

Федеральное агентство по образованию

И.В. Копытин, А.С. Корнев, Т.А. Чуракова

Задачи по квантовой механике

Учебное пособие для вузов

Часть 2

3-е издание

Воронеж 2008

Утверждено научно-методическим советом физического факультета
12 февраля 2008 г., протокол № 2

Учебное пособие подготовлено на кафедре теоретической физики
физического факультета Воронежского государственного университе-
та.

Рекомендуется для студентов 3, 4 курсов д/о и 4 курса в/о.

Для специальностей: 010701 — Физика, 010801 — Радиофизика и элек-
троника, 010803 — Микроэлектроника и полупроводниковые приборы

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Одномерные задачи	5
1.1. Общие принципы решения одномерных задач	5
1.2. Прямоугольная потенциальная яма	7
1.3. Прохождение через потенциальный барьер	14
1.4. Линейный гармонический осциллятор	23
1.5. Бозе-операторы	30
1.6. Сохранение четности	33
Глава 2. Трехмерные задачи. Движение в центральном поле	37
2.1. Общие положения	37
2.2. Водородоподобный атом	43
Глава 3. Основы теории представлений	51
3.1. Представление волновой функции	51
3.2. Дираковский формализм	56
3.3. Теория представлений для операторов физических величин	59
3.4. Теория представлений и наблюдаемые физические величины	66
3.5. Унитарные преобразования	69
3.6. Представления зависимости операторов и волновых функций от времени	73
Приложение	76
А. Вырожденная гипергеометрическая функция	76
Б. Полиномы Чебышева – Эрмита	76
В. Сферические функции	77
Г. Присоединенные полиномы Лагерра	78
Д. Функции Бесселя	79

Введение

Настоящее пособие предназначается для практических занятий и самостоятельной работы по курсу «Квантовая теория» для студентов всех специальностей физического факультета.

Пособие содержит три главы, охватывающие следующие вопросы курса: одномерные задачи (гл. 1), движение в центральном поле (гл. 2) и основы теории представлений (гл. 3).

В части 1 данного цикла пособий представлены основы квантовой механики. В настоящем пособии методами квантовой теории исследуются конкретные простейшие физические системы и разбираются задачи, допускающие точное аналитическое решение.

Все главы и разделы содержат, как правило, краткое изложение теоретического материала, а также большое количество наиболее важных задач с подробным решением. Часть задач предложена для самостоятельного решения. Наиболее трудные (дополнительные) задачи отмечены звездочками.

Нестандартный справочный математический материал вынесен в «Математическое приложение». Поэтому использование дополнительной математической литературы при изучении данного пособия не предполагается.

Приведем значения (в единицах СИ) некоторых фундаментальных констант, использованных в настоящем пособии:

постоянная Планка $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с;

масса электрона $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ кг;

заряд электрона $e = -1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл.

Глава 1.

Одномерные задачи

1.1. Общие принципы решения одномерных задач

Энергии стационарных состояний частицы массы m , совершающей одномерное движение в поле $V(x)$, и соответствующие им волновые функции находятся из решения одномерного стационарного уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (1.1)$$

Граничные условия к нему вытекают из стандартных условий [требование конечности, однозначности и непрерывности волновой функции $\Psi(x)$], а также определяются характером движения. В частности, в случае финитного движения граничные условия необходимо выбирать нулевыми. Напомним, что в стационарных состояниях зависимость волновых функций от времени дается множителем $\exp[-iEt/\hbar]$. В настоящем пособии будут исследоваться основные аспекты аналитического решения уравнения (1.1).

Вначале рассмотрим движение в кусочно-непрерывном потенциале (рис. 1.1) и исследуем поведение волновой функции в точках его разрыва.

Пример 1.1. Потенциальная энергия имеет конечный разрыв в точке $x = a$ (рис. 1.1а). Исследовать волновую функцию в этой точке.

Решение. Непрерывность волновой функции в точке $x = a$ будет обеспечена в силу фундаментальности стандартных условий.

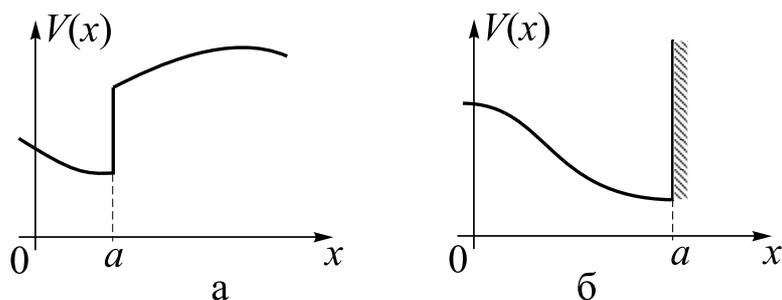


Рис. 1.1.

Для исследования производной проинтегрируем уравнение Шредингера (1.1) в пределах от $a - 0$ до $a + 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi'(a + 0) - \Psi'(a - 0)] = 0.$$

Таким образом, при наличии конечного разрыва потенциальной энергии волновая функция в точке разрыва будет оставаться непрерывной вместе со своей первой производной:

$$\boxed{\Psi(a - 0) = \Psi(a + 0); \quad \Psi'(a - 0) = \Psi'(a + 0).} \quad (1.2)$$

Под $\Psi(a \pm 0)$ здесь следует понимать значение функции справа (слева) от точки $x = a$ в непосредственной близости от нее. Соотношения (1.2) называются также правилом «сшивания» волновой функции в точке разрыва потенциала.

Соотношения (1.2) можно сформулировать иначе:

$$\boxed{\left. \frac{\Psi'(x)}{\Psi(x)} \right|_{a-0} = \left. \frac{\Psi'(x)}{\Psi(x)} \right|_{a+0}, \quad \text{или} \quad \left. \frac{d}{dx} \ln \Psi(x) \right|_{a-0} = \left. \frac{d}{dx} \ln \Psi(x) \right|_{a+0},} \quad (1.3)$$

т. е. в точке конечного разрыва потенциала логарифмическая производная волновой функции будет непрерывна. Условия (1.2) и (1.3) эквивалентны. \square

Если в точке $x = a$ имеется бесконечно высокая потенциальная стенка (рис. 1.1б), то в соответствии с уравнением Шредингера (1.1) справа от стенки волновая функция тождественно обращается в нуль, т.е. в эту область частица не проникает. В соответствии с условием непрерывности при $x = a$ волновая функция должна обратиться в нуль:

$$\boxed{\Psi(a - 0) = \Psi(a) = 0; \quad \Psi(x > a) \equiv 0.} \quad (1.4)$$

В этом случае на производную функции в точке $x = a$ каких-либо ограничений не накладываемся.

В заключение перечислим без доказательства специфические свойства одномерного финитного движения, которые устанавливаются в теории функционального анализа:

- 1) все энергетические уровни будут невырожденными;
- 2) волновые функции стационарных состояний можно выбрать вещественными ¹;

¹ Другими словами, их фазы не зависят от координат.

3) если основное состояние нумеровать индексом «0», первое возбужденное — «1» и т.д., то в области локализации частицы, исключая ее границы, волновая функция n -го возбужденного состояния ровно n раз обращается в нуль, причем все нули будут невырожденными².

Задачи для самостоятельного решения

1. Потенциальная энергия имеет δ -образную особенность в точке $x = a$:

$$V(x) = U(x) + \Omega\delta(x - a),$$

где $U(x)$ — кусочно-непрерывная функция с возможным разрывом конечной величины в точке $x = a$, $\Omega = \text{const}$. Обобщить соотношения (1.2) для потенциалов данного типа.

(Ответ:

$$\Psi(a + 0) = \Psi(a - 0); \quad \Psi'(a + 0) - \Psi'(a - 0) = \frac{2m}{\hbar^2} \Omega\Psi(a), \quad (1.5)$$

где m — масса частицы.)

1.2. Прямоугольная потенциальная яма

Прямоугольная потенциальная яма является частным случаем рассмотренной выше кусочно-непрерывной потенциальной энергии. Поэтому при решении задач мы будем пользоваться результатами предыдущего пункта.

Пример 1.2. Частица массы m находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме ширины a (рис. 1.2). Найти энергии стационарных состояний частицы и соответствующие им волновые функции.

Решение. Примем дно ямы за нулевой уровень отсчета энергии, а левый угол — за начало координат.

Допустимые энергии будут неотрицательными, а движение — всегда финитным. Поэтому необходимо решить уравнение Шредингера (1.1) с потенциалом

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a; \\ +\infty, & x \leq 0, x \geq a \end{cases} \quad (1.6)$$

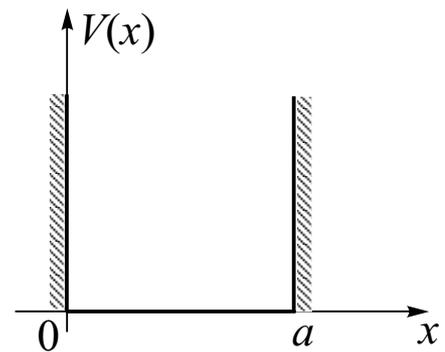


Рис. 1.2.

² Данное свойство называется осцилляционной теоремой.

и нулевыми граничными условиями *на бесконечности*. Потенциал (1.6) является кусочно-непрерывным с бесконечно высокими стенками. Поэтому в соответствии с (1.4) вне ямы волновая функция обратится в тождественный нуль и примет нулевые значения на границах ямы, что полностью согласуется с граничными условиями. Теперь уравнение (1.6) упрощается и записывается на промежутке от 0 до a в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) = E\Psi(x) \quad (1.7)$$

и нулевыми условиями *на границах промежутка*:

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0. \quad (1.8)$$

В соответствии со свойствами одномерного финитного движения общее решение линейного однородного дифференциального уравнения удобно представить в вещественной форме:

$$\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad (1.9)$$

где

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad (1.10)$$

A и B — подлежащие определению константы. Постоянная k также подлежит определению, поскольку выражается через неизвестные значения энергии. Число неизвестных на единицу превышает число граничных условий (1.8). В этом нет никакого противоречия, поскольку решение уравнения (1.7) определяется с точностью до *ненулевого постоянного множителя* (нормировочной константы).

Для выполнения первого граничного условия (1.8) в точке $x = 0$ необходимо положить $B = 0$, и тогда A следует считать нормировочной константой. Значения k , а следовательно, и энергии E , определяются вторым граничным условием (1.8) в точке $x = a$, т.е. из уравнения

$$\sin ka = 0.$$

Данное уравнение удовлетворяется при следующих *дискретных* значениях k :

$$k_n = \pi n/a, \quad n = 0, \pm 1, \dots \quad (1.11)$$

Таким образом, в соответствии с (1.9)–(1.11) мы получаем следующие выражения для энергий и волновых функций:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 0, \pm 1, \dots; \quad (1.12)$$

$$\Psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}. \quad (1.13)$$

Вид функции (1.13) подтверждает правильность выбора решения в *вещественной* форме (1.9).

Устраним теперь «посторонние» значения n . Прежде всего заметим, что при $n = 0$ функция (1.13) обращается в тождественный нуль, т.е. получено не представляющее физического интереса тривиальное решение уравнения Шредингера. Поэтому *значение $n = 0$ необходимо исключить из рассмотрения.*

Далее, при замене ненулевого $n \rightarrow -n$ значения энергии (1.12) остаются прежними, а волновые функции (1.13) вследствие нечетности синуса меняют знак, т.е. умножаются на константу -1 . Это означает физическую эквивалентность $\Psi_n(x)$ и $\Psi_{-n}(x)$. Поэтому *отрицательные значения n также необходимо исключить из рассмотрения,* так что кажущееся вырождение энергетических уровней по знаку n на самом деле отсутствует.

Нормировочная константа A для частного случая $n = 1$ вычислена в примере 1.1 части 1. Предлагаем самостоятельно обобщить результат на случай $n > 1$. Приведем окончательный ответ:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, \dots; \quad (1.14)$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi nx}{a}. \quad (1.15)$$

Кратко проанализируем решение.

Одномерная бесконечно глубокая потенциальная яма содержит бесконечное число уровней энергии. Энергии стационарных состояний сверху не ограничены и однозначно определяются квантовым числом n . Расстояние между соседними уровнями линейно возрастает с увеличением квантового числа.

Основному состоянию соответствует $n = 1$. Оно имеет *ненулевую энергию* $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$, т.е. лежит выше «дна» потенциальной ямы. Данный факт согласуется с принципом неопределенности: разброс значений координаты ограничен конечными размерами ямы, так что импульс просто *обязан* иметь ненулевой разброс значений вследствие конечности правой части неравенства

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (1.16)$$

(см. также следующий пример).

Для проверки осцилляционной теоремы решения (1.14), (1.15) необходимо перенумеровать так, чтобы основному состоянию соответствовало $n = 0$. Для этого сделаем замену $n \rightarrow n + 1$:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n + 1)^2, \quad n = 0, 1, \dots; \quad (1.17)$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} (n + 1).$$

Предлагаем теперь самостоятельно проверить осцилляционную теорему, а также свойства ортогональности и полноты функций (1.15). \square

Пример 1.3. *В условиях предыдущей задачи в стационарных состояниях найти средние значения координаты и импульса и их среднеквадратичные отклонения. Проверить соотношение неопределенностей для координаты и импульса в стационарных состояниях.*

Решение. Задачу решаем по аналогии с примером 3.3 Части 1, только в качестве волновых функций используем (1.15), а интегрирование проводим на промежутке от 0 до a . Интегрировать здесь удобно по безразмерной переменной $\xi = x/a$. Все выкладки рекомендуем сделать самостоятельно, а здесь приведем лишь конечный результат:

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2}; \quad \langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{a^2}{2} \left[\frac{1}{6} - \frac{1}{\pi^2 n^2} \right];$$

$$\langle p \rangle = 0; \quad \langle (\Delta p)^2 \rangle = \left(\frac{\pi \hbar n}{a} \right)^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

На основании полученных результатов проверим соотношение неопределенностей (1.16) в стационарных состояниях (1.15):

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{\pi^2 n^2}{3} - 2 \right).$$

Легко видеть, что множитель в скобках в правой части будет больше единицы при всех допустимых значениях n . \square

Пример 1.4. *Частица массы m находится в прямоугольной потенциальной яме, которая ограничена слева бесконечно высокой потенциальной стенкой, а справа — ступенькой конечной высоты V_0 (рис. 1.3а). Найти энергии связанных стационарных состояний частицы.*

Решение. В точке $x = a$ потенциальная энергия претерпевает конечный разрыв, поэтому уравнение Шредингера (1.1) нужно решать в двух соседних областях: I ($0 \leq x \leq a$) и II ($x > a$).

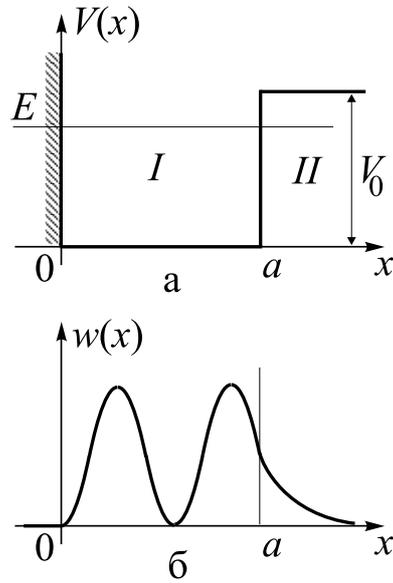


Рис. 1.3.

В области I задача полностью эквивалентна той, что разобрана в примере 1.2, поэтому можно сразу выписать ее решение с требуемым условием в нуле:

$$\Psi_I(x) = A \sin kx, \quad (1.18)$$

где A — произвольная ненулевая константа, а волновое число k связано с энергией соотношением (1.10).

Финитное движение возможно только при условии

$$E < V_0, \quad (1.19)$$

что необходимо учитывать при решении уравнения Шредингера в области II :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_{II}''(x) + V_0 \Psi_{II}(x) = E \Psi_{II}(x). \quad (1.20)$$

Нетрудно убедиться, что уравнению (1.20) удовлетворяет следующая функция, обращающаяся в нуль при $x \rightarrow +\infty$:

$$\Psi_{II}(x) = B e^{-\varkappa x}, \quad (1.21)$$

где

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \stackrel{(1.10)}{=} \sqrt{K_0^2 - k^2}, \quad (1.22)$$

$$K_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar, \quad (1.23)$$

B — произвольная ненулевая константа.

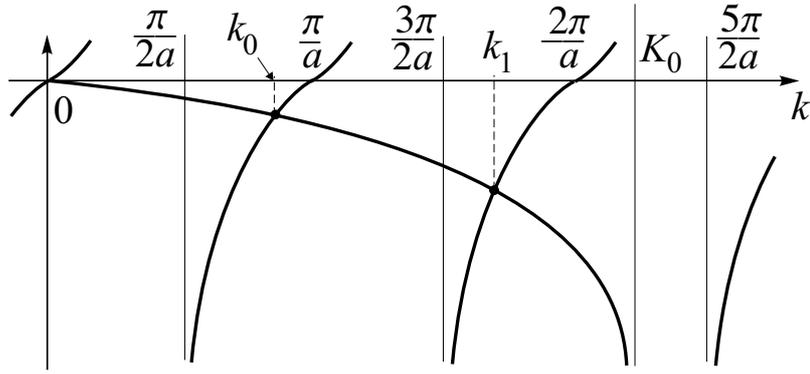


Рис. 1.4.

Решения (1.18) и (1.21) необходимо «сшить» в точке конечного разрыва потенциала $x = a$ в соответствии с (1.3), полагая $\Psi(a-0) = \Psi_I(a)$, $\Psi(a+0) = \Psi_{II}(a)$ и т.д. В итоге получаем следующее трансцендентное уравнение для k , а значит, и для E :

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\sqrt{K_0^2 - k^2}}. \quad (1.24)$$

При произвольном значении параметра K_0 оно не имеет ненулевого аналитического решения. Для энергетического спектра теперь имеем формулу:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (1.25)$$

где k_n — положительные (почему?) корни уравнения (1.24). Энергетические уровни нумеруются здесь в соответствии с осцилляционной теоремой.

Для анализа результата воспользуемся графическим методом решения уравнения (1.24) (см. рис. 1.4). График его левой части является тангенсоидой. Абсциссы точек ее пересечения с графиком правой части являются корнями (1.24). График правой части имеет вертикальную асимптоту при $k = K_0$, поэтому *число связанных состояний в яме конечной глубины ограничено*. На рис. 1.4 представлен случай с двумя связанными состояниями — основным и первым возбужденным. Можно показать, что для появления в яме последовательности уровней E_0, \dots, E_n параметр K_0 должен удовлетворять условию

$$K_0 > (2n + 1) \frac{\pi}{2a}. \quad (1.26)$$

При $2K_0a < \pi$ *связанные состояния частицы в яме вообще отсутствуют*. При условии же $K_0a \gg 1$ (т.е. при $V_0 \rightarrow \infty$) правая часть

уравнения (1.24) стремится к нулю, а энергетический спектр становится таким же, как и в случае бесконечно глубокой потенциальной ямы, т.е. переходит в (1.17). Таким образом, в соответствии с (1.23), (1.25) энергетический спектр частицы полностью определяется ее массой, а также произведением параметров $a^2 m V_0$.

Уравнение (1.24), возможно, не слишком удобно для численного решения, так как требует поиска нескольких его корней. Его, однако, методами элементарной тригонометрии можно преобразовать к эквивалентному более удобному виду, учитывающему многозначность обратных тригонометрических функций:

$$ka = \pi(n + 1) - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}. \quad (1.27)$$

Зависящее от параметра $n = 0, 1, \dots$ уравнение (1.27) имеет не более одного положительного корня для каждого n и легко решается численно.

Обратим внимание читателя на еще одну особенность движения в микромире. В данной задаче область $x > a$ является *классически недоступной*, так как в ней $E < V(x)$. Тем не менее в соответствии с (1.21) в этой области *волновая функция не обращается в нуль тождественно!* Это означает *проникновение частицы в классически недоступную область*. График распределения частицы в случае первого возбужденного состояния дается на рис. 1.3б. Плотность вероятности обнаружения частицы экспоненциально затухает при углублении в классически недоступную область ($\sim e^{-2\kappa x}$). Эффективная глубина ее проникновения $d \sim (2\kappa)^{-1}$ определяется высотой «ступеньки» V_0 и энергией частицы E . Прямое экспериментальное подтверждение данного факта невозможно по причине макроскопичности измерительных приборов. *Наличие* частицы можно зафиксировать, приведя ее в состояние с определенным импульсом. Функция (1.21) не соответствует такому состоянию. Косвенным же подтверждением проникновения микрочастицы в классически недоступную область является туннельный эффект (см. ниже). В случае бесконечно высокой «ступеньки» ($V_0 \rightarrow \infty$) частица «выталкивается» из классически недоступной области ($D \rightarrow 0$) и мы приходим к задаче примера 1.2. \square

Задачи для самостоятельного решения

2. Частица массы m движется в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a . Найти наиболее вероятные

положения частицы, приведенной в первое возбужденное состояние.
 (Ответ: два положения на расстоянии $\frac{a}{4}$ от стенок.)

3. Частица массы m движется в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a . Найти среднее значение кинетической энергии частицы в произвольном стационарном состоянии.

(Ответ: $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$, где $n = 1, 2, \dots$)

4*. Частица массы m движется в одномерной прямоугольной асимметричной потенциальной яме конечной глубины:

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & x < 0; \\ 0, & 0 \leq x \leq a; \\ V_2, & x > 0. \end{cases}$$

Найти энергии стационарных состояний частицы. При каком условии в яме не будет связанных состояний? Каково максимальное число уровней при заданных V_1 , V_2 и a ?

(Ответ: энергии вычисляются по формуле (1.25); k_n — положительный корень уравнения

$$k_n a = \pi(n+1) - \arcsin \frac{\hbar k_n}{\sqrt{2mV_1}} - \arcsin \frac{\hbar k_n}{\sqrt{2mV_2}}, \quad n = 0, 1, \dots,$$

определяемый численно).

5*. Частица массы m падает вниз с ускорением g на абсолютно упругую горизонтальную поверхность. Найти энергии стационарных состояний.
 (Ответ: $E_n = (mg^2 \hbar^2 / 2)^{1/3} \alpha_{n+1}$; $n = 0, 1, \dots$; $\text{Ai}(\alpha_k) = 0$ — см. (Д.12).)

1.3. Прохождение через потенциальный барьер

В данном разделе мы исследуем некоторые аспекты *инфинитного движения*, а именно преодоление частицей потенциального барьера.

Пусть поле $V(x)$ таково, что потенциальная кривая, изображенная на рис. 1.5, имеет в ограниченной области «горб», а в асимптотике ($x \rightarrow \pm\infty$) выходит на плато, т.е. движение частиц становится свободным. Такой «горб» принято называть *потенциальным барьером*.

Поставим задачу исследования процесса преодоления барьера частицей массой m , движущейся с полной энергией E . Последовательное рассмотрение требует моделирования частицы волновым пакетом и решения соответствующей нестационарной задачи (см. пример 4.8 части 1).

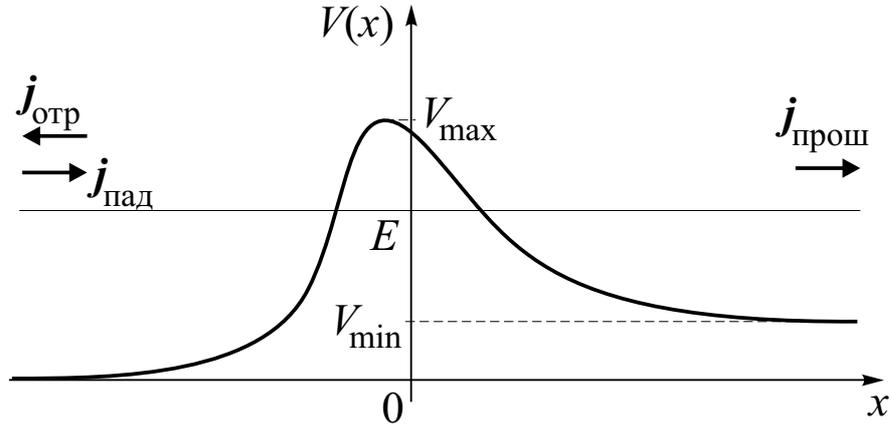


Рис. 1.5.

Более простой, однако, представляется *стационарная* задача о рассеянии барьером *установившегося* потока частиц. После преодоления барьера поток разбивается на прошедший и отраженный. Данный процесс удобно характеризовать следующими наблюдаемыми величинами: *коэффициентом отражения*, представляющего собой отношение плотности потока отраженных частиц к плотности потока падающих частиц

$$R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}}\Big|_{x \rightarrow -\infty}, \quad \text{где } j_{\text{отр}} = |j_{\text{отр}}|; \quad j_{\text{пад}} = |j_{\text{пад}}| \quad (1.28)$$

и *коэффициентом прохождения*, представляющего собой отношение плотности потока прошедших частиц к плотности потока падающих частиц

$$D = \frac{j_{\text{прош}}|_{x \rightarrow +\infty}}{j_{\text{пад}}|_{x \rightarrow -\infty}}, \quad \text{где } j_{\text{прош}} = |j_{\text{прош}}|. \quad (1.29)$$

Плотности потока предполагаются взятыми на асимптотически удаленных расстояниях в области выхода потенциалов на плато.

Для вычисления плотностей потока необходимо знать волновую функцию рассеиваемой на барьере частицы. Согласно условию задачи, в области $x \rightarrow +\infty$ имеются *только прошедшие* через барьер частицы (с положительным импульсом). Поэтому асимптотический вид волновой функции при $x \rightarrow +\infty$ представляет собой плоскую волну:

$$\Psi(x)|_{x \rightarrow +\infty} = e^{ik'x}, \quad (1.30)$$

где

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_{\text{min}})}}{\hbar}. \quad (1.31)$$

Функция (1.31) нормирована на совпадение плотности потока прошедших частиц с классической скоростью (см. пример 4.3 части 1):

$$j_{\text{прош}}|_{x \rightarrow +\infty} = \frac{\hbar k'}{m}. \quad (1.32)$$

В задаче о рассеянии частиц на потенциальном барьере в качестве граничного условия к уравнению Шредингера (1.1) необходимо использовать асимптотический вид³ волновой функции (1.30).

В области $x \rightarrow -\infty$ имеются как падающие, так и отраженные частицы. Согласно примеру 4.4 части 1, одномерное свободное движение будет двукратно вырождено по знаку проекции импульса. Поэтому асимптотический вид решения уравнения Шредингера в этой области представляется следующим образом:

$$\Psi(x)|_{x \rightarrow -\infty} = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (1.33)$$

где волновое число k определено в (1.10). Первое слагаемое в (1.33) соответствует потоку падающих частиц, второе — потоку отраженных частиц. Плотности потоков вычисляются опять же в соответствии с формулой примера 4.8 части 1:

$$j_{\text{пад}}|_{x \rightarrow -\infty} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2; \quad j_{\text{отр}}|_{x \rightarrow -\infty} = \frac{\hbar k}{m} |B|^2. \quad (1.34)$$

Зная константы A и B , легко вычислить коэффициенты отражения и прохождения по формулам (1.28), (1.29), (1.32) и (1.34):

$$\boxed{R = \frac{|B|^2}{|A|^2}; \quad D = \frac{k'}{k} |A|^{-2}.} \quad (1.35)$$

Пример 1.5. Доказать, что в ситуации с установившимся потоком

$$\boxed{R + D = 1.} \quad (1.36)$$

Решение. В стационарных состояниях плотность вероятности не зависит от времени. Поэтому, в соответствии с уравнением непрерывности, плотность потока вероятности не меняется на всем протяжении оси Ox :

$$j_x(x, t) = j = \text{const}. \quad (1.37)$$

³ Строго говоря, в (1.30) должен стоять произвольный постоянный множитель, который сократится при вычислении R и D по формулам (1.28) и (1.29) в силу линейности и однородности уравнения Шредингера.

Предлагаем на основании (1.33) самостоятельно убедиться в том, что в области $x \rightarrow -\infty$ падающий и отраженный потоки *не интерферируют*, т.е.

$$j_x|_{x \rightarrow -\infty} = (j_{\text{пад},x} + j_{\text{отр},x})|_{x \rightarrow -\infty} = (j_{\text{пад}} - j_{\text{отр}})|_{x \rightarrow -\infty}. \quad (1.38)$$

В области $x \rightarrow +\infty$ поток является целиком прошедшим:

$$j_x|_{x \rightarrow +\infty} = j_{\text{прош}}|_{x \rightarrow +\infty} \quad (1.39)$$

Из общих формул (1.28), (1.29) на основании (1.37)–(1.39) получаем фундаментальное соотношение (1.36), выражающее закон сохранения вещества при рассеянии частиц на барьере. \square

Рассеяние микрочастиц на потенциальном барьере существенно отличается от аналогичного макроскопического процесса.

Рассмотрим, во-первых, случай $V_{\min} < E < V_{\max}$. В макромире *все без исключения* частицы упруго отражались бы от барьера, т.е. $R = 1$. В микромире частицы могут с ненулевой вероятностью проникать в классически недоступную подбарьерную область (см. замечание в конце предыдущего пункта). Если барьер не слишком широк (порядка де-Бройлевской длины), то частицы будут обнаруживаться с ненулевой вероятностью и на противоположной стороне барьера, т.е. $D \neq 0$. Частицы как бы «просачиваются» сквозь барьер, или туннелируют. Такое прохождение частиц сквозь потенциальный барьер, запрещенное классической механикой, называется *туннельным эффектом*. Данный эффект имеет чисто квантовую природу. Сам *процесс* прохождения сквозь барьер принципиально не может быть изучен экспериментально, т.к. в области барьера импульс не имеет определенного значения и не измеряется классическими приборами. Экспериментально фиксируется лишь сам *факт* прохождения электрона сквозь барьер. Туннельный эффект используется в электронике (туннельные диоды), при вырывании электронов с поверхности проводника внешним электрически полем (холодная эмиссия); в теории Гамова вероятность α -распада вычисляется в предположении о туннельном механизме выхода α -частицы из ядра; сильное постоянное или низкочастотное электрическое поле приводит к *туннельной ионизации* атомов.

Рассмотрим теперь случай $E > V_{\max}$. В макромире *все без исключения* частицы продолжили бы свое движение в положительном направлении оси Ox , изменив разве что свой импульс, т.е. $D = 1$. В микромире несохранение импульса во внешнем силовом поле приводит к тому, что в области барьера появляются состояния со всевозможными значениями импульса, в том числе и с *другим его знаком*. Потоки с одинаковыми сонаправленными импульсами интерферируют друг с

другом, что в конечном итоге приводит к появлению наблюдаемых отраженных частиц, т.е. $R > 0$. Такой классически запрещенный эффект называется *надбарьерным отражением*. Для появления надбарьерного эффекта существенен не столько барьер, сколько наличие силового поля в ограниченной области пространства. Поэтому *отражать может не только барьер, но и яма*.

Таким образом, рассеяние микрочастиц на потенциальном барьере имеет скорее оптическую аналогию, чем классическую механическую. Потенциальный барьер можно уподобить среде с переменным показателем преломления.

Пример 1.6. *Показать, что если частицы налетают на барьер (рис. 1.5) из области $x \rightarrow +\infty$, то при неизменных остальных условиях коэффициенты отражения и прохождения остаются прежними.*

Решение. В общем случае произвольного стационарного состояния асимптотический вид волновой функции представляет собой суперпозицию двух плоских волн, распространяющихся в обе стороны оси Ox :

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= A_- e^{ikx} + B_- e^{-ikx} \quad \text{при } x \rightarrow -\infty; \\ \Psi(x) &= A_+ e^{ik'x} + B_+ e^{-ik'x} \quad \text{при } x \rightarrow +\infty.\end{aligned}\tag{1.40}$$

Поскольку эти выражения представляют собой асимптотические формы одного и того же решения линейного дифференциального уравнения, между коэффициентами A_- , B_- и A_+ , B_+ существует линейная связь. Пусть $A_+ = \alpha A_- + \beta B_-$, где α , β — постоянные (вообще говоря, комплексные), зависящие от конкретного поля $V(x)$. Аналогичное соотношение для B_+ можно тогда написать на основании соображений, связанных с вещественностью стационарного уравнения Шредингера (1.1): если $\Psi(x)$ есть решение данного уравнения Шредингера, то и $\Psi^*(x)$ есть решение того же уравнения. Асимптотические виды

$$\begin{aligned}\Psi^*(x) &= A_-^* e^{-ikx} + B_-^* e^{ikx} \quad \text{при } x \rightarrow -\infty; \\ \Psi^*(x) &= A_+^* e^{-ik'x} + B_+^* e^{ik'x} \quad \text{при } x \rightarrow +\infty\end{aligned}$$

отличаются от (1.40) лишь обозначением постоянных коэффициентов; поэтому имеем $B_+^* = \alpha B_-^* + \beta A_-^*$, или $B_+ = \alpha^* B_- + \beta^* A_-$. Таким образом, коэффициенты в (1.40) связаны друг с другом соотношениями вида

$$A_+ = \alpha A_- + \beta B_-; \quad B_+ = \beta^* A_- + \alpha^* B_-.\tag{1.41}$$

Для частиц, налетающих на барьер в положительном направлении (рис. 1.5), в функциях (1.40) следует положить $B_+ = 0$; при этом

$B_-/A_- = -\beta^*/\alpha^*$. Во противоположном случае полагаем $A_- = 0$, тогда $A_+/B_+ = \beta/\alpha^*$. Для коэффициентов отражения в соответствии с (1.35) имеем:

$$R_1 = \left| \frac{B_-}{A_-} \right|^2 = \left| \frac{\beta^*}{\alpha^*} \right|^2, \quad R_2 = \left| \frac{A_+}{B_+} \right|^2 = \left| \frac{\beta}{\alpha^*} \right|^2,$$

откуда ясно, что

$$\boxed{R_1 = R_2.} \quad (1.42)$$

Для коэффициентов прохождения в силу (1.36) получаем аналогичное соотношение. \square

Соотношения (1.36), (1.42) выражают модельно-независимые свойства рассеяния на потенциальном барьере.

Рассмотрим теперь отражение на потенциальном барьере заданной формы $V(x)$ и вычислим коэффициенты отражения и прохождения как функции энергии частицы, имеющей массу m .

Пример 1.7. *Определить коэффициент отражения частицы от прямоугольной потенциальной ступеньки высоты V_0 (рис. 1.6) в зависимости от энергии частицы E (частицы движутся слева направо).*

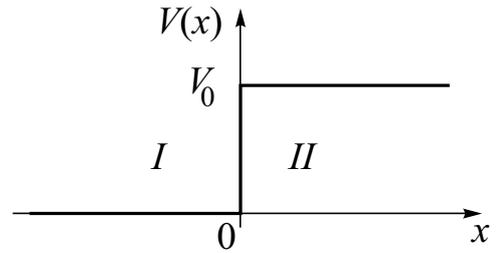


Рис. 1.6.

Решение. Введем систему координат в соответствии с рис. 1.6. Потенциальная кривая является кусочно-непрерывной с конечным разрывом в нуле. Поэтому уравнение Шредингера необходимо решить отдельно для каждой из областей I и II , а затем сшить эти решения в точке разрыва $x = 0$ в соответствии с (1.2).

В области I присутствуют как падающая, так и отраженная волны. Поэтому решение $\Psi_I(x)$ выбираем в виде (1.33).

Решение в области II существенно зависит от знака $E - V_0$ (заметим, что в отличие от общего случая в данной задаче $V_{\max} = V_{\min} = V_0$).

При $E < V_0$ область II является классически недоступной, поэтому удовлетворяющее стандартным условиям решение с точностью до постоянного множителя выбираем в виде

$$\Psi_{II}(x) = e^{-\kappa x}, \quad (1.43)$$

где κ определяется соотношением (1.22). Легко проверить, что в состоянии (1.43) плотность потока равна нулю. Поэтому коэффициент

прохождения $D = 0$. Рекомендуем самостоятельно получить выражения для A и B и на основании (1.35) независимо от (1.36) показать, что $R = 1$.

Таким образом, если область II недоступна в классическом смысле, то частицы полностью отражаются от ступеньки. Вместе с тем, вблизи ее края остается ненулевая вероятность обнаружения частиц (см. пример 1.4). Здесь можно провести аналогию с полным внутренним отражением в оптике.

При $E > V_0$ область II является классически доступной, поэтому решение $\Psi_{II}(x)$ выбираем в виде (1.30) и сшиваем с $\Psi_I(x)$. Рекомендуем также самостоятельно получить

$$A = \frac{k + k'}{2k}, \quad B = \frac{k - k'}{2k}.$$

Коэффициенты отражения и прохождения вычисляем по формулам (1.35):

$$R(E) = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 = \left(\frac{\sqrt{\xi} - \sqrt{\xi - 1}}{\sqrt{\xi} + \sqrt{\xi - 1}} \right)^2;$$

$$D(E) = \frac{4kk'}{(k + k')^2} = \frac{4\sqrt{\xi(\xi - 1)}}{(\sqrt{\xi} + \sqrt{\xi - 1})^2}, \quad \text{где } \xi = \frac{E}{V_0}.$$

Очевидно, что $R \neq 0$, т.е. имеет место надбарьерное отражение. В данной ситуации оно будет аналогично частичному отражению световой волны при ее нормальном падении на границу раздела сред с различными показателями преломления. Предлагаем самостоятельно убедиться в справедливости (1.36) и построить графики зависимостей $R(E)$ и $D(E)$.

В предельном случае классической механики ($\hbar \rightarrow 0$) коэффициент отражения должен обратиться в нуль. Между тем полученное выражение для $R(E)$ вовсе не содержит постоянной Планка! Классическому пределу соответствует случай, когда дебройлевская длина волны частицы $\lambda = 2\pi\hbar/p$ мала по сравнению с характеристическими размерами рассеивающих неоднородностей потенциала, т.е. по сравнению с расстояниями, на которых заметно меняется поле $V(x)$. В рассматриваемом же схематическом примере это расстояние равно нулю (в точке разрыва), так что предельный переход не может быть произведен. \square

Пример 1.8. Частицы массой m каждая рассеиваются на прямоугольном симметричном потенциальном барьере ширины a и высоты V_0 (рис. 1.7). Определить коэффициенты отражения и преломления как функции энергии E .

Решение. Введем систему координат в соответствие с рис. 1.7. Стационарное уравнение Шредингера необходимо отдельно решать в каждой из трех областей: *I*, *II*, *III*. В области *I* общий вид решения дается выражением (1.33). Для области *III* решение удобно представить в виде

$$\Psi_{III}(x) = e^{ik(x-a)},$$

которое отличается от (1.30) постоянным множителем e^{-ika} , а $k' = k = \sqrt{2mE}/\hbar$ вследствие симметрии барьера. Решение в области *II* существенно зависит от знака $E - V_0$.

При $E < V_0$ подбарьерная область является классически недоступной. Поэтому решение уравнения Шредингера выбирается в виде

$$\Psi_{II}(x) = F e^{\varkappa x} + G e^{-\varkappa x}, \quad (1.44)$$

где \varkappa определяется соотношением (1.22). В отличие от предыдущего примера, здесь мы обязаны сохранить и растущее решение вследствие *конечности ширины барьера*.

После сшивания решений в точках $x = 0$ и $x = a$ в соответствии с (1.2) получаем следующую систему уравнений для коэффициентов A , B , F и G :

$$\begin{cases} \left[\begin{array}{l} A + B = F + G; \\ A - B = \frac{i\varkappa}{k} (G - F); \end{array} \right. & (1.45) \\ \left[\begin{array}{l} F e^{\varkappa a} + G e^{-\varkappa a} = 1; \\ F e^{\varkappa a} - G e^{-\varkappa a} = \frac{ik}{\varkappa}. \end{array} \right. \end{cases}$$

Легко заметить, что систему (1.45) можно разбить на две удобные для решения подсистемы. После необходимых вычислений (проделать самостоятельно!) имеем:

$$A = \operatorname{ch} \varkappa a + \frac{i}{2} \left[\frac{\varkappa}{k} - \frac{k}{\varkappa} \right] \operatorname{sh} \varkappa a; \quad B = -\frac{i}{2} \left[\frac{\varkappa}{k} + \frac{k}{\varkappa} \right] \operatorname{sh} \varkappa a.$$

В соответствии с (1.35),

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{(k^2 + \varkappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \varkappa a}{4k^2 \varkappa^2 + (k^2 + \varkappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \varkappa a}; \quad (1.46)$$

$$D = |A|^{-2} = \frac{4k^2 \varkappa^2}{4k^2 \varkappa^2 + (k^2 + \varkappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \varkappa a}. \quad (1.47)$$

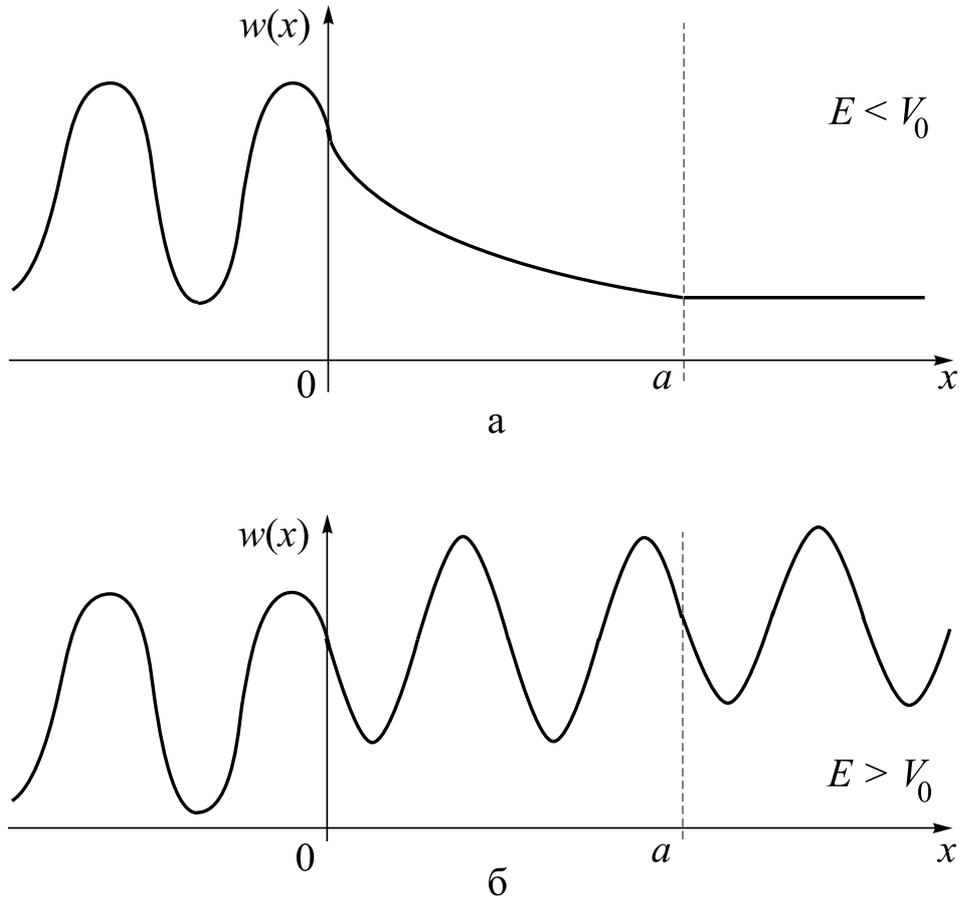


Рис. 1.8.

Видно, что $D \neq 0$, т.е. будет иметь место *туннельный эффект*. Его можно объяснить тем, что глубина проникновения частицы под барьер сравнима с шириной барьера (см. график плотности вероятности на рис. 1.8а).

При $E > V_0$ область II также является классически доступной, поэтому решение уравнения Шредингера необходимо выбрать в виде

$$\Psi_{II}(x) = F e^{ik''x} + G e^{-ik''x}, \quad (1.48)$$

где

$$k'' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar}}.$$

Решение (1.44) отличается от (1.48) заменой

$$\kappa \rightarrow ik''.$$

Такую же замену нужно сделать и в (1.46), (1.47): □

$$R = \frac{(k^2 + k''^2)^2 \sin^2 k''a}{4k^2k''^2 + (k^2 + k''^2)^2 \sin^2 k''a}; \quad (1.49)$$

$$D = \frac{4k^2 k''^2}{4k^2 k''^2 + (k^2 + k''^2)^2 \sin^2 k'' a}. \quad (1.50)$$

В общем случае $R \neq 0$, т.е. имеет место надбарьерное отражение. Однако при некоторых значениях энергии барьер становится абсолютно прозрачным: $R = 0$. Опять же прослеживается оптическая аналогия с прохождением световой волны сквозь слой вещества с иным показателем преломления: при специально подобранной толщине слоя наблюдается «просветление». Предлагаем самостоятельно найти эти значения, а также исследовать следующие частные предельные случаи:

- 1) $E \rightarrow \infty$ (фактически $E \gg V_0$);
- 2) случай барьера малой прозрачности $(V_0 - E)ma^2/\hbar^2 \gg 1$;
- 3) $E \rightarrow 0$ (фактически $E \ll ma^2 V_0^2/\hbar^2$, $E \ll V_0$);
- 4) $ma^2 V_0/\hbar^2 \ll 1$ и $ma^2 E/\hbar^2 \ll 1$;
- 5) $E \approx V_0$.

Проверьте непосредственно, что $R + D = 1$.

Задачи для самостоятельного решения

6. Решить задачу примера 1.7 для частиц, движущихся в противоположном направлении, т.е. «скатывающихся» со ступеньки.

7. Решить задачу примера 1.8 для частиц, пролетающих над симметричной прямоугольной потенциальной ямой ширины a и глубины V_0 . (Ответ: см. (1.49), (1.50), полагая

$$k'' = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}.$$

Энергия отсчитывается от краев ямы.)

8. Частицы массой m каждая рассеиваются на δ -образном потенциальном барьере $V(x) = \Omega\delta(x)$. Найти коэффициенты отражения и прохождения как функции энергии частиц.

(Ответ: $R(E) = (m\Omega)^2/[(\hbar^2 k)^2 + (m\Omega)^2]$.)

9*. Частицы массы m каждая рассеиваются на системе из двух одинаковых δ -образных потенциальных барьеров $V(x) = \Omega[\delta(x) + \delta(x - a)]$. При каких значениях энергии частиц данная система будет прозрачной для них?

1.4. Линейный гармонический осциллятор

Линейным гармоническим осциллятором называется частица, совершающая движение в потенциальной яме $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ (рис. 1.9а),

где m — масса частицы, ω — частота осциллятора. В *классическом* случае частица совершала бы движение по закону $x(t) = x_0 \cos(\omega t + \varphi_0)$. Амплитуда x_0 однозначно определяется энергией осциллятора, которая в свою очередь может принимать *непрерывный* ряд значений на интервале от 0 до ∞ .

В микромире стационарная постановка задачи требует решения уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_E(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi_E(x) = E \Psi_E(x) \quad (1.51)$$

с граничными условиями $\Psi_E(\pm\infty) = 0$ вследствие финитного движения.

В соответствии с общей теорией энергетический спектр осциллятора будет *дискретным*:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.52)$$

Уровни расположены эквидистантно на расстоянии $\hbar\omega$ друг от друга. В соответствии с общим свойством одномерного финитного движения они *не вырождены*, т.е. каждому соответствует только одно состояние:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \Psi_n^{(\text{osc})} \left(\frac{x}{x_0} \right), \quad (1.53)$$

где

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (1.54)$$

— «естественная» единица длины для осциллятора, позволяющая существенно упростить все математические выкладки переходом к безразмерным величинам;

$$\Psi_n^{(\text{osc})}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}; \quad (1.55)$$

$H_n(\xi)$ — полином Чебышева — Эрмита (см. приложение Б). Функции (1.53) нормированы на единицу и ортогональны на всей вещественной оси:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{n'}(x) \Psi_n(x) dx = \delta_{n'n}. \quad (1.56)$$

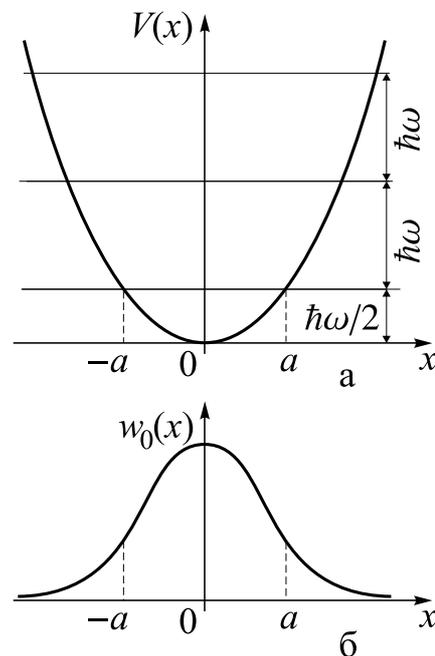


Рис. 1.9.

Основное состояние осциллятора имеет ненулевую энергию $E_0 = \hbar\omega/2$ (отсчитывается от «дна» потенциальной ямы). Это так называемая энергия нулевых колебаний. Наличие нулевых колебаний не противоречит принципу неопределенностей, не позволяющему частице опуститься на «дно». Основному состоянию соответствует волновая функция

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right). \quad (1.57)$$

Поскольку при удалении от положения равновесия потенциальная энергия монотонно возрастает непрерывным образом, волновые функции будут ненулевыми и в классически недоступной области. График плотности вероятности в основном состоянии дается в качестве примера на рис. 1.9б. Он представляет собой гауссову кривую.

Пример 1.9. *Линейный одномерный гармонический осциллятор приведен в основное состояние. Найти вероятность его обнаружения в классически доступной области.*

Решение. Будем предполагать массу осциллятора m и частоту ω известными. Найдем границы классически доступной области $\pm a$ (см. рис. 1.9) из условия

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m\omega^2 a^2 &= E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}; \\ a &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \stackrel{(1.54)}{=} x_0. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Таким образом, можно сказать, что единицей длины для осциллятора служит размер классически доступной области в основном состоянии.

Для величины вероятности получаем:

$$\begin{aligned} P &= \int_{-a}^{+a} w_0(x) dx = \int_{-a}^{+a} \Psi_0^2(x) dx \stackrel{(1.57)}{=} \\ &= \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \int_{-a}^{+a} \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right) dx = \\ &= \left(\frac{x}{x_0} = t\right) \stackrel{(1.58)}{=} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-t^2} dt = \operatorname{erf}(1) \approx 0,8427. \end{aligned}$$

При вычислении интеграла использовано свойство четности подынтегральной функции. Ответ выражается через табулированную функцию ошибок (см. формулу (А.6) части 1). Легко заметить, что результат не зависит ни от массы осциллятора, ни от его частоты.

Пример 1.10. Проверить соотношение неопределенностей для координаты и импульса в случае с одномерным линейным гармоническим осциллятором.

Решение. Полиномы Чебышева – Эрмита имеют четность $(-1)^n$, поэтому в соответствии с (1.55) $\langle x \rangle = 0$. В связанных стационарных состояниях любой системы $\langle p \rangle = 0$ (см. задачу 42 части 1). Поэтому

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle; \quad \langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle$$

Вид осцилляторного потенциала позволяет кардинально упростить вычисление этих средних величин с использованием теоремы о вириале (пример 5.2 части 1). Для осциллятора она дает

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{m} = m\omega^2 \langle x^2 \rangle. \quad (1.59)$$

С другой стороны, по определению стационарных состояний

$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.60)$$

После совместного решения (1.59) и (1.60) получаем:

$$\langle x^2 \rangle = x_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{x_0^2} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots,$$

где x_0 определено в (1.54). Заметим, что специфический вид потенциальной энергии позволил получить эти результаты без использования трудоемкого интегрирования.

Выполнение соотношения неопределенностей здесь очевидно. Более того, в основном состоянии ($n = 0$) это соотношение превращается в *строгое равенство*. Состояния, минимизирующие соотношение неопределенностей, называются *когерентными*. Примером служит основное состояние осциллятора. \square

Эффектами Штарка называются изменения, происходящие со связанной заряженной системой под воздействием внешнего электрического поля. Ниже мы рассмотрим эффект Штарка для заряженного осциллятора в постоянном электрическом поле.

Пример 1.11. Масса осциллятора m , частота ω , заряд e . На осциллятор действует постоянное однородное электрическое поле напряженности \mathcal{E} , направленное вдоль оси Ox . Найти энергии стационарных состояний и соответствующие им волновые функции.

Решение. Уравнение Шредингера для осциллятора в электрическом поле

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_E(x)}{dx^2} + \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - e\mathcal{E}x \right) \Psi_E(x) = E \Psi_E(x) \quad (1.61)$$

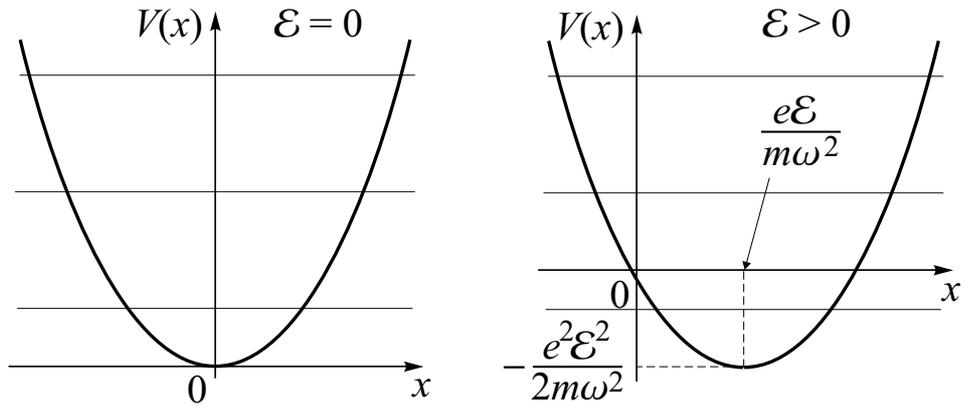


Рис. 1.10.

можно упростить, если в потенциальной энергии выделить полный квадрат:

$$\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - e\mathcal{E}x = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}. \quad (1.62)$$

После замен

$$x \rightarrow X = x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}; \quad E \rightarrow E' = E + \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}; \quad \Psi_E(x) \rightarrow \Phi_{E'}(X) \quad (1.63)$$

мы приходим к уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi_{E'}(X)}{dX^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \Phi_{E'}(X) = E' \Phi_{E'}(X), \quad (1.64)$$

по своей структуре *полностью совпадающему с уравнением Шредингера* (1.51) для такого же осциллятора без поля. Причину данного феномена легко понять, проанализировав (1.62): потенциальная кривая осциллятора под действием внешнего электрического поля претерпевает лишь *параллельный перенос* (рис. 1.10); форма кривой, определяющая частоту, остается *неизменной*. Таким образом, у осциллятора смещается положение равновесия и начало отсчета энергии. Это целиком отражается в заменах (1.63), но не в конечном уравнении (1.64) и граничных условиях к нему (вспомните их).

Решение (1.64) легко строится на основании (1.52), (1.53) и (1.63):

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}; \quad (1.65)$$

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \Psi_n^{(\text{osc})} \left(\frac{x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}}{x_0} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.66)$$

Эффект Штарка для осциллятора в постоянном поле заключается в смещении всех энергетических уровней вниз на одинаковую величину, не исчезающую в классическом пределе. \square

Ниже рассматривается случай двумерного осциллятора, имеющего в главных осях потенциальную энергию

$$V(x, y) = \frac{1}{2} m(\omega_X^2 x^2 + \omega_Y^2 y^2). \quad (1.67)$$

Пример 1.12. *Масса двумерного осциллятора m , частоты в главных осях ω_X, ω_Y (см. (1.67)). Найти энергии стационарных состояний и соответствующие им волновые функции. Рассмотреть отдельно случай кругового осциллятора: $\omega_X = \omega_Y = \omega$.*

Решение. Уравнение Шредингера с потенциалом (1.67)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi_E(x, y) + \frac{1}{2} m(\omega_X^2 x^2 + \omega_Y^2 y^2) \Psi_E(x, y) = E \Psi_E(x, y) \quad (1.68)$$

допускает разделение переменных в декартовых координатах:

$$\begin{aligned} \Psi_E(x, y) &= \Psi_X(x) \Psi_Y(y); \\ E &= E_X + E_Y; \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_X(x) + \frac{1}{2} m\omega_X^2 x^2 \Psi_X(x) &= E_X \Psi_X(x); \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} \Psi_Y(y) + \frac{1}{2} m\omega_Y^2 y^2 \Psi_Y(y) &= E_Y \Psi_Y(y). \end{aligned}$$

Очевидно, что задача двумерного осциллятора сводится теперь к задаче двух *независимых* одномерных осцилляторов. Поэтому сразу можно записать ее решение:

$$E_{n_X n_Y} = \hbar\omega_X \left(n_X + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_Y \left(n_Y + \frac{1}{2} \right), \quad n_X, n_Y = 0, 1, \dots; \quad (1.69)$$

$$\Psi_{n_X n_Y}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{x_0 y_0}} \Psi_{n_X}^{(\text{osc})} \left(\frac{x}{x_0} \right) \Psi_{n_Y}^{(\text{osc})} \left(\frac{y}{y_0} \right), \quad (1.70)$$

где

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_X}}; \quad y_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_Y}}.$$

Рассмотрим два случая.

Таблица 1.1

n	0	1	2	...
$n_X; n_Y$	0; 0	0; 1	0; 2	...
		1; 0	1; 1	...
			2; 0	...

1. $\omega_X \neq \omega_Y$. Каждому значению энергии соответствует единственное состояние, т.е. энергетический спектр будет *невыврожденным*.

2. $\omega_X = \omega_Y = \omega$. В случае кругового осциллятора $x_0 = y_0$, а соотношения (1.69), (1.70) преобразуются:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1), \quad n = n_X + n_Y, \quad n_X, n_Y = 0, 1, \dots; \quad (1.71)$$

$$\Psi_{n_X n_Y}(x, y) = \frac{1}{x_0} \Psi_{n_X}^{(\text{osc})}\left(\frac{x}{x_0}\right) \Psi_{n_Y}^{(\text{osc})}\left(\frac{y}{x_0}\right), \quad (1.72)$$

Теперь энергия определяется не каждым из квантовых чисел n_X, n_Y по отдельности, а *только их суммой* $n = n_X + n_Y$. Вместе с тем, состояния, соответствующие одному и тому же значению n , будут *различаться* значениями n_X и n_Y (таблица 1.1). Таким образом, в круговом осцилляторе энергетические уровни *вырождаются* с кратностью $n + 1$. \square

Задачи для самостоятельного решения

10. Проверить соотношение $\langle \partial_\omega \hat{H} \rangle = \partial_\omega E_n$ для стационарных состояний осциллятора.

11. Проверить соотношение $\langle \partial_\varepsilon \hat{H} \rangle = \partial_\varepsilon E_n$ для стационарных состояний осциллятора во внешнем поле (см. пример 1.11).

12. Решить задачу примера 1.12 для трехмерного осциллятора с частотами в главных осях ω_x, ω_y и ω_z .

(*Ответ:* в сферическом осцилляторе $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right)$, $n = 0, 1, \dots$;

кратность вырождения $\frac{1}{2}(n + 1)(n + 2)$.)

13*. Две частицы массами m_1 и m_2 , способные совершать одномерное движение, соединены пружиной жесткости κ . Найти энергии стационарных состояний такой системы и соответствующие им волновые функции.

1.5. Бозе-операторы

Данный раздел предназначен для углубленного изучения и при первом чтении может быть пропущен. В нем излагается алгебраический метод решения задачи о линейном гармоническом осцилляторе.

Запишем уравнение Шредингера для осциллятора (1.51) в безразмерных переменных. Координату и импульс выразим в «осцилляторных» единицах — x_0 и \hbar/x_0 соответственно:

$$\frac{1}{2} \hat{p}_\xi^2 \psi(\xi) + \frac{1}{2} \xi^2 \psi(\xi) = \varepsilon \psi(\xi), \quad (1.73)$$

где x_0 определяется соотношением (1.54);

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}; \quad \hat{p}_\xi = -i \frac{d}{d\xi}. \quad (1.74)$$

Очевидно, что

$$[\xi, \hat{p}_\xi] = i. \quad (1.75)$$

Введем так называемые *бозе-операторы*:

$$\hat{b} = \frac{\xi + i\hat{p}_\xi}{\sqrt{2}}; \quad \hat{b}^\dagger = \frac{\xi - i\hat{p}_\xi}{\sqrt{2}}. \quad (1.76)$$

Они неэрмитовы, взаимно сопряжены и согласно (1.75) удовлетворяют коммутационному соотношению

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1. \quad (1.77)$$

Уравнение (1.73) в бозе-операторах после преобразований (1.76) с учетом (1.77) примет вид:

$$\hat{b}^\dagger \hat{b} \psi(\xi) = \varepsilon' \psi(\xi), \quad (1.78)$$

где $\varepsilon' = \varepsilon - \frac{1}{2}$. Произведение $\hat{b}^\dagger \hat{b}$ будет очевидно эрмитовым оператором.

Проясним «физический» смысл бозе-операторов. Предположим, что $\psi(\xi)$ есть собственная функция оператора $\hat{b}^\dagger \hat{b}$, соответствующая собственному значению ε' . Подействуем на (1.78) слева оператором \hat{b}^\dagger и преобразуем левую часть в соответствии с (1.77). В результате получим:

$$\hat{b}^\dagger \hat{b} [\hat{b}^\dagger \psi(\xi)] = (\varepsilon' + 1) [\hat{b}^\dagger \psi(\xi)]. \quad (1.79)$$

Из сопоставления (1.78) и (1.79) можно сделать вывод о том, что $\hat{b}^\dagger \psi(\xi)$ тоже является собственной функцией $\hat{b}^\dagger \hat{b}$, соответствующей уже другому собственному значению $\varepsilon' + 1$ (оно отмечено индексом у функции):

$$\hat{b}^\dagger \psi_{\varepsilon'}(\xi) = C_{\varepsilon'}^+ \psi_{\varepsilon'+1}(\xi). \quad (1.80)$$

Заменяя в наших предыдущих рассуждениях \hat{b}^\dagger на \hat{b} , нетрудно показать, что

$$\hat{b}\psi_{\varepsilon'}(\xi) = C_{\varepsilon'}^-\psi_{\varepsilon'-1}(\xi). \quad (1.81)$$

Константы $C_{\varepsilon'}^\pm$ в (1.80), (1.81) будут найдены ниже.

Таким образом, можно утверждать, что оператор \hat{b}^\dagger добавляет осциллятору квант *колебательной* энергии, равный в обычных единицах $\hbar\omega$, — так называемый *фонон*. Оператор \hat{b} отнимает такой же фонон. Поэтому операторы \hat{b}^\dagger и \hat{b} называются соответственно операторами рождения и уничтожения фонона. Последовательным действием этих операторов можно показать *эквидистантность* спектра осциллятора.

Вычислим теперь энергию основного состояния, которое мы тоже определим через бозе-операторы. Прежде всего заметим, что спектр ε ограничен снизу минимумом осцилляторного потенциала, так что существует минимальное собственное значение ε_0 и соответственно функция $\psi_{\varepsilon_0}(\xi) \equiv \psi_0(\xi)$. Но согласно (1.81), $\hat{b}\psi_{\varepsilon_0} \sim \psi_{\varepsilon_0-1}(\xi)$, т.е. можно построить и не существующее состояние $\psi_{\varepsilon_0-1}(\xi)$. Для устранения данного противоречия необходимо положить

$$\hat{b}\psi_{\varepsilon_0}(\xi) \stackrel{\text{def}}{=} 0 \quad (1.82)$$

и рассматривать это тождество как определение основного состояния (или состояния *фононного вакуума*). Для нахождения $\psi_{\varepsilon_0}(\xi)$ запишем уравнение (1.82) в явном виде с учетом (1.74) и (1.76):

$$\frac{d}{d\xi} \psi_{\varepsilon_0}(\xi) = -\xi\psi_{\varepsilon_0}(\xi). \quad (1.83)$$

Это линейное однородное дифференциальное уравнение *первого порядка* решается существенно проще по сравнению с (1.73). Его нормированное на единицу решение

$$\psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2} \quad (1.84)$$

в обычных единицах переходит в «традиционное» (1.57). Непосредственная подстановка (1.84) в (1.73) дает искомое $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}$ (или $\varepsilon' = 0$) — энергию нулевых колебаний в безразмерных единицах. Таким образом, энергетический спектр осциллятора в безразмерных единицах

$$\boxed{\varepsilon_n = n + \frac{1}{2}; \quad \varepsilon'_n = n; \quad n = 0, 1, \dots} \quad (1.85)$$

находится в полном соответствии с (1.52). Если сопоставить (1.85) и (1.78), то оператору $\hat{b}^\dagger\hat{b}$ можно придать смысл *оператора числа фоно-*

нов в осцилляторе, т.к. его собственными значениями являются осцилляторные квантовые числа:

$$\boxed{\hat{b}^\dagger \hat{b} \psi_n(\xi) = n \psi_n(\xi).} \quad (1.86)$$

Вычислим теперь нормировочные константы в (1.80), (1.81). Для этого потребуем, чтобы функция $\psi_{n+1}(\xi)$ была нормирована на единицу при условии, что $\psi_n(\xi)$ уже нормирована. Воспользуемся дираковскими обозначениями:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n+1}^2 d\xi &\equiv \langle \psi_{n+1} | \psi_{n+1} \rangle \stackrel{(1.80)}{=} |C_n^+|^2 \langle \hat{b}^\dagger \psi_n | \hat{b}^\dagger \psi_n \rangle = \\ &= |C_n^+|^2 \langle \psi_n | \hat{b} \hat{b}^\dagger | \psi_n \rangle \stackrel{(1.77)}{=} |C_n^+|^2 \langle \psi_n | \hat{b}^\dagger \hat{b} + 1 | \psi_n \rangle \stackrel{(1.86)}{=} |C_n^+|^2 (n+1) = 1, \end{aligned}$$

откуда $C_n^+ = (n+1)^{-1/2}$. Аналогичные действия с (1.81) дают $C_n^- = n^{-1/2}$. Таким образом, мы получаем следующие правила действия бозе-операторов в пространстве стационарных состояний осциллятора:

$$\boxed{\hat{b}^\dagger \psi_n(\xi) = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(\xi); \quad \hat{b} \psi_n(\xi) = \sqrt{n} \psi_{n-1}(\xi).} \quad (1.87)$$

Согласно уравнению (1.73), $\psi_n(\xi) \equiv \Psi_n^{(\text{osc})}(\xi)$. Исходя из (1.76) и (1.87), можно получить следующие соотношения для $\Psi_n^{(\text{osc})}(\xi)$, не пользуясь их явным видом (1.55) и свойством (Б.4):

$$\begin{aligned} \xi \Psi_n^{(\text{osc})}(\xi) &= \sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1}^{(\text{osc})}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1}^{(\text{osc})}(\xi); \\ \frac{d}{d\xi} \Psi_n^{(\text{osc})}(\xi) &= \sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1}^{(\text{osc})}(\xi) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1}^{(\text{osc})}(\xi). \end{aligned} \quad (1.88)$$

С помощью оператора рождения фотона и волновой функции основного состояния можно построить и волновую функцию первого возбужденного состояния в соответствии с (1.87):

$$\boxed{\Psi_n^{(\text{osc})}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^\dagger)^n \Psi_0^{(\text{osc})}(\xi).} \quad (1.89)$$

Из выражения (1.89) можно получить формулу Родрига для полиномов Чебышева – Эрмита (Б.3).

Эффект Штарка для заряженного осциллятора в постоянном однородном электрическом поле подробно в примере 1.11. Основная идея решения задачи заключалась в сдвиге начала координат в новое положение равновесия и сведении ситуации к задаче об осцилляторе без

поля. Покажем, что эта задача может быть решена и с использованием техники бозе-операторов.

Вначале перейдем в уравнении (1.61) к безразмерным переменным:

$$\frac{1}{2} \hat{p}_\xi^2 \psi(\xi) + \frac{1}{2} \xi^2 \psi(\xi) - \sqrt{2} \gamma \xi \psi(\xi) = \varepsilon \psi(\xi), \quad (1.90)$$

где $\gamma = e\mathcal{E}x_0/(\sqrt{2}\hbar\omega)$ и выразим его через бозе-операторы по аналогии с (1.78):

$$[\hat{b}^\dagger \hat{b} - \gamma(\hat{b} + \hat{b}^\dagger)]\psi(\xi) = \varepsilon' \psi(\xi). \quad (1.91)$$

Введем теперь новые операторы \hat{B} , \hat{B}^\dagger , связанные с бозе-операторами \hat{b} , \hat{b}^\dagger соотношениями

$$\hat{b} = \hat{B} + \gamma; \quad \hat{b}^\dagger = \hat{B}^\dagger + \gamma. \quad (1.92)$$

Нетрудно убедиться в том, что они тоже будут бозе-операторами, т.е. для них выполняется соотношение (1.77). Перепишем теперь (1.91) через новые операторы (1.92):

$$\hat{B}^\dagger \hat{B} \varphi(\xi) = \varepsilon'' \varphi(\xi), \quad (1.93)$$

где $\varepsilon'' = \varepsilon' + \gamma^2 = \varepsilon - \frac{1}{2} + \gamma^2$. По своей структуре уравнение (1.93) идентично уравнению (1.78) с известным решением (см. (1.86)). Поэтому решение (1.90) можно записать теперь сразу:

$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2} - \gamma^2.$$

В обычных единицах оно совпадает с (1.65). Использованный формализм удобен в квантовой теории поля.

1.6. Сохранение четности

Как известно, в случае инвариантности потенциала относительно инверсии $[V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})]$ четность состояний будет интегралом движения (см. пример 5.7 части 1). Поэтому при таких условиях представляется целесообразным введение определенной четности уже в общий вид решения стационарного уравнения Шредингера. В одномерных задачах число *независимых* интегралов движения не превышает одного. Следовательно, *четность стационарных состояний одномерного финитного движения однозначно определяется их энергией* (но не наоборот). Напомним, что *основное состояние всегда является четным*.

Пример 1.13. Решить задачу примера 1.2, учитывая сохранение четности.

Решение. Если начало координат поместить в середину потенциальной ямы, то потенциал (1.6) станет четной функцией координаты:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} < x < +\frac{a}{2}; \\ +\infty, & x \leq -\frac{a}{2}, \quad x \geq +\frac{a}{2}. \end{cases} \quad (1.94)$$

Теперь следует решать уравнение (1.7) с граничными условиями

$$\Psi(\pm a/2) = 0. \quad (1.95)$$

Общий вид *четных* решений (1.7) выражается косинусом:

$$\Psi^{(+)}(x) = A^{(+)} \cos(kx), \quad (1.96)$$

где k определяется (1.10). Применение граничных условий (1.95) к (1.96) дает следующие допустимые значения k :

$$k_n^{(+)} = \frac{\pi}{a} (2n + 1); \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.97)$$

Общий вид *нечетных* решений (1.7) выражается синусом:

$$\Psi^{(-)}(x) = A^{(-)} \sin(kx), \quad (1.98)$$

откуда

$$k_n^{(-)} = \frac{2\pi n}{a}; \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.99)$$

Таким образом, мы приходим к известному результату (1.17), полученному в примере 1.2. \square

Применение закона сохранения четности особенно эффективно при решении более сложных задач.

Пример 1.14. Частица массы m совершает финитное движение в симметричной прямоугольной потенциальной яме глубины V_0 и ширины a . Найдите энергии стационарных состояний частицы.

Решение. Будем использовать идеи и обозначения из примера 1.4.

Если начало координат поместить в середину потенциальной ямы, то потенциал станет четной функцией координаты:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} < x < +\frac{a}{2}; \\ V_0, & x \leq -\frac{a}{2}, \quad x \geq +\frac{a}{2}. \end{cases} \quad (1.100)$$

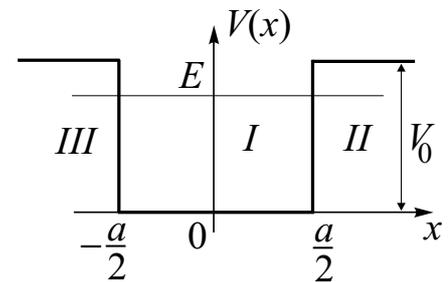


Рис. 1.11.

Поэтому нужно решать уравнение (1.1) с потенциалом (1.100) и граничными условиями

$$\Psi(\pm\infty) = 0.$$

Две точки разрыва разбивают потенциал на три области (рис. 1.11). Однако вследствие симметрии достаточно ограничиться только областями I и II и *одной* точкой разрыва $x = +\frac{a}{2}$.

В области II решение уравнения Шредингера (1.1) дается выражением (1.21). В области I его *четные* решения имеют вид (1.96), а *нечетные* — (1.98). Сшивание этих решений в правой точке разрыва приводит к следующим трансцендентным уравнениям для k :

$$\begin{aligned} k_n^{(+)}a &= \pi(2n+1) - 2 \arcsin \frac{\hbar k_n^{(+)}}{\sqrt{2mV_0}}; \\ k_n^{(-)}a &= 2\pi(n+1) - 2 \arcsin \frac{\hbar k_n^{(-)}}{\sqrt{2mV_0}}; \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Их можно теперь и объединить:

$$k_n a = \pi(n+1) - 2 \arcsin \frac{\hbar k_n}{\sqrt{2mV_0}}; \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.101)$$

Энергии стационарных состояний вычисляются по корням уравнения (1.101) в соответствии с (1.25). Рекомендуем сравнить уравнение (1.101) с полученным в задаче 4.

В нашем примере использование закона сохранения четности имеет преимущество в том, что при сшивании можно решать систему из *двух* уравнений, как в примере 1.4, а не *четырёх* (см. пример 1.8).

Предлагаем самостоятельно проанализировать энергетический спектр по аналогии с примером 1.4. \square

Заметим, что в соответствии с принятой в условии осцилляционной теоремы нумерацией уровней, четность состояний всегда будет определяться четностью квантового числа n :

$$\Psi_n(-x) = (-1)^n \Psi_n(x). \quad (1.102)$$

Поэтому *при сохранении четности плотность вероятности всегда будет четной функцией координат*. В соответствии с осцилляционной теоремой при сохранении четности *основное состояние всегда будет четным*.

Из (1.102) можно заключить также, что при сохранении четности среднее значение координаты будет нулевым (точнее — совпадает с центром симметрии).

Данный метод решения применим *только для связанных состояний*. В состояниях с определенным импульсом четность *не сохраняется*. Поэтому, например, даже граничные условия к задаче рассеяния на потенциальном барьере оказываются неинвариантными относительно инверсии.

Задачи для самостоятельного решения

14. Частица массы m движется в потенциальной яме

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & x \leq 0; \\ \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, & x > 0. \end{cases}$$

Найти энергии стационарных состояний и соответствующие им волновые функции.

15. Частица массы m находится в δ -образной потенциальной яме $V(x) = -\Omega\delta(x)$. Найти энергии связанных стационарных состояний.

(*Ответ:* единственный уровень $E_0 = -\frac{m\Omega^2}{2\hbar^2}$.)

16*. Решить задачу об осцилляторе с учетом закона сохранения четности.

(*Указание:* четные решения уравнения (1.73) искать в виде $\psi_+(\xi) = f_+(\xi^2)$, нечетные — в виде $\psi_-(\xi) = \xi f_-(\xi^2)$; уравнение (1.73) свести к вырожденному гипергеометрическому (A.1).)

Глава 2.

Трехмерные задачи. Движение в центральном поле

2.1. Общие положения

Уравнение Шредингера является уравнением второго порядка в частных производных. Если физическая система обладает многими степенями свободы, то задача нахождения собственных функций и собственных значений становится гораздо более трудоемкой по сравнению с одномерным случаем. Однако наличие у гамильтониана определенных свойств симметрии позволяет в ряде случаев существенно облегчить решение уравнения. Может оказаться, что удачная замена переменных приведет к уравнению в частных производных с *разделяющимися переменными*; задача собственных функций и собственных значений распадается при этом на несколько задач с меньшим числом переменных, т.е. более простых.

Такая ситуация имеет место при исследовании движения частицы массы μ в центрально-симметричном поле, когда потенциальная энергия зависит от расстояния до силового центра $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, но не от направления радиус-вектора \mathbf{r} ($U(\mathbf{r}) = U(|\mathbf{r}|) = U(r)$). В этом случае стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

из-за сферической симметрии потенциала удобно решать в сферической системе координат с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r^2} + U(r), \quad (2.2)$$

где

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right), \quad (2.3)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2 \quad (2.4)$$

— оператор квадрата орбитального момента (напомним, что $\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}]$). Первые два слагаемых в гамильтониане (2.2) являются оператором кинетической энергии; $\nabla_{\theta, \varphi}^2$ в (2.4) — угловая часть оператора Лапласа в сферической системе координат. Поскольку $\hat{\mathbf{L}}^2$ действует лишь на угловые переменные, он коммутирует с гамильтонианом (2.2), а значит, \mathbf{L}^2 является интегралом движения. Интегралом движения в центральном поле, как легко видеть, является и проекция орбитального момента на выделенное направление (ось Oz). Соответствующий оператор в сферической системе координат имеет вид:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (2.5)$$

Заметим, что \mathbf{L}^2 и L_z измеримы совместно, поскольку их операторы коммутируют. Таким образом, система, описываемая гамильтонианом (2.2) (т.е. частица в центральном поле), может находиться в состояниях с определенной энергией, определенным значением квадрата орбитального момента и определенным значением проекции момента на выделенное направление. Волновые функции этих состояний являются одновременно собственными функциями всех трех вышеперечисленных операторов.

Собственные функции и собственные значения операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z могут быть найдены из решения уравнений

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \Psi(\theta, \varphi) = \mathbf{L}^2 \Psi(\theta, \varphi); \quad \hat{L}_z \Psi(\theta, \varphi) = L_z \Psi(\theta, \varphi) \quad (2.6)$$

на единичной сфере. Собственными значениями операторов (2.4) и (2.5) являются

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= \hbar^2 l(l+1), & l &= 0, 1, 2, \dots; \\ L_z &= \hbar m, & m &= 0, \pm 1, \dots \end{aligned}$$

Им соответствуют сферические функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (см. приложение В). Индекс l называют орбитальным, а m — магнитным квантовыми числами.

Так как волновая функция стационарных состояний частицы с определенными значениями \mathbf{L}^2 , L_z в произвольном поле сферической симметрии должна одновременно быть собственной функцией операторов $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z , то уравнения (2.6) будут автоматически удовлетворяться, если решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (2.2) искать в виде:

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi) = f_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),} \quad (2.7)$$

где $f_{El}(r)$ — радиальная волновая функция, которая определяется видом потенциальной энергии $U(r)$ и зависит от значений полной энергии E и орбитального момента l . Поскольку в поле сферической симметрии нет выделенных направлений в пространстве, то радиальная функция $f(r)$ не будет зависеть от значения магнитного квантового числа m . Представление $\Psi(\mathbf{r})$ в виде (2.7) позволяет разделить переменные r и (θ, φ) в уравнении Шредингера (2.1). Подставляя (2.7) в (2.1) и учитывая (2.2) и (2.4), для функций $f_{El}(r)$ получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) f_{El}(r) + \left[U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] f_{El}(r) = E f_{El}(r). \quad (2.8)$$

Граничным условием для решения уравнения (2.8) является требование конечного значения $f_{El}(r)$ в области r от 0 до ∞ .

Обычно $f_{El}(r)$ представляют в виде $f_{El}(r) = \frac{1}{r} R_{El}(r)$, что приводит к эквивалентной форме уравнения (2.8):

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} R_{El}(r) + \left[U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] R_{El}(r) = E R_{El}(r)} \quad (2.9)$$

с обязательным граничным условием $R_{El}(0) = 0$. Это уравнение называется радиальным уравнением Шредингера. По своей структуре (2.9) совпадает с одномерным уравнением Шредингера с потенциалом

$$U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}. \quad (2.10)$$

Таким образом, квантовая механика, подобно классической, позволяет в центральном поле свести трехмерную задачу к одномерной добавлением центробежного слагаемого $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$. При этом в уравнении Шредингера возникает целый неотрицательный параметр l .

На бесконечном удалении от силового центра граничное условие определяется конкретной постановкой задачи. Так, для связанных состояний $f_{El}(r)|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$, $R_{El}(r)|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$. При этом функции $f_{El}(r)$ и $R_{El}(r)$ следует нормировать на единицу условиями

$$\int_0^\infty f_{El}^2(r) r^2 dr = 1; \quad \int_0^\infty R_{El}^2(r) dr = 1. \quad (2.11)$$

Поскольку при фиксированном l магнитное квантовое число m может принимать значения $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ (всего $2l + 1$ значение), каждое из стационарных состояний с определенным значением l будет

$2l + 1$ -кратно вырождено. Состояния, относящиеся к разным значениям $l = 0, 1, 2, \dots$, принято обозначать соответственно спектроскопическими символами s, p, d, f, g и далее в алфавитном порядке. Так, например, состояния с нулевым орбитальным моментом ($l = 0$) называют s -состояниями, состояния с $l = 1$ — p -состояниями и т.д.

Оператор Гамильтона (2.2) коммутирует с оператором пространственной инверсии \hat{I} [$\hat{I}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$], имеющим два собственных значения ± 1 . В связи с этим стационарные состояния рассматриваемых систем могут быть разделены на четные и нечетные. При операции инверсии координата r не меняется, а угловые переменные преобразуются по закону $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$, поэтому

$$\begin{aligned} \hat{I}\Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi) &= f_{El}(r)\hat{I}Y_{lm}(\theta, \varphi) = f_{El}(r)Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = \\ &= (-1)^l f_{El}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l \Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Из (2.12) следует, что волновые функции в случае центральных полей являются собственными функциями оператора инверсии. Все состояния с четными l относятся к четным состояниям, состояния с нечетными l являются нечетными состояниями.

Разберем несколько примеров.

Пример 2.1. *Записать оператор кинетической энергии в сферической системе координат.*

Решение. Запишем в декартовых координатах тождество, справедливое для произвольных векторных операторов $\hat{\mathbf{A}}$ и $\hat{\mathbf{B}}$:

$$(\hat{\mathbf{A}} \times \hat{\mathbf{B}})^2 = \sum_{jk} \hat{A}_j \hat{B}_k (\hat{A}_j \hat{B}_k - \hat{A}_k \hat{B}_j) \quad (j, k = x, y, z). \quad (2.13)$$

Подставляя в (2.13) вместо $\hat{\mathbf{A}}$ и $\hat{\mathbf{B}}$ соответственно операторы \mathbf{r} и \mathbf{p} и применяя повторно коммутационное соотношение $[r_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$ (проделать самостоятельно!), получаем:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]^2 = r^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})^2 + i\hbar(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}). \quad (2.14)$$

Поскольку $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, $x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} = r \frac{\partial}{\partial r}$, то, учитывая коммутационное соотношение $[r, \hat{p}_r] = i\hbar$ (доказать самостоятельно!), получим:

$$(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} = r\hat{p}_r + i\hbar,$$

где оператор \hat{p}_r определен в (2.3);

$$(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})^2 - i\hbar(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) \equiv ((\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) - i\hbar)(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}) = r\hat{p}_r(r\hat{p}_r + i\hbar) = r^2 \hat{p}_r^2. \quad (2.15)$$

Как можно видеть из (2.15), правая часть (2.14) равна $r^2(\hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{p}_r^2)$. Разделив обе части (2.14) на r^2 , получим

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \hat{\mathbf{L}}^2/r^2,$$

откуда

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\mu r^2}.$$

Данный результат был использован в (2.2) при построении гамильтониана в сферической системе координат. Напомним, что вид $\hat{\mathbf{L}}^2$ в сферической системе координат приведен в (2.4). \square

Пример 2.2. *Найти энергии стационарных состояний (энергетический спектр) и соответствующие им волновые функции для пространственного ротатора с моментом инерции I .*

Решение. Ротатор имеет только две вращательные степени свободы, которые удобно характеризовать углами θ, φ сферической системы координат. Движение ротатора является свободным, и поэтому гамильтониан можно построить по аналогии с гамильтонианом свободного поступательного движения с заменой \mathbf{p} на $\hat{\mathbf{L}}$ и массы μ — на I :

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I}.$$

С этим гамильтонианом стационарное уравнение Шредингера для ротатора принимает вид

$$\frac{1}{2I} \hat{\mathbf{L}}^2 \Psi(\theta, \varphi) = E \Psi(\theta, \varphi)$$

или

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \Psi(\theta, \varphi) = 2IE \Psi(\theta, \varphi). \quad (2.16)$$

Уравнение (2.16) является уравнением для собственных функций и собственных значений ¹ оператора $\hat{\mathbf{L}}^2$, которые нам известны:

$$\begin{aligned} 2IE_l &= \hbar^2 l(l+1), & l &= 0, 1, \dots; \\ \Psi_{lm}(\theta, \varphi) &= Y_{lm}(\theta, \varphi), & m &= 0, \pm 1, \dots, \pm l. \end{aligned}$$

¹ В данном случае им соответствует произведение $2IE$, где множитель E подлежит определению.

Таким образом, каждому энергетическому уровню ротатора

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$

соответствуют состояния, которые задаются сферическими функциями $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (базис ротатора). Энергетический уровень E_l вырожден с кратностью $2l+1$. Основное состояние ($l=0$) является невырожденным. \square

Пример 2.3. Частица массой μ совершает свободное движение с определенным значением квадрата орбитального момента. Найти ненормированные волновые функции стационарных состояний с энергией E .

Решение. Свободное движение осуществляется в поле с постоянным (для определенности — нулевым) потенциалом, который является частным случаем постоянного поля. Поэтому достаточно найти регулярное в нуле решение уравнения (2.9):

$$R'' - \frac{l(l+1)}{r^2} R + k^2 R = 0. \quad (2.17)$$

Здесь $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$. Использование подстановки $R(r) = \sqrt{r}Z(r)$ с введением новой переменной $x = kr$ приводит уравнение (2.17) к уравнению для функций Бесселя (Д.10) с полуцелым параметром:

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

Его регулярное в нуле решение выражается сферической функцией Бесселя (Д.11).

Таким образом, ненормированную волновую функцию стационарного состояния свободного движения с определенным значением квадрата орбитального момента можно представить следующим образом:

$$\Psi_{klm}(\mathbf{r}) = j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (2.18)$$

В примере 4.5 части 1 были получены волновые функции стационарных состояний свободного движения с определенным импульсом. Они имели вид *плоских* волн и сильно отличались от (2.18). Причина такого различия в том, что \mathbf{p} и \mathbf{L}^2 неизмеримы совместно. Волновые функции (2.18) иногда называются *сферическими* волнами. \square

Плоская волна допускает разложение по сферическим волнам (2.18). Приведем без вывода соответствующую формулу:

$$e^{i\mathbf{k}r} = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\theta_k, \varphi_k) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2.19)$$

где углы θ_k, φ_k задают направление вектора \mathbf{k} в сферической системе координат. Формула (2.19) четко иллюстрирует совместную неизмеримость \mathbf{p} и \mathbf{L}^2 : состояние с *определенным* импульсом есть суперпозиция состояний с *различными* наблюдаемыми значениями квадрата орбитального момента и его проекции (суммирование по соответствующим числам l и m).

2.2. Водородоподобный атом

Важнейшей задачей теории центрального поля является задача о движении заряженной частицы в кулоновском поле притяжения $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ (водородоподобный атом). Стационарное уравнение Шредингера при этом имеет вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi). \quad (2.20)$$

Если рассматривать водородоподобный ион, то под массой μ в уравнении (2.20) следует понимать приведенную массу $\mu = m_e m_p / (m_e + m_p)$ электрона и точечного ² ядра ($m_e/m_p \approx 1836$, и поэтому $\mu \approx m_e$), под r — их относительное расстояние, под E — энергию относительного движения. Центр масс при этом движется свободно, а потому его движение не представляет сейчас интереса.

На рис. 2.1 показан примерный вид эффективного потенциала (2.10) радиального уравнения Шредингера (2.9) в кулоновском поле притяжения. При $E < 0$ движение финитно, т.к. электрон находится в «потенциальной яме», образованной возрастающим кулоновским потенциалом и квадратично убывающим центробежным отталкиванием.

Если решения уравнения (2.20) искать в виде (2.7), переменные разделяются, и мы получаем следующие собственные функции, нормированные условием (2.11):

$$f_{nl}(r) = N_{nl} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l \exp \left(-\frac{Zr}{na_0} \right) {}_1F_1(-n+l+1; 2l+2; 2Zr/na_0); \quad (2.21)$$

и собственные значения энергии:

$$\boxed{E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{n^2 a_0}}, \quad (2.22)$$

² Эффект, обусловленный неточечностью ядра, будет рассмотрен в части 3.

где $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ — боровский радиус (для электрона, движущегося в поле бесконечно тяжелого ядра, $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$);

$$N_{nl} = \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^{3/2} \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}}$$

— нормировочный множитель; ${}_1F_1$ — вырожденная гипергеометрическая функция (см. приложение А) — предлагаем самостоятельно выразить (2.21) через полиномы Лагерра (см. приложение Г); $n = 1, 2, \dots$ — главное квантовое число. Как видно из (2.22), значения энергии определяются только этим квантовым числом и не зависят от орбитального момента. Такое вырождение по орбитальному квантовому числу l («случайное» вырождение) обусловлено спецификой кулоновского поля и в центральных потенциалах другого вида не встречается.

При фиксированном n число l принимает значения $l = 0, 1, \dots, n-1$ (напомним, что при фиксированном l магнитное квантовое число $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$, т. е. $(2l+1)$ значение). Таким образом, кратность вырождения уровня E_n равна

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (2.23)$$

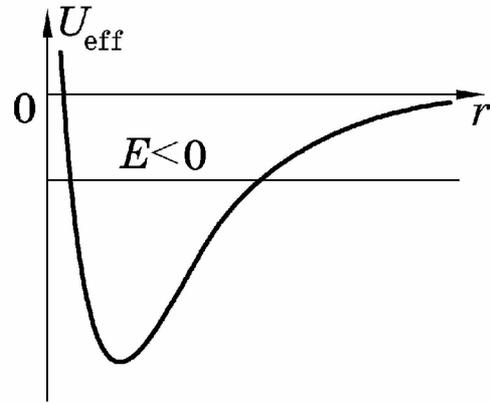


Рис. 2.1.

Спектр (2.22) иногда называется Ридберговским. Число его уровней бесконечно. Ограничивающее его сверху нулевое значение энергии является *точкой сгущения* уровней.

Радиальные волновые функции (2.21), как и должно быть в центральном поле, не зависят от магнитного квантового числа m . Они характеризуются главным n и орбитальным l квантовыми числами по схеме nl , причем для l надо использовать буквенный спектроскопический символ. Так, $1s$ -состояние означает состояние с $n = 1$ и $l = 0$ и т.д. Поскольку E_n минимально при $n = 1$, основным является $1s$ -состояние.

Разберем несколько примеров.

Пример 2.4. Используя (2.21), получить явный вид волновой функции основного состояния водородоподобного атома и показать, что она нормирована на единицу. Выписать полную волновую функцию $1s$ -состояния.

Решение. Из (2.21) следует, что $f_{10}(r) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{Zr}{a_0} \right)$. Тогда

$$\int_0^\infty f_{10}^2(r) r^2 dr = \frac{4Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty r^2 \exp \left(-\frac{2Zr}{a_0} \right) dr = \frac{1}{2} \underbrace{\int_0^\infty t^2 e^{-t} dt}_{2!} = 1,$$

что находится в согласии с (2.11) (проводилась замена переменных $t = \frac{2Z}{a_0} r$; $dt = \frac{2Z}{a_0} dr$).

Поскольку в s -состоянии $l = 0$, то m также равно нулю. Полная волновая функция находится в соответствии с (2.7):

$$\boxed{\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = \Psi_{1s}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp \left(-\frac{Zr}{a_0} \right)}, \quad (2.24)$$

где учтено, что $Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. □

Пример 2.5. Найти наивероятнейшее удаление электрона в $1s$ -состоянии от ядра с зарядом Ze .

Решение.

1 способ.

Согласно (2.7), полная волновая функция $1s$ -состояния

$$\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = f_{10}(r) Y_{00}(\theta, \varphi),$$

где радиальная функция $f_{10}(r)$ определена в (2.21). Поскольку $Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, $1s$ -состояние изотропно, т.е. сферически симметрично, и ответ не изменится, если по телесному углу провести интегрирование. Используя условия нормировки (B.6), (2.11), получаем:

$$\int |\Psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 d^3r = \int_0^\infty r^2 dr \int |\Psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 d\Omega = \int_0^\infty \underbrace{f_{10}^2(r) r^2}_{w_{10}(r)} dr = 1. \quad (2.25)$$

Наличие множителя r^2 в (2.25) обусловлено тем, что в сферической системе координат элемент объема $d^3r = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$. Поскольку квадрат модуля волновой функции имеет вероятностный смысл, обведенное фигурной скобкой в (2.25) следует рассматривать как плотность вероятности нахождения электрона в сферическом слое радиуса r толщиной dr :

$$w_{10}(r) = f_{10}^2(r) r^2 = R_{10}^2(r) \quad (2.26)$$

(напомним, что $R(r) = rf(r)$). Из (2.21) следует, что радиальное распределение электронной плотности в $1s$ -состоянии имеет вид

$$w_{10}(r) \sim r^2 \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right).$$

Таким образом, задача заключается в поиске максимума функции $w_{10}(r)$. График функции $w_{10}(r)$ представлен на рис. 2.2. Максимальное значение w_{10} , как несложно показать, достигается при $r_0 = \frac{a_0}{Z}$. Это и есть наиболее вероятное удаление электрона от силового центра. В атоме водорода оно равняется боровскому радиусу.

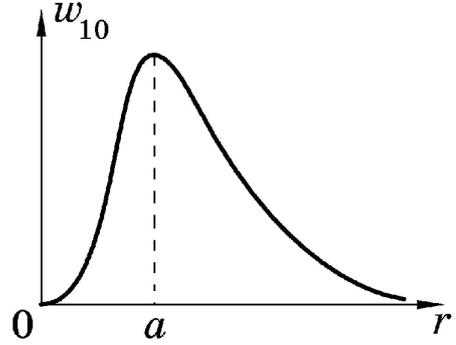


Рис. 2.2.

2 способ.

Если вместо функции $f_{10}(r)$ использовать $R_{10}(r) = r^{-1}f_{10}(r)$, то функция $R_{10}(r)$ будет удовлетворять одномерному уравнению Шредингера (2.9). Исходя из вероятностного смысла волновой функции, приходим к (2.26) и получаем тот же самый ответ.

Заметим, что вероятность обнаружения электрона на произвольном удалении от центра в $1s$ -состоянии всегда является ненулевой. Однако при больших r она уменьшается экспоненциально, так что реальный размер атома будет конечным. \square

Пример 2.6. Найти явный вид полных волновых функций состояний со значением главного квантового числа $n = 2$. Показать, что эти функции нормированы на единицу.

Решение. При $n = 2$ имеется 4 различных состояния: $n = 2, l = 0, m = 0$ (Ψ_{200}); $n = 2, l = 1, m = 1$ (Ψ_{211}); $n = 2, l = 1, m = 0$ (Ψ_{210}); $n = 2, l = 1, m = -1$ (Ψ_{21-1}). На основании (2.7) имеем:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{200}(\mathbf{r}) &= f_{20}(r)Y_{00}(\theta, \varphi); & (2s) \\ \Psi_{21\pm 1}(\mathbf{r}) &= f_{21}(r)Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi); \\ \Psi_{210}(\mathbf{r}) &= f_{21}(r)Y_{10}(\theta, \varphi), \end{aligned} \right\} \quad (2p) \quad (2.27)$$

где, согласно (2.21),

$$f_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right) \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right);$$

$$f_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right) \left(\frac{Zr}{a_0}\right).$$

Обратим внимание на то, что последние три функции отличаются только сферическими функциями, нормированными на единицу, согласно (В.6). Покажем теперь, что и радиальные части (2.27) также нормированы на единицу. Используя (2.27), получаем:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f_{20}^2(r)r^2 dr &= \frac{1}{2} \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) r^2 dr = \\ &= \frac{1}{2} \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{Z}{a_0}r + \frac{Z^2}{4a_0^2}r^2\right) r^2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) dr = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty t^2 \left(1 - t + \frac{1}{4}t^2\right) e^{-t} dt = \frac{1}{2} \left(2! - 3! + \frac{1}{4} \cdot 4!\right) = 1; \end{aligned}$$

$$\int_0^\infty f_{21}^2(r)r^2 dr = \frac{1}{24} \frac{Z^5}{a_0^5} \int_0^\infty r^4 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) dr = \frac{1}{24} \underbrace{\int_0^\infty t^4 e^{-t} dt}_{4!} = 1.$$

В обоих случаях проводилась замена переменных $\frac{Zr}{a_0} = t$. □

Пример 2.7. Непосредственным расчетом показать ортогональность волновых функций для $1s$ - и $2s$ -состояний водородоподобного атома.

Решение. Необходимо показать, что интеграл от произведения $\Psi_{100}(\mathbf{r})$ и $\Psi_{200}(\mathbf{r})$ равен нулю:

$$I = \int \Psi_{200}^*(r, \theta, \varphi) \Psi_{100}(r, \theta, \varphi) r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = \int_0^\infty f_{20}(r) f_{10}(r) r^2 dr = 0.$$

Используя (2.24), (2.27) и делая замену переменных $\frac{3Z}{2a_0} r = t$, получаем:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f_{20}(r) f_{10}(r) r^2 dr &= \sqrt{2} \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{3Zr}{2a_0}\right) r^2 dr = \\ &= \frac{8}{27} \sqrt{2} \int_0^\infty t^2 \left(1 - \frac{1}{3}t\right) e^{-t} dt = \frac{8}{27} \sqrt{2} \left(2! - \frac{1}{3} \cdot 6!\right) = 0, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать. □

Пример 2.8. Вычислить среднее значение r^{-1} в основном состоянии водородоподобного атома.

Решение.

1 способ.

Используя (2.24), имеем:

$$\langle r^{-1} \rangle = 4 \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^\infty r \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right) dr = \frac{Z}{a_0} \int_0^\infty t e^{-t} dt = \frac{Z}{a_0}.$$

2 способ.

Воспользуемся теоремой вириала. Согласно этой теореме, $2\bar{T} = N\bar{U}$, где \bar{T} и \bar{U} — соответственно средняя кинетическая и потенциальная энергии системы и предполагается $U(r) \sim r^N$.

В атоме водорода $U(r) = -Ze^2/r \sim r^{-1}$ и теорема вириала принимает вид:

$$\boxed{2\langle T \rangle = -\langle U \rangle} \quad (2.28)$$

в произвольном стационарном состоянии.

В $1s$ -состоянии

$$\langle T \rangle + \langle U \rangle = E_{1s} = -\frac{1}{2} Z^2 \frac{e^2}{a_0}. \quad (2.29)$$

Решая уравнения (2.28) и (2.29) относительно $\langle T \rangle$ и $\langle U \rangle$, получаем:

$$\langle U \rangle = -Ze^2 \langle r^{-1} \rangle = -Z^2 \frac{e^2}{a_0}, \quad \text{откуда} \quad \langle r^{-1} \rangle = \frac{Z}{a_0}.$$

Данный метод не требует непосредственного вычисления интегралов и удобен при рассмотрении возбужденных состояний. \square

Пример 2.9. Найти уровни энергии частицы массы μ в сферической бесконечно глубокой потенциальной яме радиуса a .

Решение. Потенциальная энергия в данной задаче имеет вид:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a; \\ +\infty, & r > a, \end{cases}$$

т.е. поле центрально-симметрично. Поэтому достаточно решить уравнение (2.9). Так как потенциальная энергия имеет разрывный характер, решение уравнения (2.9) следует искать в виде

$$R(r) = R_I(r) \quad \text{для} \quad 0 \leq r \leq a \quad \text{и} \quad R(r) = R_{II}(r) \quad \text{для} \quad r > a.$$

В связи с тем, что $U(r) = \infty$ при $r > a$, $R_{II}(r) \equiv 0$, и уравнение (2.9) необходимо решать в области $0 \leq r \leq a$ с $U(r) = 0$ и граничными

условиями $R_I(0) = 0$ и $R_I(a) = 0$. Второе граничное условие следует из стандартных условий, а именно из условия непрерывности $R(r)$ в точке $r = a$. В результате для функции $R_I(r)$ получаем уравнение (2.17). Его решение найдено в примере 2.3. Необходимо лишь дополнительно потребовать, чтобы оно обратилось в нуль в точке $r = a$.

Финитный характер движения частицы приводит к квантованию ее энергетических уровней, соответствующих заданному орбитальному квантовому числу l :

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 X_{nl}^2}{2\mu a^2}, \quad (2.30)$$

где $X_{nl} > 0$ — n -й нуль сферической функции Бесселя $j_l(x)$:

$$j_l(ka) = J_{l+\frac{1}{2}}\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a\right) = 0. \quad (2.31)$$

— см. (Д.11); $n = 1, 2, \dots$. Значения X_{nl} табулированы. Заметим, что среди всех возможных значений X_{nl} , соответствующих *различным* парам (n, l) , совпадающих нет. Таким образом, специфическое для кулоновского потенциала «случайное» вырождение в данном случае отсутствует.

В частном случае $l = 0$ (s -состояние), учитывая, что $j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$, вместо (2.31) получаем уравнение $\sin(ka) = 0$, откуда $ka = \pi n$ ($n = 1, 2, \dots$). Тогда спектр s -состояний имеет вид:

$$E_{ns} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \dots)$$

($n = 0$ не удовлетворяет физической постановке задачи). □

Задачи для самостоятельного решения

17. Найти $\langle \cos \theta \rangle$ и $\langle \cos^2 \theta \rangle$ в s -состоянии пространственного ротатора. (Ответ: $0, \frac{1}{3}$.)

18. Найти $\langle \cos^2 \theta \rangle$ в p -состоянии пространственного ротатора с $m = 0, \pm 1$. (Ответ: $\frac{3}{5}, \frac{1}{5}$.)

19. Показать ортогональность водородных функций Ψ_{200} и Ψ_{210} , Ψ_{100} и Ψ_{210} . Убедиться в неортогональности $f_{20}(r)$ и $f_{21}(r)$, $f_{10}(r)$ и $f_{21}(r)$. Объяснить причину.

20. Найти среднее значение r^n в $1s$ -состоянии водородоподобного атома ($n > -2$). (Ответ: $\frac{(n+2)!}{2^{n+1}} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^n$.)

21. Найти среднее значение r^n в $2s$ -состоянии водородоподобного атома ($n > -2$). (Ответ: $\frac{1}{8} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^n (n^2 + 3n + 4)(n+2)!$)

22. Найти среднее значение r^n в $2p$ -состоянии водородоподобного атома ($n > -4$). (Ответ: $\frac{1}{24} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^n (n+4)!$)

23. Найти средние значения \mathbf{p}^2 и r^{-1} в произвольном стационарном состоянии водородоподобного атома с главным квантовым числом n . (Ответ: $\langle \mathbf{p}^2 \rangle = \mu \frac{Z^2 e^2}{n^2 a_0}$; $\langle r^{-1} \rangle = \frac{Z}{n^2 a_0}$.)

24*. Найти дискретный спектр для электрона в поле $U(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\alpha}{r^2}$. (Ответ: $E_{nl} = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{(n - \mu_l)^2 a_0}$, где $\mu_l = \frac{\alpha \mu}{\hbar^2 (l + \frac{1}{2})}$.)

25*. Найти средний потенциал электростатического поля, создаваемого водородоподобным ионом в $1s$ -состоянии, как функцию расстояния до точечного ядра с зарядом Z . В чем состоит принципиальное отличие случая $Z = 1$ от $Z > 1$?

Ответ:

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r} - \frac{e}{r} \left\{ 1 - \left[\frac{2Z^2}{a_0^2} r^2 + \frac{2Z}{a_0} r + 1 \right] \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right) \right\} - \frac{Ze}{a_0} \left(\frac{2Ze}{a_0} + 1 \right) \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right).$$

Глава 3.

Основы теории представлений

3.1. Представление волновой функции

Задание волновой функции $\Psi_a(\mathbf{r})$ (« a » — набор квантовых чисел) в конфигурационном пространстве [координата \mathbf{r} в аргументе $\Psi_a(\mathbf{r})$] не является единственным. Фактически для *данного* состояния существенным является лишь набор квантовых чисел « a » («индекс состояния»). Сам же вид волновой функции $\Psi_a(\mathbf{r})$ вторичен и представляет собой лишь «математическое изображение» данного состояния « a ». Вместо $\Psi_a(\mathbf{r})$ для описания состояния « a » можно использовать коэффициенты $c_a(G_n)$ разложения $\Psi_a(\mathbf{r})$

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \sum_n c_a(G_n) \Phi_{G_n}(\mathbf{r}) \quad (3.1)$$

по *полной* системе собственных функций $\Phi_{G_n}(\mathbf{r})$ *любого* эрмитова оператора \hat{G} ($\hat{G}\Phi_{G_n} = G_n\Phi_{G_n}$), действующего в *том же пространстве*, в котором определены функции $\Psi_a(\mathbf{r})$. Это следует из того, что между $\Psi_a(\mathbf{r})$ и набором коэффициентов $c_a(G_n)$ существует взаимно однозначное соответствие: задание $c_a(G_n)$ однозначно определяет $\Psi_a(\mathbf{r})$ по формуле (3.1), а знание $\Psi_a(\mathbf{r})$ позволяет найти *все* $c_a(G_n)$:

$$c_a(G_n) = \int \Phi_{G_n}^*(\mathbf{r}) \Psi_a(\mathbf{r}) d^3r. \quad (3.2)$$

Упорядоченный набор $c_a(G_n)$ называется волновой функцией состояния « a » в G -представлении. Величина $|c_a(G_n)|^2$ (т.е. квадрат модуля волновой функции в G -представлении) дает распределение вероятностей различных значений величины G в состоянии, характеризуемом набором квантовых чисел « a ».

Отметим, что все сказанное здесь справедливо для оператора \hat{G} как с дискретным, так и с непрерывным спектром. В последнем случае G_n является непрерывной величиной, а суммирование в (3.1) заменяется интегрированием:

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \int c_a(G) \Phi_G(\mathbf{r}) dG; \quad (3.3)$$

$$c_a(G) = \int \Phi_G^*(\mathbf{r}) \Psi_a(\mathbf{r}) d^3r. \quad (3.4)$$

Рассмотрим теперь тот частный случай, когда $\Psi_a(\mathbf{r})$ совпадает с одной из собственных функций оператора \hat{G} , например, $\Phi_{G_m}(\mathbf{r})$. Тогда из (3.2) следует, что

$$c_a(G_n) = \int \Phi_{G_n}^*(\mathbf{r}) \Phi_{G_m}(\mathbf{r}) d^3r = \delta_{G_n G_m} = \delta_{nm}. \quad (3.5)$$

Таким образом, собственная функция оператора \hat{G} в G -представлении имеет вид δ -символа (для дискретного спектра) и δ -функции (для непрерывного спектра).

Описание состояния с помощью $\Psi_a(\mathbf{r})$ называется *координатным представлением* (\mathbf{r} -представлением). Если в качестве оператора \hat{G} используется оператор импульса $\hat{\mathbf{p}}$, преобразование (3.2) дает волновую функцию состояния « a » в *импульсном представлении* (\mathbf{p} -представлении). Напомним, что спектр оператора \mathbf{p} вещественный и непрерывный, а произвольному собственному значению \mathbf{p} соответствует собственная функция

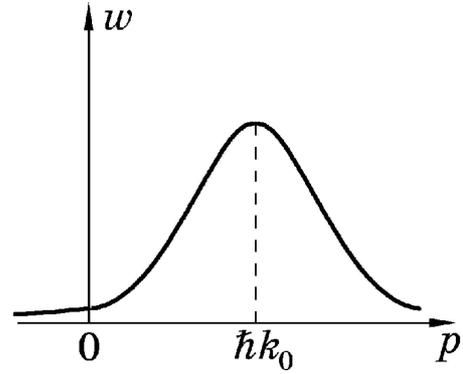


Рис. 3.1.

$$\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right). \quad (3.6)$$

Подставляя (3.6) в (3.4), получим формулу перехода от координатного представления к импульсному:

$$c_a(\mathbf{p}) = \int \Phi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \Psi_a(\mathbf{r}) d^3r = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right) \Psi_a(\mathbf{r}) d^3r. \quad (3.7)$$

Аргумент \mathbf{p} этой функции является непрерывной величиной. Видно, что переход от координатного представления к импульсному является, по сути дела, известным преобразованием Фурье волновой функции.

Если оператором \hat{G} является гамильтониан \hat{H} (предполагается, что он не зависит от времени), то преобразование (3.2) дает *энергетическое представление* волновой функции (E -представление).

Пример 3.1. Волновой пакет задается функцией:

$$\Psi(x) = \frac{1}{x_0^{1/2} \pi^{1/4}} \exp\left(ik_0x - \frac{x^2}{2x_0^2}\right).$$

Найти импульсное представление данного состояния (одномерный случай). Получить распределение по импульсам в пакете.

Решение. Используем формулу (3.6). Напомним, что в одномерном случае множитель $(2\pi\hbar)^{-3/2}$ заменяется на $(2\pi\hbar)^{-1/2}$:

$$\begin{aligned} c(p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{1}{x_0^{1/2} \pi^{1/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px + ik_0 x - \frac{x^2}{2x_0^2}\right) dx = \\ &= \frac{1}{(2\hbar x_0)^{1/2} \pi^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-i\left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right)x - \frac{x^2}{2x_0^2}\right\} dx. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Выделим в показателе экспоненты (3.8) полный квадрат:

$$\begin{aligned} \frac{x^2}{2x_0^2} + i\left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right)x &= \frac{1}{2x_0^2} \left\{x^2 + 2ixx_0^2\left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right)\right\} = \\ &= \frac{1}{2x_0^2} \left\{x^2 + 2ixx_0^2\left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right) - x_0^4\left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right)^2 + x_0^4\left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right)^2\right\} = \\ &= \frac{1}{2x_0^2} \left\{x + ix_0^2\left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right)\right\}^2 + \frac{x_0^2}{2} \left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right)^2. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Заметим также, что при произвольной комплексной константе α_0

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(t+\alpha_0)^2} dt = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi}. \quad (3.10)$$

Подставляя (3.9) в (3.8) и учитывая (3.10), получаем импульсное представление волнового пакета:

$$c(p) = \sqrt{\frac{x_0}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left\{-\frac{x_0^2}{2} \left(\frac{p}{\hbar} - k_0\right)^2\right\}$$

(рекомендуем самостоятельно проделать соответствующие выкладки).
Распределение по импульсам

$$w(p) = |c(p)|^2 = \frac{x_0}{\hbar\sqrt{\pi}} \exp\left\{-\frac{x_0^2}{\hbar^2} (p - \hbar k_0)^2\right\}$$

имеет гауссову форму с параметрами $\hbar k_0$ (средний импульс) и $\frac{\hbar^2}{2x_0^2}$ (ширина). График показан на рис. 3.1. Предлагаем самостоятельно убедиться в выполнении условия нормировки $\int_{-\infty}^{+\infty} w(p) dp = 1$. \square

Пример 3.2. Найти распределение по импульсам в основном состоянии водородоподобного иона с зарядом Z .

Решение. Волновая функция основного состояния ($1s$) в координатном представлении имеет вид

$$\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{Z|\mathbf{r}|}{a_0}\right), \quad (3.11)$$

где a_0 — борковский радиус. Подставляя (3.11) в (3.7), получим волновую функцию $1s$ -состояния в импульсном представлении:

$$c_{1s}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{Z}{2\hbar a_0}\right)^{3/2} \int \exp\left\{-\frac{Z|\mathbf{r}|}{a_0} - \frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right\} d^3r. \quad (3.12)$$

Для вычисления интеграла (3.12) направим ось Oz вдоль вектора \mathbf{p} и перейдем в сферическую систему координат (в этом случае угол θ отсчитывается от вектора \mathbf{p} и $\mathbf{p}\mathbf{r} = pr \cos \theta$, $d^3r = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$):

$$c_{1s}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{Z}{2\hbar a_0}\right)^{3/2} \int_0^\infty \int_0^\pi r^2 \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{i}{\hbar}pr \cos \theta\right) \sin \theta d\theta dr \int_0^{2\pi} d\varphi. \quad (3.13)$$

Последний интеграл в (3.13) равен 2π . Интегрирование по углу θ осуществляется с использованием замены $\cos \theta = t$ (при этом $\sin \theta d\theta = -dt$; $\cos 0 = 1$; $\cos \pi = -1$):

$$\int_0^\pi \exp\left(-\frac{i}{\hbar}pr \cos \theta\right) \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 e^{-\frac{i}{\hbar}prt} dt = \frac{i\hbar}{pr} \left(e^{-ipr/\hbar} - e^{ipr/\hbar}\right); \\ \int_0^\infty r \exp\left\{-\left(\frac{Z}{a_0} \mp \frac{i}{\hbar}p\right)r\right\} dr = \left(\frac{Z}{a_0} \mp \frac{i}{\hbar}p\right)^{-2}. \text{ После алгебраических преобразований из выражения (3.13) получаем:}$$

$$c_{1s}(\mathbf{p}) = \frac{2i\hbar}{\pi p} \left(\frac{Z}{2\hbar a_0}\right)^{3/2} \left\{ \left[\frac{Z}{a_0} + \frac{i}{\hbar}p\right]^{-2} - \left[\frac{Z}{a_0} - \frac{i}{\hbar}p\right]^{-2} \right\} = \\ = -\frac{4\hbar}{\pi p} \left(\frac{Z}{2\hbar a_0}\right)^{3/2} \operatorname{Im} \left(\frac{Z}{a_0} + \frac{i}{\hbar}p\right)^{-2} = \frac{8}{\pi} \left(\frac{a_0}{2\hbar Z}\right)^{3/2} \left[1 + \left(\frac{a_0 p}{\hbar Z}\right)^2\right]^{-2}.$$

Распределение по импульсам (плотность вероятности) дается выражением

$$w_{1s}(\mathbf{p}) = |c_{1s}(\mathbf{p})|^2 = \frac{8}{\pi^2} \left(\frac{a_0}{\hbar Z}\right)^3 \left[1 + \left(\frac{a_0 p}{\hbar Z}\right)^2\right]^{-4}.$$

Предлагаем самостоятельно убедиться в выполнении условия нормировки $\int w_{1s}(\mathbf{p})d^3p = 1$ и найти наимвероятнейшее значение импульса. \square

Пример 3.3. Квантовая система находится в состоянии, описываемом в полярных координатах волновой функцией $\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{19\pi}}(3 + \cos \varphi)$. Записать ее в энергетическом представлении по базису плоского ротатора с моментом инерции I и пояснить смысл величин $|c(E_m)|^2$.

Решение. Разложим функцию $\Phi(\varphi)$ по базисным функциям плоского ротатора $\Psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ ($m = 0, \pm 1, \dots$; спектр дискретный: $E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$). Применяя формулу Эйлера, получаем:

$$\Phi(\varphi) = 3\sqrt{\frac{2}{19}}\Psi_0(\varphi) + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{19}}\{\Psi_1(\varphi) + \Psi_{-1}(\varphi)\},$$

т. е. $c(E_0) = 3\sqrt{\frac{2}{19}}$, $c(E_{\pm 1}) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{19}}$. В остальных случаях ($|m| > 1$) $c(E_m) = 0$. Другими словами, волновая функция в E -представлении изображается бесконечным столбцом. $|c(E_m)|^2$ дает вероятность w_m обнаружения состояния $\Psi_m(\varphi)$ в состоянии $\Psi(\varphi)$. В частности, в нашей задаче при каждом измерении энергии будет получаться одно из двух значений энергии: $E_0 = 0$ (основное состояние) или $E_{\pm 1}$ (первое возбужденное состояние). Вероятности их обнаружения

$$w_0 = |c(E_0)|^2 = \frac{18}{19};$$

$$w_{\pm 1} = 2|c(E_{\pm 1})|^2 = \frac{1}{19} \text{ (двукратное вырождение).}$$

Как и следовало ожидать, выполняется условие нормировки $\sum_m w_m = 1$. \square

Задачи для самостоятельного решения

26. Частица массы m находится в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме шириной a . Найти волновые функции стационарных состояний в импульсном представлении. (*Ответ:* $c_n = \sqrt{\pi a \hbar} \frac{(-1)^n e^{-ipa/\hbar} - 1}{(pa)^2 - (\pi \hbar n)^2}$; $n = 1, 2, \dots$).

27. Линейный гармонический осциллятор (масса — m , частота — ω) находится в основном состоянии. Найти импульсное представление волновой функции. (Ответ: $c_0(p) = \frac{1}{\sqrt{p_0\sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2/2}$; $\xi = \frac{p}{p_0}$; $p_0^2 = m\hbar\omega$;

Указание: см. пример 3.1).

28. Частица массы m находится в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a и приведена в состояние $\Psi(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(x-a)$. Найти его энергетическое представление, среднее значение энергии, а также флуктуацию энергии. (Ответ: $C_n = -\frac{\sqrt{240}}{\pi^3} \frac{1 + (-1)^{n+1}}{n^3}$; $\langle E \rangle = 5 \frac{\hbar^2}{ma^2}$; $\sqrt{\langle (\Delta E)^2 \rangle} = \sqrt{5} \frac{\hbar^2}{ma^2}$; $n = 0, 1, \dots$. Указание: $\sum_{k=0}^{\infty} (2k+1)^{-4} = \pi^4/96$; $\sum_{k=0}^{\infty} (2k+1)^{-2} = \pi^2/8$).

29. Записать волновую функцию частицы в центральном поле в L^2 -представлении. (Ответ: радиальная функция $f_{El}(r)$).

30. Записать сферическую функцию $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ в L_z -представлении. (Ответ: $\sqrt{\frac{2l+1}{2}} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} P_l^m(\cos \theta)$, где $P_l^m(x)$ — присоединенный полином Лежандра).

3.2. Дираковский формализм

Наряду с ранее использованным обозначением волновой функции $\Psi_a(\mathbf{r})$ в координатном представлении нередко используется введенное Дираком скобочное обозначение:

$$\Psi_a(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | a \rangle. \quad (3.14)$$

Поясним смысл обозначения (3.14). Согласно Дираку, любое состояние « a » квантовой системы можно описать (независимо от выбора представления) некоторой математической конструкцией, которая называется «кет»-вектором и обозначается символом $|a\rangle$. Вследствие принципа суперпозиции «кет»-векторы можно складывать и умножать на комплексные скалярные величины и получать новые «кет»-векторы. Совокупность всех возможных «кет»-векторов образует абстрактное комплексное векторное пространство бесконечного числа измерений, которое называется *гильбертовым пространством*.

Каждому «кет»-вектору можно сопоставить дуальный вектор состояния «бра», который обозначается символом $\langle a|$ и связан с «кет»-

вектором операцией эрмитова сопряжения: $\langle a| = |a\rangle^\dagger$. Поэтому любое состояние квантовой системы можно описать как «кет»-вектором, так и «бра»-вектором. «Кет»- и «бра»-векторы имеют различную природу, поэтому их нельзя складывать. Следовательно, они не могут быть разбиты на чисто вещественную и чисто мнимую части. Это комплексные величины особого рода. Действие оператора на «кет»-вектор осуществляется слева направо и по отношению к эрмитову сопряжению рассматривается как произведение, т.е. если

$$|b\rangle = \hat{G}|a\rangle, \quad \text{то} \quad (|b\rangle)^\dagger = \langle b| = (\hat{G}|a\rangle)^\dagger = (|a\rangle)^\dagger \hat{G}^\dagger = \langle a| \hat{G}^\dagger.$$

Таким образом, *действие оператора на «кет»-вектор слева направо эквивалентно действию эрмитово сопряженного оператора на дуальный «бра»-вектор справа налево.*

Скалярное произведение «кет»-векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$ строится перемножением $\langle b|$ и $|a\rangle$: $\langle b|a\rangle$ ¹. Скалярное произведение является обычным комплексным числом и удовлетворяет соотношению $\langle b|a\rangle = \langle a|b\rangle^*$.

Векторы, соответствующие состояниям финитного движения, можно нормировать условием $\langle a|a\rangle = 1$.

Базисные векторы линейного эрмитова оператора \hat{G} ($\hat{G}|G_n\rangle = G_n|G_n\rangle$) будут удовлетворять условию ортонормировки

$$\langle G_n|G_m\rangle = \delta_{G_n G_m} = \delta_{nm}. \quad (3.15)$$

Свойство (3.15) записано для дискретного спектра. В случае непрерывного спектра δ -символ заменяется δ -функцией.

Конструкция $\hat{F} = |b\rangle\langle a|$, в отличие от $\langle b|a\rangle$, является *оператором*, т.к. при его действии на вектор получается новый вектор:

$$\hat{F}|c\rangle = |b\rangle\langle a|c\rangle; \quad \langle c|\hat{F} = \langle c|b\rangle\langle a|.$$

Для полной ортонормированной системы векторов выполняется соотношение, именуемое *условием полноты*:

$$\sum_n |G_n\rangle\langle G_n| = \hat{1}, \quad (3.16)$$

где $\hat{1}$ — единичный оператор. Для базиса, соответствующего непрерывному спектру, суммирование в (3.16) заменяется интегрированием.

Соотношение (3.16) чрезвычайно удобно для разложения произвольного вектора $|a\rangle$ по базису:

$$|a\rangle = \hat{1}|a\rangle \stackrel{(3.16)}{=} \sum_n |G_n\rangle\langle G_n|a\rangle = \sum_n c(G_n)|G_n\rangle. \quad (3.17)$$

¹ Термины «бра» и «кет» соответствуют частям английского слова bracket — скобка, т.к. скалярное произведение обозначается такой скобкой.

Оператор $\hat{P}_n = |G_n\rangle\langle G_n|$ в (3.17) называется *проекционным*, т.к. он позволяет получить коэффициенты разложения вектора $|a\rangle$ по базису: $c(G_n) = \langle G_n | a \rangle$.

Пусть базис оператора \hat{G} задается множеством векторов $|G_n\rangle$. Тогда упорядоченный набор коэффициентов разложения некоторого вектора $|a\rangle$ по базису оператора \hat{G} (см. (3.17)) принято называть G -представлением состояния $|a\rangle$. Для него уже имеется дираковское обозначение $\langle G_n | a \rangle$. Символ в «кет»-векторе называется *индексом состояния*, в «бра»-векторе — *индексом представления*. Другими словами, G -представление состояния $|a\rangle$ представляет собой множество всех его проекций на состояния с определенными значениями величины G . Оно дает «явный» вид вектора $|a\rangle$, удобный для различных вычислений. Данное утверждение поясняет смысл обозначения (3.14): значение волновой функции Ψ_a в точке с координатой \mathbf{r} равно проекции состояния « a » на состояние с координатой \mathbf{r} .

Пользуясь дираковской техникой, получаем правило перехода от F -представления волновой функции состояния $|a\rangle$ к G -представлению. Для простоты спектр операторов \hat{F} и \hat{G} предполагаем дискретным. На основании (3.16) имеем:

$$\langle G_m | a \rangle = \langle G_m | \hat{1} | a \rangle = \langle G_m | \sum_n |F_n\rangle\langle F_n | a \rangle = \sum_n \langle F_n | G_m \rangle^* \langle F_n | a \rangle. \quad (3.18)$$

Набор коэффициентов перехода $\langle F_n | G_m \rangle$ образует F -представление состояния $|G_m\rangle$ (см. также (3.2), (3.4)). Обобщение (3.18) на случай непрерывного спектра очевидно.

Пример 3.4. *Получить в дираковском формализме правило перехода от координатного представления состояния $|a\rangle$ к импульсному.*

Решение. В формуле (3.18) заменим $G_m \rightarrow \mathbf{p}$, $F_n \rightarrow \mathbf{r}$:

$$\boxed{\langle \mathbf{p} | a \rangle = \int d^3r \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle^* \langle \mathbf{r} | a \rangle.} \quad (3.19)$$

Скобка $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle$ соответствует координатному представлению состояния с импульсом \mathbf{p} . Как известно, $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$. \square

Пример 3.5. *Исследовать общую структуру собственной функции оператора \hat{G} в своем собственном представлении, предполагая его спектр дискретным.*

Решение. Для определенности найдем G -представление состояния $|G_m\rangle$. В соответствии с правилом получения заданного представления строим дираковскую скобку:

$$\langle G_n | G_m \rangle \stackrel{(3.15)}{=} \delta_{G_n G_m} = \delta_{nm}. \quad (3.20)$$

В непрерывном спектре δ -символ Кронекера заменяется δ -функцией Дирака. Таким образом, *собственная функция линейного эрмитова оператора в своем собственном представлении имеет δ -образную структуру*. Рекомендуем также сравнить (3.20) с (3.5).

В качестве примера построим собственную функцию оператора координаты в координатном представлении. Пусть вектор $|\mathbf{r}'\rangle$ задает состояние с координатой \mathbf{r}' . Как известно, $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$, его спектр непрерывный, поэтому в соответствии с (3.20) $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. \square

Ниже всюду взаимосвязь различных представлений будет даваться в дираковском формализме.

3.3. Теория представлений для операторов физических величин

Для конкретных вычислений необходимо использовать одинаковое представление как для векторов состояний, так и для операторов. Подобно случаю с векторами, G -представление оператора \hat{F} является упорядоченным набором коэффициентов его разложения по базису оператора \hat{G} . В дираковской форме этот базис представляет собой «операторную» конструкцию $|G_k\rangle\langle G_n|$, так что разложение выглядит следующим образом:

$$\hat{F} = \sum_{kn} |G_k\rangle F_{kn} \langle G_n|. \quad (3.21)$$

Выражение для коэффициентов F_{kn} получается из (3.21) на основе свойства ортонормировки (3.15):

$$F_{kn} = \langle G_k | \hat{F} | G_n \rangle. \quad (3.22)$$

Конструкция в правой части (3.22) называется *матричным элементом оператора \hat{F} в G -представлении*.

Пример 3.6. *Исследовать структуру матрицы линейного эрмитова оператора \hat{G} в своем собственном представлении.*

Решение. Вновь ограничимся случаем дискретного спектра:

$$\langle G_k | \hat{G} | G_n \rangle = G_n \langle G_k | G_n \rangle \stackrel{(3.15)}{=} G_n \delta_{kn}.$$

В случае непрерывного спектра получим δ -функцию. Таким образом, в своем собственном представлении матрица линейного эрмитова оператора будет диагональной. Обратное утверждение неверно. \square

Пример 3.7. Получить правило действия оператора \hat{F} на вектор $|a\rangle$ в G -представлении.

Решение. Пусть $|b\rangle = \hat{F}|a\rangle$. Домножим это соотношение слева на базисный вектор $\langle G_n|$:

$$\langle G_n|b\rangle = \langle G_n|\hat{F}|a\rangle = \langle G_n|\hat{F}\hat{1}|a\rangle \stackrel{(3.16)}{=} \sum_m \langle G_n|\hat{F}|G_m\rangle \langle G_m|a\rangle \quad (3.23)$$

— обычное правило умножения матрицы на вектор.

В непрерывном спектре

$$\langle G|b\rangle = \int dG' \langle G|\hat{F}|G'\rangle \langle G'|a\rangle. \quad (3.24)$$

Это интегральное преобразование с ядром $\langle G|\hat{F}|G'\rangle$.

В случае диагонального оператора суммирование (интегрирование) снимается. \square

Использованные ранее операторы в координатном представлении также могут быть записаны в матричной форме: $\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle = \mathbf{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$; $\langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'})$ и т.д. При этом интегрирование (3.24) по d^3r' снимается δ -функцией.

Правило пересчета матричного элемента из одного представления в другое легко выводится из свойства полноты (3.16), например, для перехода от ξ -представления к G -представлению оператора \hat{F} имеем:

$$\langle G_k|\hat{F}|G_n\rangle = \langle G_k|\hat{1}\hat{F}\hat{1}|G_n\rangle = \sum_{\xi\xi'} \langle G_k|\xi'\rangle \langle \xi'|\hat{F}|\xi\rangle \langle \xi|G_n\rangle. \quad (3.25)$$

Для перехода от координатного представления *диагонального* оператора \hat{F} к G -представлению на основании (3.25) получаем следующую формулу:

$$\boxed{\langle G_k|\hat{F}|G_n\rangle = \int \Phi_{G_k}^*(\mathbf{r}) \hat{F} \Phi_{G_n}(\mathbf{r}) d^3r,} \quad (3.26)$$

где $\Phi_{G_n}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r}|G_n\rangle$.

Пример 3.8. Найти оператор координаты в энергетическом представлении по базису линейного гармонического осциллятора с частотой ω и массой m .

Решение. Оператор координаты в своем собственном представлении будет диагональным, так что для вычисления матричных элементов можно воспользоваться (3.26). Напомним, что под базисными функциями системы понимаются собственные функции ее гамильтониана. Их координатное представление дается выражением (1.53).

Вычисление матричного элемента оператора координаты осуществляется по формуле (3.26) с заменой $x = \xi x_0$. Произведение $\xi \Phi_n^{(\text{osc})}(\xi)$ преобразуется с помощью рекуррентного соотношения (1.88). Дальнейшее интегрирование осуществляется с помощью соотношения ортонормировки (1.56). Предлагаем выполнить все промежуточные вычисления самостоятельно. Приводим здесь окончательный ответ:

$$x_{mn} \equiv \langle m | x | n \rangle = x_0 \left\{ \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right\}. \quad (3.27)$$

Напомним, что $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

Матричные элементы x_{mn} можно записать несколько иначе: $\langle n-1 | x | n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}}$; $\langle n+1 | x | n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}$, подразумевая все остальные элементы равными нулю. Приведем явный вид фрагмента бесконечной матрицы x_{mn} :

$$x_{mn} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Обратим внимание на ее *недиагональную* структуру. □

Пример 3.9. Записать оператор $\hat{F} = \cos \theta$ (сферическая система координат) в энергетическом представлении по базису пространственного ротатора.

Решение. Базисом пространственного ротатора являются сферические функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, характеризующиеся орбитальным l и магнитным m квантовыми числами (см. пример 2.2). Для сферических функций известно рекуррентное соотношение (B.8), аналогичное соотношению (1.88) для осцилляторных функций. Поэтому все вычисления можно выполнить по аналогии с предыдущим примером. Условием ортонормировки для сферических функций будет (B.6). Приведем результат:

$$\langle l' m' | \cos \theta | l m \rangle = \delta_{m' m} \left\{ \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l', l+1} + \dots \right\}$$

$$+ \left. \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}} \delta_{l',l-1} \right\}. \quad (3.28)$$

Другими словами, ненулевыми матричными элементами будут

$$\begin{aligned} \langle l+1 m | \cos \theta | l m \rangle &= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}; \\ \langle l-1 m | \cos \theta | l m \rangle &= \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}, \end{aligned}$$

т.е. матрица оператора $\cos \theta$ оказывается *диагональной по магнитному квантовому числу*. \square

Пример 3.10. *Вычислить матричные элементы декартовой координаты z между стационарными состояниями водородоподобного атома с главным квантовым числом $n = 2$. Зарядовое число ядра Z , масса электрона μ .*

Решение. В сферической системе координат $z = r \cos \theta$. Координатное представление волновых функций $\langle \mathbf{r} | 2lm \rangle = f_{2l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (см. (2.27)). Энергетический уровень с $n = 2$ четырехкратно вырожден по орбитальному и магнитному квантовым числам. Поэтому число искомых матричных элементов равно 16. Однако вследствие симметрии число ненулевых матричных элементов уменьшается до *двух*:

$$\begin{aligned} \langle 210 | z | 200 \rangle &= \langle 200 | z | 210 \rangle = \\ &= \langle 10 | \cos \theta | 00 \rangle \int_0^\infty f_{20}(r) f_{21}(r) r^3 dr \stackrel{(3.28)}{=} -3 \frac{a_0}{Z}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Рекомендуем самостоятельно вычислить радиальный интеграл. \square

Определение (3.26) пригодно и для оператора \hat{G} с непрерывным спектром. В этом случае индексы состояния G и G' в матрице $\langle G' | \hat{F} | G \rangle$ будут пробегать непрерывный ряд значений.

По формуле (3.24) известные нам операторы могут быть переведены в импульсное представление, если в качестве базисных функций будут взяты $\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}$.

Пример 3.11. *Получить импульсное представление оператора координаты.*

Решение. На основе (3.24) получим вначале матричный элемент оператора координаты в импульсном представлении, исходя из его вида в координатном представлении:

Некоторые операторы в \mathbf{r} - и \mathbf{p} -представлениях

Оператор	\mathbf{r} -представление	\mathbf{p} -представление
Координата $\hat{\mathbf{r}}$	\mathbf{r}	$i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}$
Импульс $\hat{\mathbf{p}}$	$-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$	\mathbf{p}
Момент импульса $\hat{\mathbf{L}}$	$-i\hbar[\mathbf{r} \times \nabla_{\mathbf{r}}]$	$i\hbar[\nabla_{\mathbf{p}} \times \mathbf{p}]$
Кинетическая энергия \hat{T}	$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2$	$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$
Потенциальная энергия \hat{V}	$V(\mathbf{r})$	$V(i\hbar\nabla_{\mathbf{p}})$

$$\begin{aligned} r_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} &= \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right] \mathbf{r} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{r}\right] d^3r = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (-i\hbar\nabla_{\mathbf{p}'}) \underbrace{\int \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\mathbf{r}\right] d^3r}_{(2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{p}'}\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}). \end{aligned}$$

Отчетливо видна диагональная структура матрицы координаты в импульсном представлении.

В импульсном представлении оператор координаты действует на функцию в соответствии с правилом (3.24), т.е. через интегральное преобразование с ядром $r_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$:

$$\begin{aligned} b(\mathbf{p}) &= \int r_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} a(\mathbf{p}') d^3p' = -i\hbar \int \nabla_{\mathbf{p}'}\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) a(\mathbf{p}') d^3p' = \\ &= i\hbar\nabla_{\mathbf{p}'} a(\mathbf{p}')|_{\mathbf{p}'=\mathbf{p}} = i\hbar\nabla_{\mathbf{p}} a(\mathbf{p}) = \hat{\mathbf{r}}a(\mathbf{p}). \end{aligned}$$

Таким образом, $\hat{\mathbf{r}} = i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}$, что по структуре аналогично оператору импульса в координатном представлении, за исключением знака. \square

Ниже приведена таблица 3.1 для некоторых операторов в координатном и импульсном представлениях.

Пример 3.12. Записать оператор $\hat{T}_{\mathbf{a}}$, осуществляющий пространственный параллельный перенос квантовой системы на вектор \mathbf{a} , в импульсном представлении.

Решение. Согласно определению оператора $\hat{T}_{\mathbf{a}}$,

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}). \quad (3.30)$$

Вычисляя матричный элемент (3.24) на собственных функциях оператора импульса с учетом (3.30), получаем матрицу оператора \hat{T}_a в импульсном представлении:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \hat{T}_a | \mathbf{p}' \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{r}\right) \hat{T}_a \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \mathbf{r}\right) d^3r = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \mathbf{a}\right) \underbrace{\int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \mathbf{r}(\mathbf{p}' - \mathbf{p})\right\} d^3r}_{(2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})} = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \mathbf{a}\right). \end{aligned}$$

Отметим здесь диагональность матрицы. Множитель, находящийся после δ -функции, как раз и будет оператором сдвига в импульсном представлении:

$$\hat{T}_a = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \mathbf{p}\right). \quad (3.31)$$

В координатном представлении оператор $\hat{T}_a = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \hat{\mathbf{p}}\right)$, т.е. по структуре формально совпадает с (3.31). Однако в этом случае $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}$, т.е. оператор \hat{T}_a выражается через операторную экспоненту, а в импульсном представлении (3.31) \hat{T}_a — обычный множитель, являющийся функцией импульса \mathbf{p} . \square

Пример 3.13. Найти матрицу кулоновского потенциала $V_C(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{r}$ в импульсном представлении.

Решение. Воспользуемся стандартным правилом (3.24):

$$\langle \mathbf{p} | V_C | \mathbf{p}' \rangle = -\frac{e^2}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{d^3r}{r}, \quad (3.32)$$

где $\mathbf{q} = (\mathbf{p}' - \mathbf{p})/\hbar$.

Интеграл в (3.32) вычисляется в сферической системе координат с осью Oz вдоль \mathbf{q} . Интегрирование по угловым переменным проводится по аналогии с примером 3.2. Мы предлагаем воспроизвести его самостоятельно. При вычислении радиальных интегралов

$$I_{\pm} = \int_0^{\infty} e^{\pm iqr} dr.$$

возникает расходимость. Эта расходимость, однако, является формальной, поскольку исчезает при домножении кулоновского потенциала на затухающий множитель $e^{-\zeta r}$ и устремлении ζ к нулю:

$$I_{\pm} = \lim_{\zeta \rightarrow +0} \int_0^{\infty} e^{(\pm iq - \zeta)r} dr = \lim_{\zeta \rightarrow +0} \frac{1}{\pm iq - \zeta} e^{(\pm iq - \zeta)r} \Big|_0^{\infty} = \pm \frac{i}{q}.$$

Выпишем здесь результат интегрирования

$$\boxed{\int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{d^3r}{r} = \frac{4\pi}{q^2},} \quad (3.33)$$

используемый в теории рассеяния и квантовой теории поля.

Искомый матричный элемент получается подстановкой (3.33) в (3.32):

$$\langle \mathbf{p} | V_C | \mathbf{p}' \rangle = -\frac{e^2}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|^2}.$$

Кулоновский потенциал в импульсном представлении недиагонален. \square

Пример 3.14. Матричные элементы операторов \hat{A} и \hat{B} в G -представлении известны. Найти $\langle G_{n'} | \hat{A}\hat{B} | G_n \rangle$.

Решение. Вспоминая условие полноты (3.16), имеем:

$$\langle G_{n'} | \hat{A}\hat{B} | G_n \rangle = \langle G_{n'} | \hat{A}\hat{1}\hat{B} | G_n \rangle = \langle G_{n'} | \hat{A} \sum_{n''} | G_{n''} \rangle \langle G_{n''} | \hat{B} | G_n \rangle.$$

Итак,

$$\langle G_{n'} | \hat{A}\hat{B} | G_n \rangle = \sum_{n''} \langle G_{n'} | \hat{A} | G_{n''} \rangle \langle G_{n''} | \hat{B} | G_n \rangle, \quad (3.34)$$

что соответствует обычному правилу перемножения матриц. Формула (3.34) справедлива и для непрерывно меняющихся индексов состояния; при этом суммирование заменяется интегрированием. \square

Задачи для самостоятельного решения

31. Найти оператор координаты в энергетическом представлении по базису частицы в бесконечной прямоугольной потенциальной яме ширины a . (Ответ: $\langle n | x | n \rangle = \frac{1}{2} a$; $\langle n' | x | n \rangle =$

$$= \frac{a}{\pi^2} \left\{ \frac{(-1)^{n'-n} - 1}{(n' - n)^2} - \frac{(-1)^{n'+n} - 1}{(n' + n)^2} \right\}; \quad n, n' = 1, 2, \dots; \quad n \neq n').$$

32. Найти оператор $\hat{F} = \cos \varphi$ (в полярных координатах) в энергетическом представлении по базису плоского ротатора. (Ответ: $\langle m' | \cos \varphi | m \rangle = \frac{1}{2} (\delta_{m', m+1} + \delta_{m', m-1})$, или $\langle m \pm 1 | \cos \varphi | m \rangle = \frac{1}{2}$.)

33. Найти энергетическое представление оператора x^2 по базису линейного гармонического осциллятора с массой m и частотой ω . (Ответ: $\langle n \pm 2 | x^2 | n \rangle = \frac{x_0^2}{2} \sqrt{(n+1 \pm 1)(n \pm 1)}$; $\langle n | x^2 | n \rangle = x_0^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)$; $n = 0, 1, \dots$; $x_0^2 = \hbar/m\omega$).

3.4. Теория представлений и наблюдаемые физические величины

Переход от одного представления к другому затрагивает вид волновых функций и операторов. Неизменными, однако, остаются следующие величины и соотношения:

- нормировка волновых функций;
- ортогональность волновых функций;
- коммутационные соотношения операторов (а, значит, соотношения неопределенностей и интегралы движения);
- собственные значения операторов.

Таким образом, вид представления не влияет на значения наблюдаемых характеристик исследуемой системы. Тем не менее, удачно выбранное представление позволяет значительно упростить решение задачи.

Пример 3.15. Найти волновые функции стационарных состояний одномерного движения частицы массы m в однородном поле $V(x) = -Fx$ ($F = \text{const}$).

Решение. В уравнении Шредингера

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - F\hat{x} \right) \Psi = e\Psi \quad (3.35)$$

оператор \hat{p} возводится в квадрат, а \hat{x} — в первую степень. Поэтому уравнение (3.35) в координатном представлении является уравнением второго порядка, а в импульсном — первого, следовательно, задачу удобно решать в импульсном представлении. Уравнение (3.35) при этом примет вид (см. табл. 3.1):

$$\left[\frac{p^2}{2m} - i\hbar F \frac{d}{dp} \right] \Psi_E(p) = E\Psi_E(p). \quad (3.36)$$

Поскольку в однородном поле движение всегда инфинитно, энергетический спектр непрерывен.

При заданной энергии E , используя метод разделения переменных, решение (3.36) (с точностью до произвольного постоянного множителя) можно выписать сразу:

$$\Psi_E(p) = C \exp \left\{ \frac{ip}{\hbar F} \left(E - \frac{p^2}{6m} \right) \right\}. \quad (3.37)$$

Для перехода к координатному представлению необходимо найти фурье-образ функции (3.37). После замены $p = z \sqrt[3]{2m\hbar F}$ с точностью до постоянного множителя получаем:

$$\begin{aligned} \psi(x) &\sim \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(p) \exp \left(\frac{i}{\hbar} px \right) dp = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -i \left[-\frac{p}{\hbar} \left(x + \frac{E}{F} \right) + \frac{p^3}{6m\hbar F} \right] \right\} dp \sim \\ &\sim \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -iz \left[-\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(x + \frac{E}{F} \right) + \frac{z^2}{3} \right] \right\} dz \sim \text{Ai} \left(-\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(x + \frac{E}{F} \right) \right), \end{aligned}$$

где $\text{Ai}(\xi)$ — функция Эйри, имеющая интегральное представление

$$\text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos \left(z\xi + \frac{z^3}{3} \right) dz$$

(см. приложение Д).

Таким образом, волновые функции движения в однородном поле в координатном представлении выражаются через специальную функцию — функцию Эйри. В импульсном же представлении решение уравнения Шредингера дается в элементарных функциях (3.37). Таким образом, в данной задаче импульсное представление оказывается предпочтительнее координатного.

Рекомендуем самостоятельно нормировать волновые функции $\Psi_E(p)$ «по шкале энергий», т.е. найти нормировочный множитель C , исходя из условия $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{E'}^*(p) \Psi_E(p) dp = \delta(E' - E)$. \square

Пример 3.16. Найти импульсное представление сферических функций $Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

Решение. Сферические функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ являются собственными функциями оператора \hat{L}^2 , соответствующими собственным значениям $\hbar^2 l(l+1)$, в координатном представлении:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (3.38)$$

Такому же уравнению (3.38) будут удовлетворять собственные функции и в импульсном представлении. Следует заметить, что собственные значения при этом не изменятся.

Сравним прежде всего вид декартовых компонент \hat{L}_i в различных представлениях.

В координатном представлении:

$$\hat{L}_i = \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} x_j \hat{p}_k = -i\hbar \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}.$$

В импульсном представлении (см. табл. 3.1):

$$\hat{L}_i = \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j p_k = i\hbar \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial p_j} p_k = (j \leftrightarrow k) = -i\hbar \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} p_j \frac{\partial}{\partial p_k}.$$

Итак, в координатном и импульсном представлениях структура компонент \hat{L}_i идентична. Отметим далее, что $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ в любом представлении, следовательно, структура $\hat{\mathbf{L}}^2$ и в координатном, и в импульсном представлениях одинакова. Поэтому собственными функциями $\hat{\mathbf{L}}^2$ в импульсном представлении также будут сферические функции $Y_{lm}(\theta_{\mathbf{p}}, \varphi_{\mathbf{p}})$. Отличие от координатного представления состоит в том, что углы $\theta_{\mathbf{p}}$ и $\varphi_{\mathbf{p}}$ теперь задают направление \mathbf{p} , а не \mathbf{r} .

Заметим, что данную задачу можно было бы решить, вычислив лишь фурье-образ $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, однако здесь этого делать не нужно. \square

Уравнение Шредингера $(\hat{H} - E)\Psi(\mathbf{r}) = 0$ в энергетическом представлении (за базис которого выбраны собственные функции некоторого гамильтониана \hat{H}_0 , отличного от \hat{H} , с собственными значениями $E_k^{(0)}$) имеет вид линейной системы уравнений относительно коэффициентов разложения по базису:

$$\sum_n \left\{ \langle E_{n'}^{(0)} | \hat{H} | E_n^{(0)} \rangle - \delta_{n'n} E \right\} C_{E_n^{(0)}} = 0.$$

Собственные значения энергии являются корнями характеристического уравнения

$$\det \left| \langle E_{n'}^{(0)} | \hat{H} | E_n^{(0)} \rangle - \delta_{n'n} E \right| = 0.$$

Уравнение Шредингера в импульсном представлении есть

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E \right) \Psi_E(\mathbf{p}) + \int \langle \mathbf{p} | U | \mathbf{p}' \rangle \Psi_E(\mathbf{p}') d^3 p' = 0,$$

где $\langle \mathbf{p} | U | \mathbf{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \mathbf{r} \right\} U(\mathbf{r}) d^3 r.$

В практических приложениях наиболее часто используется координатное представление. Это обусловлено тем, что энергия взаимодействия выражается функцией координат частиц и в координатном представлении совпадает с соответствующим оператором. Кинетическая энергия является простой функцией импульса. Поэтому ее оператор в координатном представлении также имеет простой вид. При исследовании систем, состоящих из слабо взаимодействующих частиц, часто применяется импульсное представление, а если используется теория возмущений, то энергетическое.

Задачи для самостоятельного решения

34. Линейный гармонический осциллятор (масса — m , частота — ω) находится в стационарном состоянии. Найти импульсное представление волновой функции. (Ответ: $c_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! p_0 \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$; $\xi = \frac{p}{p_0}$; $p_0^2 = m\hbar\omega$; $n = 0, 1, \dots$).

35. Система может находиться лишь в двух состояниях: Ψ_1 и Ψ_2 . Матричные элементы оператора \hat{H} известны: $H_{11} = a$; $H_{22} = b$; $H_{12} = H_{21}^* = c$. Найти собственные значения энергии. (Ответ: $E_{\pm} = \frac{1}{2}\{a + b \pm \sqrt{(a - b)^2 + 4c^2}\}$).

36. Записать уравнение Шредингера с кулоновским потенциалом $V(\mathbf{r}) = \frac{\alpha}{r}$ в импульсном представлении.

(Ответ: $\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E\right) \Psi_E(\mathbf{p}) + \frac{1}{2\pi^2\hbar} \int \frac{\alpha}{|\mathbf{p}' - \mathbf{p}|^2} \Psi_E(\mathbf{p}') d^3p' = 0$.)

37. Найти собственные функции оператора координаты в координатном представлении следующим способом: собственные функции оператора координаты ищутся в импульсном представлении, а результат переводится в координатное представление.

3.5. Унитарные преобразования

Переход от одного представления к другому является частным случаем так называемого *унитарного преобразования*, которое осуществляется с помощью некоторого унитарного оператора \hat{U} :

$$\boxed{|a'\rangle = \hat{U} |a\rangle.} \quad (3.39)$$

Напомним определение унитарного оператора: $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$. В соответствии с правилом преобразования (3.39) для *вектора* и определением получаем правило преобразования для *оператора*:

$$\boxed{\hat{F}' = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^{-1}.} \quad (3.40)$$

На основании (3.39), (3.40) нетрудно показать, что при унитарных преобразованиях остаются неизменными следующие конструкции:

- средние значения физических величин;
- собственные значения операторов;
- скалярные произведения векторов в гильбертовом пространстве (а значит, ортогональность и нормировка);
- матричные элементы операторов;
- коммутационные соотношения операторов (а значит, соотношения неопределенностей и интегралы движения).

Примером унитарных преобразований являются сдвиги и повороты системы координат (см. задачи 24 и 25 части 1).

Унитарные преобразования важны потому, что в ряде случаев удачно выбранное преобразование позволяет существенно упростить решение задачи.

Пример 3.17. *Решить задачу примера 1.11 в формализме унитарных преобразований*².

Решение. Исходим из уравнения (1.91) в бозе-операторах. Будем искать такое унитарное преобразование, которое уничтожит линейные по \hat{b} , \hat{b}^\dagger слагаемые.

Разложим вначале волновую функцию основного состояния смещенного осциллятора $\psi_0(\xi)$ по базису волновых функций несмещенного осциллятора $\chi_n(\xi)$:

$$\psi_0(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \chi_n(\xi) \stackrel{(1.87)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^\dagger)^n \psi_0(\xi) = f(\hat{b}^\dagger) \chi_0(\xi). \quad (3.41)$$

В соответствии с определением основного состояния (1.83) для функции $\psi_0(\xi)$ имеем:

$$\hat{B}\psi_0(\xi) \stackrel{(1.92)}{=} (\hat{b} - \gamma)\chi_0(\xi) = 0. \quad (3.42)$$

Это будет уравнением для основного состояния смещенного осциллятора.

² Пример является дополнительным.

Подставим (3.41) в (3.42):

$$[\hat{b}, f(\hat{b}^\dagger)]\chi_0(\xi) = 0.$$

Используя тождества

$$[\hat{b}, f(\hat{b}^\dagger)] = \frac{\partial f(\hat{b}^\dagger)}{\partial \hat{b}^\dagger}; \quad [\hat{b}^\dagger, f(\hat{b})] = -\frac{\partial f(\hat{b})}{\partial \hat{b}}, \quad (3.43)$$

получаем операторные уравнения для $f(\hat{b}^\dagger)$:

$$\frac{\partial f(\hat{b}^\dagger)}{\partial \hat{b}^\dagger} = \gamma f(\hat{b}^\dagger),$$

решение которого имеет вид:

$$f(\hat{b}^\dagger) = c_0 e^{\gamma \hat{b}^\dagger}, \quad (3.44)$$

где c_0 — подлежащий определению постоянный множитель.

Вместо $f(\hat{b}^\dagger)$ более удобным является

$$\hat{U}(\gamma) = f(\hat{b}^\dagger) e^{-\gamma \hat{b}} = e^{-\gamma^2/2} e^{\gamma \hat{b}^\dagger} e^{-\gamma \hat{b}} \quad (3.45)$$

(см. (1.83)). Значение множителя c_0 выбрано таким образом, чтобы преобразование $\hat{U}(\gamma)$ было унитарным.

Теперь разложение (3.41) можно представить в виде

$$\psi_0(\xi) = \hat{U}(\gamma)\chi_0(\xi). \quad (3.46)$$

Введем теперь по аналогии с (3.46) в совершенно общем виде новое преобразование между искомым решением $\psi(\xi)$ уравнения Шредингера (1.91) и новой функцией $\chi(\xi)$

$$\psi(\xi) = \hat{U}(\gamma)\chi(\xi) \quad (3.47)$$

и подставим (3.47) в (1.91):

$$[\hat{b}^\dagger \hat{b} - \gamma(\hat{b}^\dagger + \hat{b})]\hat{U}(\gamma)\chi(\xi) = \varepsilon' \hat{U}(\gamma)\chi(\xi). \quad (3.48)$$

Если на уравнение (3.48) подействовать слева оператором $\hat{U}^{-1}(\gamma)$, то гамильтониан претерпит унитарное преобразование. Найдем новый вид гамильтониана. Подвергнем унитарному преобразованию $\hat{U}^{-1}(\gamma)$ бозе-операторы по отдельности. Для этого вначале преобразуем (3.45) в соответствии с тождеством Вейля (см. задачу 11 части 1)

$$\hat{U}(\gamma) = e^{\gamma(\hat{b}^\dagger - \hat{b})},$$

а затем воспользуемся тождеством Бекера – Кэмпбелла – Хаусдорфа (см. задачу 10 Части 1). В итоге получим:

$$\hat{U}^{-1}(\gamma) \hat{b}^\dagger \hat{U}(\gamma) = \hat{b}^\dagger + \gamma; \quad \hat{U}^{-1}(\gamma) \hat{b} \hat{U}(\gamma) = \hat{b} + \gamma, \quad (3.49)$$

откуда

$$\hat{U}^{-1}(\gamma) \hat{b}^\dagger \hat{b} \hat{U}(\gamma) = \hat{U}^{-1}(\gamma) \hat{b}^\dagger \hat{U}(\gamma) \hat{U}^{-1}(\gamma) \hat{b} \hat{U}(\gamma) = (\hat{b}^\dagger + \gamma)(\hat{b} + \gamma),$$

так что уравнение (1.91) принимает удобный вид

$$\hat{b}^\dagger \hat{b} \chi(\xi) = \varepsilon'' \chi(\xi),$$

где $\varepsilon'' = \varepsilon' + \gamma$. В конечном итоге энергетический спектр будет совпадать с полученным в разделе 1.5.

Построим теперь волновые функции стационарных состояний. В соответствии с (1.89),

$$\chi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^\dagger)^n \chi_0(\xi).$$

В соответствии с (3.47),

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &= \hat{U}(\gamma) \chi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{U}(\gamma) (\hat{b}^\dagger)^n \hat{U}^{-1}(\gamma) \hat{U}(\gamma) \chi_0(\xi) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} [\hat{U}(\gamma) \hat{b}^\dagger \hat{U}^{-1}(\gamma)]^n \psi_0(\xi) \stackrel{(3.49)}{=} \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^\dagger + \gamma)^n \psi_0(\xi). \end{aligned}$$

Здесь $\chi_0(\xi) = \pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2}$. □

Канонические преобразования являются классическим аналогом унитарных преобразований.

Задачи для самостоятельного решения

38. Доказать общие свойства унитарных преобразований.

39. Доказать унитарность преобразования (3.18).

40*. Доказать тождества (3.43).

(Указание: методом математической индукции вычислить коммутаторы $[\hat{b}, (\hat{b}^\dagger)^n]$, $[\hat{b}^\dagger, \hat{b}^n]$.)

41*. Проверить унитарность оператора (3.45).

42*. Получить соотношения (3.49).

3.6. Представления зависимости операторов и волновых функций от времени

Теория представлений имеет несколько аспектов. В предыдущих разделах рассматривались различные способы выбора динамической переменной: координаты, импульса, энергии и т.д. Здесь мы рассмотрим наиболее распространенные представления зависимости операторов и волновых функций от времени. В отличие от всех предыдущих случаев (см., например, (3.18)), соответствующие унитарные преобразования должны теперь явно содержать зависимость от времени.

Представление Шредингера

Если спектр собственных значений оператора не изменяется с течением времени, удобно пользоваться такими операторами, математическая форма которых не зависит от времени. В этом случае изменение состояния во времени выражается только «вращением» вектора состояния. Такое представление векторов состояний и операторов называется *представлением Шредингера*. Операторы и волновые функции в представлении Шредингера будем отмечать индексом « S ». Противоположный случай, т.е. когда от времени зависят только операторы, но не волновые функции, называется представлением Гейзенберга (см. ниже). Такому представлению будет сопоставлен индекс « H ».

Определим оператор эволюции состояния $\hat{U}_{\text{ev}}(t)$ соотношением

$$\Psi_S(\xi, t) = \hat{U}_{\text{ev}}(t)\Psi_H(\xi); \quad \hat{U}_{\text{ev}}(0) = \hat{1}, \quad (3.50)$$

где $\Psi_H(\xi) \equiv \Psi_S(\xi, 0)$, и подставим волновую функцию в форме (3.50) во временное уравнение Шредингера с гамильтонианом \hat{H} . В результате получим уравнение «движения» для оператора эволюции:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}_{\text{ev}}(t)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}_{\text{ev}}(t); \quad \hat{U}_{\text{ev}}(0) = \hat{1}. \quad (3.51)$$

Его решение имеет вид:

$$\hat{U}_{\text{ev}}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right). \quad (3.52)$$

Унитарность $\hat{U}_{\text{ev}}(t)$ практически очевидна.

Напомним, что по аналогии с преобразованием эволюции в классической механике движение можно рассматривать как непрерывно совершаемое каноническое преобразование.

Прежде нами всюду использовалось представление Шредингера.

Представление Гейзенберга

Представление Гейзенберга является противоположным случаем по отношению к представлению Шредингера, т.е. векторы состояний остаются неподвижными, а состояния изменяются во времени только за счет операторов.

Очевидно, при переходе от представления Шредингера к представлению Гейзенберга волновая функция будет преобразовываться по закону, обратному (3.50):

$$\Psi_H(\xi) = \hat{\mathcal{U}}_{\text{ev}}^{-1}(t) \Psi_S(\xi, t) \stackrel{(3.52)}{=} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \Psi_S(\xi, t). \quad (3.53)$$

В операторах появится *зависимость от времени*:

$$\hat{F}_H(t) \stackrel{(3.40)}{=} \hat{\mathcal{U}}_{\text{ev}}^{-1}(t) \hat{F}_S \hat{\mathcal{U}}_{\text{ev}}(t) \stackrel{(3.52)}{=} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \hat{F}_S \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right). \quad (3.54)$$

Преобразование (3.54) позволяет вывести уравнение «движения» для оператора в представлении Гейзенберга:

$$\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}_H, \hat{H}]. \quad (3.55)$$

Представление Гейзенберга удобно в квантовой теории поля.

Представление взаимодействия

В квантовой механике нередко приходится исследовать системы, состоящие из нескольких взаимодействующих подсистем. В этом случае гамильтониан можно представить в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

где \hat{V} — оператор взаимодействия, \hat{H}_0 — гамильтониан без учета взаимодействия. В таких системах часто для описания временной эволюции используется *представление взаимодействия*. Переход от волновой функции в представлении Шредингера к волновой функции в представлении взаимодействия $\Psi_{\text{int}}(\xi, t)$ осуществляется с помощью унитарного преобразования

$$\Psi_{\text{int}}(\xi, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \Psi_S(\xi, t), \quad (3.56)$$

которое отличается от (3.50) заменой $\hat{H} \rightarrow \hat{H}_0$.

Подстановка (3.56) во временное уравнение Шредингера для $\Psi_S(\xi, t)$ с гамильтонианом \hat{H} приводит к следующему уравнению для $\Psi_{\text{int}}(\xi, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{int}}(\xi, t) = \hat{V}_{\text{int}} \Psi_{\text{int}}(\xi, t), \quad (3.57)$$

где

$$\hat{V}_{\text{int}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \hat{V} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right). \quad (3.58)$$

В соответствии с (3.56) переход от представления Шредингера к представлению Гейзенберга у операторов осуществляется по правилу

$$\hat{F}_{\text{int}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \hat{F}_S \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right). \quad (3.59)$$

Частным случаем (3.59) является (3.58).

Уравнение движения для оператора в представлении взаимодействия выглядит следующим образом:

$$\frac{d\hat{F}_{\text{int}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}_{\text{int}}, \hat{H}_0]. \quad (3.60)$$

Анализ (3.57) и (3.60) позволяет сделать вывод о том, что представление взаимодействия является промежуточным между шредингеровским и гейзенберговским.

Задачи для самостоятельного решения

43. Система с не зависящим от времени гамильтонианом в начальный момент времени находилась в состоянии с волновой функцией $\Psi(\xi, 0)$. Найти волновую функцию этой системы в последующие моменты времени $\Psi(\xi, t > 0)$. Энергетический спектр и базис системы предполагаются известными. Задачу решить с использованием унитарного преобразования.

44. Получить уравнения (3.51), (3.55), (3.57) и (3.60).

Математическое приложение

А. Вырожденная гипергеометрическая функция

Рассмотрим так называемое вырожденное гипергеометрическое уравнение:

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (b - x) \frac{dy}{dx} - ay = 0, \quad (\text{A.1})$$

где a и b — заданные комплексные константы. Его *регулярное в нуле* решение представляет собой с точностью до постоянного множителя вырожденную гипергеометрическую функцию:

$$y_{\text{reg}}(x) = {}_1F_1(a, b, x) = 1 + \frac{a}{b} \frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{b(b+1)} \frac{x^2}{2!} + \dots \quad (\text{A.2})$$

При целых неположительных a она превращается в полином степени $-a$.

При $|x| \rightarrow \infty$ она имеет следующее асимптотическое представление:

$$\begin{aligned} {}_1F_1(a, b, x) \sim \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} (-x)^{-a} {}_2F_0(a, a-b+1, -x^{-1}) + \\ + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^{-x} x^{a-b} {}_2F_0(b-a, 1-a, x^{-1}). \end{aligned}$$

Здесь

$${}_2F_0(a, b, x) = 1 + ab \frac{x}{1!} + a(a+1)b(b+1) \frac{x^2}{2!} + \dots$$

Введено стандартное обозначение для Γ -функции.

Б. Полиномы Чебышева – Эрмита

Полиномы Чебышева – Эрмита являются регулярными решениями дифференциального уравнения

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0, \quad n = 0, 1, \dots,$$

где n — их порядок.

Дадим здесь несколько различных их представлений:

1) формула Родрига:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}; \quad (\text{Б.3})$$

2) разложение по убывающим степеням x :

$$H_n(x) = (2x)^n - \frac{n(n-1)}{1} (2x)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{1 \cdot 2} (2x)^{n-4} - \dots$$

3) через вырожденную гипергеометрическую функцию:

$$H_{2m}(x) = (-1)^m \frac{(2m)!}{m!} {}_1F_1\left(-m, \frac{1}{2}, x^2\right);$$

$$H_{2m+1}(x) = (-1)^m \frac{(2m+1)!}{m!} 2x {}_1F_1\left(-m, \frac{3}{2}, x^2\right).$$

4) рекуррентная формула:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x); \quad H_0(x) = 1; \quad H_1(x) = 2x. \quad (\text{Б.4})$$

В. Сферические функции

Функциями Лежандра первого рода (присоединенными «полиномами» Лежандра) называются регулярные в точках ± 1 решения дифференциального уравнения

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]y = 0,$$

$$l = 0, 1, \dots; \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm l.$$

При $m = 0$ они становятся полиномами Лежандра.

Приведем здесь формулу Родрига для этих функций:

$$P_l^{|m|}(x) = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l.$$

Присоединенные «полиномы» Лежандра входят в структуру сферических функций:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (\text{В.5})$$

являющихся регулярными на единичной сфере решениями уравнений

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + l(l+1) \right] \Psi(\theta, \varphi) = 0;$$

$$\left[i \frac{\partial}{\partial \varphi} + m \right] \Psi(\theta, \varphi) = 0$$

и образующими на ней полную ортонормированную систему — базис:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \delta_{l'l} \delta_{m'm}; \quad (\text{B.6})$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta(\cos \theta' - \cos \theta) \delta(\varphi' - \varphi). \quad (\text{B.7})$$

Сферические функции удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$\begin{aligned} \cos \theta Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \\ &= \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,m}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)}} Y_{l-1,m}(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

представляющему собой разложение его левой части по базису сферических функций.

Приведем явный вид некоторых сферических функций:

$$\begin{aligned} Y_{00}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \\ Y_{10}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Г. Присоединенные полиномы Лагерра

Присоединенные полиномы Лагерра $L_n^{(\alpha)}(x)$ являются регулярными решениями дифференциального уравнения

$$xy'' + (\alpha + 1 - x)y' + ny = 0, \quad n = 0, 1, \dots$$

При $\alpha = 0$ они переходят в обычные полиномы Лагерра.

Дадим некоторые явные выражения для присоединенных полиномов Лагерра:

1) формула Родрига:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{n!} x^{-\alpha} e^x \frac{d^n}{dx^n} [x^{n+\alpha} e^{-x}];$$

2) вырожденная гипергеометрическая функция:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{n!} \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{\Gamma(\alpha + 1)} {}_1F_1(-n, \alpha + 1, x).$$

Д. Функции Бесселя

Функциями Бесселя ν -го порядка называются регулярные решения цилиндрического дифференциального уравнения:

$$x^2 y'' + xy' + (x^2 - \nu^2)y = 0. \quad (\text{Д.10})$$

Дадим некоторые явные выражения для функций Бесселя:

1) разложение в ряд:

$$J_\nu(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x^2/2)^k}{k! \Gamma(\nu + k + 1)};$$

2) вырожденная гипергеометрическая функция:

$$J_\nu(x) = \frac{e^{-iz}}{\Gamma(1 + \nu)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu {}_1F_1\left(\nu + \frac{1}{2}, 2\nu + 1, 2iz\right).$$

Сферическая функция Бесселя

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x), \quad l = 0, 1, \dots \quad (\text{Д.11})$$

выражается через элементарные, например,

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}; \quad j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}; \quad j_2(x) = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \sin x - \frac{3}{x^2} \cos x.$$

Функция Эйри $\text{Ai}(x)$ является регулярным решением уравнения

$$y'' - xy = 0 \quad (\text{Д.12})$$

и выражается через функции Бесселя порядков $\pm \frac{1}{3}$:

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{3} \sqrt{x} [I_{-1/3}(\zeta) - I_{1/3}(\zeta)]; \quad \text{Ai}(-x) = \frac{1}{3} \sqrt{x} [J_{-1/3}(\zeta) + J_{1/3}(\zeta)],$$

где $I_\nu(\zeta) = i^{-\nu} J_\nu(i\zeta); \quad \zeta = \frac{2}{3} x^{3/2}.$

Литература

Основная

1. Давыдов А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. — М. : Наука, 1973. — 704 с.
2. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики / Д.И. Блохинцев. — М. : Наука, 1983. — 664 с.
3. Галицкий В.М. Задачи по квантовой механике / В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. — М. : Наука, 1992. — 880 с.
4. Сборник задач по теоретической физике / Л.Г. Гречко [и др.]. — М. : Высш. шк., 1984. — 319 с.

Дополнительная

1. Ландау Л.Д. Теоретическая физика : в 10 т. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — М. : Физматлит, 2001. — Т. 3. : Квантовая механика : Нерелятивистская теория. — 803 с.
2. Левич В.Г. Курс теоретической физики : в 2 т. / В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин. — М. : Наука, 1971. — Т. 2. — 936 с.
3. Флюгге З. Задачи по квантовой механике : в 2 т. / З. Флюгге ; под ред. А.А. Соколова. — Череповец : Меркурий-ПРЕСС, 2000. — Т. 1. — 341 с.

Для заметок

Для заметок

Учебное издание

Копытин Игорь Васильевич,
Корнев Алексей Станиславович,
Чуракова Татьяна Алексеевна

ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Учебное пособие для вузов

Часть 2

Редактор И.Г. Валынкина