежить від часу.

Ізотропія простору (еквівалентність усіх напрямків у просторі) для замкненої системи означає комутацію гамільтоніана й оператора нескінченно малого повороту

$$\left[\hat{H}, \hat{W}_{\delta\varphi} \right] = 0, \quad \hat{W}_{\delta\varphi} = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi \hat{L}_z, \quad \left[\hat{H}, \hat{L}_z \right] = 0.$$

Одночасно вимірні енергія й кутовий момент (він же момент імпульсу) замкненої системи (*закон збереження моменту імпульсу для замкненої системи*):

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

Однорідність (незалежність) ходу часу означає, що для замкненої системи й системи в постійному зовнішньому полі можна довільним чином вибирати початок відліку часу. Енергія не залежить від вибору початку відліку за часом.

Оператор нескінченно малого зсуву в часі

$$\hat{U}(\delta t) = 1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}$$

«сконструювали» за аналогією з операторами нескінченно малої трансляції й нескінченно малого повороту.

Очевидно, що якщо подіємо цим оператором на довільну функцію,

$$\begin{aligned} \hat{U}(\delta t)\psi(q, t) &= \left(1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}\right) \psi(q, t) = \psi(q, t) + \delta t \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} = \\ &= \psi(q, t + \delta t). \end{aligned}$$

Знайдемо комутатор цього оператора з гамільтоніаном

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{U}]\psi(q, t) &= \hat{H} \left(1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}\right) \psi(q, t) - \left(1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}\right) \hat{H} \psi(q, t) = \\ &= \hat{H} \psi(q, t) + \delta t \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} - \hat{H} \psi(q, t) - \delta t \frac{\partial \hat{H} \psi(q, t)}{\partial t} = \\ &= \delta t \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} - \delta t \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \psi(q, t) - \delta t \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} = -\delta t \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \psi(q, t). \\ [\hat{H}, \hat{U}] &= -\delta t \frac{\partial \hat{H}}{\partial t}. \end{aligned}$$

Якщо $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$, то комутатор $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$.

Повна похідна за часом від оператора Гамільтона

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{H}] = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t}.$$

Якщо оператор Гамільтона явно не залежить від часу, то $\bar{H} = E = \text{const}$. Це і є закон збереження енергії.

Підсумуємо: закон збереження імпульсу – наслідок однорідності простору для замкненої системи, закон збереження моменту імпульсу – наслідок ізотропії простору. Закон збереження енергії – наслідок незалежності ходу (однорідності) часу для системи в постійному зовнішньому полі.

Приклади знаходження законів збереження

Вільна частинка (3 ступені вільності). Є стани з певною енергією й певними значеннями всіх трьох компонентів імпульсу (плоскі хвилі)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2); \quad [H, p_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3 \text{ or } x, y, z.$$

Зберігаються одночасно: p_x, p_y, p_z ; $E_p = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ – всі три компоненти імпульсу й повна (вона ж кінетична) енергія.

У вільної частинки є також стани з певною енергією й певним моментом імпульсу (сферичні хвилі)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} \right]; \quad [H, L_z] = 0, \quad [H, \vec{L}^2] = 0.$$

Зберігаються одночасно енергія й момент імпульсу, квантові числа E, l, m .

Якщо потенціальна енергія залежить тільки від однієї координати, наприклад, z , тобто

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + U(z),$$

то зберігаються p_y, p_z, L_z .

1.8.5. 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 $\hat{I}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$:

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

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

$$\begin{aligned} \hat{I}\psi(\vec{r}) &= \lambda\psi(\vec{r}); \quad \hat{I}^2 = 1, \Rightarrow, \hat{I}^2\psi(\vec{r}) = \lambda^2\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}); \\ \lambda^2 &= 1, \lambda = \pm 1; \\ \lambda = +1, \psi(-\vec{r}) &= \psi(\vec{r}); \\ \lambda = -1, \psi(-\vec{r}) &= -\psi(\vec{r}). \end{aligned}$$

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 у сферичних координатах: $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi$. Правило відбору для переходу між станами $(-1)^l a$ (a – внутрішня симетрія частинки).

1.8.6. Співвідношення невизначеності для часу та енергії

Знайдемо співвідношення між невизначеністю в енергії та часом вимірювання.

Скористаємося нерівностями Гейзенберга для двох некомутуючих операторів $\delta A \delta B \geq \frac{1}{2} \left| \overline{[A, B]} \right|$ та визначенням похідної за часом від оператора фізичної величини

$$\overline{\frac{d\hat{A}}{dt}} = \frac{d}{dt} (\bar{A}), \quad \frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}].$$

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

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

$$\delta E \delta R \geq \frac{1}{2} \dot{\bar{R}}.$$

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 впливає формула для часу життя збудженого стану:

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

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

1.9. Рух у центральному полі

1.9.1. Зведення задачі двох тіл до задачі про рух у центральному полі

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

Задача двох тіл, які взаємодіють, описується гамільтоніаном

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|). \quad (1.9.1)$$

Така система має 6 ступенів вільності (6 незалежних координат). Для розділу змінних вводимо нові координати:

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

$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ – радіус-вектор відносного руху двох частинок. Гамільтоніан в таких змінних розділяється на дві частини (вільного руху центра інерції й руху в центральному полі)

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

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

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rightarrow \psi(\vec{R}, \vec{r}) = \psi(\vec{R})\psi(\vec{r}), \quad \psi(\vec{R}) = \exp(i\vec{K}\vec{R}). \quad (1.9.2)$$

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 радіусом-вектором \vec{R} .

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} \right] + U(r), \quad (1.9.3)$$

або

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \hat{l}^2}{2\mu r^2} + U(r), \quad (1.9.4)$$

де

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

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

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

Одночасно зберігаються енергія, квадрат кутового моменту й проекція кутового моменту на вісь z. Це означає, що існують спільні ХФ у оператора

Гамільтона, оператора квадрата моменту й оператора проєкції моменту на вісь z . Як відомо, спільні ВФ $(\hat{\vec{L}})^2$, \hat{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 $U_{eff.}$

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

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 стани із певними значеннями енергії E та орбітального квантового числа $l \in 2l + 1$ -кратно виродженими за значеннями магнітного квантового числа m . 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 :

$$l = 1, \quad 2, \quad 3, \quad 4, \quad 5, \quad 7, \dots$$

$$s, \quad p, \quad d, \quad f, \quad g, \quad h, \dots$$

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

$$dW = |R(r)|^2 r^2 dr.$$

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 та m .

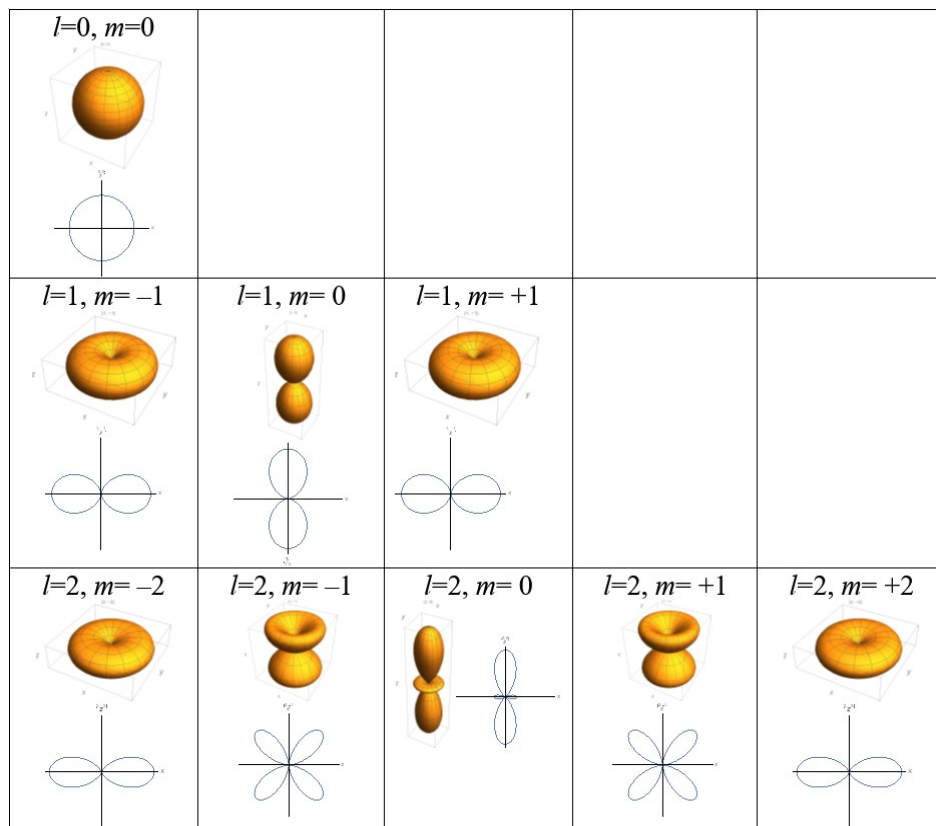


Рис. 1.9: Кутові розподіли імовірностей $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ для станів із різними значеннями орбітального l та магнітного m квантових чисел

1.9.2. Аналіз особливостей руху у центральному полі

Нагадаємо, що імовірність виявити частинку в елементі об'єму

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

У сферичному шарі dV

$$dW = |R(r)|^2 r^2 dr.$$

В елементі тілесного кута $d\theta$

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

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

$$\begin{aligned} r^2 \chi'' - l(l+1)\chi &= 0, & \chi &= r^\gamma; \\ \gamma(\gamma-1) &= l(l+1); & \gamma_1 &= -l, \quad \gamma_2 = l+1. \end{aligned}$$

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. Граничний випадок великих значень r за умови, що потенціальна енергія $U(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$, дає наближене РШ для $\chi(r)$

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

При $E > 0$

$$\chi(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}, \quad R(r) = \frac{Ae^{ikr}}{r} + \frac{Be^{-ikr}}{r}.$$

Це інфінітний рух, з безперервним спектром. Розв'язок – це розбіжні та збіжні сферичні хвилі. При $E < 0$

$$\chi(r) = Ae^{-\kappa r}, \quad R(r) = \frac{Ae^{-\kappa r}}{r}.$$

Це фінітний рух з дискретним спектром.

1.9.3. Рух вільної частинки із певним значенням моменту імпульсу. Сферичні хвилі

Розглянемо стаціонарні стани вільної частинки з певною енергією, певним моментом l і його проекцією m (сферичні хвилі) (див. ЛЛ §33).

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

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

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

Рівняння для радіальної частини хвильової функції $R(r)$ при $U(r) = 0$

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

Важливі співвідношення:

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

Маємо

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

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0; \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}.$$

Після заміни функції $R(r)$ на допоміжну функцію $\chi(r)$

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{\sqrt{r}}; \quad R'(r) = \frac{\chi'(r)}{\sqrt{r}} - \frac{1}{2} \frac{\chi(r)}{r\sqrt{r}}; \quad R''(r) = \frac{\chi''(r)}{\sqrt{r}} - \frac{\chi'(r)}{r\sqrt{r}} + \frac{3}{4} \frac{\chi(r)}{r^2\sqrt{r}}$$

та незалежної змінної r на $x = kr$ для функції $\chi(x)$ отримаємо рівняння Бесселя

$$\frac{d^2 \chi}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d\chi}{dx} + \left[1 - \frac{(l+1/2)^2}{x^2} \right] \chi(x) = 0$$

для функції Бесселя напівцілого порядку $l+1/2$.

Нагадаємо вигляд рівняння Бесселя:

$$Z_\nu''(x) + \frac{1}{x} Z_\nu'(x) + \left(1 - \frac{\nu^2}{x^2} \right) Z_\nu(x) = 0.$$

Його два лінійно незалежні розв'язки: $J_\nu(x)$, $N_\nu(x)$ – функція Бесселя та функція Неймана або $H_\nu^{(1)}(x)$, $H_\nu^{(2)}(x)$ – функції Ханкеля 1-го та 2-го роду.

Обираємо функцію Бесселя, яка є скінченною при $r \rightarrow 0$.
Розв'язок:

$$\psi_{klm}(r) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi); \quad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}. \quad (1.9.5)$$

Тут $J_{l+1/2}(kr)$ – функції Бесселя напівцілого індексу (порядку), $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферичні функції. Спектр безперервний. Енергія залежить тільки від хвильового числа $0 < k < \infty$. По квантових числах l, m рівні енергії вироджені.

1.9.4. Одноелектронний атом

Задача про одноелектронний атом розв'язується точно. Це окремий випадок задачі про рух у центральному полі. Нехай електрон рухається в полі ядра із зарядовим числом Z . Енергія такої взаємодії від'ємна (поле притягання) та дорівнює згідно із законом Кулона

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (1.9.6)$$

РШ для одноелектронного атома має наступний вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{Ze^2}{r} \psi = E \psi, \quad E < 0. \quad (1.9.7)$$

Фінітному руху, як впливає із загальних властивостей руху в центральному полі, відповідають від'ємні енергії. Нагадаємо, що задачу про рух у центральному полі зазвичай розв'язують у сферичних координатах

$$\Delta \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (r\psi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} \psi, \quad \Psi = \psi(r, \theta, \varphi);$$

$$\Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} = -l^2;$$

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

З наведених вище комутаційних співвідношень впливає, що одночасно зберігаються енергія, квадрат кутового моменту та його проекція на вісь z . Розв'язок, як і для будь-якого центрального поля, шукаємо у вигляді

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

Сферична функція $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – це спільна хвильова функція операторів $(\hat{l})^2$, \hat{l}_z . Вигляд радіальної функції $R(r)$ визначається видом потенціальної енергії $U(r)$. Повторимо, що кутовий розподіл імовірності для станів з різними значеннями l визначається як

$$\frac{dW}{d\Omega} = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2.$$

Прийняті наступні позначення для станів із заданим l

$$l = 0, \quad 1, \quad 2, \quad 3, \quad 4, \quad 5, \dots$$

$$s, \quad p, \quad d, \quad f, \quad g, \quad h, \dots$$

(s – spherical, p – polar, d – diffuse state – сферичний, полярний, дифузний стани). Для радіальної частини ХФ маємо рівняння

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[-|E| + \frac{Ze^2}{r} \right] R(r) = 0.$$

У теорії атома з одним електроном вводять для зручності наступні безрозмірні змінні

$$\rho = \frac{r}{a}; \quad \varepsilon = \frac{|E|}{E_0},$$

де $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.529 \cdot 10^{-10}$ м – радіус Бора, $E_0 = \frac{e^2}{a} = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = 4.36 \cdot 10^{-18}$ Дж = 27.21 еВ – енергія Бора.

У нових змінних РШ для радіальної частини ХФ набуває вигляду

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R(\rho) + \left[-2\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} \right] R(\rho) = 0. \quad (1.9.8)$$

Введемо допоміжну функцію $\chi(\rho)$

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \frac{dR}{d\rho} \right) = R'' + \frac{2}{\rho} R' = \frac{1}{\rho} (\rho R)'';$$

$$\chi(\rho) = \rho R(\rho); \quad R(\rho) = \frac{\chi(\rho)}{\rho}.$$

Відшукаємо асимптотичний вигляд $\chi(\rho)$ у граничному випадку $\rho \rightarrow 0$, коли наближене рівняння стає диференціальним рівнянням Ейлера:

$$\rho^2 \chi'' - l(l+1)\chi \approx 0, \quad \chi = \rho^\gamma;$$

$$\gamma(\gamma-1) = l(l+1); \quad \gamma_1 = -l, \quad \gamma_2 = l+1.$$

З двох розв'язків слід обрати тільки той, який є скінченним при $\rho \rightarrow 0$, тобто $\gamma_2 = l+1$. Тоді $\chi(\rho) \sim \rho^{l+1}$ та $R(\rho) \sim \rho^l$.

Знайдемо також вигляд $\chi(\rho)$ у граничному випадку $\rho \rightarrow \infty$

$$\chi'' - 2\varepsilon\chi \approx 0, \quad \chi \sim e^{-\sqrt{2\varepsilon}\rho}, \quad R(\rho) \sim \frac{e^{-\sqrt{2\varepsilon}\rho}}{\rho}.$$

Розв'язок будемо шукати у вигляді

$$R(\rho) = e^{-\sqrt{2\varepsilon}\rho} \rho^l w(\rho). \quad (1.9.9)$$

Рівняння для допоміжної функції $w(\rho)$ (наведені «готові» результати для похідних $R(\rho)$)

$$\begin{aligned} \beta &= \sqrt{2\varepsilon}; \\ R(\rho) &= \rho^l e^{-\beta\rho} w(\rho) \quad \left| \cdot \left[-2\varepsilon - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} \right] \right. \\ R'(\rho) &= \rho^l e^{-\beta\rho} \left[\left(\frac{l}{\rho} - \beta \right) w + w' \right] \quad \left| \cdot \frac{2}{\rho} \right. \\ R''(\rho) &= \rho^l e^{-\beta\rho} \left\{ w'' + 2 \left(\frac{l}{\rho} - \beta \right) w' + \left[\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2l\beta}{\rho} + \beta^2 \right] w \right\} \quad | \cdot 1 \end{aligned}$$

$$\rho w''(\rho) + 2(l - \beta\rho + 1) w'(\rho) + 2[Z - \beta(l + 1)] w(\rho) = 0. \quad (1.9.10)$$

Введемо ще одну змінну $\xi = 2\beta\rho$.

$$\xi w''(\xi) + (2l + 2 - \xi) w'(\xi) + \left[\frac{Z}{\beta} - (l + 1) \right] w(\xi) = 0. \quad (1.9.11)$$

Розв'язок цього рівняння шукаємо у вигляді степеневого ряду

$$\begin{aligned} w(\xi) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \quad | \cdot \xi \\ w'(\xi) &= \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} \quad | \cdot (2l + 2 - \xi) \\ w''(\xi) &= \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-2}; \quad \left| \cdot \left[\frac{Z}{\beta} - (l + 1) \right] \right. \end{aligned}$$

Знаходимо рекурентне співвідношення

$$a_{k+1} = \frac{\left(k + l + 1 - \frac{Z}{\beta} \right)}{(k+1)(2l+2+k)} a_k; \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Для великих значень $k \gg 1$

$$a_{k+1} \approx \frac{a_k}{k} \sim \frac{a_0}{k!}, \quad \Rightarrow, \quad w(\xi) \approx a_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi^k}{k!} = e^\xi;$$

$$R(\xi) \sim e^{\xi/2} \Big|_{\xi \rightarrow \infty} \rightarrow \infty!$$

Отже, ряд потрібно обірвати при певному скінченному значенні $k = n_r$:

$$k = n_r, \quad a_{n_r} \neq 0, \quad a_{n_r+1} = 0, \Rightarrow, \quad n_r + l + 1 - \frac{Z}{\beta} = 0.$$

Тут $n_r = 0, 1, 2, \dots$ – це радіальне квантове число.

Введемо головне квантове число $n = n_r + l + 1$, $n = 1, 2, 3, \dots$ та знайдемо енергію електрона у одноелектронному атомі

$$\beta_n = \frac{Z}{n}; \quad \varepsilon_n = \frac{\beta_n^2}{2} = \frac{Z^2}{2n^2}; \quad E_n = -E_0 \varepsilon_n; \quad E_0 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2};$$

Енергія залежить тільки від головного квантового числа:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.9.12)$$

Радіальна частина хвильової функції виражається через узагальнені поліноми Лагерра $L_n^m(\xi)$. ($L_n(\xi)$ – поліноми Лагерра)

$$R_{nl}(\xi) = A_{nl} \xi^l e^{-\frac{\xi}{2}} L_{n+l}^{2l+1}(\xi); \quad L_n^m(\xi) = \frac{d^m}{d\xi^m} (L_n(\xi));$$

$$L_n(\xi) = \frac{1}{n!} e^{\xi} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi} \xi^n).$$

1.9.5. Випадкове виродження

В загальному випадку фінітного руху в центральному полі енергія залежить від двох квантових чисел, крім особливих окремих випадків (кулонівське поле, сферичний осцилятор).

Це тип виродження, обумовлений деякими особливостями системи або функціональної форми розглянутого потенціалу, і пов'язаний, можливо, з прихованою динамічною симетрією в системі.

Ця прихована симетрія також призводить до збереження величин (інтегралів руху), які часто нелегко ідентифікувати. Існування прихованої симетрії приводить до додаткового виродження в дискретному енергетичному спектрі. Випадкове виродження може бути пов'язане з тим, що група гамільтоніана не є повною. Ці виродження пов'язані з існуванням замкнених орбіт в класичній фізиці.

В кулонівському полі є додатковий інтеграл руху (векторний інтеграл Лапласа):

$$\hat{A} = \frac{\mu \alpha \hat{r}}{r} + \frac{1}{2} \left(\hat{L} \times \hat{p} + \hat{p} \times \hat{L} \right); \quad \hat{l} = \frac{\hat{L}}{\hbar}; \quad \alpha = Ze^2. \quad (1.9.13)$$

Комутаційні співвідношення у кулонівському полі:

$$\left[\hat{H}, \hat{A}\right] = 0; \quad \left[\hat{H}, \vec{l}\right] = 0; \quad \left[\hat{l}_i, \hat{A}_k\right] = i\varepsilon_{ikl}\hat{A}_l.$$

Задача про рух у кулонівському полі може бути розв'язана як у сферичних, так і в параболічних координатах. Гамільтоніан має групу симетрії $O(4)$, а не $O(3)$, тобто групу обертань не в тривимірному, а в чотиривимірному просторі.

1.10. Когерентні стани гармонічного осцилятора

1.10.1. Гармонічний осцилятор. Розв'язок методом факторизації

Задача про малі коливання – найважливіша задача фізики. Практично у всіх розділах теоретичної фізики є така задача. В електродинаміці поле електромагнітної хвилі можна розкласти на незалежні гармонічні осцилятори (виникає поняття фотона, кванта електромагнітного поля). У фізиці твердого тіла теплові коливання кристала розглядають як коливання набору гармонічних осциляторів і вводять поняття фонона – кванта коливань і т.д.

Повернемося до задачі про гармонічний (лінійний) осцилятор з гамільтоніаном

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}; \quad \hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}; \quad \hat{x} = x$$

і розв'яжемо задачу методом, який називається «методом факторизації». Виконуємо перетворення, які дозволяють діагоналізувати гамільтоніан осцилятора:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\frac{\hat{p}^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega\hat{x}^2}{\hbar} \right).$$

Вводимо для зручності безрозмірні координати та імпульси

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}; \quad \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}; \quad \hat{P} = -i\frac{d}{d\hat{Q}}; \\ \hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 \right) = \left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right) \frac{1}{2} \left[\left(\hat{Q} + i\hat{P}\right) \left(\hat{Q} - i\hat{P}\right) + \left(\hat{Q} - i\hat{P}\right) \left(\hat{Q} + i\hat{P}\right) \right]; \\ \left[\hat{Q}, \hat{P}\right] &= i. \end{aligned}$$

Вводимо нові оператори (це лінійні комбінації операторів координати та імпульса)

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{Q} + i\hat{P} \right); \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{Q} - i\hat{P} \right).$$

Правила комутації для нових (неермітових операторів)

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{Q} + i\hat{P}, \hat{Q} - i\hat{P}] = 1.$$

У термінах операторів \hat{a}, \hat{a}^\dagger гамільтоніан осцилятора запишеться у вигляді

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger); & \hat{a}\hat{a}^\dagger &= 1 + \hat{a}^\dagger\hat{a}; \\ \hat{H} &= \hbar\omega (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

Оператор $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ – ермітів. Введемо для нього позначення $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right).$$

Розв'язуємо РШ у безрозмірних одиницях, використавши запис гамільтоніана через \hat{a}^\dagger, \hat{a} :

$$\hat{h}\psi_\varepsilon = \varepsilon\psi_\varepsilon; \quad \hat{h} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega}; \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}.$$

Знайдемо наступні комутатори:

$$[\hat{h}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger;$$

$$[\hat{h}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2, \hat{a}] = -\hat{a}.$$

За допомогою операторів \hat{a}^\dagger, \hat{a} можна будувати ХФ гамільтоніана \hat{h}

$$\begin{aligned} \hat{h}\hat{a}^\dagger\psi_\varepsilon &= (\hat{a}^\dagger\hat{h} + \hat{a}^\dagger)\psi_\varepsilon = \hat{a}^\dagger(\hat{h} + 1)\psi_\varepsilon = \hat{a}^\dagger(\varepsilon + 1)\psi_\varepsilon = (\varepsilon + 1)\hat{a}^\dagger\psi_\varepsilon; \\ \hat{h}\hat{a}\psi_\varepsilon &= (\hat{a}\hat{h} - \hat{a})\psi_\varepsilon = \hat{a}(\hat{h} - 1)\psi_\varepsilon = \hat{a}(\varepsilon - 1)\psi_\varepsilon = (\varepsilon - 1)\hat{a}\psi_\varepsilon; \\ \psi_{\varepsilon+1} &\sim \hat{a}^\dagger\psi_\varepsilon; \quad \psi_{\varepsilon-1} \sim \hat{a}\psi_\varepsilon. \end{aligned}$$

$\psi_{\varepsilon+1}$ і $\psi_{\varepsilon-1}$ – ХФ гамільтоніана h з ВЗ $\varepsilon \pm 1$ відповідно. Сусідні ВЗ відрізняються на одиницю. Оператор \hat{a}^\dagger збільшує ВЗ на 1, а оператор \hat{a} зменшує ВЗ на 1. З урахуванням нормування

$$\hat{a}^\dagger\psi_\varepsilon = A\psi_{\varepsilon+1}; \quad \hat{a}\psi_\varepsilon = B\psi_{\varepsilon-1}.$$

Шукаємо нормувальні константи A і B .

$$(\hat{a}^\dagger\psi_\varepsilon, \hat{a}^\dagger\psi_\varepsilon) = |A|^2 (\psi_{\varepsilon+1}, \psi_{\varepsilon+1}) = |A|^2.$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{h} - \frac{1}{2}; \quad \hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{h} + \frac{1}{2}; \quad \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1;$$

$$(\hat{a}^\dagger\psi_\varepsilon, \hat{a}^\dagger\psi_\varepsilon) = (\psi_\varepsilon, \hat{a}\hat{a}^\dagger\psi_\varepsilon) = (\psi_\varepsilon, (\hat{h} + \frac{1}{2})\psi_\varepsilon) = (\varepsilon + \frac{1}{2})(\psi_\varepsilon, \psi_\varepsilon) = (\varepsilon + \frac{1}{2});$$

$$|A|^2 = (\varepsilon + \frac{1}{2}); \quad A = \sqrt{(\varepsilon + \frac{1}{2})}.$$

Аналогічно:

$$(\hat{a}\psi_\varepsilon, \hat{a}\psi_\varepsilon) = |B|^2 (\psi_{\varepsilon-1}, \psi_{\varepsilon-1}) = |B|^2.$$

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{h} - \frac{1}{2}; \quad \hat{a} \hat{a}^\dagger = \hat{h} + \frac{1}{2}; \quad \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1;$$

$$(\psi_\varepsilon, \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_\varepsilon) = \left(\psi_\varepsilon, \left(\hat{h} - \frac{1}{2} \right) \psi_\varepsilon \right) = \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right) (\psi_\varepsilon, \psi_\varepsilon) = \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right);$$

$$|B|^2 = \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right); \quad B = \sqrt{\left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right)}.$$

Отримали:

$$\hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon = \sqrt{\varepsilon + 1/2} \psi_{\varepsilon+1}, \quad \hat{a} \psi_\varepsilon = \sqrt{\varepsilon - 1/2} \psi_{\varepsilon-1}.$$

Знайдемо рівень із найменшою енергією. Такий стан називають основним станом (ground state)

$$\hat{h}\psi_0 = \varepsilon_0\psi_0.$$

Дія оператора \hat{a} на ХФ основного стану ψ_0 , очевидно,

$$\begin{aligned} \hat{a}\psi_0 &= 0. \\ (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}) \psi_0 &= \frac{1}{2}\psi_0; \quad \varepsilon_0 = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Енергія основного стану

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Енергія кожного наступного стану відрізняється від енергії попереднього стану на одиницю

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_0 + 1; \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 1 = \varepsilon_0 + 2; \quad \varepsilon_3 = \varepsilon_2 + 1 = \varepsilon_0 + 3; \quad \dots \\ \varepsilon_n &= \varepsilon_0 + n = n + \frac{1}{2}; \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

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

Знайдемо ХФ основного стану (це ХФ оператора \hat{a} із ВЗ, що дорівнює нулю)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(Q + \frac{d}{dQ} \right) \psi_0 = 0;$$

$$\frac{d\psi_0}{dQ} = -Q\psi_0; \quad \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -QdQ; \quad \ln \psi_0 = \ln C - \frac{Q^2}{2}; \quad \psi_0 = C e^{-\frac{Q^2}{2}}.$$

Нормуємо на одиницю (для довідки: $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$.)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0|^2 dQ = 1; \quad |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{Q^2}{2}} dQ = 1; \quad |C|^2 \sqrt{\pi} = 1; \quad C = \frac{1}{\pi^{1/4}};$$

$$\psi_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{Q^2}{2}}; \quad Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x.$$

ХФ збуджених станів отримаємо за допомогою оператора \hat{a}^\dagger :

$$a^\dagger \psi_n = \sqrt{(\varepsilon_n + 1/2)} \psi_{n+1} = \sqrt{n+1} \psi_{n+1};$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger \psi_{n-1} = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0;$$

$$\psi_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(Q - \frac{d}{dQ} \right)^n \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi 2^n n!}} \left(Q - \frac{d}{dQ} \right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}};$$

$$\left(Q - \frac{d}{dQ} \right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}} = (-1)^n e^{\frac{Q^2}{2}} \frac{d^n}{dQ^n} \left(e^{-Q^2} \right) = e^{-\frac{Q^2}{2}} H_n(Q).$$

Зображення чисел заповнення:

$$\begin{aligned} a^\dagger \psi_n &= \sqrt{n+1} \psi_{n+1}; \\ a \psi_n &= \sqrt{n} \psi_{n-1}. \end{aligned}$$

Залишимо в записі ХФ тільки номер рівня (це кількість квазічастинок із даною енергією)

$$\begin{aligned} a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle; \\ a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle. \end{aligned}$$

$H_n(Q)$ – поліноми Ерміта. Оператори \hat{a}^\dagger, \hat{a} називають операторами породження та знищення (creation and annihilation). Оператор $\hat{n} = a^\dagger a$ – оператор числа частинок. Його власні значення $n = 0, 1, 2, \dots$

1.10.2. Когерентні стани осцилятора

Легко перевірити, що основному стану гармонічного осцилятора відповідає мінімально можливий добуток невизначеностей

$$\overline{\Delta x^2} \cdot \overline{\Delta p^2} = \frac{\hbar^2}{4}.$$

Виявляється, що можна побудувати ХФ більш загального виду, для якої виконується така ж рівність. Такі стани називаються когерентними. Це ВФ оператора знищення

$$\hat{a} \psi_\alpha = \alpha \psi_\alpha,$$

де α – ВЗ оператора знищення, α – будь-яке комплексне число, тому що оператор знищення неермітів (в оператора народження немає ні ВФ, ні ВЗ).

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(Q + \frac{d}{dQ} \right) \psi &= \alpha \psi; & \frac{d\psi}{dQ} &= (-Q + \sqrt{2}\alpha) \psi; & \frac{d\psi}{d\psi} &= (-Q + \sqrt{2}\alpha) dQ; \\ \psi_\alpha &= C e^{-\frac{Q^2}{2} + \sqrt{2}\alpha Q} = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{\frac{\alpha^2 - |\alpha|^2}{2}} e^{-\frac{1}{2}(Q - \sqrt{2}\alpha)^2}. \end{aligned}$$

ХФ когерентних станів можна зв'язати зі СФ осцилятора (довгий висновок опускаємо)

$$\psi_\alpha(Q) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(Q).$$

ХФ когерентних станів не є ортогональними (можна перевірити). Для таких станів (наводимо теж без доказу) виконується умова мінімуму добутку невизначеностей

$$\overline{\Delta Q^2} \cdot \overline{\Delta P^2} = \frac{1}{4}.$$

Для звичайних розмірних координати й імпульсу

$$\overline{\Delta x^2} \cdot \overline{\Delta p^2} = \frac{\hbar^2}{4}.$$

Когерентні стани найбільш близькі до класичних станів, у них частинка найбільш локалізована.

1.11. Рівняння Шредінгера у магнітному полі

З електродинаміки відомо, що орбітальному механічному моменту $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ відповідає магнітний момент $\vec{\mu}_L = (e/2mc) \vec{L}$. За правилом відповідності введемо орбітальний магнітний момент у квантовій механіці як

$$\vec{\mu}_L = (e/2mc) \hat{\vec{L}} = (e\hbar/2mc) \hat{\vec{l}}. \quad (1.11.1)$$

У квантовій механіці кожна елементарна частинка має також власний механічний момент – **спін**. Із власним механічним моментом зв'язаний власний магнітний момент частинки

$$\hat{\vec{\mu}}_s = \frac{\mu}{s} \hat{\vec{S}},$$

де $\hat{\vec{S}}$ – спін частинки, μ – характерна для частинки стала. Спін буває цілий та напівцілий, а його проекція набуває $2s+1$ значення від $-s$ до $+s$. З релятивістського рівняння Дірака (узагальнення РШ на релятивістський випадок) випливає, що відношення спінового магнітного моменту до спінового механічного моменту дорівнює

$$\frac{\mu}{\hbar A} = -\frac{|e|\hbar}{mc}, \quad s = \frac{1}{2}, \quad -\mu = \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} = 0.927 \cdot 10^{-20} \frac{\text{ерг}}{\text{гаус}}.$$

Зв'язок спінових моментів для електрона

$$\begin{aligned} \hat{\vec{\mu}}_s &= -2\mu_B \hat{\vec{S}} = 2\mu \hat{\vec{S}}, \quad \mu < 0; \\ \hat{\vec{\mu}}_J &= \mu(\hat{\vec{l}} + 2\hat{\vec{S}}); \quad \hat{\vec{j}} = \hat{\vec{l}} + \hat{\vec{S}}. \end{aligned}$$

З експериментальних даних випливає, що у протона спіновий і магнітний моменти паралельні, а у нейтрона антипаралельні:

$$\mu_{\text{протона}} = 2.79\mu_{\text{яд.}}; \quad \mu_{\text{нейтрона}} = 1.91\mu_{\text{яд.}}; \quad \mu_{\text{яд.}} = \frac{e\hbar}{2m_p c}.$$

Перетворимо згідно із принципом відповідності функцію Гамільтона для нерелятивістського заряду в електромагнітному полі в оператор Гамільтона (поставимо «капелюшка», де це потрібно)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi - \hat{\mu}_s \vec{H}. \quad (1.11.2)$$

Записаний гамільтоніан Паулі для частинки, який має спін $1/2$. В.Паулі запропонував цей гамільтоніан в 1926 році для частинки зі спіном $1/2$, просто додавши в гамільтоніан такий же доданок, як у класичній електродинаміці для взаємодії магнітного моменту із зовнішнім магнітним полем.

1.11.1. Рух електрона в однорідному постійному магнітному полі. Рівні Ландау (1930)

Нехай магнітне поле паралельне осі z $\vec{H} \parallel oZ$. Використаємо в (1.11.2) запропоноване Ландау калібрування векторного потенціалу

$$\vec{A} = (0, xH, 0)$$

та запишемо гамільтоніан електрона, який рухається у постійному однорідному магнітному полі у вигляді

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p}_x^2 + \left(p_y - \frac{eH}{c} x \right)^2 + p_z^2 \right] - 2\mu_B H S^z; \quad S^z = \pm \frac{1}{2}. \quad (1.11.3)$$

Добавка, зв'язана зі спіновим магнітним моментом, комує з доданками у квадратних дужках і дає внесок у рівні енергії $\pm \mu_B H$. Її ми відкинемо та розглянемо гамільтоніан

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p}_x^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{eH}{c} \hat{x} \right)^2 + \hat{p}_z^2 \right]. \quad (1.11.4)$$

Це й будуть рівні Ландау. Задача зводиться до знаходження енергетичних рівнів та ХФ лінійного осцилятора. Рівні енергії квантуються в напрямку, перпендикулярному магнітному полю. Координати x та z не входять у гамільтоніан. Такі координати в класичній механіці називають циклічними.

Кожній циклічній координаті відповідає закон збереження відповідного узагальненого імпульсу. Розв'язок РШ можемо шукати у вигляді

$$\psi(x, y, z) = \exp \left[\frac{i(p_y y + p_z z)}{\hbar} \right] \psi(x).$$

Енергії

$$E_{np_z} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m}; \quad \omega = \frac{eH}{mc}.$$

Частота ω – це кругова частота для обертання класичного електрона в магнітному полі.

Хвильова функція

$$\psi_{n,p_y,p_z} = \exp \left[\frac{i(p_y y + p_z z)}{\hbar} \right] \psi_n(x) \quad (1.11.5)$$

залежить від трьох квантових чисел, а енергія – від двох.

Рівні Ландау вироджені по квантовому числу p_y . Кратність виродження залежить від величини магнітного поля.

1.12. Теорія збурень (ТЗ)

Розглянемо наближений метод розв'язку РШ для гамільтоніана \hat{H} . Нехай \hat{H} можна розбити на дві частини:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (1.12.1)$$

\hat{H}_0 – називається основний гамільтоніан (незбурений), для якого відомий точний розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}, \quad \left(\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(0)} \right) = \delta_{mn}.$$

\hat{V} – оператор збурення. Умову малості оператора збурення знайдемо пізніше. Якщо збурення \hat{V} явно не залежить від часу $\frac{\partial \hat{V}}{\partial t} = 0$ – це стаціонарна ТЗ. Якщо при цій умові рівні енергії основного гамільтоніана \hat{H}_0 не вироджені, то маємо стаціонарну ТВ без виродження. Якщо рівні енергії основного гамільтоніана вироджені, то це буде стаціонарна ТЗ із виродженням. При $\frac{\partial \hat{V}}{\partial t} \neq 0$ – будується нестаціонарна ТВ. Після включення збурення зникають стаціонарні стани. Потрібно розв'язувати точно або наближено нестаціонарне РШ.

1.12.1. Стационарна теорія збурень без виродження

Розв'яжемо стаціонарне РШ методом послідовних наближень

$$\hat{H}\psi = E\psi, \\ E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots; \quad \psi = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)} + \dots$$

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})(\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)}) \approx (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)})(\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)}). \quad (1.12.2)$$

В (1.12.22) обмежилися розкладанням ХФ та енергії до членів 2-го порядку малості.

Вважаємо, що точний розв'язок РШ у 0-му наближенні нам відомий:

$$\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}.$$

Зберемо з (1.12.2) усі доданки, що мають 1-й порядок малості по оператору збурення \hat{V} :

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - \hat{V})\psi_n^{(0)}.$$

Знайдемо скалярний добуток

$$\left(\psi_m^{(0)}, (\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(1)} \right) = \left(\psi_m^{(0)}, (E_n^{(1)} - \hat{V})\psi_n^{(0)} \right); \\ (E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \left(\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(1)} \right) = E_n^{(1)} \delta_{mn} - \left(\psi_m^{(0)}, \hat{V}\psi_n^{(0)} \right).$$

$V_{mn} = \left(\psi_m^{(0)}, \hat{V}\psi_n^{(0)} \right)$ – матричні елементи оператора збурення; $\left(\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(1)} \right)$ – коефіцієнти розкладання в ряд Фур'є першої поправки до хвильової функції по ВФ незбуреного гамільтоніана \hat{H}_0

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m C_m^{(1)} \psi_m^{(0)}; \quad C_m^{(1)} = \left(\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(1)} \right).$$

Таким чином,

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})C_m^{(1)} = E_n^{(1)}\delta_{mn} - V_{mn}.$$

Якщо покладемо $m = n$, то отримаємо першу поправку до енергії

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \bar{V}_n,$$

яка визначається діагональними матричними елементами оператора збурення. Вони ж одночасно є середніми значеннями оператора збурення в стані з $\psi_n^{(0)}$.

Першу поправку до ХФ знаходимо, поклавши $m \neq n$

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}. \quad (1.12.3)$$

Підсумовування виконується по всіх $m \neq n$. Поправка до ХФ повинна бути багато менше, ніж основна ХФ. Необхідна умова для цього – малість усіх коефіцієнтів розкладання в (1.12.3), тобто

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|. \quad (1.12.4)$$

Відстані між рівнями повинні бути багато більше матричних елементів оператора збурення. Випишемо з (1.12.2) всі доданки 2-го порядку малості

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(2)} = E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} + (E_n^{(1)} - \hat{V})\psi_n^{(1)}.$$

Розглянемо скалярний добуток

$$\left(\psi_m^{(0)}, (\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(2)}\right) = E_n^{(2)}\delta_{mn} + \left(\psi_m^{(0)}, (E_n^{(1)} - \hat{V})\psi_n^{(1)}\right);$$

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \left(\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(2)}\right) = E_n^{(2)}\delta_{mn} + E_n^{(1)} \left(\psi_m^{(0)}, \psi_n^{(1)}\right) - \left(\psi_m^{(0)}, \hat{V}\psi_n^{(1)}\right). \quad (1.12.5)$$

Поправку до енергії $E_n^{(2)}$ знайдемо, поклавши $m = n$ в (1.12.5) та відставивши $\psi_n^{(1)}$ з (1.12.3). Другий доданок у правій частині зникає, тому що в (1.12.5) немає ХФ $\psi_n^{(0)}$ з індексом $m = n$:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm}V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Випишемо ще раз усі отримані формули стаціонарної ТЗ без виродження:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_n^{(1)} = V_{nn}; \\ \psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}; \end{array} \right. \quad E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}; \quad (1.12.6)$$

$V_{mn} = \left(\psi_m^{(0)}, \hat{V}\psi_n^{(0)}\right)$ – матричні елементи оператора збурення. $|V_{mn}| \ll |E_m^{(0)} - E_n^{(0)}|$ – умова застосовності ТВ.

1.12.2. Стаціонарна ТЗ при наявності виродження. Скулярне рівняння

У випадку виродження рівнів енергії в нульовому наближенні потрібно побудувати з відомих ХФ нульового наближення такі їхні комбінації, які б мало змінювалися під дією збурення. Виродження при включенні збурення може бути зняте повністю або частково.

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}; \quad \underbrace{\psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)}, \dots, \psi_{n''}^{(0)}}_s \text{ (} s\text{-кратно вироджений рівень)}.$$

Обираємо «пробну функцію» у вигляді

$$\psi = \sum_{n'=1}^s C_{n'}^{(0)} \psi_{n'}^{(0)} \quad (1.12.7)$$

та знаходимо наближений розв'язок РШ – рівні енергії й коефіцієнти $C_{n'}^{(0)}$

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \hat{V}) \sum_{n'=1}^s C_{n'}^{(0)} \psi_{n'}^{(0)} &= (E^{(0)} + E^{(1)}) \sum_{n'=1}^s C_{n'}^{(0)} \psi_{n'}^{(0)}; \\ \left(\psi_n^{(0)}, (\hat{H}_0 + \hat{V}) \sum_{n'=1}^s C_{n'}^{(0)} \psi_{n'}^{(0)} \right) &= (E^{(0)} + E^{(1)}) \sum_{n'=1}^s C_{n'}^{(0)} \underbrace{\left(\psi_n^{(0)}, \psi_{n'}^{(0)} \right)}_{\delta_{nn'}}; \end{aligned}$$

$$\sum_{n'=1}^s C_{n'}^{(0)} \left(V_{nn'} - E^{(1)} \delta_{nn'} \right) = 0. \quad (1.12.8)$$

Умова існування нетривіальних розв'язків у системи лінійних однорідних рівнянь (1.12.8) – рівність нулю визначника системи

$$\text{Det} \left(V_{nn'} - E^{(1)} \delta_{nn'} \right) = 0. \quad (1.12.9)$$

Визначник (1.12.9) є алгебраїчним рівнянням ступеня s відносно $E^{(1.12.1)}$. Таке рівняння має s коренів. Якщо всі s коренів (1.12.9) є різними, то виродження знімається повністю. Якщо серед коренів є кратні, то виродження знімається частково. Рівняння (1.12.9) називають секулярним рівнянням. Для кожного з розв'язків (1.12.9) знаходимо відповідну ХФ. Отримаємо правильні хвильові функції нульового наближення

$$\psi = \sum_{n=1}^s C_n^{(0)} \psi_n^{(0)}.$$

З умови нормування на одиницю ХФ випливає, що

$$\sum_{n=1}^s |C_n^{(0)}|^2 = 1. \quad (1.12.10)$$

1.12.3. Теорія збурень для дворівневої системи

Як приклад застосування стаціонарної теорії збурень з виродженням розглянемо дворівневу систему.

Відшукаємо поправку першого наближення до власного значення та правильні хвильові функції нульового наближення для двократно виродженого рівня $s = 2$. Отримаємо з (1.12.8) два рівняння

$$\begin{cases} (V_{11} - E^{(1)})C_1^{(0)} + V_{12}C_2^{(0)} = 0; \\ V_{21}C_1^{(0)} + (V_{22} - E^{(1)})C_2^{(0)} = 0. \end{cases} \quad (1.12.11)$$

Умова існування нетривіальних розв'язків (1.12.11) набуває вигляду

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{12}^* & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0; \quad (V_{11} - E^{(1)})(V_{22} - E^{(1)}) - |V_{12}|^2 = 0. \\ \varepsilon^2 - (V_{11} + V_{22})\varepsilon + V_{11}V_{22} - |V_{12}|^2 = 0; \quad E^{(1)} \equiv \varepsilon.$$

Отримуємо два розв'язки квадратного рівняння

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\pm} &= \frac{V_{11}+V_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{V_{11}-V_{22}}{2}\right)^2 + |V_{12}|^2}; \\ \varepsilon_{\pm} \frac{V_{11}+V_{22}}{2} \pm \hbar\omega; \quad \hbar\omega &= \sqrt{\left(\frac{V_{11}-V_{22}}{2}\right)^2 + |V_{12}|^2}. \end{aligned} \quad (1.12.12)$$

Двократне виродження знімається, якщо хоча б один з виразів $(V_{11} - V_{22})$, V_{12} відмінний від нуля. Припускаючи цю умову виконаною, знайдемо правильні ХФ нульового наближення. Підставимо вирази для енергії (1.12.12) в (1.12.11) і врахуємо умову нормування ХФ (1.12.10). Нижче наведені розрахунки, яких на лекції не було. Для спрощення запису покладемо далі $C_{1,2}^{(0)} \equiv C_{1,2}$.

$$\begin{cases} (V_{11} - \varepsilon_{\pm})C_1 + V_{12}C_2 = 0; \\ V_{21}C_1 + (V_{22} - \varepsilon_{\pm})C_2 = 0. \\ |C_1|^2 + |C_2|^2 = 1. \end{cases}$$

Визначник системи (1.12.11) тепер дорівнює нулю, й рівняння стали лінійно залежними. Можна залишити одне із двох рівнянь і умову нормування (тобто потрібно вирішувати два рівняння із двома невідомими C_1 , C_2). Зручніше, однак, зробити так. Виражаємо C_2 через C_1 із двох верхніх рівнянь та підставляємо добуток $C_2C_2^* = |C_2|^2$ в умову нормування:

$$\begin{cases} C_2 = \frac{(\varepsilon_{\pm} - V_{11})}{V_{12}} C_1; \\ C_2 = \frac{V_{12}^*}{(\varepsilon_{\pm} - V_{22})} C_1. \end{cases} \quad \begin{cases} C_2 = \frac{(\varepsilon_{\pm} - V_{11})}{V_{12}} C_1; \\ C_2^* = \frac{V_{12}}{(\varepsilon_{\pm} - V_{22})} C_1^*. \end{cases} \quad |C_1|^2 \left(1 + \frac{V_{11} - \varepsilon_{\pm}}{V_{22} - \varepsilon_{\pm}}\right) = 1;$$

$$|C_1|^2 \left(\frac{\pm 2\hbar\omega}{\varepsilon_{\pm} - V_{22}}\right) = 1; \quad |C_1|^2 = \pm \frac{1}{2\hbar\omega} \left(\frac{V_{11} - V_{22}}{2} \pm \hbar\omega\right) = \frac{1}{2\hbar\omega} \left(1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{2\hbar\omega}\right);$$

$$\begin{aligned} C_{1(\pm)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{2\hbar\omega}\right)^{1/2}; \quad C_{2(\pm)} = \frac{1}{V_{12}} \left(-\frac{V_{11} - V_{22}}{2} \pm \hbar\omega\right) C_{1(\pm)} = \\ &= \pm \frac{\hbar\omega}{V_{12}} \left(1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{2\hbar\omega}\right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{2\hbar\omega}\right)^{1/2} = \pm \frac{\hbar\omega}{V_{12}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{2\hbar\omega}\right)^{1/2} \frac{|V_{12}|}{\hbar\omega}; \end{aligned}$$

$$C_{1(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{2\hbar\omega} \right)^{1/2}; \quad C_{2(\pm)} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{|V_{12}|}{V_{12}} \left(1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{2\hbar\omega} \right)^{1/2}.$$

Наводимо без виведення уточнену формулу ТЗ із виродженням (див. Ландау, Лифшиц «Квантовая механика» §39, ф-ла (39.4)).

$$\sum_{n'=1}^s \left(V_{nn'} + \sum_k \frac{V_{nk}V_{kn'}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} - E^{(2)}\delta_{n,n'} \right) C_{n'}^{(0)} = 0. \quad (1.12.13)$$

Уточнена формула (1.12.13) ТЗ для вироджених рівнів враховує в другому порядку ТВ матричні елементи для переходів у стани з іншими енергіями. Така формула знадобиться для розв'язку задачі про плоский ротатор з моментом інерції I й дипольним моментом \vec{d} , який знаходиться в однорідному електричному полі, що лежить у площині обертання.

1.12.4. Нестационарна теорія збурень

Якщо оператор збурення містить явну залежність від часу, потрібно розв'язувати нестационарне РШ. Перший крок – це перехід в енергетичне зображення:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q,t)}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) \Psi(q,t);$$

$$\Psi(q,t) = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)}(q,t); \quad \Psi_k^{(0)}(q,t) = \psi_k^{(0)}(q) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar},$$

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_k \left(\dot{a}_k(t) - \frac{iE_k^{(0)}}{\hbar} a_k(t) \right) \psi_k^{(0)}(q) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} = \\ = \sum_k \left(E_k^{(0)} + \hat{V}(t) \right) a_k(t) \psi_k^{(0)}(q) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar}. \end{aligned}$$

Помножимо скалярно обидві частини

$$i\hbar \sum_k \dot{a}_k(t) \psi_k^{(0)}(q) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} = \sum_k \hat{V}(t) a_k(t) \psi_k^{(0)}(q) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar}$$

на $(\psi_m^{(0)}(q), \dots$:

$$i\hbar \sum_k \dot{a}_k(t) \underbrace{(\psi_m^{(0)}, \psi_k^{(0)})}_{=\delta_{mk}} e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} = \sum_k (\psi_m^{(0)}, \hat{V}(t) \psi_k^{(0)}) a_k(t) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar}$$

і знайдемо точне нестационарне РШ в енергетичному зображенні

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} a_k. \quad (1.12.14)$$

Тут

$$V_{mk}(t) = \left(\psi_m^{(0)}, \hat{V} \psi_k^{(0)} \right) = V_{mk}, \quad \omega_{mk} = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar},$$

ω_{mk} – частота переходу. Поки рівняння для хвильової функції $a_m(t)$ в енергетичному зображенні є точним. Будемо розв'язувати його наближено, вважаючи, що до моменту включення збурення система перебувала n -му стаціонарному стані:

$$a_{kn} \approx \delta_{k,n} + a_{kn}^{(1)}(t), \quad a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt. \quad (1.12.15)$$

Зокрема, отримана формула для $a_{kn}^{(1)}$ (1.12.15) дозволяє знайти імовірність переходу з початкового стану в кінцевий під впливом збурення, що діє протягом кінцевого часу. Якщо припустити, що збурення повільно вмикається й вимикається, тобто $V(t \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$, то з (1.12.15) випливає, що в будь-який момент часу t

$$a_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt.$$

При $t \rightarrow +\infty$

$$a_{kn}^{(1)}(+\infty) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt.$$

Таким чином, імовірність переходу з початкового стану n у кінцевий стан k дорівнює

$$w_{k \leftarrow n} = |a_{kn}^{(1)}(+\infty)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt \right|^2. \quad (1.12.16)$$

Можна розглянути періодичне збурення $\hat{V} = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^\dagger e^{i\omega t}$:

$$V_{kn} = F_{kn} e^{-i\omega t} + F_{kn}^* e^{i\omega t}; \quad a_{kn}^{(1)}(t) = \frac{F_{kn} e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)} + \frac{F_{kn}^* e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)}; \quad (1.12.17)$$

$$\omega = \pm\omega_{kn}.$$

Можна розглянути переходи в суцільному спектрі й одержати імовірність переходу за одиницю часу

$$dW_{f \leftarrow i} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}| \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d\nu_f \quad (1.12.18)$$

з початкового стану з енергією E_i в кінцевий стан з енергією $E_f = E_i + \hbar\omega$.

Формули (1.12.17) і (1.12.18) наведені без виведення.

1.13. Квазікласичне наближення

Розглянемо наближений розв'язок РШ за умови $\lambda_D \ll L$ – довжина хвилі де Бройля, мала у порівнянні з лінійними розмірами системи. Наприклад, це дуже широка та глибока потенціальна яма або слабко прозорий (широкий і високий) бар'єр (див. рис. 1.10).

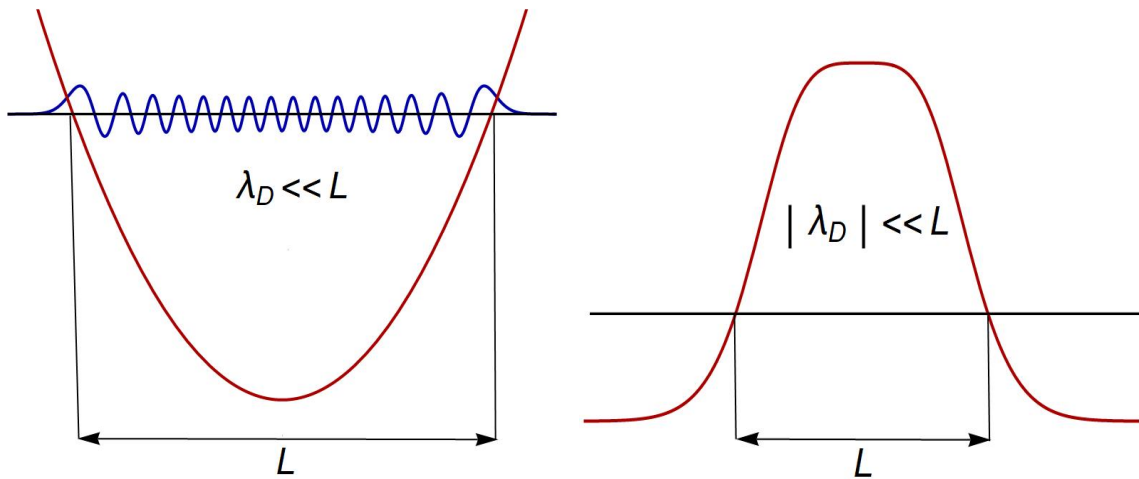


Рис. 1.10: Необхідні умови застосування квазікласичного наближення

Властивості квантової системи в цьому випадку близькі до класичних. Квантування проявляється «слабко», але властивості змінюються кардинально (квантування рівнів енергії в ямі й тунелювання через класично недоступну область у випадку потенціального бар'єра). Розглянемо розв'язок РШ для спрощення розрахунків на прикладі одномірного стаціонарного РШ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.13.1)$$

за умови, що постійна Планка є малим параметром. Розв'язок будемо шукати у вигляді

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}\sigma(x)}.$$

Точне РШ для $\sigma(x)$

$$\frac{1}{2m}(\sigma')^2 - \frac{i\hbar}{2m}\sigma'' = E - U(x). \quad (1.13.2)$$

Розв'язок шукаємо методом послідовних наближень

$$\sigma = \sigma_0 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)\sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \dots$$

$$\frac{1}{2m} (\sigma'_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma'_1)^2 - \frac{i\hbar}{2m} (\sigma''_0 + \sigma''_1) \approx E - U(x);$$

$$(\sigma'_0)^2 + 2 \left(\frac{\hbar}{i}\right) \sigma'_0 \sigma'_1 - i\hbar \sigma''_0 \approx 2m [E - U(x)].$$

У нульовому наближенні (1.13.2) набуває вигляду

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{d\sigma_0}{dx}\right)^2 + U(x) = E. \quad (1.13.3)$$

Рівняння (1.13.3) – це рівняння Гамільтона–Якобі для «скороченої» дії $S_0(\vec{r})$. Таким чином, стаціонарне РШ для частинки в зовнішньому полі за умови $\hbar \rightarrow 0$ переходить у рівняння Гамільтона–Якобі класичної механіки. Це є «класична границя» квантової механіки.

Нестаціонарне РШ для частинки в зовнішньому полі має свою класичною границею рівняння Гамільтона–Якобі для функції дії $S(\vec{r}, t)$. (Це твердження доводити не будемо.)

З (1.13.3) отримаємо

$$\frac{d\sigma_0}{dx} = \pm \sqrt{2m [E - U(x)]}. \quad (1.13.4)$$

У класичній механіці в постійному зовнішньому полі $U(x)$ зберігається енергія

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x).$$

Класичний імпульс $p(x) = \sqrt{2m [E - U(x)]}$. Розв'язок (1.13.4) можна представити у вигляді

$$\sigma_0(x) = \pm \int p(x) dx + \text{const}. \quad (1.13.5)$$

Перше наближення

$$2\sigma'_0 \sigma'_1 + \sigma''_0 = 0; \quad \frac{d\sigma_1}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{\sigma''_0}{\sigma'_0}; \quad \sigma'(x) = \pm p(x);$$

$$\frac{d\sigma_1}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} (\ln p(x));$$

$$\sigma_1(x) = C \ln \left(\frac{1}{\sqrt{p(x)}} \right). \quad (1.13.6)$$

Умова застосовності

$$(\sigma'_0)^2 \gg \left| 2 \left(\frac{\hbar}{i}\right) \sigma'_0 \sigma'_1 - i\hbar \sigma''_0 \right|; \quad p(x)^2 \gg \hbar \left| \frac{dp}{dx} \right|; \quad |p(x)| \gg \left| \frac{\hbar}{p(x)} \frac{dp}{dx} \right|;$$

$$\left| \frac{dp}{dx} \lambda \right| \ll |p(x)|, \quad \lambda = \frac{\hbar}{p(x)}. \quad (1.13.7)$$

Тобто зміна імпульсу на відстанях порядку довжини хвилі де Бройля повинна бути багато менше імпульсу. Умова застосовності порушується поблизу класичних точок зупинки, у яких імпульс обертається в нуль.

Наближений розв'язок РШ із урахуванням нульового й першого наближень (1.13.5) і (1.13.6) має вигляд

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right] + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right], \quad E > U(x) \quad (1.13.8)$$

у класично доступній області та

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx \right] + \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx \right], \quad E < U(x) \quad (1.13.9)$$

у класично недоступній області, у якій повна енергія менше потенціальної, а імпульс – уявний, тому $|p(x)| = \sqrt{2m [U(x) - E]}$.

1.13.1. Правило квантування Бора–Зомерфельда

Умова квазікласичності (1.13.7) порушується поблизу точок зупинки. Поблизу від таких точок хвильовими функціями (1.13.8) і (1.13.9) користуватися не можна. Розв'язки потрібно «зшити» так, щоб ХФ залишалася безперервною. Якщо потенціальна енергія поблизу від точки зупинки змінюється плавно і її розкладання в ряд Тейлора має доданок, лінійний за $x - a$, можна «зшивку» виконати через розв'язок РШ із потенціальною енергією $U(x) \approx U(a) + U'(a)(x - a)$. Точні розв'язки для такої потенціальної енергії – функції Ейрі. Відомі асимптотики функції Ейрі для великих значень аргументу порівнюємо з (1.13.8), (1.13.9) та знаходимо такі комбінації двох лінійно незалежних розв'язків (1.13.8) та (1.13.9), які б збігалися з асимптотиками функції Ейрі. Наведемо без висновку умови такої «зшивки» для розв'язків (1.13.8) та (1.13.9) при переході із класично недоступної області в класично доступну область

$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \left| \int_x^a |p| dx \right| \right] \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p dx \right| + \frac{\pi}{4} \right].$$

Для вертикальної стінки умова квазікласичності виконується до самої границі, а квантова частинка не може подолати нескінченний потенціал, тому умова «зшивки» інша:

$$0 \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p dx \right| \right]. \quad (1.13.10)$$

Правило квантування Бора–Зомерфельда

Знайдемо квазікласичну ХФ частинки, яка здійснює фінітний рух у потенціальній ямі за умови «гладких» стінок (1.13.9). Перехід із класично недоступної області ліворуч–праворуч та праворуч–ліворуч у довільну точку x в середині ями

$$\begin{aligned} \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx \right] &\rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx}_{\alpha} + \frac{\pi}{4} \right] = \\ &= \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin \left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx}_{\beta} + \frac{\pi}{4} \right] \leftarrow \frac{C'}{2\sqrt{|p|}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx \right]. \end{aligned}$$

Рівність можлива за умови $C' = \pm C$ та

$$\begin{aligned} \sin \alpha \mp \sin \beta &= 0; \\ \alpha + \beta &= \pi(n+1), \\ \frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx + \frac{\pi}{2} &= \pi(n+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Якщо розглядати інтеграл в останньому виразі від a до b як інтеграл від b до a з імпульсом $p < 0$, то

$$\int_a^b p dx - \int_b^a p dx = 2 \int_a^b p dx = \oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Цей криволінійний інтеграл є не що інше, як адіабатичний інваріант. Таким чином, у квазікласичному наближенні при фінітному русі адіабатичні інваріанти квантуються. Іншими словами, квантується площа траєкторії руху частинки у фазовому просторі. Фазовий простір – це $6N$ -мірний простір координат і імпульсів системи з $3N$ ступенями вільності. Для частинки з одним ступенем вільності фазовий простір двовимірний. Якщо одна зі стінок ями вертикальна, то умова «зшивки» набуде вигляду

$$0 \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx}_{\alpha} \right] = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin \left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx}_{\beta} + \frac{\pi}{4} \right] \leftarrow \frac{C'}{2\sqrt{|p|}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx \right].$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx + \frac{\pi}{4} = \pi(n+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\int_a^b p dx = \pi\hbar \left(n + \frac{3}{4} \right) \text{ або } \oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{3}{4} \right).$$

Знайшли правило квантування Бора–Зомерфельда:

$$\int_a^b p dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right); \oint p dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad (1.13.11)$$

$$\int_a^b p dx = \pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right); \oint p dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right) \quad (1.13.12)$$

для квазікласичного руху в потенціальній ямі із плавними стінками та в ямі з однією вертикальною стінкою відповідно.

Умову квазікласичності можна записати ще й так: $n \gg 1$ – квантові числа повинні набувати великі значення.

Рівні енергії лінійного осцилятора у квазікласичному наближенні

Для осцилятора зручно скористатися формулою $\oint p dx = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Енергія

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

класичного осцилятора зберігається.

Траєкторія руху у фазовому просторі є еліпсом

$$\frac{p^2}{(\sqrt{2mE})^2} + \frac{x^2}{(\sqrt{2E/m\omega^2})^2} = 1$$

з напівосями $\sqrt{2E/m\omega^2}$ та $\sqrt{2mE}$.

Його площа

$$S_{\text{ellipse}} = \pi \sqrt{2E/m\omega^2} \cdot \sqrt{2mE} = \frac{2\pi E}{\omega} = 2\pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Вираз для рівнів енергії осцилятора у квазікласичному наближенні збігається з точним результатом

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

Квазікласичне наближення для рівнів енергії одноелектронного атома та для нескінченно глибокої прямокутної ями також збігається з відповідними точними рівнями енергії. Наприклад, для нескінченно глибокої ями завширшки a правило квантування буде таким (з обох боків виконується умова

«зшивання» (1.13.10)). З урахуванням цих правил «зшивання» квазікласичних ХФ отримуємо

$$0 \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \underbrace{\left[\frac{1}{\hbar} \left| \int_0^x p dx \right| \right]}_{\alpha} = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin \underbrace{\left[\frac{1}{\hbar} \left| \int_x^a p dx \right| \right]}_{\beta} \leftarrow 0;$$

$$C' = \pm C; \quad \alpha + \beta = \pi(n+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\int_0^a p dx = \pi \hbar(n+1); \quad p = \sqrt{2mE};$$

$$\int_0^a p dx = \pi \hbar(n+1). \quad (1.13.13)$$

В середині ями потенціальна енергія дорівнює нулю, а класичний імпульс збігається та дорівнює $p = \sqrt{2mE}$. Маємо

$$\sqrt{2mE} \int_0^a dx = \pi \hbar(n+1); \quad \sqrt{2mE} a = \pi \hbar(n+1);$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n+1)^2}{2ma^2}. \quad (1.13.14)$$

Квазікласичний результат для рівнів енергії частинки в нескінченно глибокій ямі (1.13.14) збігся з точним розв'язком.

1.13.2. Квазікласичний коефіцієнт прозорості бар'єра

Формулу для коефіцієнта прозорості потенціального бар'єра в квазікласичному наближенні наводимо без виведення

$$D \approx \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right). \quad (1.13.15)$$

Необхідна умова застосовності формули (1.13.15): $D \ll 1$, більш точна необхідна умова застосовності квазікласичного підходу:

$$\left| \lambda \frac{dp}{dx} \right| \ll |p|, \quad |p(x)| = \sqrt{2m(U(x) - E)}; \quad \lambda = \frac{\hbar}{|p(x)|}.$$

Для бар'єра з однією або двома вертикальними стінками формула (1.13.15) застосовна лише по порядку величини точністю до множника перед експонентою

$$D \sim \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right). \quad (1.13.16)$$

Наприклад, для прямокутного бар'єра завширшки a та заввишки U_0 квазікласична оцінка за формулою (1.13.16) дає такий результат

$$D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx\right) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(U_0 - E)} dx\right);$$

$$D \sim \exp\left(-\frac{2\sqrt{2m(U_0 - E)}a}{\hbar}\right). \quad (1.13.17)$$

Висота й ширина бар'єра повинні бути такими, щоб при $E \rightarrow +0$ виконувалася нерівність

$$\frac{2\sqrt{2mU_0}a}{\hbar} \gg 1; \quad \frac{mU_0a^2}{\hbar^2} \gg 1.$$

Тобто для «квазікласичності» потрібний досить високий та широкий бар'єр плюс важка частинка. Відкинули числові множники при виконанні оцінки за порядком величини. Якщо ця вимога виконана, то енергії, для яких коефіцієнт прозорості можна оцінювати в квазікласичному наближенні, повинні задовольняти нерівності

$$\frac{2\sqrt{2m(U_0 - E)}a}{\hbar} \gg 1; \quad E \ll U_0 - \frac{\hbar^2}{8ma^2}.$$

У параграфі 1.3.5 задача про проходження частинки через прямокутний бар'єр була розв'язана точно й отримані наступні формули:

$$D = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa}\right)^2 \text{sh}^2 \kappa a}; \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (1.13.18)$$

Для слабко прозорого бар'єра $\kappa a \gg 1$, $\text{sh} \kappa a \approx \frac{1}{2}e^{\kappa a}$, тому коефіцієнт прозорості

$$D \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa a}. \quad (1.13.19)$$

Формули (1.13.17) і (1.13.19) збігаються з точністю до множника перед експонентою, який не враховується в наближеній квазікласичній формулі (1.13.16).

1.13.3. Теорія альфа-розпаду

Визначимо імовірність виходу частинки (з рівним нулю кутовим моментом $l = 0$) із центрально-симетричної ями (α -розпад).

Побудуємо теорію альфа-розпаду (Г.Гамов 1928 рік, Геттінген). Георгій Гамов застосував ідею про квантовомеханічне проникнення альфа-частинки,

що утворилася у нестабільному ядрі, через кулонівський бар'єр (тунелювання) і показав, що частинки навіть із не дуже великою енергією можуть із певною ймовірністю вилітати з ядра. Це було перше успішне пояснення поведінки радіоактивних елементів на основі квантової теорії.

Розглянемо потенціальну енергію наступного виду (див. рис. нижче):

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & 0 \leq x < r_0; \\ \frac{\alpha}{r}, & r > r_0. \end{cases} \quad (1.13.20)$$

Тут $\alpha = 2(Z - 2)e^2$, де Z – заряд ядра до альфа-розпаду, a – розмір ядра. Розмір атома визначається умовою $E = \alpha/r_0$. Відомо, що $a \ll r_0$.

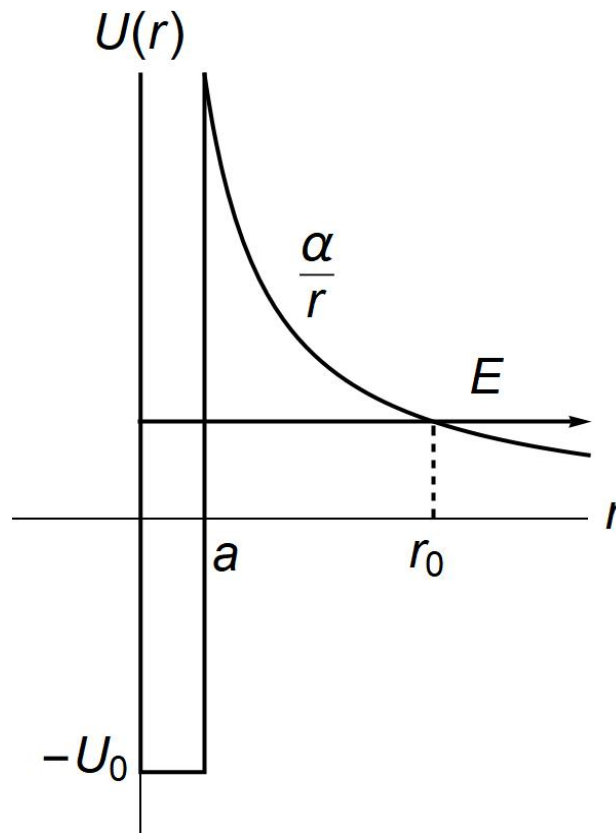


Рис. 1.11: Схематичне зображення потенціальної енергії (1.13.20)

Оцінимо за формулою (1.13.16) за порядком величини коефіцієнт прозорості бар'єра (1.13.20). Це й буде ймовірність альфа-розпаду. Маємо

$$\begin{aligned} D &\sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^{r_0} \sqrt{2m \left(\frac{\alpha}{r} - \frac{\alpha}{r_0}\right)} dr\right) = \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m\alpha r_0}}{\hbar} \int_a^{r_0} \sqrt{\left(\frac{r_0}{r} - 1\right)} d\left(\frac{r}{r_0}\right)\right] = \\ &= \left\{x = \frac{r}{r_0}\right\} = \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m\alpha r_0}}{\hbar} \int_{a/r_0}^1 \sqrt{\left(\frac{1}{x} - 1\right)} dx\right] = \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m\alpha r_0}}{\hbar} \cdot I\right]. \end{aligned}$$

Обчислимо інтеграл I :

$$I = \int_{a/r_0}^1 \sqrt{\left(\frac{1}{x} - 1\right)} dx = \sqrt{\left(\frac{1}{x} - 1\right)} x \Big|_{a/r_0}^1 + \frac{1}{2} \int_{a/r_0}^1 \frac{1}{\sqrt{x} \sqrt{1-x}} dx =$$

$$\begin{aligned}
&= -\left(\frac{r_0}{a} - 1\right)^{1/2} \left(\frac{a}{r_0}\right) + \int_{a/r_0}^1 \frac{d(\sqrt{x})}{\sqrt{1-(\sqrt{x})^2}} = -\sqrt{\frac{a}{r_0} \left(1 - \frac{a}{r_0}\right)} + \arcsin(\sqrt{x}) \Big|_{a/r_0}^1 = \\
&= \sqrt{\frac{a}{r_0} \left(1 - \frac{a}{r_0}\right)} - \arcsin\left(\sqrt{\frac{a}{r_0}}\right) + \frac{\pi}{2} \approx \frac{\pi}{2}.
\end{aligned}$$

У такому наближенні коефіцієнт прозорості

$$D \sim \exp\left(-\frac{\pi\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}\right). \quad (1.13.21)$$

З урахуванням формули для нерелятивістської кінетичної енергії

$$E = \frac{mv^2}{2}$$

формулу (1.13.21) можна записати у вигляді

$$D \sim \exp\left(-\frac{2\pi\alpha}{\hbar v}\right). \quad (1.13.22)$$

Умова застосовності оціночної формули (1.13.22) $\alpha/\hbar v \gg 1$.

Розділ 2

Конспект практичних занять

2.1. Математичний апарат квантової механіки

2.1.1. Лінійні оператори. Комутатор операторів

Визначення та властивості лінійних операторів див. у пункті 1.4.1.

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.1.1

2.1.1. Обчислити операторні вирази:

$$(a) \left(\frac{d}{dx} + x\right)^2; \quad (б) \left[x^2, \frac{d}{dx}\right]; \quad (в) \left[x \frac{d}{dx}, \frac{1}{x}\right].$$

Тут комутатор двох операторів визначено наступним чином:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Розв'язок задачі 2.1.1а. Для перетворення оператора (операторного виразу), який містить оператори у явному вигляді, потрібно подіяти таким оператором на довільну функцію f . Перетворимо даний вираз:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dx} + x\right)^2 f(x) &= \left(\frac{d}{dx} + x\right) \left[\left(\frac{d}{dx} + x\right) f(x)\right] = \left(\frac{d}{dx} + x\right) \left[\frac{df(x)}{dx} + x f(x)\right] = \\ &= \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \frac{d[x f(x)]}{dx} + x \frac{df(x)}{dx} + x^2 f(x) = \left[\frac{d^2}{dx^2} + 2x \frac{d}{dx} + 1 + x^2\right] f(x), \end{aligned}$$

звідки остаточно отримуємо: $\left(\frac{d}{dx} + x\right)^2 = \frac{d^2}{dx^2} + 2x \frac{d}{dx} + 1 + x^2$.

Розв'язок задачі 2.1.1б. Перетворимо даний вираз: $\left[x^2, \frac{d}{dx}\right]f(x) =$
 $= x^2 \frac{df(x)}{dx} - \frac{d}{dx}[x^2 f(x)] = x^2 \frac{df(x)}{dx} - 2x f(x) - x^2 \frac{df(x)}{dx} = -2x f(x).$

Розв'язок задачі 2.1.1в. Перетворимо даний вираз: $\left[x \frac{d}{dx}, \frac{1}{x}\right]f(x) =$
 $= x \frac{d}{dx} \frac{f(x)}{x} - \frac{x}{x} \frac{df(x)}{dx} = -\frac{f(x)}{x} + \frac{df(x)}{dx} - \frac{df(x)}{dx} = -\frac{f(x)}{x}.$

2.1.2. Оператори \hat{L} та \hat{M} задовольняють умові $[\hat{M}, \hat{L}] = 1$. Обчислити комутатори:

$$(a) [\hat{M}^n, \hat{L}]; \quad (б) [f(\hat{M}), \hat{L}].$$

Зауваження: Функція від оператора може бути визначена за допомогою ряду Тейлора:

$$f(\hat{M}) = f(0) + f'(0)\hat{M} + \frac{f''(0)}{2!}\hat{M}^2 + \frac{f'''(0)}{3!}\hat{M}^3 + \dots$$

Розв'язок задачі 2.1.2а. За допомогою комутаційного співвідношення $[\hat{M}, \hat{L}] = 1$ виразимо $\hat{M}\hat{L} = 1 + \hat{L}\hat{M}$. Далі перетворюємо:

$$\begin{aligned} [\hat{M}^n, \hat{L}] &= \hat{M}^n \hat{L} - \hat{L} \hat{M}^n = \hat{M}^{n-1} \hat{M} \hat{L} - \hat{L} \hat{M}^n = \hat{M}^{n-1} (1 + \hat{L} \hat{M}) - \hat{L} \hat{M}^n = \\ &= \hat{M}^{n-1} + \hat{M}^{n-1} \hat{L} \hat{M} - \hat{L} \hat{M}^n = \hat{M}^{n-1} + \hat{M}^{n-2} (1 + \hat{L} \hat{M}) \hat{M} - \hat{L} \hat{M}^n = \\ &= 2\hat{M}^{n-1} + \hat{M}^{n-2} \hat{L} \hat{M}^2 - \hat{L} \hat{M}^n = \dots = n\hat{M}^{n-1} + \hat{L} \hat{M}^n - \hat{L} \hat{M}^n = n\hat{M}^{n-1}. \end{aligned}$$

Тобто остаточно маємо: $[\hat{M}^n, \hat{L}] = n\hat{M}^{n-1}$.

Розв'язок задачі 2.1.2б. Скористаємося рядом Тейлора для оператора $f(\hat{M})$ та маємо:

$$\begin{aligned} [f(\hat{M}), \hat{L}] &= f(0)[1, \hat{L}] + \frac{f'(0)}{1!}[\hat{M}, \hat{L}] + \frac{f''(0)}{2!}[\hat{M}^2, \hat{L}] + \dots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}[\hat{M}^n, \hat{L}] + \dots = \\ &= f'(0) + \frac{f''(0)}{1!}\hat{M} + \dots + \frac{f^{(n)}(0)}{(n-1)!}\hat{M}^{n-1} + \dots \end{aligned}$$

Останній вираз — це ряд Тейлора для $f'(\hat{M})$. Тому остаточно отримуємо:

$$[f(\hat{M}), \hat{L}] = f'(\hat{M}).$$

2.1.3. Обчислити явний вигляд оператора $\exp\left[a\frac{d}{dx}\right]$, де a — довільна дійсна постійна.

Розв'язок задачі 2.1.3. Запишемо ряд Тейлора $e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$.
Тоді $\exp\left[a\frac{d}{dx}\right]f(x) = \left(1 + \frac{a}{1!}\frac{d}{dx} + \frac{a^2}{2!}\frac{d^2}{dx^2} + \dots + \frac{a^n}{n!}\frac{d^n}{dx^n} + \dots\right)f(x) =$
 $= f(x) + \frac{a}{1!}f'(x) + \frac{a^2}{2!}f''(x) + \dots + \frac{a^n}{n!}f^{(n)}(x) + \dots = f(x+a)$.
Звідси випливає, що $\exp\left[a\frac{d}{dx}\right] = \hat{T}_a$ — оператор зсуву, $\hat{T}_a f(x) = f(x+a)$.

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.1.1

2.1.4. Обчислити операторні вирази:

$$(a) \left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^2; \quad (б) \left[x^2 + \frac{d}{dx}, \frac{1}{x}\right]; \quad (в) \left[\frac{d^2}{dx^2}, \cos(2x)\right];$$

2.1.5. Дано три оператори \hat{K} , \hat{L} і \hat{M} . Довести наступні співвідношення:

$$(a) [\hat{K}\hat{L}, \hat{M}] = \hat{K}[\hat{L}, \hat{M}] + [\hat{K}, \hat{M}]\hat{L};$$

$$(б) [\hat{K}, [\hat{L}, \hat{M}]] + [\hat{L}, [\hat{M}, \hat{K}]] + [\hat{M}, [\hat{K}, \hat{L}]] = 0 \text{ (співвідношення Якобі);}$$

$$(в) e^{\hat{M}}\hat{L}e^{-\hat{M}} = \hat{L} + [\hat{M}, \hat{L}] + \frac{1}{2!}[\hat{M}, [\hat{M}, \hat{L}]] + \frac{1}{3!}[\hat{M}, [\hat{M}, [\hat{M}, \hat{L}]]] + \dots;$$

Зауваження: $e^{\hat{K}} = \hat{1} + \hat{K} + \frac{1}{2!}\hat{K}^2 + \frac{1}{3!}\hat{K}^3 + \dots$

2.1.6. Обчислити явний вигляд оператора $\exp[ia\hat{I}]$, де a — довільна дійсна постійна, \hat{I} — оператор віддзеркалення, $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$.

2.1.2. Ермітово-спряжені та ермітові оператори

Визначення ермітово-спряжених та ермітових операторів були дані у пункті 1.4.1. Тут нагадаємо основні положення.

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

Скалярний добуток функцій: $(f, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)g(x)dx$.

Властивості скалярного добутку:

$$(f + g, h) = (f, h) + (g, h); \quad (\alpha f, \beta g) = \alpha^*\beta(f, g); \quad (f, g) = (g, f)^*$$

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 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$.

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.1.2

2.1.7. Довести, що довільний оператор \hat{L} можна представити в наступному вигляді: $\hat{L} = \hat{M} + i\hat{N}$, де \hat{M} та \hat{N} — деякі ермітові оператори, так звані ермітова і антиермітова частина оператора \hat{L} , відповідно.

Зауваження: Покажіть, що оператори $\hat{M} = (\hat{L} + \hat{L}^\dagger)/2$ і $\hat{N} = i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})/2$ — ермітові.

Розв'язок задачі 2.1.7. Візьмемо оператори \hat{M} і \hat{N} у наступному вигляді: $\hat{M} = (\hat{L} + \hat{L}^\dagger)/2$ і $\hat{N} = i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})/2$. 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} доведення аналогічне), тобто покажемо $(\hat{N}f, g) \stackrel{?}{=} (f, \hat{N}g)$. Проведемо перетворення, скориставшись властивостями скалярного добутку:

$$\begin{aligned} (i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})f/2, g) &\stackrel{?}{=} (f, i(\hat{L}^\dagger - \hat{L})g/2), \\ -i(\hat{L}^\dagger f, g)/2 + i(\hat{L}f, g)/2 &\stackrel{?}{=} i(f, \hat{L}^\dagger g)/2 - i(f, \hat{L}g)/2. \end{aligned}$$

Остання рівність правильна, оскільки за визначенням спряженого оператора та властивістю скалярного добутку виконані такі рівності: $(\hat{L}f, g) = (f, \hat{L}^\dagger g)$ та $(\hat{L}^\dagger f, g)^* = (f, \hat{L}g)^*$.

2.1.8. Обчислити ермітовим пов'язаний оператор \hat{L}^\dagger , де \hat{L} визначений таким чином:

$$(a) \hat{L}\varphi(x) = ix\varphi(x); \quad (б) \hat{L}\varphi(x) = \frac{d\varphi(x)}{dx}.$$

Розв'язок задачі 2.1.8а. Запишемо визначення спряженого оператора: $(\hat{L}f, g) = (f, \hat{L}^\dagger g)$. Підставимо сюди оператор $\hat{L} = ix$ та вираз для скалярного добутку: $\int_{-\infty}^{\infty} [ixf(x)]^* g(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \hat{L}^\dagger g(x) dx$.

Перетворимо ліву частину так, щоб вона стала схожа на праву:

$$\int_{-\infty}^{\infty} [ixf(x)]^* g(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) [-ixg(x)] dx.$$

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

Розв'язок задачі 2.1.8б. Аналогічно попередній задачі запишемо визначення спряженого оператора, підставляючи оператор $\hat{L} = \frac{d}{dx}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{df(x)}{dx} \right]^* g(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \hat{L}^\dagger g(x)^* dx.$$

Перетворимо ліву частину так, щоб вона стала схожа на праву:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{df(x)}{dx} \right]^* g(x) dx = \underbrace{f^*(x)g(x)}_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{dg(x)}{dx} dx.$$

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

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.1.2

2.1.9. Для довільних операторів \hat{A} та \hat{B} довести, що:

(а) $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$; (б) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$;

(в) $\hat{A}\hat{A}^\dagger$, $\hat{A}^\dagger\hat{A}$ і $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger]$ — ермітові оператори;

(г) якщо \hat{A} — ермітів, то $\hat{B}\hat{A}\hat{B}^\dagger$ також ермітів;

(д) якщо \hat{A} та \hat{B} — ермітові, то оператори $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ та $i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ також ермітові.

2.1.10. Обчислити ермітово-спряжений оператор \hat{L}^\dagger , де \hat{L} :

(а) $\hat{L} = \hat{I}$ — оператор віддзеркалення, $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$;

(б) $\hat{L} = \hat{T}_a$ — оператор зсуву, $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$;

(в) $\hat{L} = \frac{d^2}{dx^2}$; (г) $\hat{L} = \left(x + \frac{d}{dx}\right)^2$; (д) $\hat{L}\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy L(x,y)\varphi(y)$.

2.1.11. Ядро $L(x,y)$ інтегрального оператора \hat{L} (див. **2.1.10д**) є функцією виду:

(а) $L(x,y) = f(x+y)$; (б) $L(x,y) = g(x-y)$; (в) $L(x,y) = h(x)l(y)$.

Які обмеження на функції $f(x)$, $g(x)$, $h(x)$ та $l(x)$ випливають з ермітовості оператора \hat{L} ?

2.1.3. Власні функції і власні числа операторів. Середні значення

Визначення (див. пункт 1.4.1): 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} .

Середнє значення оператора (фізичної величини) (див. пункт 1.4.6):

$$\bar{F} = \langle F \rangle = (\psi, \hat{F}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{F}\psi(x) dx.$$

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.1.3

2.1.12. Визначити власні значення і нормовані власні функції (вектори) оператора \hat{L} :

$$(a) \quad \hat{L} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}; \quad (б) \quad \hat{L} = x + \frac{d}{dx}.$$

Розв'язок задачі 2.1.12а. 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 власні числа $L = \pm 1$.

Для обох чисел повертаємось до системи рівнянь і отримуємо власні вектори:

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} x \\ -ix \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_{-1} = \begin{pmatrix} x \\ ix \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}.$$

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 $x = 1/\sqrt{2}$.

Розв'язок задачі 2.1.12б. За визначенням маємо:

$$\left(\frac{d}{dx} + x \right) \psi(x) = L\psi(x).$$

Розкриваючи дужки та перетворюючи, отримаємо диференціальне рівняння:

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \psi(x)(L - x).$$

Це рівняння може бути розв'язане за допомогою розділення змінних:

$$\int \frac{d\psi(x)}{\psi(x)} = \int (L - x)dx.$$

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 $L = L_1 + iL_2$, а невідому константу C визначимо з умови нормування:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Перетворюємо:

$$|\psi(x)|^2 = |Ce^{Lx - x^2/2}|^2 = |C|^2 |e^{2L_1x - x^2}| |e^{2iL_2x}| = |C|^2 e^{2L_1x - x^2} = |C|^2 e^{-(x-L_1)^2} e^{L_1^2}$$

та інтегруємо

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = |C|^2 e^{L_1^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2} d(x-L_1) = |C|^2 e^{L_1^2} \sqrt{\pi} = 1.$$

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

Зауваження: Тут було використано формулу Ейлера $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$, звідки $|e^{i\varphi}|^2 = \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1$, та інтеграл Ейлера–Пуассона

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

2.1.13. Обчислити середні значення

(а) \bar{p} — імпульсу; (б) $\overline{x^2}$ — квадрата координати

для хвильового стану системи, що описується власними функціями оператора

$$\hat{L} = x + \frac{d}{dx} \text{ з задачі 2.1.12б.}$$

Зауваження: Оператор імпульсу визначено виразом $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$.

Розв'язок задачі 2.1.13а. За визначенням середнє значення імпульсу:

$$\langle p_x \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi'(x) dx.$$

Підставляючи в останнє рівняння функцію ψ із задачі **2.1.12б**, проводимо наступні розрахунки:

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-iL_2x - (x-L_1)^2/2} \pi^{-\frac{1}{4}} e^{iL_2x - (x-L_1)^2/2} (iL_2 - x + L_1) dx = \\ &= -i \frac{\hbar}{\sqrt{\pi}} \left[iL_2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2} dx - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2} (x-L_1) dx \right] = \frac{\hbar}{\sqrt{\pi}} L_2 \sqrt{\pi} = \hbar L_2. \end{aligned}$$

Зауваження: Інтеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-x^2} dx = 0$ завдяки непарності підінтегральної функції $x e^{-x^2}$.

Розв'язок задачі 2.1.13б. Аналогічно попередній задачі проводимо наступні розрахунки:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx = \pi^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2} x^2 dx = \\ &= \pi^{-\frac{1}{2}} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2} (x-L_1)^2 dx + 2L_1 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2} (x-L_1) dx + L_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x-L_1)^2} dx \right]. \end{aligned}$$

Другий інтеграл є інтегралом Ейлера–Пуассона, а перший може бути зведений до нього інтегруванням «частинами»:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} dx = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} x dx e^{-x^2} = -\frac{1}{2} x e^{-x^2} \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

В результаті отримуємо $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} + L_1^2$.

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.1.3

2.1.14. Визначити власні значення і нормовані власні функції (вектори) оператора \hat{L} :

$$(a) \hat{L} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (б) \hat{L} = 1 + 2x + \frac{d}{dx}; \quad (в) \hat{L} = x \frac{d}{dx} + x^2.$$

Зауваження: $\int_0^{\infty} x^a e^{-x^2} dx = \frac{1}{2} \Gamma\left[\frac{1+a}{2}\right], \quad \text{Re } a > -1.$

2.1.15. Ермітів оператор \hat{L} задовольняє співвідношенню $\hat{L}^2 = \lambda \hat{L}$, де λ — дійсне число. Які можливі власні значення оператора \hat{L} ?

2.1.16. Обчислити середні значення (а) \bar{x} ; (б) $\overline{p^2}$; (в) $\overline{(x - \bar{x})^2}$ для хвильового стану системи, що описується власними функціями оператора $\hat{L} = x + \frac{d}{dx}$ з задачі **2.1.12б**.

2.1.17. Показати, що середні значення операторів $\hat{M}\hat{M}^\dagger$ та $\hat{M}^\dagger\hat{M}$ (\hat{M} — деякий оператор) в довільному хвильовому стані невід'ємні.

2.1.18. Обчислити середній імпульс частинки, хвильовий стан якої має вигляд $\psi(x) = C \exp(ip_0 x/\hbar) \phi(x)$, де $\phi(x)$ — дійсна функція.

2.1.4. Імпульсне зображення

Теоретичні відомості стосовно теорії зображень були представлені у пункті 1.4.2, а частковий випадок імпульсного зображення більш детально розібраний у пункті 1.5.1. Тут наведемо лише необхідні співвідношення. *Хвильова функція у імпульсному зображенні:*

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx.$$

Обернене перетворення (координатне зображення):

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(p) e^{ipx/\hbar} dp.$$

Імпульсне зображення оператора: Нехай оператор \hat{L}_x заданий у координатному зображенні, тобто $\hat{L}_x \psi(x) = \varphi(x)$, де функції $\psi(x)$ та $\varphi(x)$ задані у ко-

ординатному зображенні. Тоді відповідний оператор \hat{L}_p у імпульсному представленні діє наступним чином: $\hat{L}_p\psi(p) = \varphi(p)$, де $\psi(p)$ та $\varphi(p)$ — відповідні функції в імпульсному зображенні.

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.1.4

2.1.19. Нормувати хвильову функцію $\psi(x)$ та обчислити її імпульсне зображення:

$$(a) \psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > x_0, \\ C \sin \frac{\pi nx}{x_0}, & 0 \leq x \leq x_0; \end{cases} \quad n - \text{ціле число};$$

$$(б) \psi(x) = C \exp \left[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{2a^2} \right].$$

Розв'язок задачі 2.1.19а. Нормуємо хвильову функцію:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = |C|^2 \int_0^{x_0} \sin^2 \frac{\pi nx}{x_0} dx = \frac{|C|^2}{2} \int_0^{x_0} (1 - \cos \frac{2\pi nx}{x_0}) dx = \\ &= \frac{|C|^2}{2} \left(x_0 - \frac{x_0}{2\pi n} \sin^2 \frac{2\pi nx}{x_0} \Big|_0^{x_0} \right) = \frac{x_0}{2} |C|^2. \end{aligned}$$

Звідки $C = \sqrt{2/x_0}$.

Імпульсне зображення хвильової функції: $\psi(p) =$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{x_0} \sqrt{\frac{2}{x_0}} \sin \frac{\pi nx}{x_0} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx = \frac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar x_0}} \left(\int_0^{x_0} e^{\frac{i\pi nx}{x_0}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx - \int_0^{x_0} e^{-\frac{i\pi nx}{x_0}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx \right) = \\ &= \frac{1}{2i\sqrt{\pi\hbar x_0}} \left[\frac{e^{ix(\frac{\pi n}{x_0} - \frac{p}{\hbar})}}{i[\frac{\pi n}{x_0} - \frac{p}{\hbar}]} + \frac{e^{-ix(\frac{\pi n}{x_0} + \frac{p}{\hbar})}}{i(\frac{\pi n}{x_0} + \frac{p}{\hbar})} \right] \Big|_0^{x_0} = \frac{1 - (-1)^n e^{-\frac{ipx_0}{\hbar}}}{\sqrt{\pi\hbar x_0}} \frac{\pi n/x_0}{(\pi n/x_0)^2 - (p/\hbar)^2}. \end{aligned}$$

Зауваження: Тут були використані наслідки з формули Ейлера:

$$\sin \varphi = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} \quad \text{та} \quad e^{\pm i\pi n} = \cos \pi n \pm i \sin \pi n = (-1)^n.$$

Розв'язок задачі 2.1.19б. Нормуємо хвильову функцію:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} dx = |C|^2 a \sqrt{\pi}.$$

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

$$\begin{aligned}\psi(p) &= \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right] \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2} + \frac{i(p_0-p)x}{\hbar}\right] dx = \\ &= \frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{a^2(p_0-p)^2}{2\hbar^2} + \frac{i(p_0-p)x_0}{\hbar}\right] \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left[\frac{x-x_0}{\sqrt{2}a} - \frac{i}{\sqrt{2}}\frac{p_0-p}{\hbar}\right]^2} dx.\end{aligned}$$

Виконуючи заміну

$$y = \frac{x-x_0}{\sqrt{2}a} - \frac{i}{\sqrt{2}}\frac{p_0-p}{\hbar} \quad \text{та} \quad dy = \frac{dx}{\sqrt{2}a},$$

ми остаточно отримуємо:

$$\psi(p) = \frac{Ca}{\sqrt{\hbar}} \exp\left[-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p_0-p)^2 + \frac{ix_0}{\hbar}(p_0-p)\right].$$

2.1.20. Визначити імпульсне зображення оператора \hat{L}_p , заданого в координатному зображенні наступним чином: $\hat{L}_x = \frac{d}{dx}$.

Розв'язок задачі 2.1.20. Підставимо умову $\hat{L}_x = \frac{d}{dx}$ до рівності $\hat{L}_x\psi(x) = \varphi(x)$, замінюючи $\psi(x)$ та $\varphi(x)$ відповідними перетвореннями до імпульсного зображення:

$$\frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(p) e^{ipx/\hbar} dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) e^{ipx/\hbar} dp.$$

Оператор $\hat{L}_x = d/dx$ діє тільки на функцію від x , тобто на $e^{ipx/\hbar}$, тобто приходимо до рівності

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ip}{\hbar} \psi(p) e^{ipx/\hbar} dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) e^{ipx/\hbar} dp,$$

з якої очевидно випливає наступна рівність: $\frac{ip}{\hbar}\psi(p) = \varphi(p)$. Порівнюючи її з рівністю $\hat{L}_p\psi(p) = \varphi(p)$, отримуємо імпульсне зображення $\hat{L}_p = \frac{ip}{\hbar}$.

Зауваження: Останній результат показує, що оператор імпульсу у імпульсному зображенні має очевидний вигляд $\hat{p}_p = p$ (порівняйте з оператором координати у координатному представленні: $\hat{x}_x = x$). Також звернемо увагу, що, в силу схожості переходу між координатним та імпульсним зображеннями, оператор координати у імпульсному представленні схожий з оператором імпульсу у координатному зображенні: $\hat{x}_p = -\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}$.

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.1.4

2.1.21. Нормувати хвильову функцію $\psi(x)$ і обчислити її імпульсне зображення:

$$(a) \psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > \pi, \\ C \sin^3 2x, & 0 \leq x \leq \pi; \end{cases}$$

$$(б) \psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ Cx \exp(i\alpha x - \beta x), & x \geq 0, \alpha > 0, \beta > 0. \end{cases}$$

Зауваження: З формули Ейлера: $\cos kx = \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2}$.

2.1.22. Визначити імпульсне зображення оператора \hat{L}_p , заданого в координатному зображенні наступним чином:

$$(a) \hat{L}_x = x; \quad (б) \hat{L}_x = \frac{d^2}{dx^2}; \quad (в) \hat{L}_x \varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy L(x, y) \varphi(y).$$

2.2. Одновимірний рух

Рух одновимірної частинки маси m в потенціалі $U(x, t)$ описується рівнянням Шредингера (докладніше див. пункт (1.2.7)):

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

У цьому підрозділі наведено задачі, які ілюструють методи розв'язання рівняння Шредингера, що було описано у підрозділі 1.3.

2.2.1. Нескінченно-глибока потенціальна яма

У цьому підрозділі ми знову повертаємось до дослідження руху частинки у одновимірній нескінченно-глибокій потенціальній ямі, яке було коротко представлено у пункті 1.3.2. Будуть розглянуті деякі технічні аспекти розв'язання, які будуть використовуватись у наступних пунктах.

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.2.1

2.2.1. Дослідити рух одновимірної частинки у потенціалі

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

(а) Визначити хвильові функції $\psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ стаціонарних станів і спектр енергій частинки.

(б) Обчислити хвильову функцію $\psi(x, t)$ нестаціонарного стану частинки, якщо

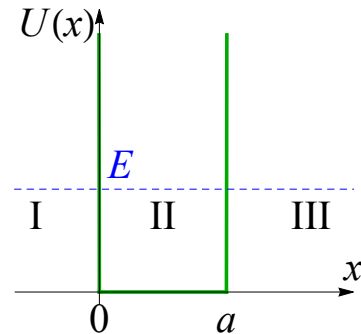
$$\psi(x, t = 0) = \begin{cases} Ax(x - a), & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x < 0, x > a. \end{cases}$$

Розв'язок задачі 2.2.1а. Хвильові функції стаціонарних станів мають вигляд $\psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$. Підставляючи цей вираз у рівняння Шредінгера, отримуємо для функції $\psi(x)$ стаціонарне рівняння Шредінгера:

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

Потенціальна енергія частинки у нескінченно-глибокій потенціальній 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 Шредінгера для кожної області, що позначена римською цифрою (на рисунку), окремо.

I. У цій області $x < 0$, тому потенціальна енергія $U(x) = \infty$. Підставляючи до рівняння Шредінгера, маємо $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \infty \cdot \psi(x) = E\psi(x)$. 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 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E\psi(x)$. Шукаємо розв'язок у вигляді $\psi(x) = e^{kx}$. Підставляючи у рівняння, маємо $-\frac{\hbar^2}{2m} k^2 e^{kx} = E e^{kx}$, звідки $k = \pm \sqrt{-2mE/\hbar^2}$. Звернемо увагу, що підкореневий вираз додатний, оскільки $E < 0$, тому k — дійсне число. Позначимо $\gamma = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$, тоді загальний розв'язок рівняння Шредінгера набуває вигляду $\psi_{II}(x) = c_1 e^{\gamma x} + c_2 e^{-\gamma x}$.

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

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

Оскільки $\gamma > 0$ та $a > 0$, то вираз $e^{\gamma a} - e^{-\gamma a}$ не може дорівнювати 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) $E = 0$. Розраховуємо аналогічно за областями:

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

II. $0 < x < a$ та $U(x) = 0$, тому рівняння Шредінгера зводиться до простого рівняння $\frac{d^2\psi}{dx^2} = 0$. 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 $\psi(x) = 0$, тобто частинка не може існувати при енергії $E = 0$.

3) $E > 0$. Розраховуємо аналогічно за областями:

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

II. $0 < x < a$ та $U(x) = 0$, тому рівняння Шредінгера має вигляд $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x)$ та його розв'язком є

$$\psi_{II}(x) = c_1 e^{igx} + c_2 e^{-igx}, \quad \text{де} \quad g = \sqrt{2mE/\hbar^2}.$$

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

$$\begin{cases} \psi_{II}(0) = \psi_I(0), \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \end{cases} \quad \begin{cases} c_1 + c_2 = 0, \\ c_1 e^{iga} + c_2 e^{-iga} = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} c_2 = -c_1, \\ 2ic_1 \sin(ga) = 0. \end{cases}$$

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:

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

Зауваження: Константу нормування $\sqrt{2/a}$ було визначено при розв'язанні задачі 2.1.19.

Розв'язок задачі 2.2.16. Хвильова функція нестационарного стану $\psi(x, t)$ може бути представлена у вигляді розкладання в ряд Фур'є за базисом стаціонарних станів (подробіці див. у пункті 1.4.2):

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar),$$

де коефіцієнти c_n пов'язані з хвильовою функцією у початковий момент часу $\psi(x, t = 0)$ за допомогою скалярного добутку:

$$c_n = (\psi_n(x), \psi(x, t = 0)) = \int_0^a \psi_n^*(x) \psi(x, t = 0) dx.$$

Спочатку виконаємо нормування $\psi(x, t = 0)$, знаходячи невідому константу A :

$$1 = \int_0^a A^2 x^2 (x - a)^2 dx = A^2 \left(\frac{x^5}{5} - \frac{2ax^4}{4} + \frac{a^2 x^3}{3} \right) \Big|_0^a = \frac{a^5 A^2}{120},$$

звідки $A = \sqrt{\frac{120}{a^5}}$.

Тепер виконаємо розрахунки c_n за допомогою інтегрування частинами:

$$\begin{aligned} c_n &= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} A x (x - a) dx = -A \frac{\sqrt{2a}}{\pi n} \int_0^a x (x - a) d \cos \frac{\pi n x}{a} = \\ &= -A \frac{\sqrt{2a}}{\pi n} \left[x (x - a) \cos \frac{\pi n x}{a} \Big|_0^a - \int_0^a \cos \frac{\pi n x}{a} (2x - a) dx \right] = \\ &= A \frac{a\sqrt{2a}}{\pi^2 n^2} \left[(2x - a) \sin \frac{\pi n x}{a} \Big|_0^a - 2 \int_0^a \sin \frac{\pi n x}{a} dx \right] = A \frac{2a^2 \sqrt{2a}}{\pi^3 n^3} \cos \left(\frac{\pi n x}{a} \right) \Big|_0^a = \\ &= [(-1)^n - 1] A \frac{2a^2 \sqrt{2a}}{\pi^3 n^3} = [(-1)^n - 1] \frac{8\sqrt{15}}{\pi^3 n^3}. \end{aligned}$$

Остаточно для хвильової функції нестационарного стану маємо:

$$\psi(x, t) = - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{16\sqrt{15}}{\pi^3 (2m+1)^3} \psi_{2m+1}(x) \exp(-iE_{2m+1} t/\hbar).$$

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.2.1

2.2.2. Частинка маси m рухається в одновимірному потенціалі

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq x_0, \\ \infty, & |x| > x_0. \end{cases}$$

(а) Визначити хвильові функції стаціонарних станів і спектр енергії частинки.

(б) Обчислити хвильову функцію $\psi(x, t)$ нестаціонарного стану частинки, якщо

$$\psi(x, t = 0) = \begin{cases} B(x^2 - x_0^2)^2, & |x| \leq x_0, \\ 0, & |x| > x_0. \end{cases}$$

2.2.3. Визначити середнє значення кінетичної енергії в початковому стані $\psi(x, t = 0)$ із задачі **2.2.2б**.

Зауваження: Оператор кінетичної енергії $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$.

2.2.2. Потенціальна δ -яма

У цьому пункті досліджується фінітний рух квантової частинки у потенціалі, що містить дельта-функцію Дірака, зокрема потенціальна δ -яма. Зауважимо, що частковий випадок такої задачі був розв'язаний в імпульсному зображенні в пункті 1.5.4. Тут ми розв'язуємо рівняння Шредінгера у координатному зображенні.

Нехай потенціальна енергія представляється у вигляді двох доданків:

$$U(x) = U_0(x) - \alpha\delta(x - x_0),$$

де $\delta(x - x_0)$ — дельта-функція Дірака (подробіці див. у пункті 1.4.3), яка може бути означена за допомогою таких двох рівностей:

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0, & x \neq x_0, \\ \infty, & x = x_0, \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1,$$

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

- Розглянути дві області I ($x < x_0$) та II ($x > x_0$).
- В кожній з цих областей окремо розв'язати рівняння Шредінгера при $U(x) = U_0(x)$, без доданка $-\alpha\delta(x - x_0)$, оскільки 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.

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

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

Для подальшого спрощення припустимо, що $\varepsilon \rightarrow 0$. Тоді перший та третій інтеграли у попередньому виразі перетворюються на 0 тому, що довжина інтервалу інтегрування $2\varepsilon \rightarrow 0$, а під знаком інтеграла стоять регулярні функції. Останній інтеграл, що містить дельта-функцію, обчислюється за використання очевидної рівності $\delta(x-x_0)\psi(x) = \delta(x-x_0)\psi(x_0)$. Остаточоно отримуємо:

$0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} - \alpha\psi(x_0)$. Враховуючи, що $x_0 - 0$ належить I області, а $x_0 + 0$ — II області, отримуємо шукану граничну умову:

$$\psi'_{II}(x_0) - \psi'_I(x_0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(x_0).$$

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.2.2

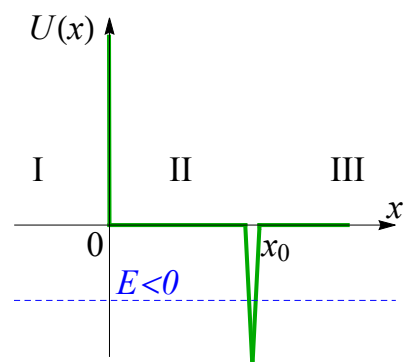
2.2.4. Знайти можливі значення енергії $E < 0$ і відповідні нормовані стаціонарні хвильові функції (пов'язані стани) частки маси m в потенціалі

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

Визначити критичне значення α_{cr} глибини ями таке, що при $\alpha < \alpha_{cr}$ частинка не може «знаходитись» в ямі, тобто не буде існувати рівня з $E < 0$.

Розв'язок задачі 2.2.4. На рисунку схематично представлено дану потенціальну енергію. Будемо розв'язувати рівняння Шредінгера при $E < 0$ для кожної області, що позначена римською цифрою, окремо.

I. У цій області $x < 0$, тому потенціальна енергія $U(x) = \infty$. Розв'язок може бути тільки $\psi_I(x) = 0$ (див. розв'язання задачі 2.2.1).



II. $0 < x < x_0$ та $U(x) = 0$, тому маємо рівняння $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x)$. Шукаючи розв'язок у вигляді $\psi(x) = e^{kx}$ (див. розв'язання задачі **2.2.1**), знаходимо $k = \pm\sqrt{-2mE/\hbar^2}$. Оскільки $E < 0$, то підкореневий вираз додатний, тобто k — дійсне число. Позначимо $\gamma = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$, тоді загальний розв'язок рівняння Шредінгера набуває вигляду $\psi_{II}(x) = c_1e^{\gamma x} + c_2e^{-\gamma x}$.

III. $x > x_0$ та $U(x) = 0$, тому загальний розв'язок рівняння Шредінгера набуває вигляду $\psi_{III}(x) = c_3e^{\gamma x} + c_4e^{-\gamma x}$. Але звернемо увагу, що квадрат модуля хвильової функції визначає густину ймовірності, тому ця функція повинна бути обмеженою при $x \rightarrow \pm\infty$. Ця умова може бути записана у вигляді $|\psi(\pm\infty)| < \infty$. Враховуючи, що $e^{\gamma x} \rightarrow +\infty$ при $x \rightarrow +\infty$, можна зробити висновок, що $c_3 = 0$, тобто $\psi_{III}(x) = c_4e^{-\gamma x}$.

Запишемо граничні умови,

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0), & \psi_{II}(x_0) = \psi_{III}(x_0), \\ \psi'_{III}(x_0) - \psi'_{II}(x_0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi_{III}(x_0), \end{cases}$$

та підставимо у них знайдені функції:

$$\begin{cases} 0 = c_1 + c_2, & c_1e^{\gamma x_0} + c_2e^{-\gamma x_0} = c_4e^{-\gamma x_0}, \\ -\gamma c_4e^{-\gamma x_0} - \gamma c_1e^{\gamma x_0} + \gamma c_2e^{-\gamma x_0} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}c_4e^{-\gamma x_0}. \end{cases}$$

Виключаючи з останнього рівняння змінні c_2 та c_4 за допомогою двох перших рівнянь, отримуємо наступне рівняння:

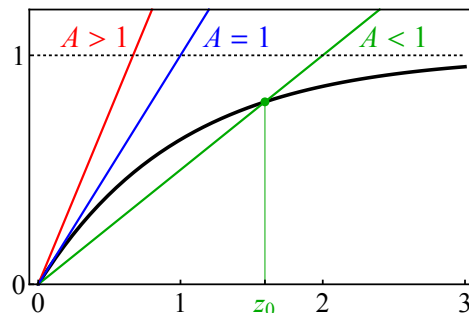
$$c_1e^{\gamma x_0} \left[1 - \frac{m\alpha}{\gamma\hbar^2}(1 - e^{-2\gamma x_0}) \right] = 0.$$

Це рівняння задовольняється, по-перше, якщо $c_1 = 0$, а з ним і $c_2 = c_3 = c_4 = 0$, тобто $\psi(x) = 0$, і квантова частинка не може існувати, або, по-друге, якщо виконана рівність:

$$\frac{\gamma\hbar^2}{m\alpha} = 1 - e^{-2\gamma x_0}.$$

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 $A = \frac{\hbar^2}{2m\alpha x_0}$, тоді рівняння перепишеться у вигляді: $Az = 1 - e^{-z}$. На рисунку зображені графіки правої та лівої частини рівняння.



Похили прямі представляють графік функції $f_1(z) = Az$ при різних значеннях параметра A , а крива — графік функції $f_2(z) = 1 - e^{-z}$. Очевидно, що пряма $f_1(z) = z$ (при $A = 1$) представляє собою дотичну до графіка $f_2(z) = 1 - e^{-z}$. Тому при $A \geq 1$ рівняння не має додатних коренів, а при значеннях $A < 1$ рівняння має єдиний розв'язок, позначений на рисунку z_0 . Тобто при $\alpha \leq \alpha_{\text{cr}} = \hbar^2/(2mx_0)$ квантова частинка з енергією $E < 0$ не може існувати, а при $\alpha > \alpha_{\text{cr}}$ частинка може існувати лише при значенні енергії:

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 z_0^2}{8mx_0^2}.$$

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.2.2

2.2.5. Знайти можливі значення енергії $E < 0$ і відповідні стаціонарні хвильові функції (зв'язані стани) частинки маси m , що знаходиться в потенціалі

$$(a) U(x) = -\alpha\delta(x), \quad (б) U(x) = -\alpha\delta(x) + \begin{cases} 0, & x \geq 0, \\ U_0, & x < 0. \end{cases}$$

Тут $U_0 > 0$, $\alpha > 0$. Визначити значення параметрів, при яких частка може «перебувати» в ямі.

Зауваження: Задача **2.2.5а** була розв'язана у імпульсному зображенні у пункті 1.5.4, зокрема енергія та хвильова функція описуються рівняннями (1.5.6) та (1.5.7).

2.2.6. У стаціонарному стані частинки, що відповідає найнижчому рівню енергії E_0 в задачі **2.2.5а**, обчислити середні значення

$$(a) \text{ координати,} \quad (б) \text{ імпульсу,} \quad (в) \text{ квадрата імпульсу,} \\ (г) \text{ кінетичної енергії,} \quad (д) \text{ потенціальної енергії.}$$

2.2.3. Проходження частинок через потенціальний бар'єр

У цьому пункті досліджується проходження потоку квантових частинок через потенціальний бар'єр методами, що були представлені у пункті 1.3.5.

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.2.3

2.2.7. Визначити коефіцієнти проходження T і відбиття R потоку частинок, що падають на потенціальний бар'єр

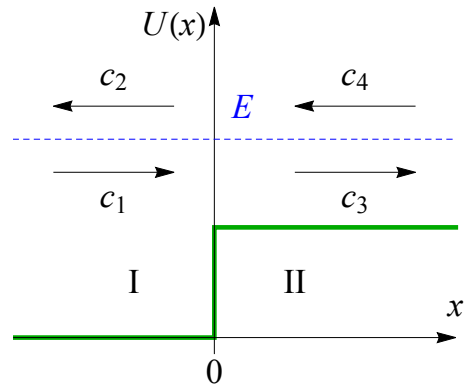
$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

при енергії частинок $E > 0$.

Розв'язок задачі 2.2.7. Потенціальна енергія частинки 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 Шредінгера для кожної області, що позначена римською цифрою, окремо.



I. У цій області $x < 0$, тому потенціальна енергія $U(x) = 0$. Підставляючи до рівняння Шредінгера, маємо $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x)$. Шукаючи розв'язок у вигляді $\psi(x) = e^{kx}$ (див. розв'язання задачі 2.2.1), знаходимо $k = \pm i\beta_1$, де $\beta_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Оскільки $E > 0$, то підкореневий вираз додатний, тобто β_1 — додатне число. Тоді загальний розв'язок рівняння Шредінгера набуває вигляду $\psi_I(x) = c_1 e^{i\beta_1 x} + c_2 e^{-i\beta_1 x}$.

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

Хвильова функція повинна бути обмеженою при $x \rightarrow \pm\infty$: $|\psi(\pm\infty)| < \infty$, див. розв'язок задачі 2.2.4. Функція $\psi_I(x)$ при $x \rightarrow -\infty$, а функція $\psi_{II}(x)$ при $x \rightarrow +\infty$, обмежені при довільних значеннях коефіцієнтів, тобто задовільняють вказаній умові.

Для визначення невідомих коефіцієнтів розглянемо стаціонарну хвильову функцію у першій області

$$\psi_I(x, t) = c_1 e^{i(\beta_1 x - Et/\hbar)} + c_2 e^{-i(\beta_1 x + Et/\hbar)}.$$

Вона представляє собою суму хвиль, що біжать: перша експонента — у напрямку осі x , а друга — у протилежному напрямі. Така хвильова функція описує не єдину частинку, а потік частинок із певним значенням енергії E .

Припустимо, що потік частинок налітає на потенціальний 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'єра. Розрахуємо цю густину. Для цього скористаємося виразом для потоку ймовірності

(подробиці див. у пункті 1.2.8):

$$j(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}[\psi^*(x)\psi'(x)].$$

Підставляючи у цей вираз $\psi_I(x)$, отримуємо:

$$\begin{aligned} j_I &= \frac{\hbar}{m} \text{Im}[(c_1^* e^{-i\beta_1 x} + c_2^* e^{i\beta_1 x}) i\beta_1 (c_1 e^{i\beta_1 x} - c_2 e^{-i\beta_1 x})] = \\ &= \frac{\hbar\beta_1}{m} [|c_1|^2 - |c_2|^2 + \text{Re}(c_1 c_2^* e^{2i\beta_1 x} - c_1^* c_2 e^{-2i\beta_1 x})] = \frac{\hbar\beta_1}{m} |c_1|^2 - \frac{\hbar\beta_1}{m} |c_2|^2. \end{aligned}$$

Перший доданок має зміст потоку частинок, що рухаються у напрямі осі x , а другий (із знаком мінус) — у протилежному. Аналогічно можна визначити потік ймовірності у другій області:

$$j_{II} = \frac{\hbar\beta_2}{m} |c_3|^2 - \frac{\hbar\beta_2}{m} |c_4|^2.$$

У цьому випадку перший доданок визначає потік частинок, що пройшли крізь бар'єр, а другий доданок повинен бути рівний нулю, оскільки немає частинок, що рухаються із $x = +\infty$. Звідси можна розрахувати коефіцієнти відбиття R та проходження T :

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

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

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0), \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0), \end{cases} \quad \begin{cases} 1 + c_2 = c_3, \\ i\beta_1 - i\beta_1 c_2 = i\beta_2 c_3, \end{cases} \quad \begin{cases} c_2 = (\beta_1 - \beta_2)/(\beta_2 + \beta_1), \\ c_3 = 2\beta_1/(\beta_1 + \beta_2). \end{cases}$$

Звідки коефіцієнти відбиття R та проходження T дорівнюють

$$R = \frac{|c_2|^2}{|c_1|^2} = \frac{(\beta_1 - \beta_2)^2}{(\beta_2 + \beta_1)^2}, \quad T = \frac{\beta_2|c_3|^2}{\beta_1|c_1|^2} = \frac{2\beta_1\beta_2}{(\beta_2 + \beta_1)^2}.$$

Зауваження: Якщо розв'язувати задачу за умови, що частинки налітають на бар'єр з $x = +\infty$, то очевидно, що всі обчислення будуть зберігатися з тією лише різницею, що β_1 та β_2 поміняються ролями. Оскільки вирази для T та R не зміняться при заміні $\beta_1 \leftrightarrow \beta_2$, то можна зробити висновок, що ці коефіцієнти не залежать від того, з якого боку частинки падають на бар'єр.

2) $U_0 > E > 0$. Будемо розв'язувати рівняння Шредінгера для кожної області, що позначена римською цифрою, окремо.

I. Розв'язання ідентично до попереднього пункту.

II. У цій області $x < 0$, тому потенціальна енергія $U(x) = U_0$. Підставляючи до рівняння Шредінгера, маємо $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\psi(x) = E\psi(x)$. Шукаючи розв'язок у вигляді $\psi(x) = e^{kx}$, знаходимо $k = \pm\gamma$, де $\gamma = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$. Оскільки $E < U_0$, то підкореневий вираз додатний, тобто γ — дійсне число. Тоді загальний розв'язок рівняння Шредінгера набуває вигляду

$$\psi_{II}(x) = c_3 e^{\gamma x} + c_4 e^{-\gamma x}.$$

Хвильова функція повинна бути обмеженою при $x \rightarrow \pm\infty$: $|\psi(\pm\infty)| < \infty$, див. розв'язок задачі **2.2.4**. Враховуючи, що $e^{\gamma x} \rightarrow +\infty$ при $x \rightarrow +\infty$, можна зробити висновок, що $c_3 = 0$, тобто $\psi_{II}(x) = c_4 e^{-\gamma x}$.

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:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0), \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0), \end{cases} \quad \begin{cases} 1 + c_2 = c_4, \\ i\beta_1 - i\beta_1 c_2 = -\gamma c_4, \end{cases} \quad \begin{cases} c_2 = (\beta_1 - i\gamma)/(\beta_1 + i\gamma), \\ c_4 = 2\beta_1/(\beta_1 + i\gamma). \end{cases}$$

Звідки коефіцієнти відбиття R та проходження T :

$$R = \frac{|c_2|^2}{|c_1|^2} = \frac{|\beta_1 - i\gamma|^2}{|\beta_1 + i\gamma|^2} = \frac{\beta_1^2 + \gamma^2}{\beta_1^2 + \gamma^2} = 1, \quad T = 1 - R = 0.$$

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.2.3

2.2.8. Визначити коефіцієнт проходження T потоку частинок, що падають на потенціальний бар'єр:

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & 0 \leq x \leq x_0, \\ 0, & x < 0, x > x_0. \end{cases} \quad (2.2.1)$$

Розглянути наступні випадки:

- | | | |
|---------------------|---------------------|---------------------|
| (а) $U_0 > 0 > E$; | (б) $U_0 > E = 0$; | (в) $U_0 > E > 0$; |
| (г) $E = U_0 > 0$; | (д) $E > U_0 > 0$; | (е) $E > 0 > U_0$. |

2.2.4. Потенціальний δ -бар'єр

В цьому пункті узагальнюються навички, отримані при вивченні попередніх пунктів — розв'язання рівняння Шредінгера з потенціалом, що містить δ -функцію, та визначення коефіцієнтів відбиття та проходження.

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.2.4

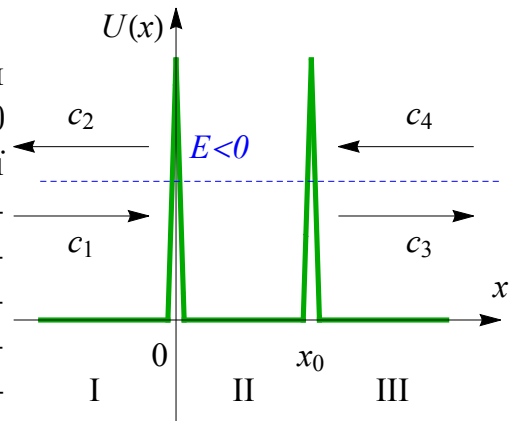
2.2.9. Визначити значення енергії, при яких частки не відбиваються від потенціального бар'єра:

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

Розв'язок задачі 2.2.9. Потенціальна енергія частинки

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

зображена на рисунку. Очевидно, що енергія частинки повинна бути $E > 0$, оскільки 0 — найменше можливе значення потенціальної енергії серед усіх x . Будемо розв'язувати рівняння Шредінгера для кожної області окремо. Зауважимо, що у всіх областях, позначених римською цифрою, значення потенціальної енергії $U(x) = 0$, тому можемо записати однакові рівняння Шредінгера для кожної



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

Шукаючи розв'язок у вигляді $\psi(x) = e^{kx}$ при $E > 0$, отримуємо:

$$\psi_I(x) = c_1 e^{igx} + c_2 e^{-igx}, \quad \psi_{II}(x) = c_3 e^{igx} + c_4 e^{-igx}, \quad \psi_{III}(x) = c_5 e^{igx} + c_6 e^{-igx},$$

де $g = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

Перейдемо до визначення невідомих констант. Задамо значення $c_1 = 1$, що відповідає визначенню величини потоку частинок, що налітають на бар'єр із $x = -\infty$, та $c_6 = 0$, оскільки немає частинок, що рухаються із $x = +\infty$, див. розв'язок задачі 2.2.7. Також задамо значення $c_2 = 0$, оскільки за умовою задачі частинки не відбиваються від бар'єра. Інші коефіцієнти треба знайти з граничних умов:

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

Знаходимо з перших двох рівнянь невідомі c_3 та c_4 : $c_3 = 1 - A$, $c_4 = A$, де $A = im\alpha/(\hbar^2 g)$. Потім виключаємо з двох останніх рівнянь невідому c_5 ,

$$igc_3e^{igx_0} + igc_4e^{-igx_0} - igc_3e^{igx_0} + igc_4e^{-igx_0} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}(c_3e^{igx_0} + c_4e^{-igx_0}),$$

та, підставляючи знайдені значення для c_3 та c_4 , отримуємо рівняння для невідомої g :

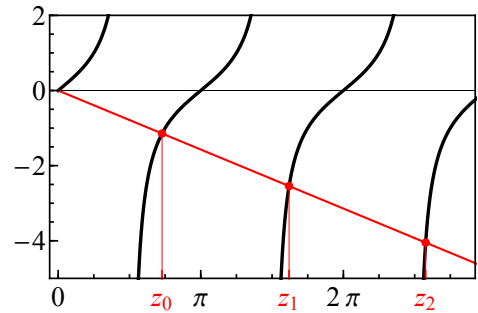
$$Ae^{-igx_0} = -A[(1 - A)e^{igx_0} + Ae^{-igx_0}].$$

Перетворюємо останнє рівняння:

$$\begin{aligned} e^{-igx_0} &= -(1 - A)e^{igx_0} - Ae^{-igx_0} \Rightarrow e^{igx_0} + e^{-igx_0} = A(e^{igx_0} - e^{-igx_0}) \Rightarrow \\ &\Rightarrow 2 \cos(gx_0) = 2iA \sin(gx_0) \Rightarrow \tan(gx_0) = 1/(iA). \end{aligned}$$

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 $B = \hbar^2/(m\alpha x_0)$, тоді рівняння перепишеться у вигляді: $\operatorname{tg} z = -Bz$. На рисунку зображені графіки правої (пряма) та лівої (періодичні криві) 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 $n = 0, 1, 2, \dots$, див. рисунок. Тоді значення енергії можна записати у вигляді: $E_n = \hbar^2 z_n^2 / (2mx_0^2)$.

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.2.4

2.2.10. Визначити коефіцієнт проходження T потоку частинок, що падають на потенціальний бар'єр:

$$(a) U(x) = \alpha\delta(x); \quad (b) U(x) = \alpha\delta(x) + \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ -U_0, & x > 0; \end{cases}$$

при енергії частинок $E > 0$; $U_0 > 0$ та $\alpha > 0$.

2.2.11. Чи можливо повне проходження через потенціальний бар'єр

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

для частинок з енергією $E > 0$?

2.3. Наближені методи у квантовій механіці

2.3.1. Теорія збурення

У цьому пункті більш детально виводяться деякі результати теорії збурень (див. пункт 1.12) та застосовується теорія збурень до конкретних потенціалів, зокрема нескінченно-глибокої ями з неоднорідним дном.

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.3.1

2.3.1. Показати, що рівні енергії E_n і відповідні хвильові функції $\psi_n(x)$ квантово-механічної системи, описуваної оператором Гамільтона $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, можуть бути представлені у вигляді

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots, \quad \psi_n(x) = \psi_n^{(0)}(x) + \sum_k (c_{nk}^{(1)} + c_{nk}^{(2)} + \dots) \psi_k^{(0)}(x),$$

де $E_n^{(0)}$ та $\psi_n^{(0)}(x)$ — рівні енергії і нормовані хвильові функції системи з необуреним гамільтоніаном: $\hat{H}_0 \psi_n^{(0)}(x) = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}(x)$, а перші поправки до рівнів енергії і хвильових функцій можна обчислити таким чином:

$$E_n^{(1)} = H'_{nn}, \quad c_{nk}^{(1)} = \begin{cases} \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, & k \neq n, \\ 0, & k = n. \end{cases} \quad H'_{kn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{(0)*}(x) \hat{H}' \psi_n^{(0)}(x) dx.$$

Старшими поправками $E_n^{(2)}, E_n^{(3)}, \dots$ та $c_{nk}^{(2)}, c_{nk}^{(3)}, \dots$ можна знехтувати, якщо

$$|H'_{kn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|.$$

Зауваження: Поправки другого порядку визначаються наступним чином:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}},$$

$$c_{nk}^{(2)} = \begin{cases} \sum_{m \neq n} \frac{H'_{km} H'_{mn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} - \frac{H'_{kn} H'_{nn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}, & k \neq n, \\ -\frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}, & k = n. \end{cases}$$

Розв'язок задачі 2.3.1. Нехай оператор Гамільтона $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ складається з двох доданків: оператора незбуреної системи \hat{H}_0 та оператора збурення \hat{H}' , та стаціонарне рівняння Шредінгера 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

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + \cancel{E_n^{(2)}} + \dots \quad \text{та} \quad \psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \cancel{\psi_n^{(2)}} + \dots,$$

де $E_n^{(1)}, E_n^{(2)}, \dots$ — поправки першого, другого, ... порядку до незбурених рівнів енергії, а $\psi_n^{(1)}, \psi_n^{(2)}, \dots$ — поправки першого, другого, ... порядку до відповідних хвильових функцій. Надалі ми будемо нехтувати поправками другого та старших порядків та розрахуємо поправки першого порядку. Нагадаємо, що сукупність $\{\psi_n^{(0)}\}$ являє 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 Шредінгера, $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$, 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):

$$\begin{aligned} & \cancel{\hat{H}_0\psi_n^{(0)}} + \hat{H}'\psi_n^{(0)} + \hat{H}_0 \sum_k c_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + \cancel{\hat{H}'\psi_n^{(1)}} = \\ & = \cancel{E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(0)} \sum_k c_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + \cancel{E_n^{(1)}\psi_n^{(1)}}. \end{aligned}$$

Перші доданки у правій та лівій частинах скоротилися завдяки тому, що виконується стаціонарне рівняння Шредінгера 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:

$$H'_{mn} + \sum_k c_{nk}^{(1)} E_k^{(0)} \delta_{mk} = E_n^{(1)} \delta_{mn} + E_n^{(0)} \sum_k c_{nk}^{(1)} \delta_{mk}, \quad \text{де} \quad H'_{mn} = (\psi_m^{(0)}, \hat{H}'\psi_n^{(0)}).$$

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:

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

Зауважимо, що значення $c_{nn}^{(1)} = 0$ неможливо знайти з вищенаведених рівнянь. Для його визначення розрахуємо скалярний добуток:

$$\begin{aligned} 1 &= (\psi_n, \psi_n) = (\psi_n^{(0)}, \psi_n^{(0)}) + (\psi_n^{(1)}, \psi_n^{(0)}) + (\psi_n^{(0)}, \psi_n^{(1)}) + \overline{(\psi_n^{(1)}, \psi_n^{(1)})} = \\ &= 1 + \sum_k [c_{nk}^{(1)}]^* \delta_{nk} + \sum_k c_{nk}^{(1)} \delta_{nk} = 1 + [c_{nn}^{(1)}]^* + c_{nn}^{(1)}. \end{aligned}$$

Бачимо, що $\text{Re } c_{nn}^{(1)} = 0$. З іншого боку, хвильова функція визначена з точністю до постійної комплексної фази, тому можна вважати, що $c_{nn}^{(1)}$ — дійсне число. Таким чином, $c_{nn}^{(1)} = 0$.

Оскільки ми припустили, що оператор збурення \hat{H}' призводить до малої зміни значень енергії та хвильових функцій, то відзначимо, що ці наведені розрахунки правильні, якщо $|c_{nm}^{(1)}| \ll 1$, тобто $|H'_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$, що, фактично, і позначає застосовність теорії збурень.

2.3.2. Частинка знаходиться в нескінченно глибокій потенціальній ямі завширшки a , див. задачу **2.2.1**. Збурений потенціал має вигляд:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 \cos^2 \frac{\pi x}{a}, & 0 \leq x \leq a, \\ \infty, & x < 0, x > a. \end{cases}$$

Розрахувати в перших двох порядках теорії збурень рівні енергії частинки і в першому порядку відповідні хвильові функції. Вважати U_0 малим параметром. Вказати умови застосовності отриманого результату.

Розв'язок задачі 2.3.2. Звернемо увагу, що при $U_0 \rightarrow 0$ потенціальна енергія набуває вигляду з задачі **2.2.1**. Тому ми можемо записати, що рівні енергії та хвильові функції незбуреної задачі мають вигляд:

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

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

$$\begin{aligned} H'_{mn} &= \int_{-\infty}^{+\infty} [\psi_m^{(0)}(x)]^* \hat{H}' \psi_n^{(0)}(x) dx = \frac{2U_0}{a} \int_0^a \sin \frac{\pi m x}{a} \cos^2 \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi n x}{a} dx = \\ &= \frac{U_0}{2a} \int_0^a \left[\cos \frac{\pi x(m-n)}{a} - \cos \frac{\pi x(m+n)}{a} \right] \left[1 + \cos \frac{2\pi x}{a} \right] dx = \\ &= \frac{U_0}{2a} \int_0^a \left\{ \cos \frac{\pi x(m-n)}{a} - \cos \frac{\pi x(m+n)}{a} + \frac{1}{2} \left[\cos \frac{\pi x(m-n+2)}{a} + \right. \right. \\ &\left. \left. + \cos \frac{\pi x(m-n-2)}{a} - \cos \frac{\pi x(m+n+2)}{a} - \cos \frac{\pi x(m+n-2)}{a} \right] \right\} dx. \end{aligned}$$

Далі ми розрахуємо всі шість однакових інтегралів наступним способом:

$$\int_0^a \cos \frac{\pi x k}{a} dx = \begin{cases} \frac{a}{\pi k} \sin \frac{\pi k x}{a} \Big|_0^a = 0, & k \neq 0, \\ x \Big|_0^a = a, & k = 0 \end{cases} = a \delta_{k,0}.$$

Окрім того, оскільки m та n у розрахунку H'_{mn} можуть набувати лише натуральні значення, тому $\delta_{m+n,0}$ та $\delta_{m+n+2,0}$ завжди рівні нулю:

$$H'_{mn} = \frac{U_0}{2} \left\{ \delta_{m-n,0} - \delta_{m+n,0} + \frac{1}{2} \left[\delta_{m-n+2,0} + \delta_{m-n-2,0} - \delta_{m+n+2,0} - \delta_{m+n-2,0} \right] \right\}.$$

Розрахуємо першу поправку до енергії при $m = n$:

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \frac{U_0}{2} \left\{ \delta_{0,0} + \frac{1}{2} \left[\delta_{2,0} + \delta_{-2,0} - \delta_{2n-2,0} \right] \right\} = \frac{U_0}{2} \left[1 - \frac{\delta_{n,1}}{2} \right],$$

тобто $E_1^{(1)} = U_0/4$, а $E_{n \geq 2}^{(1)} = U_0/2$.

Далі розрахуємо коефіцієнти $c_{nm}^{(1)}$ при $m \neq n$, зауважуючи, що $\delta_{m+n,2}$ може не дорівнювати 0 лише при $m = n = 1$, що в даному випадку не може реалізуватись:

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{U_0}{4} \left[\delta_{m,n-2} + \delta_{m,n+2} - \delta_{m+n,2} \right] / [E_n^{(0)} - E_m^{(0)}].$$

Тепер можемо розрахувати хвильові функції, зводячи суму лише до двох (або одного) доданків, завдяки $\delta_{m,n-2}$ та $\delta_{m,n+2}$:

$$\psi_{n \geq 3}^{(1)} = \frac{U_0}{8} \frac{ma^2}{(\pi \hbar)^2} \left[\frac{\psi_{n-2}^{(0)}}{n-1} - \frac{\psi_{n+2}^{(0)}}{n+1} \right], \quad \psi_{n=1,2}^{(1)} = -\frac{U_0}{8} \frac{ma^2}{(\pi \hbar)^2} \frac{\psi_{n+2}^{(0)}}{n+1}.$$

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:

$$E_{n \geq 3}^{(2)} = \frac{U_0^2 ma^2}{32 (\pi \hbar)^2} \left[\frac{1}{n-1} - \frac{1}{n+1} \right] = \frac{U_0^2 ma^2}{16 (\pi \hbar)^2} \frac{1}{n^2 - 1}, \quad E_{n=1,2}^{(2)} = -\frac{U_0^2 ma^2}{32 (\pi \hbar)^2} \frac{1}{n+1}.$$

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.3.1

2.3.3. В умовах задачі **2.3.1** отримати аналітичні вирази для поправок до рівня енергії E_n^0 : (а) другої $E_n^{(2)}$; (б) третьої $E_n^{(3)}$.

2.3.4. Частинка знаходиться в нескінченно глибокій потенціальній ямі завширшки $3x_0$. Збурений потенціал має вигляд:

$$U(x) = \begin{cases} V(x), & 0 \leq x \leq 3x_0, \\ \infty, & x < 0, x > 3x_0; \end{cases}$$

(а) У першому порядку теорії збурень енергетичні рівні і відповідні хвильові функції в потенціалі: $V(x) = U_0 |1 - x/x_0|$.

(б) Розрахувати в перших трьох порядках теорії збурень рівні енергії частки в потенціалі: $V(x) = \alpha [\delta(x - x_0) - \delta(x - 2x_0)]$.

Вважати U_0 та α малими параметрами. Вказати умови застосовності отриманого результату.

2.3.2. Квазікласичне наближення

У цьому пункті ми нагадуємо основні рівняння квазікласичного наближення, див. підрозділ 1.13. Зокрема показуємо, що в граничному випадку $\hbar \rightarrow 0$ розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера може бути знайдено у наступному вигляді:

$$\psi(x) = \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right] + \frac{C_-}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right]. \quad (2.3.1)$$

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.3.2

2.3.5. Вважаючи, що $\hbar \rightarrow 0$, побудувати розв'язок (2.3.1) стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hbar^2 \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -p^2(x) \psi(x), \quad p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}, \quad (2.3.2)$$

зробивши заміну

$$\psi(x) = \exp [iS(x)/\hbar] = \exp [i\hbar^{-1}S_0(x) + S_1(x) + \dots] \quad (2.3.3)$$

у рівнянні Шредінгера та отримавши для функцій $S_0(x)$ та $S_1(x)$ наближенні рівняння:

$$[S'_0(x)]^2 = p^2(x), \quad 2S'_0(x)S'_1(x) + S''_0(x) = 0.$$

Зауваження: Позначення $p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}$ має наступний фізичний зміст. Різниця між повною E та потенціальною $U(x)$ енергіями являє собою кінетичну енергію, яка може бути представлена у вигляді $p^2/2m$, де p — імпульс частинки. Тому функція $p(x)$ носить назву *квазікласичного імпульсу*.

Розв'язок задачі 2.3.5. Розглянемо одновимірне стаціонарне рівняння Шредінгера (2.3.2). Якщо ми покладемо $\hbar \rightarrow 0$ безпосередньо у цьому рівнянні, то прийдемо до тривіального рівняння, яке не має фізичного змісту. Тому в першу чергу треба переписати його у запропонованому вигляді (2.3.3). Розрахуємо послідовно першу та другу похідні функції $\psi'(x)$:

$$\begin{aligned} \psi'(x) &= \exp[iS(x)/\hbar] iS'(x)/\hbar, \\ \psi''(x) &= \exp[iS(x)/\hbar] \{ -[S'(x)]^2/\hbar^2 + iS''(x)/\hbar \} \end{aligned}$$

та підставимо у рівняння Шредінгера. Скорочуючи на $\exp[iS(x)/\hbar]$, маємо:

$$[S'(x)]^2 - i\hbar S''(x) = p^2(x).$$

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 по \hbar :

$$S(x) = S_0(x) + (\hbar/i)S_1(x) \dots$$

Підставляючи такий розклад до рівняння Шредінгера, маємо:

$$[S'_0(x)]^2 + 2(\hbar/i)S'_0(x)S'_1(x) - \hbar^2[S'_1(x)]^2 - i\hbar S''_0(x) - \hbar^2 S''_1(x) = p^2(x).$$

Покладемо $\hbar \rightarrow 0$ та знаходимо: $S'_0(x) = \pm p(x)$. Далі, повертаючись до попереднього рівняння, знаходимо: $S'_1(x) = -S_0(x)/[2S'_0(x)]$. Інтегруючи два останні рівняння, маємо:

$$\begin{aligned} S_0(x) &= \pm \int p(x) dx, \\ S_1(x) &= -\frac{1}{2} \int \frac{p'(x)}{p(x)} dx = -\frac{1}{2} \ln p(x) + \ln C_{\pm}. \end{aligned}$$

В останньому рівнянні константа інтегрування позначена як C_{\pm} . Це пов'язано з тим, що для кожного з двох розв'язків першого рівняння (які відрізняються

знаком перед інтегралом) повинна бути своя константа інтегрування другого рівняння. Підставляючи отримані вирази для $S_0(x)$ та $S_1(x)$ у $\psi(x)$ та складаючи лінійну комбінацію двох отриманих рівнянь, остаточно приходимо до (2.3.1).

2.3.6. Використовуючи правило квантування Бора–Зомерфельда, обчислити рівні енергії гармонічного осцилятора $U(x) = m\omega^2 x^2/2$.

Зауваження: Правило квантування Бора–Зомерфельда, див. пункт 1.13.1:

$$\int_a^b p_n(x) dx = \pi \hbar (n + 1/2),$$

для рівнів енергії E_n , де $p_n(x) = \sqrt{2m[E_n - U(x)]}$ — квазікласичний імпульс, a та b — точки повороту, де $U(a) = U(b) = E_n$.

Розв’язок задачі 2.3.6. Розрахуємо точки повороту для даного потенціалу. Для цього прирівняємо $U(x) = E$ та знаходимо

$$a = -\sqrt{2E/m\omega^2}, \quad b = +\sqrt{2E/m\omega^2}.$$

Запишемо правило квантування Бора–Зомерфельда, перетворимо інтеграл та зробимо заміну змінної:

$$\begin{aligned} \int_a^b p(x) dx &= \int_a^b \sqrt{2m[E - m\omega^2 x^2/2]} dx = \sqrt{2mE} \int_a^b \sqrt{1 - (m\omega^2/2E)x^2} dx = \\ &= \sqrt{2mE} \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \int_{-1}^1 \sqrt{1 - y^2} dy = \frac{\pi E}{\omega} = \pi \hbar (n + 1/2). \end{aligned}$$

Останній інтеграл був легко розрахований за допомогою його геометричного змісту. 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, $\pi/2$.

Остаточно з правила квантування маємо:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2).$$

Зауваження: Отримане наближене значення для рівнів енергії збігається з точним значенням. Але у загальному випадку квазікласичне наближення правильне лише для високих рівнів енергії, $n \gg 1$.

2.3.7. Для частинок з енергією $0 < E < U_0$ оцінити в квазікласичному наближенні коефіцієнт прозорості бар'єра:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0(1 - x/a), & x \geq 0. \end{cases}$$

Зауваження: Коефіцієнт прозорості $T(E)$ для частинок з енергією E в квазікласичному наближенні може бути оцінений наступним чином:

$$T(E) \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right].$$

Тут a та b — точки повороту, $p(x)$ — квазікласичний імпульс.

Розв'язок задачі 2.3.7. Для даної потенціальної енергії маємо такі точки повороту: 0 та $b = a(1 - E/U_0)$. Тоді розрахуємо інтеграл:

$$\begin{aligned} \int_0^b \sqrt{2m[U_0(1 - x/a) - E]} dx &= \sqrt{2mU_0/a} \int_0^b \sqrt{b - x} dx = \\ &= -\frac{2}{3} \sqrt{2mU_0/a} (b - x)^{3/2} \Big|_0^b = -\frac{2}{3} b^{3/2} \sqrt{2mU_0/a}. \end{aligned}$$

Підставляючи результат у вираз для $T(E)$, остаточно отримуємо:

$$T(E) \approx \exp \left[-\frac{4a}{3\hbar} \sqrt{2mU_0} (1 - E/U_0)^{3/2} \right].$$

Зауважимо, що квазікласичне наближення правильне лише тоді, коли коефіцієнт прозорості малий, $T(E) \ll 1$.

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.3.2

2.3.8. Для частинки, що знаходиться в потенціалі $U(x) = U_0|x/a| > 0$, визначити рівні енергії зв'язаних станів.

2.3.9. При енергії частинки $0 < E < U_0$ оцінити в квазікласичному наближенні коефіцієнт прозорості бар'єра

$$\begin{aligned} \text{(а)} \quad U(x) &= \begin{cases} 0, & |x| > a, \\ U_0(1 - x^2/a^2), & |x| < a; \end{cases} \\ \text{(б)} \quad U(x) &= \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0 \exp(-x/a), & x \geq 0. \end{cases} \end{aligned}$$

2.4. Тривимірний рух

2.4.1. Момент імпульсу

Оператор моменту імпульсу (кутового моменту) $\hat{L} = [\hat{r} \times \hat{p}]$ має наступні компоненти, див. пункт 1.7:

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.4.1

2.4.1. Обчислити комутатори: (а) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$; (б) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y^2]$.

Розв'язок задачі 2.4.1а. Діємо даним оператором на функцію $\psi(x, y, z)$ та перетворюємо:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y]\psi &= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \hbar^2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = \\ &= \hbar^2 \left(-y \frac{\partial \psi}{\partial x} - yz \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial z} + yx \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - xz \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial z} + zy \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial z} - z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - \right. \\ &\quad \left. -xy \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + x \frac{\partial \psi}{\partial y} + xz \frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial y} \right) = \frac{i\hbar^2}{i} \left(x \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = i\hbar \hat{L}_z \psi, \end{aligned}$$

отже, $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$.

Розв'язок задачі 2.4.1б. Перетворимо, користуючись властивістю комутатора:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y^2] = \hat{L}_y [\hat{L}_x, \hat{L}_y] + [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \hat{L}_y = i\hbar (\hat{L}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z \hat{L}_y).$$

2.4.2. Показати, що функції, які виникають внаслідок дії операторів $\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$ на власні функції ψ_m оператора проекції моменту імпульсу на вісь z : $\hat{l}_z \psi_m = m\psi_m$, також є власними функціями оператора \hat{l}_z , що відповідають власним значенням $m \pm 1$. Тут $\hat{l} = \hbar^{-1} \hat{L}$ — оператори безрозмірного моменту імпульсу.

Розв'язок задачі 2.4.2. Нехай функції ψ_m^{\pm} — це результат дії оператора \hat{l}_{\pm} на власні функції ψ_m оператора \hat{l}_z , тобто: $\psi_m^{\pm} = \hat{l}_{\pm} \psi_m$. Подіємо на них оператором \hat{l}_z :

$$\hat{l}_z \psi_m^{\pm} = \hat{l}_z \hat{l}_{\pm} \psi_m = \hat{l}_z (\hat{l}_x \pm i\hat{l}_y) \psi_m = \hat{l}_z \hat{l}_x \psi_m \pm i\hat{l}_z \hat{l}_y \psi_m.$$

Використаємо результат задачі **2.4.1а**:

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = \hat{l}_z \hat{l}_x - \hat{l}_x \hat{l}_z = i\hat{l}_y, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_y] = \hat{l}_z \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_z = -i\hat{l}_x$$

та продовжимо перетворення:

$$\begin{aligned}\hat{l}_z \psi_m^\pm &= (i\hat{l}_y + \hat{l}_x \hat{l}_z) \psi_m \pm i(-i\hat{l}_x + \hat{l}_y \hat{l}_z) \psi_m = \\ &= i\hat{l}_y \psi_m + \hat{l}_x \hat{l}_z \psi_m \pm \hat{l}_x \psi_m \pm i\hat{l}_y \hat{l}_z \psi_m = i\hat{l}_y \psi_m + \hat{l}_x m \psi_m \pm \hat{l}_x \psi_m \pm i l_y m \psi_m = \\ &= (l_x \pm i l_y) m \psi_m \pm (\hat{l}_x \pm i l_y) \psi_m = m \hat{l}_\pm \psi_m \pm \hat{l}_\pm \psi_m = (m \pm 1) \hat{l}_\pm \psi_m = (m \pm 1) \psi_m^\pm.\end{aligned}$$

Що і треба було довести.

2.4.3. Показати, що у сферичних координатах

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

оператор проекції моменту імпульсу на вісь z дорівнює

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Розв'язок задачі 2.4.3. Проведемо розрахунки у зворотному порядку, перетворюючи оператор $\partial/\partial\varphi$ зі сферичних координат до декартових, використовуючи зв'язок часткових похідних для довільної функції f :

$$\begin{aligned}\frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial \varphi} &= \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial f}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial f}{\partial z} \right] = \\ &= \left[\frac{\hbar}{i} - r \sin \varphi \cos \theta \frac{\partial f}{\partial x} + r \cos \varphi \cos \theta \frac{\partial f}{\partial y} + 0 \right] = \frac{\hbar}{i} \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} = \hat{L}_z f \right].\end{aligned}$$

Що і треба було довести.

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.4.1

2.4.4. Показати, що оператор квадрата моменту імпульсу \hat{L}^2 комутує з будь-якою його проекцією, тобто показати, наприклад, $[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0$.

2.4.5. Обчислити комутатори: **(а)** $[\hat{L}_y, \hat{r}^2]$, **(б)** $[\hat{L}_x, \hat{p}^2]$; **(в)** $[\hat{L}_y, \hat{r} \cdot \hat{p}]$.

2.4.6. Показати, що в стані ψ_m з певною проекцією моменту на вісь z (див. задачу 2.4.2):

$$\text{(а)} \quad \bar{l}_x = \bar{l}_y = 0; \quad \text{(б)} \quad \bar{l}_x^2 = \bar{l}_y^2; \quad \text{(в)} \quad \bar{l}_x \bar{l}_y = -\bar{l}_y \bar{l}_x = im/2.$$

2.4.7. Використовуючи результат задачі 2.4.3, обчислити власні значення і власні функції оператора \hat{L}_z .

Зауваження: Ця задача була розв'язана у пункті 1.7.2.

2.4.8. У стані частинки, хвильова функція якої має кутову залежність $\psi(\varphi) = A \cos^n \varphi$, знайти ймовірність того, що проекція моменту імпульсу L_z дорівнює $\hbar m$ (m і n — цілі числа).

Зауваження: Для обчислення ймовірностей необхідно розкласти $\psi(\varphi) = A \cos^n \varphi$ за власними функціями, які були знайдені в задачі **2.4.7** (або у пункті 1.7.2). Тоді квадрат модуля коефіцієнта перед ψ_m в цьому розкладанні і буде являти собою необхідну ймовірність.

2.4.2. Рух в центральному полі

Стационарне рівняння Шредингера для однієї частинки маси¹ μ у тривимірному просторі може бути записане у вигляді

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z).$$

Якщо потенціальна енергія має центральну симетрію (див. підрозділ 1.9), $U(x, y, z) = U(r)$, де $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ — відстань від центра координат, то для подальшого розв'язування зручно перейти до сферичних координат:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2 \psi}{\hbar^2} \right] + [U(r) - E] \psi(r, \theta, \varphi) = 0,$$

де \hat{L}^2 — оператор квадрата моменту імпульсу, див. підрозділ 1.7:

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

Відомо, що власними функціями оператора \hat{L}^2 є сферичні функції $Y_{lm}(\theta, \varphi)$:

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

де $l = 0, 1, 2, \dots$ та $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ називаються азимутальним та магнітним квантовими числами, відповідно.

Скористаємося методом розділення змінних у рівнянні з частковими похідними та представимо хвильову функцію у вигляді $\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Тоді рівняння Шредингера спроститься:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) + \left[U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - E \right] \psi(r) = 0,$$

де другий доданок у квадратних дужках називається відцентровою потенціальною енергією. Припустимо, що потенціальна енергія $U(r)$ — це енергія

¹Тут m для маси частки не використовуємо, щоб не було плутанини з магнітним квантовим числом m .

притягання, $U(r) < 0$ та $U(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Тоді, в залежності від знака енергії E , ми отримуємо різний характер руху: при $E > 0$ частинка рухається не локалізовано, а при $E < 0$ — локалізована поблизу центра координат. Зосередимося на другому випадку, $E < 0$.

Для подальшого розв'язання рівняння Шредінгера 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 Шредінгера, приходимо до наступного рівняння для невідомої функції $g(r)$:

$$rg''(r) + 2g'(r)(l - kr + 1) - g(r)[2k(l + 1) + ru(r)] = 0,$$

де $u(r) = 2\mu U(r)/\hbar^2$.

Приклади завдань з розв'язками до пункту 2.4.2

2.4.9. Показати, що в кулонівському полі, $u(r) = -\alpha/r$, $\alpha > 0$, функція $g(r)$ — поліном степеня n_r , де n_r може набувати цілі невід'ємні значення $0, 1, 2, \dots$. Обчислити рівні енергії частинки.

Зауваження: У цьому випадку n_r та $n = n_r + l + 1$ називаються радіальним і головним квантовими числами, відповідно.

Розв'язок задачі 2.4.9. Розглянемо потенціальну енергію у вигляді кулонівського потенціалу (електрон поблизу ядра атома): $u(r) = -\alpha/r$, де $\alpha > 0$. Представимо $g(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n$ у вигляді степеневого ряду та підставимо до рівняння:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n n(n-1)r^{n-1} + 2(l+1) \sum_{n=0}^{\infty} a_n n r^{n-1} - 2k \sum_{n=0}^{\infty} a_n n r^n - [2k(l+1) - \alpha] \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n = 0.$$

У перших двох сумах зробимо заміну $n - 1$ на m , а в двох останніх — n на m . Тоді у всіх сумах буде один і той же степінь r^m :

$$\sum_{m=0}^{\infty} r^m \{ a_{m+1}(m+1)[m+2(l+1)] - a_m[2k(m+l+1) - \alpha] \} = 0.$$

Степеневий ряд дорівнює нулю тоді і лише тоді, коли всі його коефіцієнти рівні нулю, тобто отримуємо рекурентне співвідношення для a_m :

$$a_{m+1} = a_m \frac{2k(m+l+1) - \alpha}{(m+1)[m+2(l+1)]}. \quad (2.4.1)$$

За його допомогою можна знайти послідовно всі значення a_m :

$$a_0 \xrightarrow{m=0} a_1 \xrightarrow{m=1} a_2 \xrightarrow{m=2} \dots,$$

за умови, що a_0 — відомо.

З'ясуємо, чи може цей степеневий ряд бути нескінченним. Припустимо, що це можливо, тоді спростимо рекурентне співвідношення за умови $m \rightarrow \infty$: $a_{m+1} \approx \frac{2ka_m}{m+1}$. Використовуючи його послідовно, знаходимо a_m через a_0 :

$$a_{m+1} \approx \frac{2ka_m}{m+1} \approx \frac{(2k)^2 a_{m-1}}{(m+1)m} \approx \frac{(2k)^3 a_{m-2}}{(m+1)m(m-1)} \approx \dots \approx \frac{(2k)^{m+1} a_0}{(m+1)!}.$$

Тепер обчислимо $g(r)$ при таких a_m :

$$g(r) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m r^m \sim a_0 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2kr)^m}{m!} = a_0 \exp(2kr).$$

Тоді функція $\psi(r) \sim \exp(kr)$, тобто зростає до ∞ при $r \rightarrow \infty$, що суперечить фізичному змісту хвильової функції. Таким чином, степеневий ряд повинен бути скінченним, 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 набуває вигляду:

$$E_n = -\alpha^2 \hbar^2 / (8n^2 \mu).$$

2.4.10. Для електрона з головним $n = 4$ і азимутальним $l = 1$ квантовими числами в полі ядра He ($\alpha = 4\mu e^2 / \hbar^2$, e — заряд електрона) обчислити $\psi(r)$ та:

(а) радіус електронної хмари \bar{r} ;

(б) товщину електронної хмари $\Delta r = \sqrt{(r - \bar{r}^2)^2}$.

Розв'язок задачі 2.4.10. 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 старший степінь $g(r)$ має бути $n_r = 2$, тобто:

$$g(r) = \sum_{n=0}^{n_r} a_n r^n = a_0 + a_1 r + a_2 r^2.$$

Розрахуємо коефіцієнти a_1 та a_2 з рекурентного співвідношення (2.4.1) з

розв'язання задачі **2.4.9**, підставляючи послідовно $m = 0$ та $m = 1$:

$$a_1 = a_0 \frac{2k(l+1) - \alpha}{2(l+1)} = a_0 \frac{4k - 8k}{4} = -a_0 k,$$

$$a_2 = a_1 \frac{2k(l+2) - \alpha}{2[1+2(l+1)]} = a_1 \frac{6k - 8k}{10} = a_0 \frac{k^2}{5}.$$

Таким чином, хвильова функція набуває вигляду:

$$\psi(r) = a_0 r [1 - kr + (kr)^2/5] e^{-kr}.$$

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 координатах (r, θ, φ) , для яких $dx dy dz = r^2 \cos \theta dr d\theta d\varphi$. Залишаючи лише координату r та інтегруючи по ній від 0 до ∞ , отримуємо такий вираз для норми функції $\psi(x)$:

$$\int_0^\infty |\psi(r)|^2 r^2 dr = 1.$$

Підставляючи сюди вираз для $\psi(r)$, отримуємо наступний результат:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |\psi(r)|^2 r^2 dr &= a_0^2 \int_0^\infty \left[1 - kr + \frac{(kr)^2}{5}\right]^2 e^{-2kr} r^4 dr = \\ &= a_0^2 [I_4 + k^2 I_6 + \frac{k^4 I_8}{25} - 2k I_5 + \frac{2k^2 I_6}{5} - \frac{2k^3 I_7}{5}] = \\ &= \frac{a_0^2}{(2k)^5} \left[4! + \frac{6!}{2^2} + \frac{8!}{25 \cdot 2^4} - \frac{2 \cdot 5!}{2} + \frac{2 \cdot 6!}{5 \cdot 2^2} - \frac{2 \cdot 7!}{5 \cdot 2^3}\right] = \frac{3 a_0^2}{20 k^5} = 1, \end{aligned}$$

де ми позначили через I_s наступний інтеграл, який може бути розрахований за допомогою інтегрування частинами:

$$I_s = \int_0^\infty r^s \exp(-2kr) dr = \frac{s}{2k} I_{s-1} = \dots = \frac{s!}{(2k)^s} I_0 = \frac{s!}{(2k)^{s+1}}.$$

Звідси отримуємо значення константи $a_0 = \sqrt{20k^5/3}$.

Аналогічним чином можуть бути розраховані:

$$(a) \text{ радіус електронної хмари } \bar{r} = \int_0^\infty \psi^*(r) r \psi(r) r^2 dr = \frac{69a_0^2}{80k^6} = \frac{23}{4k} = \frac{46}{\alpha};$$

(б) товщина електронної хмари

$$\Delta r = \sqrt{\overline{(r - \bar{r})^2}} = \left[\int_0^{\infty} \psi^*(r)(r - \bar{r})^2 \psi(r) r^2 dr \right]^{1/2} = \frac{2\sqrt{71}}{\alpha}.$$

Завдання для самостійної роботи до пункту 2.4.2

2.4.11. Розв'язати задачу 2.4.10 для

(а) $n = 3, l = 2, \alpha = 6\mu e^2/\hbar^2$; (б) $n = 2, l = 0, \alpha = 8\mu e^2/\hbar^2$.

2.4.12. Знайти розподіл по імпульсах частинки в основному стані в кулонівському полі $u(r) = -\alpha/r, \alpha > 0$.

Зауваження: Основний стан: $n_r = l = m = 0$. Розподіл по імпульсах дорівнює $dw(\vec{p}) = |\psi(\vec{p})|^2 d\vec{p}$, де $\psi(\vec{p})$ — імпульсне зображення $\psi(\vec{r})$:

$$\psi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}) \exp(-i\vec{p}\vec{r}/\hbar) d\vec{r}.$$

2.5. Приклади індивідуальних завдань

2.5.1. Одновимірний рух

<p>Варіант № 1 Знайти рівні енергії з $E \geq 0$ і відповідні нормовані хвильові функції станів дискретного спектра частинки в полі</p> $U(x) = \begin{cases} \infty, & x > a; \\ -\alpha\delta(x), & x \leq a. \end{cases}$ <p>Тут $\alpha > 0, a > 0$.</p>	<p>Варіант № 2 З'ясувати, чи існують в полі</p> $U(x) = \begin{cases} \infty, & x > a; \\ -\alpha\delta(x), & x \leq a \end{cases}$ <p>рівні енергії з $E < 0$. Якщо так, то за яких умов. Тут $\alpha > 0, a > 0$.</p>
<p>Варіант № 3 Чи може коефіцієнт проходження T частинок при русі в полі</p> $U(x) = \alpha(\delta(x) + \delta(x - a))$ <p>дорівнювати 0? Тут $\alpha > 0, a > 0$.</p>	<p>Варіант № 4 Знайти зв'язані стани з $E < 0$ частинки в полі</p> $U(x) = -\alpha(\delta(x + b) + \delta(x - a)).$ <p>Тут $\alpha > 0, a > 0, b > 0$.</p>

<p>Варіант № 5 Показати, що коефіцієнт відбиття R при русі частинок в полі</p> $U(x) = \begin{cases} \alpha\delta(x), & x \leq a; \\ \infty, & x > a \end{cases}$ <p>при будь-яких значеннях параметрів дорівнює 1. Тут $\alpha > 0, a > 0$.</p>	<p>Варіант № 6 Обчислити коефіцієнт відображення R при русі частинок в полі</p> $U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0; \\ \alpha\delta(x - x_0), & x > 0. \end{cases}$ <p>Тут $\alpha > 0, x_0 > 0$.</p>
<p>Варіант № 7 Знайти коефіцієнт проходження T частинок через бар'єр</p> $U(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0; \\ U_1, & 0 < x \leq a; \\ U_2, & x > a \end{cases}$ <p>при $E > U_1 > U_2 > 0$.</p>	<p>Варіант № 8 Знайти коефіцієнт проходження T частинок через бар'єр</p> $U(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0; \\ U_1, & 0 < x \leq a; \\ U_2, & x > a \end{cases}$ <p>при $U_1 > E > U_2 > 0$.</p>
<p>Варіант № 9 Знайти хвильові функції стаціонарних станів частинки в полі</p> $U(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0; \\ U_1, & 0 < x \leq a; \\ U_2, & x > a \end{cases}$ <p>при $U_1 > U_2 > E > 0$. Чому в даному випадку дорівнює коефіцієнт проходження T?</p>	<p>Варіант № 10 Знайти нормовані хвильові функції стаціонарних станів частинки в полі</p> $U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0; \\ \alpha\delta(x - x_0), & x > 0 \end{cases}$ <p>при $E > 0$.</p>
<p>Варіант № 11 Знайти рівні енергії з $E < 0$ станів дискретного спектра частинки в полі</p> $U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, x \geq 2a; \\ -\alpha\delta(x - a), & 0 < x < 2a. \end{cases}$ <p>Тут $\alpha > 0, a > 0$. Чи при всіх значеннях параметрів існують такі рівні?</p>	<p>Варіант № 12 Знайти зв'язані стани з $E < 0$ частинки в полі</p> $U(x) = \alpha (\delta(x + a) - \delta(x - a)).$ <p>Тут $\alpha > 0, a > 0$. Чи при будь-яких значеннях параметрів існують такі стани?</p>

<p>Варіант № 13 Чи може коефіцієнт проходження T при надбар'єрному відбитті частинок в полі двох δ-ям:</p> $U(x) = -\alpha (\delta(x + a) + \delta(x - a))$ <p>дорівнювати 0? Тут $\alpha > 0, a > 0$.</p>	<p>Варіант № 14 Показати, що коефіцієнт відбиття R частинок з енергією $E > 0$ у полі</p> $U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0; \\ -U_0, & 0 < x \leq a; \\ 0, & x > a \end{cases}$ <p>дорівнює 1. Тут $U_0 > 0$.</p>
<p>Варіант № 15 Знайти зв'язані стани з $E < 0$ частинки в полі</p> $U(x) = -\alpha [\delta(x + a) + \delta(x - a)].$ <p>Тут $\alpha > 0, a > 0$.</p>	<p>Варіант № 16 Обчислити коефіцієнт відбиття R частинок в полі</p> $U(x) = \begin{cases} U_0, & x \leq 0; \\ \alpha\delta(x - a), & x > 0. \end{cases}$ <p>Тут $U_0 > E > 0, \alpha > 0, a > 0$.</p>
<p>Варіант № 17 Визначити умови, при яких існують рівні енергії з $0 < E \leq U_0$ частинки в полі</p> $U(x) = \begin{cases} U_0, & x \leq b; \\ 0, & b < x \leq 2b; \\ \infty, & x > 2b, \end{cases}$ <p>які відповідають <i>непарним</i> хвильовим функціям.</p>	<p>Варіант № 18 Визначити умови, при яких існують рівні енергії з $0 > E > -U_0$ частинки в полі</p> $U(x) = \begin{cases} -U_0, & x \leq b; \\ 0, & b < x \leq 2b; \\ \infty, & x > 2b, \end{cases}$ <p>які відповідають <i>парним</i> хвильовим функціям.</p>
<p>Варіант № 19 Визначити умови, при яких існують рівні енергії з $0 < E < U_0$ частинки в полі</p> $U(x) = \begin{cases} U_0, & x > a; \\ -\alpha\delta(x), & x \leq a, \end{cases}$ <p>які відповідають <i>непарним</i> хвильовим функціям. Тут $U_0 > 0, \alpha > 0, a > 0$.</p>	<p>Варіант № 20 Визначити умови, при яких існують рівні енергії з $E < 0$ частинки в полі</p> $U(x) = \begin{cases} U_0, & x > a; \\ -\alpha\delta(x), & x \leq a, \end{cases}$ <p>які відповідають <i>парним</i> хвильовим функціям. Тут $U_0 > 0, \alpha > 0, a > 0$.</p>

2.5.2. Використання теорії збурень

За допомогою теорії збурень знайти рівні енергії (в нульовому, першому і другому порядках) з $E \geq 0$ і відповідні хвильові функції стаціонарних станів (в нульовому і першому порядку) частинки в полі

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq -a, \quad x \geq b; \\ V(x), & -a < x < b, \end{cases}$$

де $b > a > 0$. Вказати умови застосовності отриманого результату.

Збурюючий потенціал $V(x)$ наведено у таблиці нижче:

Варіант № 1 $V(x) = \alpha\delta(x)$.	Варіант № 2 $V(x) = -\alpha\delta(x)$.
Варіант № 3 $V(x) = \alpha\delta(x - a)$.	Варіант № 4 $V(x) = -\alpha\delta(x - a)$.
Варіант № 5 $V(x) = U_0x/a$.	Варіант № 6 $V(x) = -U_0x/b$.
Варіант № 7 $V(x) = U_0(x - b)/a$.	Варіант № 8 $V(x) = U_0(b - x)/a$.
Варіант № 9 $V(x) = U_0(x - a)/b$.	Варіант № 10 $V(x) = U_0(a - x)/b$.
Варіант № 11 $V(x) = U_0 \sin [3\pi(x + a)/(b + a)]$.	Варіант № 12 $V(x) = U_0 \sin [2\pi(x - b)/(b + a)]$.
Варіант № 13 $V(x) = U_0 \cos [2\pi(x + a)/(b + a)]$.	Варіант № 14 $V(x) = U_0 \cos [3\pi(x - b)/(b + a)]$.
Варіант № 15 $V(x) = U_0 1 - x/a $.	Варіант № 16 $V(x) = U_0 x - a /a$.
Варіант № 17 $V(x) = \alpha[\delta(x) + \delta(x - a)]$.	Варіант № 18 $V(x) = -\alpha[\delta(x) + \delta(x - a)]$.
Варіант № 19 $V(x) = \alpha[\delta(x) - \delta(x - a)]$.	Варіант № 20 $V(x) = \alpha[\delta(x - a) - \delta(x)]$.

Вважати U_0 та α малими параметрами.

Бібліографія

- [1] Бете Г. Квантовая механика / Г. Бете. — М. : Мир, 1965. — 333 с.
- [2] Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. — Львів : ЛДУ ім. І. Франка, 1998. — 616 с.
- [3] Галицкий Е. М. Задачи по квантовой механике / Е. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. — М. : Наука, 1981. — 648 с.
- [4] Гольдман И. И. Сборник задач по квантовой механике / И. И. Гольдман, В. Д. Кривченков. — М. : Гос. изд-во технико-теоретической литературы, 1957. — 275 с.
- [5] Гречко Л. Г. Сборник задач по теоретической физике / Л. Г. Гречко, В. И. Сугаков, О. Ф. Томасевич, А. М. Федорченко. — М. : Высшая школа, 1984. — 319 с.
- [6] Давыдов А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. — М. : Наука, 1973. — 704 с.
- [7] Елютин П. В. Квантовая механика / П. В. Елютин, В. Д. Кривченков. — М. : Наука, 1976. — 336 с.
- [8] Ландау Л. Д. Теоретическая физика. В 10 т. Т. 1 : Квантовая механика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М. : Наука, 1989. — 768 с.
- [9] Левич В. Г. Курс теоретической физики. В 2 т. Т. 2. / В. Г. Левич, Ю. А. Вдовин, В. А. Мямлин. — М. : Физматгиз, 1971. — 936 с.
- [10] Мессия А. Квантовая механика. В 2 т. / А. Мессия. — М. : Наука, 1979. — Т. 1. — 478 с., Т. 2. — 583 с.
- [11] Ульянов В. В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике / В. В. Ульянов. — Харьков : Вища школа, 1980. — 216 с.
- [12] Ульянов В. В. Методы квантовой кинетики / В. В. Ульянов. — Харьков : Вища школа, 1987. — 144 с.

- [13] Фейнман Р. Квантовая механика и интегралы по траекториям / Р. Фейнман, А. Хиббс. — М. : Мир, 1968. — 382 с.
- [14] Флюгге З. Задачи по квантовой механике. В 2 т. / З. М. Флюгге. — М. : Мир, 1974. — Т. 1. — 341 с., Т. 2. — 315 с.

Навчальне видання

Апостолов Станіслав Сергійович

Єзерська Олена Володимирівна

**ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ. ТЕОРІЯ ТА ПРАКТИЧНІ
ЗАВДАННЯ**

Навчально-методичний посібник

Відповідальний за випуск О. І. Любимов

Коректор О. В. Анцибора

Комп'ютерне верстання С. С. Апостолов

Макет обкладинки І. М. Дончик

Формат 60x84/16. Ум. друк. арк. 6,79. Наклад 100 пр. Зам. № 148/21.

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна,
61022, м. Харків, майдан Свободи, 4.

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3367 від 13.01.09.

Видавництво ХНУ імені В. Н. Каразіна

Тел. 705-24-32

Надруковано з готових оригінал-макетів у ФО-П Тітов Є.В.
61057, м. Харків, Харківська набережна, 9, кв. 23.

Свідоцтво про реєстрацію ВОО № 951823 від 18.01.1999 р.