

Вступ

Класична механіка передбачає кількісний опис механічного руху або переміщення тіла в просторі. Але ця теорія застосовна не завжди. Якщо механічна дія фізичної системи за порядком величини збігається зі сталою Планка, то рух набуває інших якісних форм: зникає саме поняття траєкторії, з'являються принципові обмеження в точності вимірювання фізичних величин, у ряді випадків виникає дискретність значень деяких фізичних величин, хвильовий характер руху частинок і т.д. Розміри цих систем надто малі. Такі системи утворюють *мікросвіт*. У свою чергу, системи, підпорядковані законам класичної механіки, утворюють *макросвіт*. Механіку мікросвіту традиційно називають *квантовою*. До об'єктів мікросвіту належать елементарні частинки (електрон, протон, нейтрон тощо), ядра, атоми, молекули і кристали. Кількісна теорія мікросвіту потребує специфічного понятійного й математичного апарату. Майже кожне поняття подається за допомогою деякої математичної конструкції з розділів математичного й функціонального аналізу.

Незважаючи на велику кількість повноцінних підручників із квантової теорії, у студентів практично завжди виникають труднощі, пов'язані з опрацюванням матеріалу, який потрібно засвоїти. У даному посібнику компактно відображено найбільш важливі аспекти курсу, що допоможе студентам систематично ознайомитися з ним.

У ході вивчення курсу квантової механіки істотне значення має набуття навичок, а отже, засвоєння теоретичного матеріалу повинне супроводжуватись виконанням розв'язанням великої кількості різноманітних завдань. У посібнику до кожного розділу запропоновано індивідуальні завдання, а також приклади розв'язання найбільш типових задач.

Вектори позначено жирним прямим шрифтом, наприклад, $\mathbf{v}$. Та ж літера світлим шрифтом (v) позначає модуль відповідного вектора.

Наведемо значення (в одиницях СІ) деяких фундаментальних констант, використаних в даному посібнику:

- заряд електрона $e = 1,6021892 \cdot 10^{-19}$ Кл;
- стала Планка $\hbar = h/2\pi = 1,0545887 \cdot 10^{-34}$ Дж·с;
- маса спокою електрона $m_e = 9,109534 \cdot 10^{-31}$ кг;
- маса спокою протона $m_p = 1,6726485 \cdot 10^{-27}$ кг;
- маса спокою нейтрона $m_n = 1,6749543 \cdot 10^{-27}$ кг.

1. Хвильова функція мікрочастинки та її фізичний зміст

Одним із фундаментальних понять квантової теорії є квантовий стан системи (мікрочастинки). Математично квантовий стан зображують за допомогою *хвильової функції* – деякої комплексної функції координат і часу $\Psi(\zeta, t)$ (ζ – сукупність всіх узагальнених координат; для частинки в тривимірному евклідовому просторі $\zeta \equiv \mathbf{r}$).

Хвильова функція сама по собі не має фізичного змісту, тобто є *непостережуваною величиною*. У класичній механіці, наприклад, координата не буде мати змісту доти, доки не визначений вибір початку координат. Те ж можна сказати й про час, і про потенціальну енергію. В електродинаміці неспостережуваними величинами є потенціали електромагнітного поля.

Для опису вільного руху частинки з масою m та імпульсом $\mathbf{p}$ Луї де Бройль запропонував застосовувати плоску хвилю:

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{r} - Et) \right], \quad (1.1)$$

яку прийнято називати *хвилею де Бройля*, де $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ – енергія частинки; A – ненульова стала.

Стала Планка $\hbar$ – фундаментальна фізична стала, специфічна для мікросвіту. Зокрема, вона являє собою коефіцієнт пропорційності між енергією й частотою у формулі (1.1). Співвідношення квантової теорії дають класично не суперечливі результати за формального переходу до границі $\hbar \rightarrow 0$.

У загальному випадку хвильову функцію знаходять із розв'язку відповідного лінійного однорідного диференційного рівняння, тому її визначають з точністю до довільного постійного множника – *сталого нормування*. Якщо хвильові функції відрізняються тільки постійним множником, то відповідні їм стани фізично еквівалентні.

Макс Борн запропонував таку фізичну інтерпретацію хвильової функції: *квадрат модуля хвильової функції пропорційний густині ймовірності виявлення частинки в точці з координатою ζ : $|\Psi(\zeta, t)|^2 \sim w(\zeta, t)$* .

У стані *фінітного* руху частинка локалізована в скінченній області простору, так що належним вибором сталого нормування останнє співвідношення може бути перетворено в строгу рівність:

$$|\Psi(\zeta, t)|^2 = w(\zeta, t). \quad (1.2)$$

За теорією ймовірності умову нормування для хвильової функції фінітного

руху можна сформулювати таким чином:

$$\int_{\Omega} |\Psi(\zeta, t)|^2 d\zeta = 1, \quad (1.3)$$

де інтегрування ведеться по *всьому простору* Ω .

Інтеграл у виразі (1.3) скінченний тільки тоді, коли функція $|\Psi(\zeta, t)|^2$ на великих відстанях спадає досить швидко. Також із цієї умови випливає, що навіть нормована хвильова функція визначається неоднозначно, а з точністю до довільного постійного *фазового множника*, який обирають так, щоб по можливості спростити вигляд хвильової функції.

У хвильової функції немає *універсальної розмірності*. Її розмірність визначається тільки елементом інтегрування

$$|\Psi(\zeta, t)| = (d\zeta)^{-1/2}. \quad (1.4)$$

Легко побачити, що за виконання співвідношення (1.4) підінтегральна функція у виразі (1.3) буде безрозмірною. За хвильову функцію можна взяти тільки ту математичну функцію, яка задовольняє умови *скінченності, однозначності і безперервності*.

Пояснимо істотну відмінність квантового руху від поширення хвилі, наприклад електромагнітної. Якщо є N джерел електромагнітних хвиль, то результуюча хвиля буде, як і в класичній механіці, залежати тільки від однієї просторової змінної. У випадку системи N мікрочастинок її повна хвильова функція залежатиме від N просторових змінних: $\Psi(\zeta_1, \dots, \zeta_N, t)$. Однак за елемент інтегрування варто брати елемент так званого *конфігураційного простору* $d\zeta = d\zeta_1 \dots d\zeta_N$.

Фундаментальний принцип квантової теорії — **принцип суперпозиції** — являє собою результат узагальнення експериментальних випробувань: *якщо квантова система може перебувати в станах із хвильовими функціями Ψ_1 і Ψ_2 , то вона може перебувати й у стані*

$$\Psi = \alpha\Psi_1 + \beta\Psi_2, \quad (1.5)$$

де α і β — довільні комплексні сталі.

Лінійна комбінація хвильових функцій у правій частині рівняння (1.5) задає *суперпозицію станів*. Інакше кажучи, *суперпозиція станів квантової системи теж буде станом цієї системи*. Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 1.1. Частинка знаходиться в стані з хвильовою функцією

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \sin \frac{\pi x}{a}, & x \in [0; a]; \\ 0, & x < 0, \ x > a. \end{cases} \quad \text{Обчисліть сталу нормування } A.$$

Розв'язання. Частинка локалізована в скінченній області простору, тому за умову нормування обираємо співвідношення (1.3):

$$1 = |A|^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{1}{2} |A|^2 \int_0^a \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a} \right) dx = \frac{a}{2} |A|^2.$$

Інтеграл від другого доданка перетворюється на нуль завдяки інтегруванню гармонічної функції за її періодом. Таким чином, нормована хвильова функція має вигляд $\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}$.

Приклад 1.2. Частинка приведена в стан з хвильовою функцією $\Psi(x) = B \exp \left[-\frac{x^2}{2x_0^2} \right]$, де x_0 — стала розмірності довжини. Обчисліть B .

Розв'язання. Означення (1.3) за допомогою заміни змінних $\frac{x}{x_0} = \xi$ зведемо до *інтеграла Пуассона*:

$$1 = |B|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{x^2}{x_0^2} \right] dx = |B|^2 x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = |B|^2 x_0 \sqrt{\pi}, \Rightarrow |B|^2 = \frac{1}{x_0 \sqrt{\pi}}.$$

Остаточна відповідь: $\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{x^2}{2x_0^2} \right]$.

Приклад 1.3. Хвильова функція залежить від полярного кута φ та задана виразом $\Psi(\varphi) = A e^{i\alpha\varphi}$, де α — деяка стала. Визначте можливі значення α та пронормуйте хвильову функцію $\Psi(\varphi)$.

Розв'язання. Полярний кут задає деякий напрямок на площині $ХОУ$ відносно початку координат. У разі зміни кута на 2π напрямок залишається незмінним. Тому для виконання умови однозначності функція полярного кута $\Psi(\varphi)$ повинна бути *періодичною* з періодом 2π : $\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$.

З явного вигляду функції $\Psi(\varphi)$ та попередньої умови отримуємо обмеження на значення сталої α : $e^{2\pi i\alpha} = 1$, звідки випливає, що вона повинна набувати тільки цілих значень: $\alpha \equiv m = 0, \pm 1, \dots$

Полярний кут φ може набувати значення з інтервалу $0 \leq \varphi < 2\pi$, тому умова нормування (1.3) набуває вигляду $\int_0^{2\pi} |\Psi(\varphi)|^2 d\varphi = 2\pi |A|^2 = 1$. Остаточна

отримуємо нормовану хвильову функцію: $\Psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$, $m \in \mathbb{Z}$.

Приклад 1.4. Пронормуйте функції $\Psi_1(\theta, \varphi) = A_1$ і $\Psi_2(\theta, \varphi) = A_2 \cos \theta$ на одиничній сфері.

Розв'язання. Задані хвильові функції залежать тільки від полярного та азимутального кутів, тому розв'язувати задачу будемо у сферичній системі координат. Елемент кута в ній $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$.

Сталу A_1 отримаємо елементарним інтегруванням з умови (1.3):

$$\int |\Psi_1(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = |A_1|^2 \int d\Omega = |A_1|^2 \underbrace{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\varphi}_{4\pi} = 1, \text{ звідки } A_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

У ході обчислення сталої нормування A_2 зробимо заміну змінних $\cos \theta = \xi$:

$$\int |\Psi_2(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = |A_2|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{+1} \xi^2 d\xi = \frac{4\pi}{3} |A_2|^2 = 1. \text{ В результаті } A_2 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}.$$

Приклад 1.5. Пронормуйте хвильову функцію $\Psi(r) = D \exp\left[-\frac{Zr}{a_0}\right]$, задану в усьому просторі у сферичних координатах ($a_0 > 0$ — стала розмірності довжини, $Z > 0$ — безрозмірна стала).

Розв'язання. Елемент об'єму у сферичних координатах $d^3r = r^2 dr d\Omega$. Застосовуючи обчислення з попереднього прикладу і заміну $\xi = 2Zr/a_0$ в радіальному інтегралі, вираз (1.3) перетворимо до такого вигляду:

$$\int |\Psi(r)|^2 d^3r = |D|^2 \int d\Omega \int_0^\infty r^2 \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right) dr = 4\pi |D|^2 \frac{a_0^3}{8Z^3} \overbrace{\int_0^\infty \xi^2 e^{-\xi} d\xi}^2 = 1.$$

Остаточно отримаємо $\Psi(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp\left[-\frac{Zr}{a_0}\right]$.

Приклад 1.6. Знайдіть координату x мікрочастинки в одновимірній прямокутній потенціальній ямі шириною $\alpha = 10\text{\AA}$ з нескінченно високими стінками, за якої густина ймовірності її знаходження максимальна. Хвильова функція мікрочастинки має вигляд $\Psi = Ax^5(a-x)^2$.

Розв'язання. Густина ймовірності максимальна, коли $|\Psi|^2$ хвильової

функції має екстремум. Умова екстремуму $\frac{d}{dx}|\Psi|^2 = 0$. З неї маємо:

$$\frac{d}{dx} \left(A^2 x^{10} (a-x)^4 \right) = A^2 10x^9 (a-x)^4 - A^2 x^{10} 4(a-x)^3 = 0.$$

$$A^2 x^9 (a-x)^3 (10(a-x) - 4x) = 0 \Rightarrow x = \frac{10a}{14} = 7,14\text{\AA}.$$

Завдання для самостійного виконання

1. Хвильовий пакет заданий функцією $\Psi(x) = A \exp \left(-\frac{x^2}{2x_0^2} + ik_0 x \right)$, де $x_0 > 0$ — стала розмірності довжини, що визначає ширину пакета; k_0 — стала з розмірністю хвильового числа. Обчисліть сталу нормування A .

2. Хвильова функція задана на всій дійсній осі такими виразами:

$$\Psi_1(x) = Ax \exp \left(-\frac{x}{x_0} \right), \quad \Psi_2(x) = Ax \exp \left(-\frac{x^2}{x_0^2} \right), \quad \Psi_3(x) = A \left(1 + \frac{x^2}{x_0^2} \right)^{-1},$$

де $x_0 > 0$ — стала розмірності довжини. Обчисліть A .

3. Хвильові функції задані на одиничній сфері у сферичних координатах виразом $\Psi_{\pm}(\theta, \varphi) = B_{\pm} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$. Обчисліть сталі нормування $B_{\pm}$.

4. Хвильова функція задана в усьому просторі у сферичних координатах виразом $\Psi(r) = C \exp \left(-\frac{r^2}{2r_0^2} \right)$, де $r_0 > 0$ — стала розмірності довжини. Обчисліть сталу C .

5. Хвильова функція деякої частинки має вигляд $\Psi = \frac{A}{r} e^{-r/\alpha}$, де r — відстань від цієї частки до силового центра (візьміть $\alpha = 1\text{\AA}$). Застосовуючи умову нормування (1.3), знайдіть коефіцієнт A . Визначте, яка густина ймовірності знаходження цієї частинки на відстані $2\text{\AA}$.

6. Хвильова функція деякої частинки має вигляд $\Psi = Ae^{-r/\alpha}$, де r — відстань від цієї частинки до силового центра ($\alpha = 1\text{\AA}$). Застосовуючи умову нормування (1.3), визначте коефіцієнт A . Визначте, на якій відстані r_1 (у нанометрах) від початку координат ймовірність знаходження мікрочастинки максимальна. Обчисліть густину ймовірності ω знаходження цієї частинки на відстані $2\text{\AA}$ від початку координат. Визначте відстань r_2 (у нанометрах) від частинки до силового центра, де густина ймовірності знаходження частинки дорівнює $5,83 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$.

7. Знайдіть максимальну густину ймовірності знаходження мікрочастинки в одновимірній прямокутній потенціальній ямі шириною $a = 10\text{\AA}$ з нескінченно високими стінками, якщо хвильові функції мають такий вигляд:

$$\Psi_1 = Ax^2(a-x)^2, \Psi_2 = Ax(a-x), \Psi_3 = Ax^3(a-x), \Psi_4 = Ax(a-x)^2, \Psi_5 = Ax^2(a-x).$$

8. Знайдіть координату x мікрочастинки в одновимірній прямокутній потенціальній ямі завширшки $a = 10\text{\AA}$ з нескінченно високими стінками, за якої густина ймовірності її знаходження максимальна. Хвильова функція мікрочастинки має такий вигляд: $\Psi_1 = Ax^4(a-x)$, $\Psi_2 = Ax(a-x)^2$, $\Psi_3 = Ax(a-x)^3$, $\Psi_4 = Ax^3(a-x)$.

9. Хвильова функція $\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{(n+1)\pi x}{a}$ описує стан електрона в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками, де $a = 10\text{\AA}$. Визначте координату x електрона (у нанометрах), де густина ймовірності його знаходження дорівнює $2 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$.

2. Оператори в квантовій механіці

У квантовій механіці для зображення фізичних величин служать **оператори**. З математичної позиції оператор являє собою спосіб переходу від однієї хвильової функції до іншої. Оператор позначають, наприклад, так: $\hat{D}$. Запис $\hat{D}\Psi(\zeta)$ означає дію оператора $\hat{D}$ на функцію $\Psi(\zeta)$, що в загальному випадку не зводиться до звичайного множення. Результатом дії оператора на функцію буде функція. Оператор визначають на деякій множині, або класі, функцій. У квантовій теорії — це функції, що задовольняють стандартні умови скінченності, однозначності та безперервності. Визначити оператор — означає встановити правило його дії на довільну функцію даного класу.

Визначимо найважливіші правила алгебричних дій над операторами.

Операторна рівність $\hat{A} = \hat{B}$. Оператори $\hat{A}$ і $\hat{B}$ дорівнюють один одному, якщо в результаті дії їх на одну й ту ж довільну функцію $\Psi(\zeta)$ з даного класу отримуємо однакові функції: $\hat{A}\Psi(\zeta) = \hat{B}\Psi(\zeta)$.

Нульовий оператор $\hat{0}$. Оператор нульовий, якщо внаслідок його дії на довільну функцію $\Psi(\zeta)$ результатом буде тотожний нуль: $\hat{0}\Psi(\zeta) \equiv 0$.

Одиничний оператор $\hat{1}$. Оператор одиничний, якщо його дія на довільну функцію $\Psi(\zeta)$ не змінює останню: $\hat{1}\Psi(\zeta) = \Psi(\zeta)$.

Множення оператора на сталу $\alpha\hat{A}$. У результаті множення оператора на сталу отримуємо новий оператор, дію якого на довільну функцію $\Psi(\zeta)$ визначає таке правило: $\alpha\hat{A}\Psi(\zeta) = \alpha(\hat{A}\Psi(\zeta))$.

Сума операторів $\hat{A} + \hat{B}$. Сумою операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ називають оператор, дія якого на довільну функцію $\Psi(\zeta)$ полягає в незалежній дії на неї кожного

оператора окремо з подальшим додаванням результатів:

$$(\hat{A} + \hat{B}) \Psi(\zeta) = (\hat{A}\Psi(\zeta)) + (\hat{B}\Psi(\zeta)).$$

Звідси випливає, що *сума операторів завжди комутативна*:

$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}. \quad (2.1)$$

Добуток операторів $\hat{A} \cdot \hat{B}$. Добутком операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ називають оператор, дія якого на довільну функцію $\Psi(\zeta)$ полягає в послідовній дії на неї спочатку оператора $\hat{B}$, а потім $\hat{A}$: $(\hat{A}\hat{B})\Psi(\zeta) = \hat{A}(\hat{B}\Psi(\zeta))$. На відміну від суми добуток операторів у загальному випадку залежить від порядку наступності співмножників, тобто *добуток операторів некомутативний*. У квантовій механіці вводять спеціальну конструкцію, побудовану з добутків операторів, — *комутатор*:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (2.2)$$

Також існує поняття *антикомутатора*: $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$.

Обернений оператор $\hat{A}^{-1}$. Оберненим до $\hat{A}$ будемо називати такий оператор $\hat{A}^{-1}$, для якого виконується співвідношення: $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = 1$.

Цілий додатний степінь оператора $\hat{A}^n$ є n -кратним добутком оператора самого на себе: $\hat{A}^n = \hat{A} \cdot \dots \cdot \hat{A}$.

Ермітово-спряжений оператор $\hat{A}^+$. Оператор $\hat{A}^+$ називають *ермітово-спряженим щодо $\hat{A}$* , якщо для довільних функцій $\Upsilon(\zeta)$ і $\Psi(\zeta)$ справджується рівність

$$\int \Upsilon^*(\zeta) \hat{A}^+ \Phi(\zeta) d\zeta = \int \Phi(\zeta) \hat{A}^* \Upsilon^*(\zeta) d\zeta. \quad (2.3)$$

Якщо дія оператора на функцію зводиться до множення її на функцію $\omega(\zeta)$: $\hat{A}\Psi(\zeta) = \omega(\zeta)\Psi(\zeta)$, то для неї маємо рівність $\omega^+(\zeta) = \omega^*(\zeta)$.

Оператор називають *самоспряженим* або *ермітовим*, якщо він збігається зі своїм ермітовим спряженням: $\hat{A}^+ = \hat{A}$.

Оператор $\hat{A}$ називають *унітарним*, якщо його ермітове спряження збігається з оберненим оператором: $\hat{A}^+ = \hat{A}^{-1}$.

У квантовій механіці велике значення мають так звані *лінійні оператори*, які задовольняють умову

$$\hat{A}(\alpha\Phi + \beta\Psi) = \alpha\hat{A}\Phi + \beta\hat{A}\Psi \quad (2.4)$$

для довільних функцій Φ і Ψ та довільних комплексних сталих α і β . Для виконання принципу суперпозиції станів (1.5) оператори фізичних величин повинні бути лінійними.

У табл. 2.1 наведено оператори найважливіших фізичних величин (m — маса частинки). Перші шість із них застосовують як у класичній, так і в квантовій механіці. *Парність* — суто квантова характеристика мікрооб'єктів.

Таблиця 2.1. Оператори основних фізичних величин

Фізична величина	Оператор
<i>Координата</i>	
$\mathbf{r} = \mathbf{i}x + \mathbf{j}y + \mathbf{k}z = \sum_k \mathbf{e}_k x_k$	$\hat{\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\Psi(\mathbf{r})$
<i>Імпульс</i>	
$\mathbf{p} = \mathbf{i}p_x + \mathbf{j}p_y + \mathbf{k}p_z = \sum_k \mathbf{e}_k p_k$	$\hat{\mathbf{p}}\Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\Psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r})$
<i>Орбітальний момент</i>	
$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix},$ $L_x = yp_z - zp_y,$ $L_y = zp_x - xp_z,$ $L_z = xp_y - yp_x$	$\hat{\mathbf{L}} = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix},$ $\hat{L}_x = -i\hbar \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right),$ $\hat{L}_y = -i\hbar \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} \right),$ $\hat{L}_z = -i\hbar \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)$
<i>Кінетична енергія</i>	
$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$	$\hat{T}\Psi(\mathbf{r}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{r})$
<i>Потенціальна енергія</i>	
$U = U(\mathbf{r}, t)$	$\hat{U}\Psi(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)$
<i>Повна енергія</i>	
$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}, t)$ оператор Гамільтона
<i>Парність</i>	
P	$\hat{I}\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(-\mathbf{r}, t)$ оператор інверсії

Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 2.1. У добутках операторів $(\hat{F} - \hat{G}) \cdot (\hat{F} + \hat{G})$ та $(\hat{F} + \hat{G})^2$ розкрийте дужки.

Розв'язання. Подамо результати у формі, найбільш близькій до відповідних тотожностей для звичайних чисел:

$$\begin{aligned}(\hat{F} - \hat{G})(\hat{F} + \hat{G}) &= \hat{F}(\hat{F} + \hat{G}) - \hat{G}(\hat{F} + \hat{G}) = \hat{F}^2 - \hat{G}^2 + \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = \\&= \hat{F}^2 - \hat{G}^2 + [\hat{F}, \hat{G}]. \\(\hat{F} + \hat{G})^2 &= (\hat{F} + \hat{G})(\hat{F} + \hat{G}) = \hat{F}(\hat{F} + \hat{G}) + \hat{G}(\hat{F} + \hat{G}) = \\&= \hat{F}^2 + \hat{G}^2 + \hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F} = \hat{F}^2 + 2\hat{F}\hat{G} + \hat{G}^2 - [\hat{F}, \hat{G}].\end{aligned}$$

Відмінність від звичайної алгебри полягає в додаткових складових — комутаторах.

Приклад 2.2. Виразіть оператор $(\hat{F}\hat{G})^{-1}$ через $\hat{F}^{-1}$ та $\hat{G}^{-1}$.

Розв'язання. Легко показати, що $\hat{F}\hat{1} = \hat{1}\hat{F} = \hat{F}$. За визначенням оберненого оператора: $(\hat{F}\hat{G})(\hat{F}\hat{G})^{-1} = \hat{1}$. Перетворимо ліву частину рівності, домноживши обидві частини зліва спочатку на $\hat{F}^{-1}$, а потім на $\hat{G}^{-1}$:

$$\hat{F}^{-1}(\hat{F}\hat{G})(\hat{F}\hat{G})^{-1} = \hat{F}^{-1} \Rightarrow \hat{G}^{-1}\hat{G}(\hat{F}\hat{G})^{-1} = \hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1}.$$

У результаті отримаємо тотожність $(\hat{F}\hat{G})^{-1} = \hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1}$. Вона демонструє відмінність операторів від звичайних чисел. Якщо ж оператори комутують, ми приходимо до «традиційного» правила перетворення добутку чисел.

Приклад 2.3. Виразіть комутатор $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]$ через прості комутатори $[\hat{A}, \hat{B}]$ і $[\hat{A}, \hat{C}]$.

Розв'язання. Застосовуючи означення комутатора (2.2) і дві допоміжні тотожності $\hat{F} + \hat{0} = \hat{F}$ і $\hat{F} - \hat{F} = \hat{0}$, перетворимо заданий комутатор таким чином:

$$\begin{aligned}[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{0} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \\&= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}).\end{aligned}$$

У результаті отримаємо співвідношення $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$. Отримана тотожність надзвичайно зручна у ході «спрощення» комутаторів.

Приклад 2.4. Обчисліть комутатор $[\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}^2]$.

Розв'язання. Записавши комутатор у декартовій системі координат,

застосуємо властивість білінійності й результат попереднього прикладу:

$$\begin{aligned} [\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}^2] &= \left[\sum_k \mathbf{e}_k x_k, \sum_l \hat{p}_l \hat{p}_l \right] = \sum_{k,l} \mathbf{e}_k [x_k, \hat{p}_l \hat{p}_l] = \\ &= \sum_{k,l} \mathbf{e}_k \{ [x_k, \hat{p}_l] \hat{p}_l + \hat{p}_l [x_k, \hat{p}_l] \} = 2i\hbar \sum_{k,l} \mathbf{e}_k \delta_{kl} \hat{p}_l = 2i\hbar \hat{\mathbf{p}}. \end{aligned}$$

Приклад 2.5. Обчисліть комутатори $[\mathbf{r}, \hat{H}]$, $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}]$, вважаючи вигляд потенціальної енергії $U(\mathbf{r})$ і масу частинки m відомими.

Розв'язання. Застосувавши результати попередніх задач, отримаємо такі вирази:

$$\begin{aligned} [\mathbf{r}, \hat{H}] &= \left[\mathbf{r}, \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right] = \frac{1}{2m} [\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}^2] + [\mathbf{r}, U(\mathbf{r})] = \frac{i\hbar}{m} \hat{\mathbf{p}}. \\ [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] &= - \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}} \right] = -\frac{1}{2m} [\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{\mathbf{p}}] - [U(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar \text{grad } U(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Дані тотожності застосовують для виведення деяких фундаментальних співвідношень квантової теорії.

Приклад 2.6. Обчисліть комутатор $[x_k, \hat{L}_l]$.

Розв'язання. Виразимо $\hat{L}_l$ за допомогою символу **Леві-Чивіті**:

$$\begin{aligned} [x_k, \hat{L}_l] &= \left[x_k, \sum_{m,n} \epsilon_{lmn} x_m \hat{p}_n \right] = \sum_{m,n} \epsilon_{lmn} [x_k, x_m \hat{p}_n] = \\ &= \sum_{m,n} \epsilon_{lmn} \{ [x_k, x_m] \hat{p}_n + x_m [x_k, \hat{p}_n] \} = i\hbar \sum_m \epsilon_{lmn} x_m = i\hbar \sum_m \epsilon_{klm} x_m. \end{aligned}$$

На останньому кроці ми зробили циклічну перестановку індексів, від якої значення символу Леві-Чивіті не змінюється. Легко побачити, що за рахунок ϵ -символу формули більш компактні.

Приклад 2.7. За допомогою правил комутації доведіть, що оператор $\hat{L}^2$ комутує з операторами $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ і $\hat{L}_z$.

Розв'язання. Спочатку розглянемо комутацію $\hat{L}^2$ з оператором $\hat{L}_x$:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x].$$

Кожна проекція оператора моменту комутує сама із собою, тоді перший доданок рівності $[\hat{L}_x^2, \hat{L}_x] = 0$. Останні два комутатори подамо у вигляді

$$\begin{aligned} [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] &= \hat{L}_y [\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x] \hat{L}_y = -i\hbar (\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y); \\ [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] &= \hat{L}_z [\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \hat{L}_z = -i\hbar (\hat{L}_z \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_z). \end{aligned}$$

Остаточно маємо, що $[\widehat{L}^2, \widehat{L}_x] = 0$. Аналогічно доводимо для $\widehat{L}_y$ та $\widehat{L}_z$.

Приклад 2.8. Доведіть, що якщо оператори $\widehat{A}$ та $\widehat{B}$ ермітові та комутують, то оператор $\widehat{A}\widehat{B}$ теж ермітовий.

Розв'язання. З умови ермітовості (2.3) операторів $\widehat{A}$ та $\widehat{B}$ випливає, що

$$\int \Psi_1^* \widehat{A} (\widehat{B} \Psi_2) d\zeta = \int \widehat{B} \Psi_2 (\widehat{A}^* \Psi_1^*) d\zeta = \int \widehat{A}^* \Psi_1^* (\widehat{B} \Psi_2) d\zeta = \int \Psi_2 \widehat{B}^* (\widehat{A}^* \Psi_1^*) d\zeta.$$

Оскільки оператори $\widehat{A}$ і $\widehat{B}$ комутують, то $\widehat{B}^* \widehat{A}^* = \widehat{A}^* \widehat{B}^*$ та

$$\int \Psi_1^* \widehat{A} \widehat{B} \Psi_2 d\zeta = \int \Psi_2 \widehat{A}^* \widehat{B}^* \Psi_1^* d\zeta,$$

що і є умовою ермітовості оператора $\widehat{A}\widehat{B}$.

Приклад 2.9. Припустимо, що $\widehat{L}$ — довільний лінійний оператор. Доведіть, що $(\widehat{L}^+)^+ = \widehat{L}$.

Розв'язання. Застосовуючи означення ермітово-спряженого оператора (2.3) та властивості скалярного добутку для двох довільних функцій Φ і Ψ , отримаємо, що

$$(\Phi, \widehat{L} \Psi) = (\widehat{L}^+ \Phi, \Psi) = (\Psi, \widehat{L}^+ \Phi)^* = \left((\widehat{L}^+)^+ \Psi, \Phi \right)^* = \left(\Phi, (\widehat{L}^+)^+ \Psi \right),$$

звідки випливає твердження задачі.

Приклад 2.10. Доведіть, що для будь-яких трьох лінійних операторів $\widehat{A}$, $\widehat{B}$, $\widehat{C}$ справедливе співвідношення $(\widehat{A}\widehat{B}\widehat{C})^+ = \widehat{C}^+ \widehat{B}^+ \widehat{A}^+$.

Розв'язання. З одного боку, для двох довільних функцій Υ і Ω

$$(\Upsilon, \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C}\Omega) = \left((\widehat{A}\widehat{B}\widehat{C})^+ \Upsilon, \Omega \right).$$

З іншого боку,

$$(\Upsilon, \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C}\Omega) = (\widehat{A}^+ \Upsilon, \widehat{B}\widehat{C}\Omega) = (\widehat{B}^+ \widehat{A}^+ \Upsilon, \widehat{C}\Omega) = (\widehat{C}^+ \widehat{B}^+ \widehat{A}^+ \Upsilon, \Omega).$$

Тобто $\left((\widehat{A}\widehat{B}\widehat{C})^+ \Upsilon, \Omega \right) = (\widehat{C}^+ \widehat{B}^+ \widehat{A}^+ \Upsilon, \Omega).$

Приклад 2.11. Доведіть ермітовість оператора $\hat{p}_x$.

Розв'язання. Здійснюємо такі перетворення, маючи на увазі, що в нескінченності хвильові функції та їх похідні перетворюються на нуль:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \hat{p}_x \Psi_2 dx &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \left(\frac{d\Psi_2}{dx} \right) dx = -i\hbar \left(\Psi_1^* \Psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 \frac{d\Psi_1^*}{dx} dx \right) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 \left(i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_1^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 \hat{p}_x \Psi_1^* dx. \end{aligned}$$

Приклад 2.12. Доведіть самоспряженість оператора $\hat{p}_x$.

Розв'язання. Застосувавши явний вид оператора проекції імпульсу, маємо

$$\hat{p}_x^+ = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^+ = \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^+ (-i\hbar)^+ = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \equiv \hat{p}_x.$$

Приклад 2.13. Нехай комутатором двох операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ є число $[\hat{A}, \hat{B}] = ic$, де c — дійсна стала. Доведіть вираз $e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-ic\lambda^2/2}$.

Розв'язання. Введемо оператор $\hat{F}(\lambda) = e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} - e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-ic\lambda^2/2}$ та знайдемо похідну оператора за параметром λ :

$$\frac{\partial \hat{F}(\lambda)}{\partial \lambda} = (\hat{A} + \hat{B}) e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} - \hat{A} e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{ic\lambda^2}{2}} - e^{\lambda\hat{A}} \hat{B} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{ic\lambda^2}{2}} + ic\lambda e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{ic\lambda^2}{2}}.$$

Застосовуючи комутативне співвідношення $[\hat{A}, \hat{B}] = ic$, отримаємо

$$\hat{A}^n \hat{B} = \hat{A}^{n-1} \hat{B} \hat{A} + ic \hat{A}^{n-1} = \dots = \hat{B} \hat{A}^n + icn \hat{A}^{n-1},$$

тобто

$$e^{\lambda\hat{A}} \hat{B} = \hat{B} e^{\lambda\hat{A}} + ic \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{(n-1)!} \hat{A}^{n-1} = \hat{B} e^{\lambda\hat{A}} + ic\lambda e^{\lambda\hat{A}}.$$

Отже, маємо співвідношення $\frac{\partial \hat{F}(\lambda)}{\partial \lambda} = (\hat{A} + \hat{B}) \hat{F}(\lambda)$, із якого випливає, що $\hat{F}(\lambda) = e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} \hat{G}$, де $\hat{G}$ — оператор, що не залежить від параметра λ .

За $\lambda = 0$ $\hat{F} = 0$, тому $\hat{G} = 0$ та $\hat{F} \equiv 0$, що й треба було довести.

Приклад 2.14. Оператор зсуву вздовж осі x визначають за правилом $\hat{T}_a \Psi(x) = \Psi(x-a)$, де $\Psi(x)$ — хвильова функція. Знайдіть аналогічний вигляд цього оператора і доведіть його унітарність.

Розв'язання. Розвинемо праву частину заданого рівняння в ряд Тейлора за степенями параметра зсуву a :

$$\Psi(x-a) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{a^n}{n!} \frac{d^n \Psi(x)}{dx^n} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[-a \frac{d}{dx} \right]^n \Psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x \right]^n \Psi(x).$$

Застосовуючи операторну рівність, отримуємо явний вигляд оператора зсуву $\hat{T}_a = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x \right) = \exp \left(-a \frac{d}{dx} \right)$. Останній запис дозволяє зробити висновок про унітарність оператора зсуву.

Завдання для самостійного виконання

1. Доведіть, що оператор піднесення до квадрата є лінійний, а оператор комплексного спряження — нелінійний.

2. Знайдіть результат дії операторів $\frac{d^2}{dx^2} x^2$ та $\left(\frac{d}{dx} x \right)^2$ на функцію $\cos x$.

3. Знайдіть явний вигляд операторів $\left(x + \frac{d}{dx} \right)^2$, $\left(x \frac{d}{dx} \right)^2$, $\left(\frac{1}{x} + \frac{d}{dx} \right)^3$.

4. Розкрийте дужки: $\left(\frac{\hat{x}}{x_0} - \frac{\hat{p}_x}{p_0} \right) \cdot \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + \frac{\hat{p}_x}{p_0} \right)$, $\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + \frac{\hat{p}_x}{p_0} \right)^2$, $\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + \frac{\hat{p}_x}{p_0} \right)^3$, якщо x_0 і p_0 — сталі розмірності координати й імпульсу відповідно.

5. Доведіть, що для довільного оператора $\hat{F}$, для якого виконується умова $\hat{F}^2 = 1$, справедливе співвідношення $e^{i\lambda \hat{F}} = \cos \lambda + i \hat{F} \sin \lambda$.

6. Перевірте, чи є оператори $i \frac{d}{dx}$, $ix \frac{d}{dx}$, $x^2 \cos x$, $-i \cos x \frac{d}{dx}$ ермітовими.

7. Знайдіть оператори ермітово-спряжені операторам $i \frac{\partial}{\partial x}$, $x \frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$.

8. Для трьох операторів $\hat{A}$, $\hat{B}$ і $\hat{C}$ знайдіть правило комутації $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$.

9. Для довільних операторів $\hat{L}$ і $\hat{M}$, що задовольняють співвідношення $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 1$, знайдіть значення виразу $\hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{L}$.

10. Доведіть, що оператори $\hat{L}^+ \hat{L}$, $\hat{L} \hat{L}^+$, $\hat{L} + \hat{L}^+$ й $i(\hat{L} - \hat{L}^+)$ будуть ермітовими, якщо $\hat{L}$ — довільний оператор.

11. Доведіть, що оператор $\hat{G} = \hat{A}\hat{C}\hat{A}^+$ ермітовий, якщо оператор $\hat{C}$ ермітів.

12. Доведіть, що якщо $\hat{A}$ і $\hat{B}$ — ермітові оператори, то оператори $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ й $i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ також ермітові.

13. З'ясуйте, за яких умов оператор $\hat{\Pi}^2$ буде ермітовим, якщо оператор $\hat{\Pi}$ неермітовий.

14. Доведіть самоспряженість операторів фізичних величин та оператора інверсії.

15. Оператори $\hat{F}$ і $\hat{G}$ — ермітові. Доведіть самоспряженість $i[\hat{F}, \hat{G}]$.

16. Покажіть, що добуток унітарних операторів є унітарний оператор.

17. Припускаючи, що λ — мала величина, знайдіть розвинення в ряд оператора $(\hat{A} - \lambda \hat{B})^{-1}$ за степенями λ .

18. Доведіть співвідношення Бекера — Кемпбелла — Хаусдорфа:

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

19. Доведіть тотожність Вейля $e^{\hat{F} + \hat{G}} = e^{-[\hat{F}, \hat{G}]/2} e^{\hat{F}} e^{\hat{G}}$ для операторів, що задовольняють умови $[\hat{F}, [\hat{F}, \hat{G}]] = 0$, $[\hat{G}, [\hat{F}, \hat{G}]] = 0$.

20. Знайдіть такі комутатори: $[x_i, \hat{p}_j]$, $[x_i, x_j]$, $[\hat{p}_i, \hat{p}_j]$, $[\mathbf{r}, (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})]$, $[\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{r}^2]$, $[\mathbf{r}^2, (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})]$, $[\hat{\mathbf{p}}^2, (\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}})]$, $[(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}), [\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}]]$, $[x_i, \hat{H}]$, $[\hat{p}_i, \hat{H}]$, $[\mathbf{r}^2, \hat{H}]$, $[\hat{\mathbf{p}}^2, \hat{H}]$, $[(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}), \hat{H}]$, $[\hat{p}_i, \hat{L}_j]$, $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$, $[\hat{L}_i, \hat{\mathbf{r}}^2]$, $[\hat{L}_i, \hat{\mathbf{p}}^2]$, $[\hat{L}_i, (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})]$, $[\hat{L}_i, (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})^2]$, $[\hat{L}_i, (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{r}}]$, $[\hat{L}_i, (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{p}}]$, $[\hat{L}_i, (a\hat{\mathbf{r}} + b\hat{\mathbf{p}})]$, $[\hat{L}_i, \hat{x}_k \hat{x}_l]$, $[\hat{L}_i, \hat{p}_k \hat{p}_l]$, $[\hat{L}_i, \hat{x}_k \hat{p}_l]$.

21. Знайдіть такі комутатори: $[B(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}]$, $[\mathbf{A}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}]$, $[B(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{L}}]$, $[\mathbf{A}(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{L}}]$, $[B(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{L}}^2]$ за умови, що $B(\mathbf{r})$ і $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — диференційовні скалярна і векторна функції координат відповідно.

3. Власні функції та власні значення операторів

Якщо відома хвильова функція квантової системи, то середнє значення D обчислюють за формулою

$$\overline{D} = \int \Psi^*(\zeta) \hat{D} \Psi(\zeta) d\zeta, \quad (3.1)$$

де $\hat{D}$ — оператор величини D . Якщо має місце ненормована хвильова функція фінітного руху, то формулу (3.1) необхідно узагальнити таким чином:

$$\overline{D} = \frac{\int \Psi^*(\zeta) \hat{D} \Psi(\zeta) d\zeta}{\int |\Psi(\zeta)|^2 d\zeta}. \quad (3.2)$$

Середнє значення за своїм змістом повинно бути величиною суто дійсною.

Методика вимірювання фізичної величини D мікрооб'єкта дає ненульові значення середньоквадратичного відхилення $\overline{(\Delta D)^2} \equiv \overline{D^2} - \overline{D}^2$ навіть у випадку ідеального приладу з нульовою похибкою. Така *невизначеність* у значенні величини D є об'єктивна властивість руху в мікросвіті. Тому постає проблема пошуку станів з *певними* значеннями D . Визначеність величини D у деякому стані квантової системи означає, що кожного разу під час її вимірювання буде виходити *те саме значення* цієї величини. Дану проблему легко вирішити, якщо ототожнити одержані в експерименті значення величини D з *власними значеннями* її оператора $\hat{D}$, а певні стани математично описувати відповідними до цих значень *власними функціями* $\Psi_D(\zeta)$ оператора $\hat{D}$:

$$\hat{D}\Psi_D(\zeta) = D\Psi_D(\zeta). \quad (3.3)$$

З математичної позиції рівняння (3.3) являє собою задачу пошуку власних функцій і власних значень оператора $\hat{D}$. Вона вимагає знаходження нетривіальних ($\Psi_D(\zeta) \neq 0$) розв'язків рівняння із заданими граничними умовами.

Якщо множина власних значень оператора $\hat{D}$ зліченна, то говорять про **дискретний спектр** значень. У даному випадку власні значення виражають як D_n , а власні функції, відповідні власним значенням, — як $\Psi_n(\zeta)$. Якщо власному значенню D_n відповідає кілька лінійно незалежних власних функцій $\Psi_n^1, \Psi_n^2, \dots, \Psi_n^s$, то відповідне значення D_n називають s -кратно виродженим. У цьому випадку будь-яка лінійна комбінація $\Phi_n^m = \sum_{i=1}^s c_m^i \Psi_n^i$, де c_m^i —

довільні комплексні числа, також буде власною функцією оператора $\hat{D}$, що належить до значення D_n . Кількість лінійно незалежних комбінацій дорівнює кратності виродження рівня s .

Якщо власні значення оператора $\hat{D}$ є довільними комплексними числами (визначаються неперервним рядом на деякому інтервалі), то спектр оператора називають **неперервним**. Власні значення в цьому випадку виражають як D , а власні функції, відповідні цим власним значенням, як Ψ_D . Власні функції неперервного спектра залежать від D як від параметра, тобто $\Psi_D(\zeta) \equiv \Psi(D, \zeta)$.

Власні значення і власні функції лінійних ермітових операторів мають ряд специфічних властивостей:

- їх власні значення *дійсні*;
- власні функції, що відповідають різним власним значенням, взаємно *ортogonalні*;
- власні функції *лінійно незалежні*;

- система власних функцій *повна* в класі тих функцій, на яких цей оператор заданий, тобто вона утворює *базис оператора*.

Найважливіші математичні властивості операторів із дискретним і неперервним спектрами наведені нижче (табл. 3.1). Розглянемо деякі характерні приклади.

Таблиця 3.1. Властивості власних функцій і власних значень лінійних ермітових операторів

Дискретний спектр	Неперервний спектр
<i>Рівняння</i>	
$\hat{D}\Psi_n(\zeta) = D_n\Psi_n(\zeta)$	$\hat{D}\Psi_D(\zeta) = D\Psi_D(\zeta)$
<i>Ортонормованість</i>	
$\int \Psi_{n'}^*(\zeta)\Psi_n(\zeta)d\zeta = \delta_{n'n},$ $\delta_{n'n}$ — <i>символ Кронекера</i>	$\int \Psi_{D'}^*(\zeta)\Psi_D(\zeta)d\zeta = \delta(D' - D),$ $\delta(D' - D)$ — <i>δ-функція Дірака</i>
<i>Повнота</i>	
$\sum_n \Psi_n^*(\zeta)\Psi_n(\zeta') = \delta(\zeta' - \zeta)$	$\int \Psi_D^*(\zeta)\Psi_D(\zeta')dD = \delta(\zeta' - \zeta)$
<i>Базис</i>	
$\Phi(\zeta) = \sum_n f_n\Psi_n(\zeta),$ $f_n = \int \Psi_n^*(\zeta)\Phi(\zeta)d\zeta,$ $\sum_n f_n ^2 = 1$	$\Phi(\zeta) = \int f(D)\Psi_D(\zeta)dD,$ $f(D) = \int \Psi_D^*(\zeta)\Phi(\zeta)d\zeta,$ $\int f(D) ^2 dD = 1$

Приклад 3.1. Доведіть таке твердження: якщо оператори $\hat{A}$ та $\hat{B}$ мають спільні власні функції, то такі оператори комутують.

Розв'язання. Якщо Ψ — спільна власна функція операторів $\hat{A}$ та $\hat{B}$, то, застосовуючи означення (3.3), маємо дві рівності:

$$\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{A}B\Psi = B\hat{A}\Psi = BA\Psi; \quad \hat{B}\hat{A}\Psi = \hat{B}A\Psi = A\hat{B}\Psi = AB\Psi.$$

Звідси $\hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi$ та $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Приклад 3.2. Доведіть, що, якщо оператор $\hat{A}$ ермітовий, то його власні значення дійсні.

Розв'язання. Нехай Ψ — довільна власна функція оператора $\hat{A}$, що відповідає його власному значенню A . Тоді у випадку самоспряженості цього оператора отримаємо таке співвідношення:

$$\int \Psi^* \hat{A} \Psi d\zeta = \int \Psi \hat{A}^* \Psi^* d\zeta \Rightarrow A \int \Psi^* \Psi d\zeta = A^* \int \Psi \Psi^* d\zeta,$$

звідки $A = A^*$. Але останнє твердження можливе лише за дійсного A .

Приклад 3.3. Нехай функція $F(z)$ комплексної змінної z є аналітична в колі з центром у точці $z = 0$ і нехай власні значення f_n ермітового оператора $\hat{f}$ знаходяться в цьому колі. Доведіть, що під оператором $F(\hat{f})$ можна розуміти оператор $F(\hat{f}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{f}^n$, де c_n — коефіцієнти ряду Тейлора функції $F(z)$. Під оператором $F(\hat{f})$ розуміють лінійний оператор з тими ж власними функціями ψ_n , що й у оператора $\hat{f}$, і відповідними до них власними значеннями $F(f_n)$.

Розв'язання. Нехай ψ — довільна функція. Розвинемо її в ряд за власними функціями оператора $\hat{f}$: $\psi = \sum_m a_m \psi_m$. Тоді

$$\begin{aligned} F(\hat{f}) \psi &= \sum_m a_m F(\hat{f}) \psi_m = \sum_m a_m F(f_m) \psi_m = \sum_m \sum_n a_m c_n (f_m)^n \psi_m = \\ &= \sum_n c_n \hat{f}^n \sum_m a_m \psi_m = \sum_n c_n \hat{f}^n \psi, \end{aligned}$$

що й доводить твердження задачі.

Приклад 3.4. Знайдіть власні функції і власні значення оператора координати $\hat{x}$: $\hat{x}\Psi_{x_0}(x) = x_0\Psi_{x_0}(x)$.

Розв'язання. Число x_0 буде власним значенням оператора. Очевидно, що за $x \neq x_0$ функція $\Psi(x)$ повинна дорівнювати нулю, а за $x = x_0$ $\Psi(x)$ не визначена. Проінтегруємо рівняння для власних значень:

$$\int x \Psi(x) dx = x_0 \int \Psi(x) dx.$$

Власну функцію можемо подати у вигляді $\Psi_{x_0}(x) = C\delta(x - x_0)$. Оскільки спектр оператора координати неперервний, то C — сталу нормування — знайдемо з умови нормування власних функцій неперервного спектра:

$$\int \Psi_{x'_0}^*(x) \Psi_{x_0}(x) dx = \delta(x'_0 - x_0).$$

З останнього рівняння маємо

$$|C|^2 \int \delta(x - x'_0) \delta(x - x_0) dx = |C|^2 \delta(x'_0 - x_0) = \delta(x'_0 - x_0) \Rightarrow C = 1.$$

Відповідну значенню x_0 власну функцію виразимо таким чином через δ -функцію Дірака: $\Psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$.

Приклад 3.5. Знайдіть спостережувані значення оператора проєкції моменту L_z та відповідні їм власні хвильові функції.

Розв'язання. У рівнянні для власних значень (3.3) $\hat{L}_z \Omega = L_z \Omega$ невідомими є як L_z , так і Ω . Перепишемо це рівняння у сферичній системі координат, де вигляд $\hat{L}_z$ найпростіший:

$$-i\hbar \frac{\partial \Omega(\varphi)}{\partial \varphi} = L_z \Omega(\varphi); \quad 0 \leq \varphi < 2\pi.$$

Це лінійне однорідне диференціальне рівняння першого порядку. Тому його розв'язок шукатимемо у вигляді $\Omega(\varphi) = A e^{i\lambda\varphi}$, де A — довільна ненульова стала нормування; λ — стала, що підлягає визначенню. Вибір такого розв'язку забезпечує скінченність і безперервність хвильової функції.

Після цього диференціальне рівняння перетворюється на алгебричне: $\hbar\lambda = L_z$. Умова однозначності хвильової функції потребує такої умови: функція полярного кута повинна бути періодичною з періодом 2π . Це накладає на значення λ певні обмеження — λ може набувати тільки цілих значень: $\lambda_m = m = 0, \pm 1, \dots$

Таким чином, спостережувані значення $L_{z,m} = \hbar m$, $m \in \mathbb{Z}$, а відповідні їм нормовані власні функції мають такий вигляд: $\Omega(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$. Із цього випливає, що спектр оператора $\hat{L}_z$ дискретний та не вироджений.

Приклад 3.6. Ермітовий оператор $\hat{f}(\lambda)$ має дискретний спектр власних значень і залежить від параметра λ . Доведіть співвідношення

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \left(\Psi_n, \frac{\partial \hat{f}(\lambda)}{\partial \lambda} \Psi_n \right),$$

де $f_n(\lambda)$ — власне значення; $\Psi_n(\lambda)$ — відповідна йому нормована власна функція оператора $\hat{f}(\lambda)$.

Розв'язання. Диференціюючи співвідношення $f_n(\lambda) = (\Psi_n, \hat{f}(\lambda) \Psi_n)$ за λ , зведемо його до такого вигляду:

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \left(\Psi_n, \frac{\partial \hat{f}(\lambda)}{\partial \lambda} \Psi_n \right) + f_n(\lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda} (\Psi_n, \Psi_n),$$

звідки випливає твердження задачі, оскільки добуток $(\Psi_n, \Psi_n) = 1$.

Приклад 3.7. Знайдіть явний вигляд оператора $\exp\left(\mu \frac{d}{dx}\right)$, де μ — дійсний параметр, його власні значення та відповідні їм власні функції.

Розв’язання. Застосуємо результат попередньої задачі 3.6. Запишемо результат дії оператора на довільну функцію $\Psi(x)$:

$$\exp\left(\mu \frac{d}{dx}\right) \Psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mu^k}{k!} \frac{d^k \Psi(x)}{dx^k} = \Psi(x + \mu),$$

тобто $\exp\left(\mu \frac{d}{dx}\right) = \hat{T}_\mu$ — оператор зсуву вздовж осі x на величину μ .

Для знаходження власних функцій $\Psi_\lambda(x)$ і власних значень λ оператора зсуву потрібно розв’язати рівняння

$$\exp\left(\mu \frac{d}{dx}\right) \Psi_\lambda(x) = \lambda \Psi_\lambda(x),$$

для чого корисно застосувати фур’є-перетворення цього рівняння. Власні значення цього оператора мають вигляд $\lambda = e^{iq\mu}$, де q належить довільному інтервалу шириною $2\pi/\mu$. Власну функцію, відповідну власному значенню λ , описують формулою $\Psi_\lambda(x) = e^{iq\mu} U(x)$, де $U(x)$ — довільна періодична функція із періодом μ .

Приклад 3.8. Плоский ротатор приведений у стан із хвильовою функцією $\Phi(\varphi) = A(1 + \cos \varphi + \cos 2\varphi)$. Знайдіть спостережувані значення L_z , ймовірності їх виявлення, $\overline{L_z}$, $\overline{\Delta L_z^2}$.

Розв’язання. Специфічна залежність $\Phi(\varphi)$ дозволяє розв’язати задачу алгебричними методами на основі формули Ейлера. Застосуємо розв’язок задачі 3.5 і розвинемо функцію $\Phi(\varphi)$ за базисом оператора $\hat{L}_z$:

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi) &= A \left[1 + \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} + \frac{e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}}{2} \right] = \\ &= A\sqrt{2\pi} \left[\Psi_0(\varphi) + \frac{\Psi_1(\varphi)}{2} + \frac{\Psi_{-1}(\varphi)}{2} + \frac{\Psi_2(\varphi)}{2} + \frac{\Psi_{-2}(\varphi)}{2} \right]. \end{aligned}$$

Останній вираз зведемо до вигляду $\Phi(\varphi) = \sum_n c_n \Phi_n(\varphi)$ з ненульовими коефі-

цієнтами $c_0 = A\sqrt{2\pi}$ і $c_{\pm 1} = c_{\pm 2} = A\sqrt{\frac{\pi}{2}}$. Сталу нормування зручно знайти з умови $\sum_m |c_m|^2 = 1$, звідки $A = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$; $c_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $c_{\pm 1} = c_{\pm 2} = \frac{1}{2\sqrt{2}}$.

Таким чином, у ході вимірювання будуть мати місце такі значення L_z : $L_{z,0}$ з ймовірністю $\frac{1}{2}$ і $L_{z,\pm 1} = \pm \hbar$, $L_{z,\pm 2} = \pm 2\hbar$ з однаковими ймовірностями $W_{\pm 1} = W_{\pm 2} = \frac{1}{8}$. Середнє значення обчислимо як $\overline{L_z} = \sum_m L_{z,m} W_m = 0$.

Для обчислення середньоквадратичного відхилення застосуємо вираз

$$\overline{\Delta L_z^2} = \overline{L_z^2} - \overline{L_z}^2 = \overline{L_z^2} = \sum_m L_{z,m}^2 W_m = \frac{5\hbar^2}{4}.$$

Завдання для самостійного виконання

1. Доведіть, що необхідною і достатньою умовою дійсності середнього значення величини F є самоспряженість її оператора $\hat{F}$.
2. Доведіть, що власні функції унітарного оператора ортогональні, а власні значення за модулем дорівнюють 1.
3. Доведіть, що середнє значення квадрата фізичної величини невід'ємне.
4. Доведіть, що функція Ψ є власна функція оператора $\hat{F}$, і знайдіть відповідне власне значення:

а) $\Psi(\xi) = \frac{\sin \xi}{\xi}, \hat{F}(\xi) = \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{d}{d\xi};$

б) $\Psi(\rho) = e^{-\rho/3} \rho^3, \hat{F}(\rho) = \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{6}{\rho^2};$

в) $\Psi(\theta, \varphi) = \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \hat{F}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$

5. Знайдіть власні функції й власні значення операторів за таких умов:

а) $-i \frac{d}{dx}$, якщо $\Psi(x) = \Psi(x+a)$, a — стала;

б) $-\frac{d^2}{dx^2}$, якщо $\Psi(x) = 0$ за $x = 0$ та $x = l$;

в) $\sin \frac{d}{d\varphi}$, якщо $\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$.

6. Нехай власні функції і власні значення двох операторів задовольняють умови $\hat{A}f_1(x) = af_1(x)$ і $\hat{B}f_2(y) = bf_2(y)$. Визначте, чи буде власна функція оператора $\Psi(x, y)$ мати вигляд $\Psi(x, y) = f_1(x)f_2(y)$, якщо $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, а $\hat{C}\Psi(x, y) = c\Psi(x, y)$, причому $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ і $\hat{B} = \frac{d}{dy}$.

7. Знайдіть спостережувані значення проекції імпульсу та відповідні їм хвильові функції.

8. Знайдіть можливі власні значення оператора $\hat{L}_z$ та їх ймовірності, а також $\overline{L_z}$ і $\overline{\Delta L_z^2}$ для частинки, що знаходиться в таких станах:

$$\Psi_1(\varphi) = A \sin \varphi, \quad \Psi_2(\varphi) = B \sin^2 \varphi, \quad \Psi_3(\varphi) = C(2 - \cos 4\varphi).$$

9. Для хвильового пакета $\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}\sqrt{\pi}} \exp \left[-\frac{x^2}{2x_0^2} \right]$ обчисліть величини $\overline{x}$, $\overline{p_x}$, $\overline{(\Delta x)^2}$ та $\overline{(\Delta p_x)^2}$.

10. Знайдіть зв'язок між середніми значеннями координати й імпульсу двох частинок, хвильові функції яких пов'язані таким співвідношенням: $\Psi_2(x) = \Psi_1(x) \exp(ip_0x/\hbar)$, p_0 — додатна стала.

11. Обчисліть середнє значення квадрата моменту імпульсу для частинки, що знаходиться в стані $\Psi(\theta, \varphi) = A \sin \theta \cos \varphi$.

12. Знайдіть явний вигляд операторів інверсії $\hat{I}\Psi(x) = \Psi(-x)$, зміни масштабу $\hat{M}_c\Psi(x) = \sqrt{c}\Psi(cx)$ і комплексного спряження $\hat{K}\Psi(x) = \Psi^*(x)$, а також їх власні функції та власні значення.

4. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга

Фізичні величини A і B називають *одночасно вимірними*, якщо існують такі стани, у кожному з яких буде вимірна як величина A , так і B . Математично це виражається в наявності в операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ *спільних* власних функцій. *Необхідною й достатньою умовою існування в лінійних операторів спільних власних функцій є комутація цих операторів.* У ході спільного вимірювання таких величин у довільному стані завжди має місце розкид спостережуваних значень. Величина цього розкиду, що має середньоквадратичне відхилення, задовольняє **співвідношення невизначеностей Гейзенберга**:

$$\overline{(\Delta A)^2} \cdot \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4} \overline{(\hat{C})^2}. \quad (4.1)$$

Тут $\hat{C}$ — самоспряжений оператор, який можна знайти з умови $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. Усі усереднення в співвідношенні (4.1) здійснені в *одному й тому ж* стані.

Часто за характеристику розкиду отриманих у результаті обчислень значень фізичної величини D відносно середнього беруть *середньоквадратичне відхилення* $\Delta D = \sqrt{\overline{\Delta D^2}}$. У цих позначеннях нерівність (4.1) перетворюється на

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\overline{\hat{C}}|}{2}. \quad (4.2)$$

Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 4.1. Доведіть, що якщо два оператори $\hat{A}$ і $\hat{B}$ задовольняють переставне співвідношення $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}$, причому $\hat{A}$ і $\hat{B}$ — ермітові, то має місце таке співвідношення: $\sqrt{\overline{(\Delta A)^2} \cdot \overline{(\Delta B)^2}} \geq \frac{|\overline{\hat{C}}|}{2}$.

Розв'язання. Розглянемо спочатку випадок *дискретного* набору хвильових функцій Ψ_i . Середні значення операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ у стані, який характеризується функцією $\Psi = \sum a_i \Psi_i$: $\bar{A} = \sum_{i,k} a_i^* A_{ik} a_k$ і $\bar{B} = \sum_{i,k} a_i^* B_{ik} a_k$.

Складемо невід'ємну величину:

$$J(\lambda) = \sum_i \left\{ \sum_k (A_{ik} + i\lambda B_{ik}) a_k \right\}^* \left\{ \sum_l (A_{il} + i\lambda B_{il}) a_l \right\} \geq 0,$$

де λ — дійсний параметр.

Групуючи члени з однаковими степенями λ і користуючись ермітовістю операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ ($A_{ik} = A_{ki}^*$, $B_{ik} = B_{ki}^*$), знаходимо

$$\begin{aligned} J(\lambda) &= \sum_{i,k,l} \{ a_k^* A_{ki} A_{il} a_l + i\lambda a_k^* (A_{ki} B_{il} - B_{ki} A_{il}) a_l + \lambda^2 a_k^* B_{ki} B_{il} a_l \} = \\ &= \overline{A^2} + \lambda \overline{C} + \lambda^2 \overline{B^2}. \end{aligned}$$

Оскільки $\hat{C} = \frac{1}{i} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ — ермітовий оператор, то квадратична форма $J(\lambda)$ є невід'ємною і, таким чином, $4\overline{A^2}\overline{B^2} \geq \overline{C^2}$. Зауваживши, що оператори $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \overline{A}$ і $\Delta\hat{B} = \hat{B} - \overline{B}$ задовольняють співвідношення комутації $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} = i\hat{C}$, отримуємо $\sqrt{(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2} \geq \frac{|\overline{C}|}{2}$.

Доведення цього співвідношення для *неперервного* набору можна провести аналогічно. Вираз $J(\lambda) = \int \left\{ (\hat{A} + i\lambda\hat{B}) \Psi \right\}^* \left\{ (\hat{A} + i\lambda\hat{B}) \Psi \right\} d\zeta$, де λ — дійсне число, є невід'ємним і може бути перетворений таким чином:

$$\begin{aligned} J(\lambda) &= \int \left\{ (\hat{A}\Psi)^* - i\lambda (\hat{B}\Psi)^* \right\} \left\{ \hat{A}\Psi + i\lambda\hat{B}\Psi \right\} d\zeta = \\ &= \int \left\{ \Psi^* \hat{A}^2 \Psi + i\lambda \Psi^* (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \Psi + \lambda^2 \Psi^* \hat{B}^2 \Psi \right\} d\zeta. \end{aligned}$$

Дійсно, на підставі ермітовості оператора $\hat{A}$ $\int (\hat{A}\Psi^*) \Phi d\zeta = \int \Psi^* \hat{A} \Phi d\zeta$. Далі доведення таке саме, як і попереднього співвідношення.

Приклад 4.2. Запишіть співвідношення невизначеностей для координати x і проекції моменту імпульсу L_z .

Розв'язання. Спочатку обчислимо комутатор двох ермітових операторів $\hat{x}$ і $\hat{L}_z$: $[\hat{x}, \hat{L}_z] = -i\hbar\hat{y}$. Таким чином, оператор $\hat{C}$ у нерівності (4.2) має вигляд $\hat{C} = -\hbar\hat{y}$. Модуль середнього значення $|\overline{C}| = \hbar\overline{y}$. Тому шукане співвідношення невизначеностей (4.2) має такий вигляд: $\Delta x \Delta L_z \geq \frac{\hbar}{2} \overline{y}$.

Приклад 4.3. Координату x частинки, що вільно рухається, можна визначити, якщо поставити перпендикулярно шляху її руху вузьку щілину. Доведіть, що вимірювання координати частинки за допомогою щілини товщиною b вносить у відповідну проекцію імпульсу невизначеність $|\Delta p_x| > \hbar/b$.

Розв'язання. Спрямуємо вісь OX уздовж щілини. Тоді внаслідок дифракції хвиль де Бройля під час проходження крізь щілину частинка набуватиме складової імпульсу вздовж вказаної осі $p_x = p \sin \varphi$.

За міру невизначеності імпульсу електрона візьмемо розкид даної проєкції в межах центрального дифракційного максимуму, тобто $|\Delta p_x| = 2p |\sin \varphi|$, де $\sin \varphi = \pm \frac{\lambda}{b}$, $\lambda = \frac{h}{p}$. Застосовуючи наведені співвідношення, одержуємо $|\Delta p_x| = \frac{4\pi\hbar}{b}$ або $|\Delta p_x| > \frac{\hbar}{b}$.

Приклад 4.4. Застосовуючи співвідношення невизначеностей, оцініть швидкість протона в атомному ядрі та доведіть, що в ньому не може бути електронів. Візьміть розмір ядра $r_{\text{я}} = 5 \cdot 10^{-15} \text{ м}$.

Розв'язання. Взявши співвідношення невизначеностей, отримуємо, що швидкість протона повинна мати значення $V_p \sim 10^7 \text{ м/с}$.

Будемо розглядати розмір ядра як невизначеність координати електрона. Для оцінки його швидкості виходячи з нерелятивістського співвідношення $V_e \sim \frac{\hbar}{m_e r_{\text{я}}}$ одержуємо $V_e \sim 10^{11} \text{ м/с}$, що перевищує швидкість світла у вакуумі й свідчить про те, що, електрони, наявність яких у ядрі передбачається, повинні бути релятивістськими.

Із співвідношення невизначеностей випливає, що $r_{\text{я}} \geq \frac{\hbar}{\Delta p}$. Оскільки середнє значення імпульсу частинки p задовольняє нерівність $p \geq \Delta p$, маємо $r_{\text{я}} \geq \frac{\hbar}{p}$. Остання нерівність повинна виконуватись за будь-якого імпульсу релятивістського електрона з тих, що він може мати в ядрі; зокрема, за *комплівського* імпульсу $p = \frac{h}{\lambda_c}$. Тобто має виконуватись нерівність $r_{\text{я}} \geq \frac{\lambda_c}{2\pi}$. Підставляючи значення $r_{\text{я}}$ і $\lambda_c = 0,0242 \text{ Å}$ (для електрона), бачимо, що ця нерівність не виконується, тому електрони локалізованими в об'ємі ядра бути не можуть.

Завдання для самостійного виконання

1. Перевірте співвідношення невизначеностей для частинки, яку описує функція $\Psi(x) = Ae^{ikx - \alpha x^2}$.
2. Електрон, кінетична енергія якого $T = 4 \text{ еВ}$, локалізований в області розміром $l = 1 \text{ мкм}$. Оцініть за допомогою співвідношення невизначеностей відносну невизначеність його швидкості.
3. Енергія основного стану мікрочастинки масою $2 \cdot 10^{-25} \text{ кг}$ в одновимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі $E = 5 \cdot 10^{-2} \text{ еВ}$. Оцініть

невизначеність імпульсу Δp_x мікрочастинки

4. Частинки, маса яких $m = 10^{-11}$ г, перебувають у повітрі в стані теплової рівноваги. Вважається, що частинки мають сферичну форму, а повітря характеризується нормальними умовами. Густина речовини, з якої складаються частинки, $\rho = 1,5 \cdot 10^3$ кг/м³. З'ясуйте, чи можна встановити відхилення від законів класичної механіки, спостерігаючи за рухом частинок.

5. Слід від пучка електронів на екрані електронно-променевої трубки має діаметр $d = 0,5$ мм, відстань від електронної гармати до екрана 20 см, прискорювальна напруга $U = 10$ еВ. Оцініть невизначеність координати Δx електрона на екрані.

6. Визначте, у скільки разів довжина хвилі де Бройля частинки λ менша за невизначеність її координати Δx , що відповідає відносній невизначеності імпульсу $\Delta p/p$ в 1%.

7. Нерелятивістська частинка, що вільно рухається, має відносну невизначеність кінетичної енергії $\frac{\Delta T}{T} = 1,6 \cdot 10^{-4}$. Оцініть, у скільки разів невизначеність координати Δx такої частинки більша її довжини хвилі де Бройля.

8. Оцініть мінімально можливу енергію електрона в атомі водню, вважаючи, що один оберт електрона навколо ядра відбувається за проміжок часу $\tau = 1,5 \cdot 10^{-16}$ с. Відповідь наведіть в електрон-вольтах.

9. Частинка масою $m = 9 \cdot 10^{-31}$ кг перебуває в одновимірній потенціальній ямі шириною 100 пм із нескінченно високими стінками. Оцініть мінімально можливу силу тиску частинки на стінки ями.

10. Потік електронів із довжиною хвилі де Бройля 0,6 мкм падає нормально на прямокутну щілину шириною 0,1 мм. Оцініть за допомогою співвідношення невизначеностей кутову ширину пучка $\Delta \phi$ поза щілиною (у кутових градусах).

5. Рівняння Шредінгера. Стаціонарні стани

Хвильову функцію реальної фізичної системи в загальному випадку знаходять з розв'язку *часового рівняння Шредінгера*:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\zeta, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\zeta, t), \quad (5.1)$$

де $\hat{H}$ — гамільтоніан системи. Подібно до рівнянь Ньютона і Максвелла рівняння Шредінгера не виводять, а *постулюють*. Критерієм правильності даного рівняння є збіг фактів, що випливають із нього, з експериментальними даними.

Для однієї частинки, що рухається в полі із заданою функцією потенціальної енергії $U(\mathbf{r}, t)$, гамільтоніан $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t)$ і рівняння (5.1) набувають такого вигляду:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (5.2)$$

На підставі самоспряженості гамільтоніана можна довести, що густина ймовірності (1.2) у тривимірному випадку задовольняє *рівняння безперервності*, що виражає закон збереження кількості речовини в нерелятивістській фізиці:

$$\frac{\partial}{\partial t} w(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0,$$

де величина $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ має значення густини потоку ймовірності та пов'язана з хвильовою функцією $\Psi(\mathbf{r}, t)$ співвідношенням

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)) \quad (5.3)$$

(m — маса частинки). Умова безперервності хвильової функції необхідна для забезпечення скінченності густини потоку ймовірності.

У квантовій механіці особлива роль відведена системам, гамільтоніан яких не залежить від часу явно: $\hat{H}(\zeta, t) = \hat{H}(\zeta)$. У цьому випадку в квантовій системі можуть бути реалізовані **стаціонарні стани** з хвильовими функціями вигляду

$$\Psi_E(\zeta, t) = \Psi_E(\zeta) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E t \right]. \quad (5.4)$$

Тут E і $\Psi_E(\zeta)$ — відповідно власне значення і власна функція гамільтоніана $\hat{H}(\zeta)$, який у цьому випадку можна назвати *оператором енергії*:

$$\hat{H}(\zeta) \Psi_E(\zeta) = E \Psi_E(\zeta). \quad (5.5)$$

Рівняння (5.5) має назву **стаціонарного рівняння Шредінгера**. На підставі цього рівняння *стаціонарні стани визначають як стани з певними значеннями енергії*. Вони мають такі основні властивості:

- 1) їх хвильові функції залежать від часу за гармонічним законом (5.4);
- 2) середні значення густини ймовірності й густини потоку ймовірності в стаціонарних станах не залежать від часу;
- 3) якщо оператор фізичної величини не залежить від часу явно, то його середнє значення в стаціонарному стані теж не буде залежати від часу.

Енергетичний спектр стаціонарної системи залежить від характеру руху: за *фінітного* руху він *дискретний*, у випадку *інфінітного* — *неперервний*.

Якщо відомі розв'язки $\Psi_E(\zeta)$ стаціонарного рівняння Шредінгера, то розв'язок нестаціонарного рівняння (5.1) можна записати у вигляді

$$\Psi(\zeta, t) = \sum_n A_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \Psi_n(\zeta) \quad (5.6)$$

у випадку дискретного спектра або у вигляді

$$\Psi(\zeta, t) = \int A_E \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right) \Psi_E(\zeta) dE \quad (5.7)$$

у випадку неперервного спектра. Коефіцієнти в A_n і A_E однозначно визначають заданням хвильової функції в початковий момент часу:

$$A_{n,E} = \int \Psi_{n,E}^*(\zeta) \Psi(\zeta, t=0) d\zeta. \quad (5.8)$$

У тривимірному випадку рівняння (5.5) набуває такого вигляду:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_E(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}) = E \Psi_E(\mathbf{r}), \quad (5.9)$$

аналогічного рівнянню для стійних хвиль у середовищі зі змінним показником заломлення. Таким чином, стаціонарні стани можна порівнювати зі стійкими хвилями в пружному середовищі. Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 5.1. Доведіть, що для середніх значень координати x частинки масою m , її імпульсу p_x і сили F_x , що діє на неї, справедливі такі співвідношення:

$$\frac{d}{dt}(\bar{x}) = \frac{\overline{p_x}}{m}, \quad \frac{d^2}{dt^2}(\bar{x}) = \frac{\overline{F_x}}{m}.$$

Розв'язання. Продиференціюємо вираз для середнього значення координати за часом:

$$\frac{d}{dt}(\bar{x}) = \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi dx + \int \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx.$$

З рівняння Шредінгера (5.2) знайдемо вирази для частинних похідних хвильової функції та її комплексного спряження:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{2m\hbar} \hat{p}_x^2 \Psi - \frac{i}{\hbar} U(x, t) \Psi, \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{2m\hbar} \hat{p}_x^2 \Psi^* + \frac{i}{\hbar} U(x, t) \Psi^*.$$

Підставляючи ці співвідношення у вираз для похідної та враховуючи ермітовість оператора $\hat{p}_x^2$, отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\bar{x}) &= -\frac{i}{2m\hbar} \int \Psi^* x \hat{p}_x^2 \Psi dx + \frac{i}{2m\hbar} \int \Psi^* \hat{p}_x^2 (x\Psi) dx = \\ &= \frac{i\hbar^2}{2m\hbar} \int \Psi^* x \frac{d^2\Psi}{dx^2} dx - \frac{i\hbar^2}{2m\hbar} \int \Psi^* \frac{d^2(x\Psi)}{dx^2} dx = -\frac{i\hbar}{m} \int \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} dx \equiv \frac{\overline{p_x}}{m}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Продиференціюємо останній вираз за часом:

$$m \frac{d^2}{dt^2}(\bar{x}) = \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{p}_x \Psi dx + \int \Psi^* \hat{p}_x \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx.$$

Знову застосувавши вирази для частинних похідних та ермітовість оператора $\hat{p}_x^2$, маємо

$$\begin{aligned} i\hbar m \frac{d^2}{dt^2}(\bar{x}) &= \int \left(-\frac{\hat{p}_x^2}{2m} - U \right) \Psi^* \hat{p}_x \Psi dx + \int \Psi^* \hat{p}_x \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U \right) \Psi dx = \\ &= \int \Psi^* (\hat{p}_x U) \Psi dx = i\hbar \int \Psi^* \left(-\frac{dU}{dx} \right) \Psi dx \equiv i\hbar \overline{F_x}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Рівності (5.10) і (5.11) називають **теоремами Еренфеста**, які встановлюють, що середні значення величин (координат, імпульсів, енергій), які характеризують рух частинок у квантовій механіці, а також середнє значення сили, що діє на частинку, пов'язані між собою рівняннями, аналогічними відповідним рівнянням класичної механіки.

Приклад 5.2. Хвильова функція мікрочастинки з масою m має вигляд $\Psi = A \sin(\alpha x) \sin(\beta y) e^{-\gamma z}$. Кінетична енергія частинки $T = 5$ еВ. Знайдіть сталу α . Припустіть, що $\hbar = 10^{-34}$ Дж·с; $m = 2,5 \cdot 10^{-29}$ кг, $\beta = 6 \cdot 10^{10}$ м $^{-1}$, $\gamma = 2 \cdot 10^{10}$ м $^{-1}$.

Розв'язання. Визначимо другі частинні похідні від хвильової функції:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= -A\alpha^2 \sin(\alpha x) \sin(\beta y) e^{-\gamma z} = -\alpha^2 \Psi; \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} &= -A\beta^2 \sin(\alpha x) \sin(\beta y) e^{-\gamma z} = -\beta^2 \Psi; \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} &= A(-\gamma)^2 \sin(\alpha x) \sin(\beta y) e^{-\gamma z} = \gamma^2 \Psi. \end{aligned}$$

Знайдемо лапласіан хвильової функції: $\Delta \Psi = \Psi(-\alpha^2 - \beta^2 + \gamma^2)$. Із рівняння (5.9) знайдемо α , враховуючи, що $T = E - U(\mathbf{r})$:

$$\Psi(-\alpha^2 - \beta^2 + \gamma^2) + \frac{2m}{\hbar^2} T \Psi = 0 \Rightarrow \alpha = \sqrt{\frac{2mT}{\hbar^2} - \beta^2 + \gamma^2} = 2,83 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}.$$

Приклад 5.3. Знайдіть енергію стаціонарних станів плоского ротатора з моментом інерції I .

Розв’язання. Гамільтоніан обертального руху ротатора одержимо за аналогією з гамільтоніаном поступального руху матеріальної точки. Для цього в класичній функції Гамільтона для плоского ротатора $H = \frac{L_z^2}{2I}$ замінимо $L_z \rightarrow \hat{L}_z$. Тепер можна записати стаціонарне рівняння Шредінгера для ротатора і звести його до такого вигляду: $\hat{L}_z^2 \Psi(\varphi) = 2IE \Psi(\varphi)$. На підставі прикладу 3.5 одержуємо розв’язок:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \quad \Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

Усі стаціонарні стани, за винятком основного ($m = 0$), дворазово вироджені. Це пов’язано з двома можливими напрямками обертання ротатора навколо будь-якої закріпленої осі.

Приклад 5.4. Перевірте, чи може стан з хвильовою функцією $\Psi(\xi, t) = \frac{D}{2} \left(1 - \cos 2\varphi \cdot \exp \left(\frac{2i\hbar t}{\alpha} \right) \right)$ бути стаціонарним. Стала α — дійсна.

Розв’язання. Запишемо вираз для густини ймовірності в цьому стані:

$$\begin{aligned} w(\xi, t) &= \Psi^*(\xi, t) \Psi(\xi, t) = \frac{D^2}{4} \left(1 - \cos 2\varphi \cdot e^{-2i\hbar t/\alpha} \right) \left(1 - \cos 2\varphi \cdot e^{2i\hbar t/\alpha} \right) = \\ &= \frac{D^2}{4} \left(1 + \cos^2 2\varphi - 2 \cos 2\varphi \cos \frac{2\hbar t}{\alpha} \right). \end{aligned}$$

Оскільки густина ймовірності залежить від часу, то стан $\Psi(\xi, t)$ не може бути стаціонарним.

Приклад 5.5. Знайдіть загальний розв’язок одновимірного нестационарного рівняння Шредінгера.

Розв’язання. Розв’язок рівняння (5.1) у разі заміни $\zeta \rightarrow x$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

будемо шукати у вигляді $\Psi(x, t) = T(t) \cdot X(x)$. Тоді наше рівняння перетвориться на

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

Щоб функція $X(x)$ була скінченною на нескінченності, необхідно, щоб a було додатним. Позначивши $\frac{2ma}{\hbar^2} = k^2$, одержимо два рівняння:

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

розв'язки яких: $X(x) = \exp(ikx)$ і $T(t) = \exp\left(-\frac{ik^2\hbar t}{2m}\right)$.

Загальний розв'язок має вигляд $\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \exp\left(ikx - i\frac{k^2\hbar}{2m}t\right) dk$.

Приклад 5.6. Стаціонарні стани частинки в одновимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a описані хвильовими функціями $\Psi_l(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi l x}{a}, & x \in (0; a); \\ 0, & x \leq 0, x \geq a, \end{cases}$ відповідними власними значеннями енергії $E_l = \frac{\pi^2 \hbar^2 l^2}{2ma^2}$, де $l = 1, 2, \dots$ і m — маса частинки. Нехай у початковий момент часу хвильова функція частинки $\Psi(x, t = 0) = \frac{4}{\sqrt{5a}} \sin^3 \frac{\pi x}{a}$. Знайдіть хвильову функцію в довільний момент часу.

Розв'язання. Оскільки енергетичний спектр дискретний, то в довільний момент часу хвильову функцію визначають за рівністю (5.6). Коефіцієнти A_l в даному випадку простіше визначити не прямим інтегруванням (5.8), а за допомогою тригонометричних формул. Тоді

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{4}{\sqrt{5a}} \sin^3 \frac{\pi x}{a} = \frac{3}{\sqrt{5a}} \sin \frac{\pi x}{a} - \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin \frac{3\pi x}{a}.$$

Із виразу (5.6) $\Psi(x, t = 0) = \sum_l A_l \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi l x}{a}$. Порівнявши останні дві рівності, отримаємо тільки два ненульові значення: $A_1 = \frac{3}{\sqrt{10}}$ і $A_3 = \frac{1}{\sqrt{10}}$. Відповідні їм значення енергії — $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ і $E_3 = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$.
Остаточна відповідь:

$$\Psi(x, t) = \frac{3}{\sqrt{5a}} \exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2}{2ma^2}t\right) \sin \frac{\pi x}{a} - \frac{1}{\sqrt{5a}} \exp\left(-\frac{9i\hbar\pi^2}{2ma^2}t\right) \sin \frac{3\pi x}{a}.$$

Приклад 5.7. Стан вільної частинки масою m у початковий момент часу визначений хвильовим пакетом $\Psi(x, 0) = B \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2} + ik_0x\right)$, де $x_0 > 0$ — стала розмірності довжини, що визначає ширину пакета; k_0 — стала розмірності хвильового числа. Доведіть, що з часом пакет «розпливається».

Розв'язання. У момент $t = 0$ густина ймовірності (1.2) буде гаусовою із шириною x_0 , максимум якої буде рухатися з груповою швидкістю $(\hbar k_0/m)$.

Енергетичний спектр вільної частинки неперервний. У ролі «базисних» функцій зручно застосувати власні функції: $\Psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}p_x x\right]$.

Відповідно до рівняння (5.7) маємо

$$\Psi(x, t > 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(p_x) \exp\left[\frac{i}{\hbar}p_x x - \frac{i\hbar t}{2m}p_x^2\right] dp,$$

тобто пакет являє собою суперпозицію плоских хвиль де Бройля. Коефіцієнти $A(p_x)$ знайдемо з означення (5.8). За допомогою інтеграла Пуассона можемо подати у такому вигляді: $A(p_x) = \sqrt{\frac{\hbar}{x_0\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{x_0^2}{2}\left(\frac{p_x}{\hbar} - k_0\right)^2\right]$. Остаточно явний вигляд хвильової функції (із заміною $a(t) = 1 + \frac{i\hbar}{mx_0^2}t$):

$$\Psi(x, t > 0) = \frac{1}{\sqrt{x_0 a(t)}\sqrt{\pi}} \exp\left[\frac{ik_0 x}{a(t)} - \frac{x^2}{2x_0^2 a(t)} - \frac{ik_0^2 \hbar t}{2ma(t)}\right].$$

Легко побачити, що густина ймовірності знов має форму гаусової кривої з тією ж швидкістю руху максимуму. Однак її ширина тепер збільшується з часом за законом $x_0(t) = x_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{mx_0^2}\right)^2}$. Співвідношення невизначеностей для такого пакета буде виконуватися в будь-який момент часу.

Завдання для самостійного виконання

1. Побудуйте гамільтоніан двовимірного ізотропного гармонічного осцилятора масою M та частотою ω у декартовій і полярній системах координат.
2. Хвильова функція мікрочастинки з масою $m = 2,5 \cdot 10^{-29}$ кг має вигляд $\Psi(x) = B(\cos(\alpha x) + e^{i\alpha x})$, $\alpha = 4 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}$. Знайдіть кінетичну енергію частинки (в електронвольтах). Припустіть, що $\hbar = 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}$.
3. Хвильова функція мікрочастинки з масою $m = 2,5 \cdot 10^{-29}$ кг має вигляд $\Psi(x, y, z) = Ae^{-\alpha x} \sin(\beta y) \sin(\gamma z)$, $\beta = 6 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}$, $\gamma = 4 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}$. Кінетична енергія частинки дорівнює $T = 5 \text{ еВ}$. Знайдіть сталу α . Припустіть, що $\hbar = 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}$.
4. Частинка масою m рухається вільно. Знайдіть енергію та хвильові функції стаціонарних станів у випадку тривимірного руху.
5. Потенціальна енергія системи є степенева функція від усіх координат із показником степеня n . Знайдіть співвідношення між середніми значеннями кінетичної і потенціальної енергії.

6. Запишіть оператор кінетичної енергії у сферичних координатах та виразіть його через оператор моменту імпульсу.

7. Знайдіть комутатор операторів кінетичної і потенціальної енергії частинки в полі $U = U(\mathbf{r})$.

8. Частинка з імпульсом p_x рухається вздовж осі OX у вільному просторі. Знайдіть хвильову функцію частинки.

9. Запишіть часове рівняння Шредінгера для зарядженої частинки в електромагнітному полі.

10. Визначте, чи можуть стани з хвильовими функціями бути стаціонарними:

$$\begin{aligned}\Psi(\xi, t) &= \Phi(\xi)e^{-i(\varepsilon - i\gamma)t}, & \Psi(\xi, t) &= \Phi(\xi)e^{-i\varepsilon t} - \Phi^*(\xi)e^{i\varepsilon t}, \\ \Psi(\xi, t) &= \Phi_1(\xi)e^{-i\varepsilon t} - \Phi_2(\xi)e^{-2i\varepsilon t}, & \Psi(\xi, t) &= \Phi(\xi, t)e^{-iEt/\hbar},\end{aligned}$$

Усі сталі вважати дійсними.

11. Вільні частинки мають у початковий момент часу $t = 0$ хвильові функції $\Psi_1(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \sin\left(\frac{xp_0}{\hbar}\right)$ і $\Psi_2(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{xp_0}{\hbar}\right)$. Знайдіть хвильові функції в наступні моменти часу.

12. З'ясуйте, як із часом змінюється стан плоского ротатора, якщо в початковий момент часу він був описаний хвильовою функцією $\Psi = A \sin^2 \varphi$.

13. Плоский ротатор з моментом інерції I у момент часу $t = 0$ приведений у стан із хвильовою функцією $\Psi(\varphi) = B(1 + \cos \varphi + \cos 2\varphi)$. Знайдіть хвильову функцію в наступні моменти $t > 0$.

14. Хвильова функція частинки, що перебуває в одновимірній прямокутній потенціальній ямі шириною a з абсолютно непроникними стінками, в початковий момент часу мала вигляд $\Psi(x, 0) = Cx(x - a)$. Знайдіть хвильову функцію в наступні моменти часу.

6. Диференціювання операторів та інтеграли руху

У квантовій системі з гамільтоніаном $\hat{H}$ повна похідна оператора фізичної величини $\hat{G}$ пов'язана із частинною похідною рівнянням руху у формі Гейзенберга:

$$\frac{d\hat{G}}{dt} = \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} [\hat{G}, \hat{H}]. \quad (6.1)$$

Таким чином, повна похідна оператора за часом може виявитися *ненульовою* навіть у тому випадку, коли оператор не залежить від часу явно, тобто за *нульової частинної похідної*.

Інтегралом руху (або величиною, що зберігається) називають фізичну величину, середнє значення якої в довільному стані не залежить від часу. Якщо фізична величина не залежить явно від часу, відповідно до рівняння (6.1) критерієм збереження цієї величини буде *комутація її оператора з гамільтоніаном фізичної системи*. Наявність інтегралів руху повністю визначена типом фізичної взаємодії у квантовій системі, а точніше — його просторово-часовою симетрією.

Стани квантової системи доцільно вибирати так, щоб вони характеризувались максимальною кількістю незалежних одночасно вимірних інтегралів руху (**повним набором**). Число елементів у повному наборі дорівнює *числу степенів свободи* квантової системи. Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 6.1. Частинка з масою m рухається в зовнішньому силовому полі з потенційною енергією $U(\mathbf{r})$. Отримайте явний вигляд операторів швидкості і прискорення частинки.

Розв’язання. Оператори координати й імпульсу явно не залежать від часу, тому відповідно до рівняння (6.1) маємо

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{r}, \hat{H}] = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m},$$

що збігається з класичним визначенням швидкості руху.

$$\hat{\mathbf{a}} = \frac{1}{m} \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = -\frac{i}{\hbar m} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] = -\frac{1}{m} \nabla U(\mathbf{r})$$

являє собою «квантовий» аналог другого закону Ньютона.

Приклад 6.2. Перевірте, чи буде імпульс $\hat{\mathbf{p}}$ частинки масою m інтегралом руху в центральному полі.

Розв’язання. У центральному полі оператор Гамільтона має вигляд

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

де r — модуль радіус-вектора. Оператор $\hat{\mathbf{p}}$ явно не залежить від часу, отже, його частинна похідна дорівнює нулю, він комутує з кінетичною енергією $\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}$, але не комутує з оператором потенціальної енергії:

$$\begin{aligned} [\hat{U}(r), \hat{\mathbf{p}}] \Psi &= -i\hbar [U(r) \nabla \Psi - \nabla (U(r) \Psi)] = \\ &= -i\hbar [U(r) \nabla \Psi - (\nabla U(r)) \Psi - U(r) (\nabla \Psi)] = -i\hbar [\nabla U(r)] \Psi. \end{aligned}$$

Отже, комутатор $[\hat{U}(r), \hat{\mathbf{p}}] = -i\hbar \nabla U(r) \neq 0$. Тобто оператор імпульсу не є інтегралом руху в центрально-симетричному полі.

Приклад 6.3. Доведіть, що квадрат моменту імпульсу $\hat{L}^2$ — це інтеграл руху в центральному полі.

Розв’язання. Оскільки оператор $\hat{L}^2$ явно не залежить від часу, то його частинна похідна дорівнює нулю. Тоді необхідною і достатньою умовою того, що фізична величина — це інтеграл руху, є рівність нулю комутатора цього оператора з оператором Гамільтона: $[\hat{H}, \hat{L}^2] = (\hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H})$.

Оператор Гамільтона частинки в центральному полі має такий вигляд:

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

де r — модуль радіус-вектора; $\hat{L}^2$ — оператор, що містить тільки похідні за кутовими змінними, отже, він комутує з будь-якою функцією радіальної змінної. Тоді

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

Отже, момент кількості руху є інтеграл руху.

Приклад 6.4. Доведіть, що якщо потенціальна енергія є парна функція координат, то парність буде інтегралом руху.

Розв’язання. Запишемо гамільтоніан частинки маси m у потенціальному полі у вигляді $\hat{H}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + U(\mathbf{r})$. Відповідно до табл. 3.1 оператор інверсії не містить явної залежності від часу. Тому досить довести його комутацію з гамільтоніаном, враховуючи парність $U(\mathbf{r})$. Подіємо комутатором на довільну функцію $\Omega(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} [\hat{H}(\mathbf{r}), \hat{I}] \Omega(\mathbf{r}) &= \hat{H}(\mathbf{r})\Omega(-\mathbf{r}) - \hat{H}(-\mathbf{r})\Omega(-\mathbf{r}) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Omega(-\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^2} + U(\mathbf{r})\Omega(-\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Omega(-\mathbf{r})}{\partial (-\mathbf{r})^2} - U(-\mathbf{r})\Omega(-\mathbf{r}) = \\ &= \{(U(\mathbf{r}) - U(-\mathbf{r}))\} \Omega(-\mathbf{r}). \end{aligned}$$

За умови $U(\mathbf{r}) = U(-\mathbf{r})$ даний вираз тотожно перетворюється на нуль, що й доводить комутацію $\hat{H}(\mathbf{r})$ і $\hat{I}$.

Приклад 6.5. Визначте, які з механічних величин (енергія, проекції імпульсу, проекції та квадрат моменту імпульсу) зберігаються під час руху частинки в центральньо-симетричному полі $U(r)$.

Розв’язання. Вирішення цього питання зводиться до перевірки того, чи комутують з гамільтоніаном $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r)$ оператори вказаних механічних величин. Усі величини комутують з оператором кінетичної енергії, тому

треба з'ясувати, чи комутують ці оператори з оператором потенціальної енергії.

З оператором $\hat{U}(r)$ комутують оператори $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ і $\hat{L}^2$, тому що записані у сферичних координатах ці оператори діють тільки на змінні θ і φ .

Таким чином, зберігається з часом величини E , L_x , L_y , L_z і L^2 .

Завдання для самостійного виконання

1. Доведіть такі властивості повної похідної:

$$\frac{d}{dt}\bar{A} = \overline{\frac{dA}{dt}}, \quad \frac{d}{dt}(\hat{A} + \hat{B}) = \frac{d\hat{A}}{dt} + \frac{d\hat{B}}{dt}, \quad \frac{d}{dt}(\hat{A}\hat{B}) = \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}.$$

2. Для частинки, що рухається в потенціальному полі $U(x)$, знайдіть похідні $\frac{d}{dt}(x^2)$, $\frac{d}{dt}(x\hat{p}_x)$, $\frac{d}{dt}(\hat{p}_x^2)$.

3. Знайдіть такі похідні: $\frac{d}{dt}(\hat{\mathbf{L}})$, $\frac{d}{dt}(f(\mathbf{r}, t)\hat{\mathbf{L}})$ та $\frac{d}{dt}(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})$.

4. Доведіть, що за відсутності силових полів імпульс частинки зберігається.

5. Доведіть, що для частинки, яка рухається в постійному однорідному полі із силою $\mathbf{F}$, величина $\mathbf{G} = \mathbf{p} - \mathbf{F}t$ буде інтегралом руху.

6. Знайдіть повні набори фізичних величин під час руху частинки:

- а) за відсутності поля (вільний рух);
- б) у полі однорідного нескінченного циліндра з віссю OZ ;
- в) полі однорідної площини XOY ;
- г) полі нескінченної однорідної півплощини XOY , $z > 0$;
- д) полі двох точкових зарядів на осі OZ ;
- є) однорідному змінному полі;
- ж) змінному полі однорідного нескінченного циліндра;
- з) змінному полі однорідної нескінченної нитки;
- і) змінному полі нерухомої точкової частинки.

7. Потенціальні ями

Енергії стаціонарних станів частинки масою m , яка рухається в полі $U(x)$, і відповідні їм хвильові функції знаходять із розв'язку одновимірного стаціонарного рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U(x) \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (7.1)$$

Граничні умови до нього впливають із умов скінченності, однозначності й безперервності хвильової функції $\Psi(x)$, а також визначені характером руху. Зокрема, у випадку *фінітного* руху граничні умови необхідно вибирати *нульовими*.

За наявності кусково-неперервного потенціалу хвильова функція в точці розриву a буде залишатися неперервною разом зі своєю першою похідною:

$$\Psi(a-0) = \Psi(a+0), \quad \Psi'(a-0) = \Psi'(a+0). \quad (7.2)$$

Співвідношення (7.2) називають умовами **зшивок** хвильових функцій у точці розриву потенціалу. Ці співвідношення також можна сформулювати у вигляді *безперервності логарифмічної похідної* в точці розриву потенціалу:

$$\left. \frac{\Psi'(x)}{\Psi(x)} \right|_{a-0} = \left. \frac{\Psi'(x)}{\Psi(x)} \right|_{a+0}. \quad (7.3)$$

У випадку, коли потенціальна енергія має δ -подібну особливість у точці $x = a$ ($V(x) = U(x) + \gamma\delta(x-a)$, де $U(x)$ — кусково-неперервна функція; γ — стала), співвідношення (7.2) набувають такого вигляду:

$$\Psi(a-0) = \Psi(a+0), \quad \Psi'(a+0) - \Psi'(a-0) = \frac{2m}{\hbar^2} \gamma \Psi(a). \quad (7.4)$$

Наведемо найважливіші властивості одновимірного фінітного руху, які впливають із теорії функціонального аналізу:

- 1) усі енергетичні рівні не вироджені;
- 2) хвильові функції стаціонарних станів можна обирати дійсними (щоб їх фази не залежали від координат);

3) виконується **осциляційна теорема**: якщо основний стан позначити індексом «0», перший збуджений — «1» тощо, то в області локалізації частинки, крім її границь, хвильова функція n -го збудженого стану рівно n разів обертається в нуль, причому всі нулі будуть не вироджені. Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 7.1. Частинка масою m знаходиться в нескінченно глибокій прямокутній потенціальній ямі шириною a : $U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a; \\ \infty, & x < 0, x > a. \end{cases}$ Знайти енергії стаціонарних станів частинки та відповідні їм хвильові функції.

Розв'язання. Вважатимемо дно ями нульовим рівнем відліку енергії, а лівий кут — початком координат. Допустимі енергії будуть невід'ємними, а рух — завжди фінітним.

Рівняння (7.1) перетворюється на рівняння $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = E\Psi(x)$ з нульовими умовами на границях $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$. Відповідно до властивостей одновимірного фінітного руху загальний розв'язок лінійного однорідного диференціального рівняння зручно подати в дійсній формі:

$$\Psi(x) = C \sin \lambda x + D \cos \lambda x, \quad \lambda = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

де C і D — сталі, що підлягають визначенню. З умов зшивки (7.2) отримуємо дві умови: $D = 0$ і $\sin \lambda a = 0$. Останнє рівняння задовольняється тільки за дискретних значень: $\lambda_n = \frac{\pi n}{a}$, $n = 0, \pm 1, \dots$. Таким чином, ми одержуємо такі вирази для енергій і хвильових функцій:

$$\Psi_n(x) = C \sin \frac{\pi n x}{a}, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Якщо вилучити з розгляду тривіальний розв'язок рівняння Шредінгера (за $n = 0$), від'ємні значення n (виродження енергетичних рівнів за знаком n відсутнє), застосувати приклад 1.1 для знаходження сталої нормування C і привести результат у відповідність до осциляційної теореми, отримаємо остаточну відповідь:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{a}{2}} \sin \frac{\pi(n+1)}{a}x, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n+1)^2}{2ma^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.5)$$

Нескінченно глибока потенціальна яма містить *нескінченну* кількість рівнів енергії. Енергії стаціонарних станів зверху необмежені й однозначно визначені квантовим числом n . Основному стану відповідає ненульова енергія $E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$, тобто він лежить вище за «дно» потенціальної ями.

Приклад 7.2. Знайдіть можливі власні значення енергії та їх ймовірності для частинки масою m , що перебуває в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a в стані, описаному функцією $\Psi(x) = Ax(a-x)$.

Розв'язання. Спочатку пронормуємо функцію:

$$1 = |A|^2 \int_0^a x^2(a-x)^2 dx = \frac{|A|^2 a^5}{30}, \quad \text{звідки } A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}.$$

Розвинемо функцію стану $\Psi(x) = \sum_n D_n \Psi_n(x)$ за власними функціями

стаціонарних станів (7.5). Коефіцієнти розвинення знайдемо таким чином:

$$\begin{aligned} D_n &= \int_0^a \Psi_n^*(x) \Psi(x) dx = \sqrt{\frac{60}{a^6}} \int_0^a \sin \frac{\pi(n+1)x}{a} x(a-x) dx = \\ &= \frac{2\sqrt{60}}{\pi^3(n+1)^3} (1 - (-1)^{n+1}) = \begin{cases} \frac{4\sqrt{60}}{\pi^3(n+1)^3}, & \text{коли } n \text{ — парне;} \\ 0, & \text{коли } n \text{ — непарне.} \end{cases} \end{aligned}$$

У результаті ненульові значення енергії частинки (7.5) та відповідні їм ймовірності можна обчислити як

$$E_l = \frac{\pi^2 \hbar^2 (2l+1)^2}{2ma^2}, \quad W_l = |D_l|^2 = \frac{960}{\pi^6 (2l+1)^6}, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Приклад 7.3. Частинка масою m перебуває в напівнескінченній потенціальній ямі з потенціалом вигляду $U = \begin{cases} \infty, & x \leq 0; \\ 0, & 0 < x < a; \\ U_0, & x \geq a. \end{cases}$ Знайти рівняння

для стаціонарних станів енергії, а також умови появи першого і n -го дискретного енергетичного рівнів.

Розв'язання. Розіб'ємо заданий простір на три області, де хвильові функції $\Psi = \begin{cases} 0, & x \leq 0; \\ \Psi_1, & 0 < x < a; \\ \Psi_2, & x \geq a. \end{cases}$ Ми розв'язуємо задачу на пошук стаціонар-

них станів, тому енергія частинки повинна задовольняти умову $E < U_0$. Рівняння Шредінгера (7.1) в наших областях (рис. 7.1) набуває такого вигляду:

$$\Psi_1'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_1 = 0, \quad \Psi_2'' + \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \Psi_2 = 0.$$

Розв'язки цих рівнянь, застосовуючи умови зшивок (7.2), подамо в такому вигляді:

$$\Psi_1(x) = A \sin(kx + b), \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \text{з умови } \Psi_1(0) = 0 \Rightarrow b = 0.$$

$$\Psi_2(x) = B e^{-qx} + C e^{qx}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}, \quad \text{з умови } \Psi_2(\infty) < \infty \Rightarrow C = 0.$$

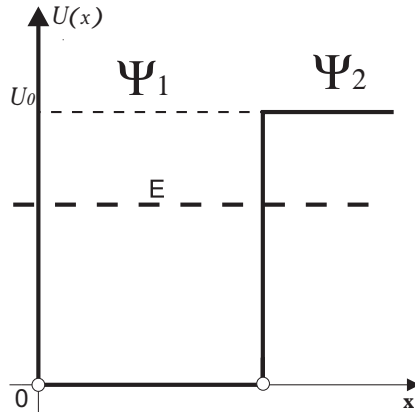


Рис. 7.1

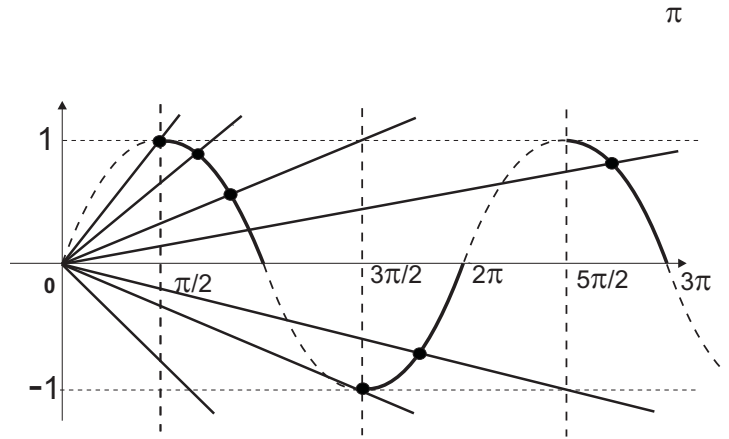


Рис. 7.2

З умов зшивок (7.2) у точці $x = a$ маємо

$$\Psi_1(a) = \Psi_2(a) \Rightarrow A \sin ka = B e^{-qa}, \quad \Psi_1'(a) = \Psi_2'(a) \Rightarrow kA \cos ka = -qB e^{-qa}.$$

З останніх рівнянь одержимо вираз $\frac{1}{k} \operatorname{tg} ka = -\frac{1}{q}$, за допомогою якого маємо таке перетворення:

$$\sin ka = \frac{\pm \operatorname{tg} ka}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 ka}} = \pm \frac{k}{\sqrt{q^2 + k^2}} = \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0a^2}} ka.$$

З цього рівняння отримаємо вираз для знаходження рівнів енергії частинки:

$$\sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0a^2}} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a,$$

який, у свою чергу, можна розв'язати графічно (рис. 7.2). Розв'язками будуть точки перетину синусоїди і прямої, що залежать від параметра ka (спектр енергії буде *дискретним*). Задовольняють наші умови тільки ті області визначення синусоїди, де $\operatorname{tg} ka$ від'ємний. Кут нахилу прямої залежить від множника $\frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0a^2}}$, тобто параметрів ями — ширини a і глибини U_0 . Кількість

точок перетину скінченна. Жодного рівня енергії не існує, якщо $ka < \frac{\pi}{2}$, тобто $U_0a^2 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$. Перший рівень з'являється, коли $U_0a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$. У разі збільшення розмірів ями кількість рівнів збільшується, n -й рівень з'являється за $ka = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$, тобто $U_0a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} (2n + 1)^2$.

У даній задачі область $x > a$ є класично недоступною. Але хвильова функція $\Psi_2(x)$ у цій області не обертається в нуль тотожно. Це означає можливість проникнення частинки в класично недоступну область. Густина

ймовірності виявлення частинки експоненційно згасає в разі поглиблення в цю область. *Ефективна глибина* її проникнення $d \sim (2q)^{-1}$ визначається висотою U_0 та енергією E і є однією з характеристик **тунельного ефекту**.

Приклад 7.4. У напівнескінченній потенціальній ямі (див. дані з прикл. 7.3) енергія частинки $E = U_0/2$. Знайдіть:

- а) параметри ями $U_0 a^2$;
- б) найбільш ймовірне значення координати частинки;
- в) ймовірність знаходження частинки всередині ями.

Розв'язання. Застосуємо розв'язки попереднього прикладу.

а) Оскільки рівень єдиний, то $\frac{\pi}{2} < ka < \frac{3\pi}{2} \Rightarrow \frac{\pi}{2} < \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} a < \frac{3\pi}{2}$. Рівняння на рівні енергії дасть умову для параметрів ями:

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

б) Хвильова функція $\Psi(x) = \begin{cases} A \sin kx, & 0 < x < a; \\ B e^{-qx}, & x \geq a; \end{cases} \quad k = q = \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar}.$

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

ймовірне положення частинки — всередині ями. Щоб знайти її координату, обчислимо екстремум густини ймовірності (рис. 7.3):

$$\frac{dw}{dx} = 0 \Rightarrow \sin 2kx = 0 \Rightarrow x_\gamma = \frac{\pi\gamma}{2k} = \frac{2a\gamma}{3}.$$

Найбільш ймовірне значення координати $x = \frac{2a}{3}$.

в) Ймовірність знаходження частинки всередині ями:

$$W_{\text{in}} = \int_0^a A^2 \sin^2 kx dx = \frac{A^2}{2} \left(a - \frac{1}{2k} \sin 2ka \right) = \frac{A^2 a}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{3\pi} \right).$$

Знайдемо так само ймовірність знаходження частинки поза ямою:

$$W_{\text{out}} = \int_a^\infty B^2 e^{-2qx} dx = \frac{B^2 e^{-2qa}}{2q} = \left\{ B e^{-qa} = -A \frac{\sqrt{2}}{2} \right\} = \frac{A^2 a}{3\pi}.$$

Повна ймовірність $W_{\text{in}} + W_{\text{out}} = 1$, звідки $A^2 = \frac{6\pi}{a(4 + 3\pi + \sqrt{2})}$. Отже, ймовірність знаходження частинки всередині ями $W_{\text{in}} = \frac{3\pi + \sqrt{2}}{4 + 3\pi + \sqrt{2}} = 0,73$.

Приклад 7.5. Знайдіть рівні енергії та нормовані хвильові функції станів дискретного спектра частинки в полі $U(x) = -\gamma\delta(x)$, $\gamma > 0$. Знайдіть середні значення кінетичної і потенціальної енергії частинки в цих станах.

Розв'язання. Оскільки нас цікавлять зв'язані стани, то повна енергія частинки повинна бути від'ємною. Рівняння Шредінгера (7.1) для частинки:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (-|E| + \gamma\delta(x)) \Psi(x) = 0.$$

Всюди, крім точки $x = 0$, це рівняння набуває вигляду

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - k^2\Psi(x) = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar},$$

розв'язок якого подамо як $\Psi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}$. У результаті накладання умов обмеженості на хвильову функцію отримаємо такий вираз:

$$\Psi(x) = \begin{cases} Be^{-kx}, & x > 0; \\ Ae^{kx}, & x < 0. \end{cases}$$

Застосування умов зшивок (7.4) дає змогу записати такі співвідношення:

$$A = B, \quad -kA - kB = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}A.$$

Враховуючи все вище сказане, ми отримуємо вираз для енергії частинки: $E = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}$. Таким чином, у δ -подібній ямі завжди маємо один енергетичний рівень.

Вираз для хвильової функції можна записати для двох областей у вигляді $\Psi(x) = Ae^{-k|x|}$. Застосувавши умову нормування хвильової функції у випадку дискретного спектра, отримаємо сталу нормування:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 e^{-2k|x|} dx = |A|^2 \left(\int_{-\infty}^0 e^{2k|x|} dx + \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx \right) = \frac{|A|^2}{k} \Rightarrow A = \sqrt{k},$$

за допомогою якої знайдемо хвильову функцію частинки:

$$\Psi(x) = \sqrt{k} e^{-k|x|} = \frac{\sqrt{m\gamma}}{\hbar} \exp\left(-\frac{m\gamma}{\hbar^2}|x|\right).$$

Середнє значення потенціальної енергії

$$\bar{U} = \frac{m\gamma}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} (-\gamma\delta(x)) \exp\left(-2\frac{m\gamma}{\hbar^2}|x|\right) dx = -\frac{m\gamma^2}{\hbar^2}.$$

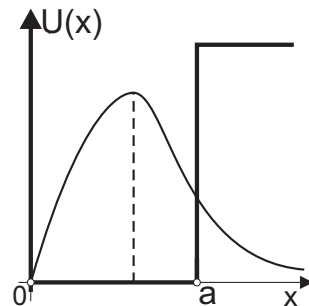


Рис. 7.3

Середнє значення кінетичної енергії

$$\begin{aligned}\bar{T} &= -\frac{\gamma}{2} \left(\int_{-\infty}^0 e^{m\gamma x/\hbar^2} \frac{d^2}{dx^2} [e^{m\gamma x/\hbar^2}] dx + \int_0^{\infty} e^{-m\gamma x/\hbar^2} \frac{d^2}{dx^2} [e^{-m\gamma x/\hbar^2}] dx \right) = \\ &= \frac{m\gamma^2}{4\hbar^2} \left(\int_{-\infty}^0 e^{\xi} d\xi - \int_0^{\infty} e^{-\xi} d\xi \right) = \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}.\end{aligned}$$

Завдання для самостійного виконання

1. Визначте середні значення координати, імпульсу та їх флуктуації для частинки, що знаходиться в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a . Перевірте співвідношення невизначеностей для координати й імпульсу в стаціонарних станах.

2. Знайдіть розподіл ймовірностей різних значень енергії частинки масою m , флуктуації її координати, імпульсу й енергії в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a , що описується хвильовими функціями вигляду $\Psi_1(x) = Ax(x - a)$; $\Psi_2(x) = Bx \left(x^2 - \frac{a^2}{4} \right)$; $\Psi_3(x) = C \sin^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right)$.

3. Частинка масою m рухається в одновимірній прямокутній нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a . Знайдіть найбільш ймовірні положення частинки, приведеної в перший збуджений стан, та середнє значення кінетичної енергії частинки в цьому стані.

4. Частинка перебуває в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками. Знайдіть енергетичний рівень частинки, для якого інтервали енергій двох сусідніх із ним рівнів (верхнього й нижнього) відносяться як 7/5.

5. Частинка перебуває в основному стані в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками. Ширина ями a . Знайдіть ймовірність перебування частинки в області $x \in [a/3; 2a/3]$.

6. Частинка перебуває в основному стані в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками. Ширина ями a . Знайдіть ймовірність перебування частинки в області $x \in [0; 2a/3]$.

7. Протон перебуває в одновимірній прямокутній потенціальній ямі шириною 1 нм із нескінченно високими стінками. Знайдіть найменшу різницю енергетичних рівнів ΔE_p протона.

8. Знайдіть ймовірність того, що частинка масою m , яка перебуває в нескінченно глибокій ямі, має енергію $E = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ в стані $\Psi(x) = Ax(a - x)$.

9. Розв'яжіть рівняння Шредінгера для частинки масою m , що перебуває у двовимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі, ширина якої по осі x дорівнює a , а по осі y дорівнює b ($0 < x < a$, $0 < y < b$). Знайдіть:

- а) спектр власних значень енергії $E_{n_1 n_2}$ і власні функції частинки $\Psi_{n_1 n_2}$;
- б) ймовірність її знаходження в області $a/3 \leq x \leq 2a/3$.

10. Розв'яжіть рівняння Шредінгера для частинки масою m , що перебуває в тривимірному непроникному потенціальному ящику:

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

Знайдіть спектр енергії $E_{n_1 n_2 n_3}$ і власні функції частинки $\Psi_{n_1 n_2 n_3}$.

11. Частинка знаходиться в потенціальному полі (див. дані з прикл. 7.3). Знайдіть:

- а) значення $a^2 U_0$, за якого енергія основного стану дорівнює $3U_0/4$;
- б) значення величини $a^2 U_0$, за якого з'являється третій дискретний рівень;
- в) число енергетичних рівнів у ямі, якщо $a^2 U_0 = 125\hbar^2/m_0$;
- г) наближений аналітичний вираз енергій нижніх рівнів ($E \ll U_0$), якщо $a^2 U_0 \gg \hbar^2/m_0$.

12. Знайдіть парні й непарні енергетичні рівні дискретного спектра частинки в симетричній потенціальній ямі вигляду $U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a; \\ 0, & |x| \geq a. \end{cases}$ Визначте кількість станів частинки дискретного спектра залежно від глибини ями. Укажіть умову появи нових станів у разі поглиблення ями.

13. Частинка масою m рухається в одновимірній асиметричній потенціальній ямі скінченної глибини $U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0; \\ 0, & x \leq 0 \leq a; \\ U_2, & x > a. \end{cases}$ Визначте:

- а) енергії стаціонарних станів частинки;
- б) умову, за якої в ямі не буде зв'язаних станів;
- в) максимальне число рівнів за заданих U_1 , U_2 і a .

Розгляньте граничні випадки $U_1 \rightarrow \infty$ і $U_1 = U_2$.

14. Знайдіть енергетичний спектр частинки масою m в потенціальному полі вигляду $U(x) = \begin{cases} -\alpha\delta(x), & |x| < a; \\ \infty, & |x| \geq a, \end{cases}$ $\alpha > 0$. За умови $\frac{m\alpha a}{\hbar^2} \gg 1$ дослідіть структуру рівнів нижньої частини спектра. Доведіть, що енерге-

тичний спектр складається з послідовності пар близько розташованих рівнів, і знайдіть відстань між цими рівнями.

15. Частинка перебуває в нескінченно глибокій потенціальній ямі. Обчисліть середню силу, з якою частинка діє на кожну зі стінок ями в стаціонарних станах. Відповідь порівняйте з результатом класичної механіки.

8. Проходження крізь потенціальні бар'єри

Нехай потенціальне поле $U(x)$ таке, що потенціальна крива (рис. 8.1) має в обмеженій області «горб», а в асимптотиці виходить на «плато», тобто за $x \rightarrow \pm\infty$ рух частинок стає вільним. Такий «горб» прийнято називати **потенціальним бар'єром**.

Розглянемо *стаціонарний* процес розсіювання бар'єром потоку частинок, що встановився.

Після подолання бар'єра потік розбивається на «той, що пройшов» і «відбитий». Цей процес зручно характеризувати спостережуваними величинами: **коефіцієнтом відбиття**, що являє собою відношення густини потоку відбитих частинок до густини потоку частинок, що падають:

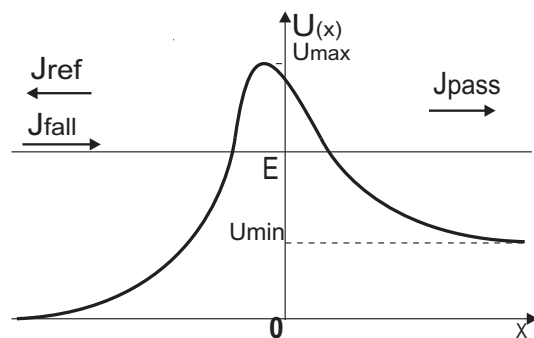


Рис. 8.1

$$R = \frac{j_{\text{ref}}}{j_{\text{fal}}} \Big|_{x \rightarrow -\infty} \quad (\text{де } j_{\text{ref}} = |\mathbf{j}_{\text{ref}}|, \quad j_{\text{fal}} = |\mathbf{j}_{\text{fal}}|) \quad (8.1)$$

і **коефіцієнтом прозорості**, що являє собою відношення густини потоку частинок, що пройшли, до густини потоку частинок, що падають:

$$D = \frac{j_{\text{pas}}|_{x \rightarrow \infty}}{j_{\text{fal}}|_{x \rightarrow -\infty}} \quad (\text{де } j_{\text{pas}} = |\mathbf{j}_{\text{pas}}|). \quad (8.2)$$

Густини потоків вважають взятими на асимптотично віддалених відстанях в області виходу потенціалів на плато.

В області $x \rightarrow \infty$ маємо тільки частинки, які пройшли через бар'єр (з додатним імпульсом). Тому хвильова функція являє собою плоску хвилю:

$$\Psi(x) \Big|_{x \rightarrow \infty} = e^{i\gamma x}, \quad \text{де } \gamma = \frac{\sqrt{2m(E - U_{\text{min}})}}{\hbar}. \quad (8.3)$$

Функція (8.3) нормована на збіг густини потоку частинок, що пройшли, з класичною швидкістю. Застосовуючи формулу (5.3), отримаємо

$$j_{\text{pas}} \Big|_{x \rightarrow \infty} = \frac{\hbar \gamma}{m}. \quad (8.4)$$

В області $x \rightarrow -\infty$ є частинки як ті, що пройшли, так і відбиті. Асимптотичний вигляд розв'язку рівняння Шредінгера в цій області подамо в такому вигляді:

$$\Psi(x) \Big|_{x \rightarrow -\infty} = C e^{ikx} + F e^{-ikx}, \quad \text{де} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (8.5)$$

Перший доданок у виразі (8.5) відповідає частинкам, що падають, другий — потоку відбитих частинок. Густина потоків обчислюють відповідно до формули (5.3):

$$j_{\text{fal}} \Big|_{x \rightarrow -\infty} = \frac{\hbar k}{m} |C|^2, \quad j_{\text{ref}} \Big|_{x \rightarrow -\infty} = \frac{\hbar k}{m} |F|^2. \quad (8.6)$$

Якщо відомі сталі C і F , то за формулами (8.1), (8.2), (8.4) і (8.6) знаходимо коефіцієнти прозорості і відбиття:

$$D = \frac{\gamma}{k} \frac{1}{|C|^2}, \quad R = \frac{|F|^2}{|C|^2}; \quad R + D = 1. \quad (8.7)$$

Розсіювання мікрочастинок на потенціальному бар'єрі суттєво відрізняється від аналогічного макроскопічного процесу. Якщо енергія частинки задовольняє умову $U_{\min} < E < U_{\max}$, то в макросвіті всі без винятку частинки пружно відбивалися б від бар'єра, тобто $R = 1$. У мікросвіті частинки можуть із ненульовою ймовірністю проникати в класично недоступну підбар'єрну область. Якщо бар'єр не надто широкий (близький до довжини де Бройля), то частинки будуть проявлятися з ненульовою ймовірністю і на протилежному боці бар'єра, тобто $D \neq 0$ (тунельний ефект). Даний ефект має суто квантову природу.

У випадку $E > U_{\max}$ у макросвіті всі без винятку частинки продовжили б свій рух у додатному напрямку осі OX , змінивши хіба що свій імпульс, тобто $D = 1$. У мікросвіті незбереження імпульсу в зовнішньому силовому полі зумовлює появу в області бар'єра станів з різними значеннями імпульсу, у тому числі й з іншим знаком. Потоки з однаково спрямованими імпульсами інтерферують один з одним, що в остаточному підсумку обумовлює появу спостережуваних відбитих частинок, тобто $R > 0$. Такий класично заборонений ефект називають **надбар'єрним відбиттям**. Для появи надбар'єрного ефекту потрібен не стільки бар'єр, скільки наявність силового поля в

обмеженій області простору. Тому відбивати може не тільки бар'єр, а і яма. Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 8.1. Частинка масою m падає зліва на симетричну потенціальну яму глибиною U_0 : $U(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0; \\ -U_0, & 0 < x < a; \\ 0, & x \geq a. \end{cases}$ Енергія частинки $E > 0$. Знайдіть коефіцієнти прозорості D і відбиття R частинки. За отриманими результатами визначте енергію E , за якої частинка буде вільно проходити через яму. Установіть для цього випадку зв'язок між шириною ями a і довжиною хвилі де Бройля λ всередині ями. Обчисліть, за яких значень ширини ями a коефіцієнт прозорості мінімальний.

Розв'язання. Розіб'ємо простір на три області (рис. 8.2), рівняння Шредінгера (7.1) для одновимірного випадку в яких матиме вигляд

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1, & x \leq 0; \\ \Psi_2, & x \in (0; a); \\ \Psi_3, & x \geq a. \end{cases} \Rightarrow \Psi_2'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_2 = 0, \quad \Psi_{1,3}'' + \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2} \Psi_{1,3} = 0.$$

Розв'язок останніх рівнянь подамо у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= A_1 e^{iqx} + B_1 e^{-iqx}, \\ \Psi_3(x) &= A_3 e^{iqx} + B_3 e^{-iqx}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar}; \\ \Psi_2(x) &= A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \end{aligned}$$

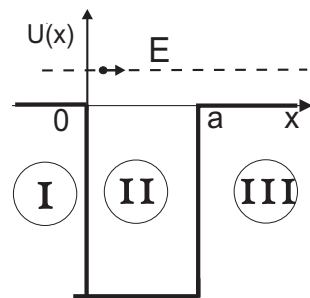


Рис. 8.2

Підставляючи ці розв'язки в умови зшивки (7.2), отримаємо систему рівнянь з невідомими сталими:

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, \quad A_1 - B_1 = (A_2 - B_2) \frac{q}{k}, \\ A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika} &= A_3 e^{iqa}, \quad A_2 e^{ika} - B_2 e^{-ika} = A_3 \frac{q}{k} e^{iqa}. \end{aligned}$$

Стала $B_3 = 0$ впливає з умови обмеженості хвильової функції. Шляхом лінійних перетворень виразимо всі невідомі через сталу A_3 :

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{e^{i(k-q)a}}{2} \left(\frac{q+k}{q} \right) A_3, \quad B_2 = \frac{e^{i(k+q)a}}{2} \left(\frac{q-k}{q} \right) A_3, \\ A_1 &= \frac{A_3 e^{ika}}{4kq} (e^{-iqa}(q+k)^2 - e^{iqa}(q-k)^2), \quad B_1 = \frac{A_3 e^{ika}}{2kq} (q^2 - k^2) i \sin qa. \end{aligned}$$

За означеннями (8.1) і (8.2) знаходимо коефіцієнти прозорості й відбиття:

$$D = \frac{16k^2q^2}{|e^{-iqa}(q+k)^2 - e^{iqa}(q-k)^2|^2}, \quad R = \left| \frac{2(q^2 - k^2) \sin qa}{e^{-iqa}(q+k)^2 - e^{iqa}(q-k)^2} \right|^2.$$

Розкривши модулі комплексних чисел та застосувавши значення сталих q і k , остаточно отримаємо

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

Для того щоб коефіцієнт прозорості дорівнював одиниці, необхідно виконання умови $\frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar} a = \pi l$, звідки $E_l = \frac{\pi^2 \hbar^2 l^2}{2ma^2} - U_0$, $l = 0, 1, \dots$

Якщо λ_0 — дебройлівська довжина хвилі частинки, то хвильове число $k_0 = \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda_0}$, $a = \frac{l}{2} \lambda_0$. Це означає, що якщо ширина ями дорівнює цілому числу напівдовжин хвиль де Бройля, то частинка проходить яму безперешкодно. Для фотона прикладом такої ями може слугувати ефект «*просвітління оптики*».

Коефіцієнт прозорості мінімальний, якщо $\sin \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar} a = \pm 1$. При цьому отримуємо такі співвідношення:

$$\frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar} a = \pi \left(l + \frac{1}{2} \right), \quad E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - U_0, \quad D_{\min} = \frac{4E(E + U_0)}{(2E + U_0)^2}.$$

Ширина ями з мінімальним коефіцієнтом відбиття $a = \frac{\lambda_0}{2} \left(l + \frac{1}{2} \right)$. Для оптики це ширина так званої «*чвертьхвильової плівки*».

Приклад 8.2. Частинка масою m падає зліва на потенціальний бар'єр висотою U_0 (рис. 8.3): $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_0, & x \geq a. \end{cases}$ Енергія частинки $E > U_0$. Знайдіть коефіцієнти прозорості D і відбиття R частинки.

Розв'язання. Розіб'ємо простір на дві області, рівняння Шредінгера (7.1) в яких матиме вигляд

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1, & x < 0; \\ \Psi_2, & x \geq 0. \end{cases} \Rightarrow \Psi_1'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_1 = 0, \quad \Psi_2'' + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \Psi_2 = 0.$$

Розв'язок останніх рівнянь подамо у вигляді

$$\Psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

$$\Psi_2(x) = Ce^{iqx} + Ge^{-iqx}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

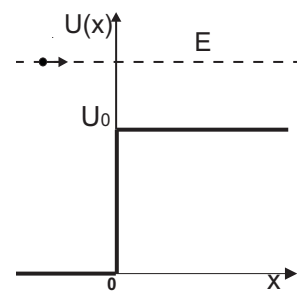


Рис. 8.3

Ці функції являють собою плоскі хвилі. У функції $\Psi_1(x)$ перший доданок описує хвилю, що падає на бар'єр, другий — хвилю, що відбивається від нього. У $\Psi_2(x)$ перший доданок описує хвилю, що пройшла над бар'єром, а відбитої хвилі немає, тому $G \equiv 0$.

За допомогою граничних умов (7.2) отримуємо співвідношення між невідомими сталими: $A + B = C$, $A - B = \frac{q}{k}C$, звідки виразимо коефіцієнти A і B у вигляді $A = \frac{k+q}{2k}C$, $B = \frac{k-q}{2k}C$.

Застосовуючи означення (8.7), знайдемо коефіцієнти прозорості й відбиття:

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

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

Обидва коефіцієнти подані у вигляді, зручному для подальшого аналізу.

У граничному випадку класичної механіки ($\hbar \rightarrow 0$) коефіцієнт відбиття повинен обернутися в нуль. При цьому отриманий вираз для $R(E)$ зовсім не містить сталої Планка. Класичній границі відповідає випадок, коли дебройлівська довжина хвилі частинки $\lambda = h/p$ мала порівняно з характеристичними розмірами неоднорідностей потенціалу, тобто порівняно з відстанями, на яких помітно змінюється поле $U(x)$. У розглянутому ж схематичному прикладі ця відстань дорівнює нулю, так що *граничний перехід не може бути виконаний*.

Приклад 8.3. Частинка масою m падає зліва на потенціальний бар'єр висотою U_0 (рис. 8.4): $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_0, & x \geq 0. \end{cases}$ Енергія частинки $E < U_0$. Знайдіть ефективну глибину χ_{eff} проникнення частинки під бар'єр. Обчисліть χ_{eff} для електрона, якщо $U_0 - E = 1$ еВ.

Розв'язання. Знайдемо розв'язок рівняння Шредінгера для частинки під бар'єром $x > 0$:

$$\Psi'' + \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \Psi = 0 \Rightarrow \Psi(x) = Ae^{-qx} + Be^{qx}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar},$$

який у зв'язку з обмеженістю функції повинен мати вигляд $\Psi(x) = Ae^{-qx}$.

Густина ймовірності перебування частинки під бар'єром $w(x) = A^2 e^{-2qx}$, ймовірність мати координату $x = 0$ є $w(0) = A^2$.

За означенням χ_{eff} — глибина, на якій ймовірність перебування частинки зменшується в e разів порівняно з ймовірністю на границі:

$$w(\chi_{\text{eff}}) = A^2 e^{-2q\chi_{\text{eff}}} = \frac{w(0)}{e} = \frac{A^2}{e},$$

$$\chi_{\text{eff}} = \frac{1}{2q} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}.$$

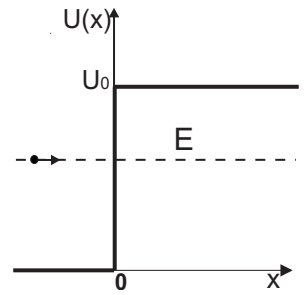


Рис. 8.4

Для електрона ефективна глибина проникнення становить $\chi_{\text{eff}} = 1 \text{ \AA}$.

Приклад 8.4. Частинка масою m падає на прямокутний симетричний потенціальний бар'єр шириною a і висотою U_0 : $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_0, & x \in [0; a]; \\ 0, & x > a. \end{cases}$

Визначте коефіцієнти відбиття і прозорості як функції енергії частинки E .

Розв'язання. Стаціонарне рівняння Шредінгера (7.1) необхідно окремо розв'язувати в кожній із трьох областей. У крайній зліва області загальний вигляд розв'язку запишемо так:

$$\Psi(x) \Big|_{x < 0} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{де} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Для крайньої справа області розв'язок зручно подати у вигляді

$$\Psi(x) \Big|_{x > a} = e^{ik(x-a)}.$$

Розв'язок у центральній області суттєво залежить від знака $E - U_0$.

За $E < U_0$ (рис. 8.5) підбар'єрна область є класично недоступною. Тому розв'язок рівняння Шредінгера подамо у вигляді

$$\Psi(x) \Big|_{0 \leq x \leq a} = Fe^{\gamma x} + Ge^{-\gamma x}, \quad \text{де} \quad \gamma = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

Сталу F занулити не можемо, тому що наш бар'єр має скінченну довжину.

За допомогою умов зшивок (7.2) отримуємо співвідношення між невідомими сталими:

$$A + B = F + G, \quad A - B = (G - F)i\gamma/k, \quad A - B = (G - F)i\gamma/k, \\ Fe^{\gamma a} + Ge^{-\gamma a} = 1, \quad Fe^{\gamma a} - Ge^{-\gamma a} = ik/\gamma.$$

Треба зауважити, що для обчислення коефіцієнтів нам потрібні тільки дві сталі B :

$$A = \operatorname{ch} \gamma a + \frac{i}{2} \left(\frac{\gamma}{k} - \frac{k}{\gamma} \right) \operatorname{sh} \gamma a, \quad B = -\frac{i}{2} \left(\frac{\gamma}{k} + \frac{k}{\gamma} \right) \operatorname{sh} \gamma a,$$

що дає змогу, застосовуючи означення (8.7), знайти коефіцієнти відбиття і прозорості:

$$R = \frac{(k^2 + \gamma^2)^2 \operatorname{sh}^2 \gamma a}{4k^2\gamma^2 + (k^2 + \gamma^2)^2 \operatorname{sh}^2 \gamma a}, \quad D = \frac{4k^2\gamma^2}{4k^2\gamma^2 + (k^2 + \gamma^2)^2 \operatorname{sh}^2 \gamma a}.$$

$D \neq 0$, тобто буде мати місце *тунельний ефект*. Його можна пояснити тим, що глибина проникнення частинки під бар'єр порівнянна із шириною бар'єра.

За $E > U_0$ (рис. 8.6) підбар'єрна область є класично доступною, тому розв'язок рівняння Шредінгера необхідно брати у вигляді

$$\Psi(x) \Big|_{0 \leq x \leq a} = Fe^{i\xi x} + Ge^{-i\xi x}, \quad \text{де} \quad \xi = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}.$$

Цей розв'язок відрізняється від попереднього заміною $\gamma \rightarrow \xi$, тому коефіцієнти відбиття і прозорості можемо знайти відразу:

$$R = \frac{(k^2 + \xi^2)^2 \sin^2 \xi a}{4k^2\xi^2 + (k^2 + \xi^2)^2 \sin^2 \xi a}, \\ D = \frac{4k^2\xi^2}{4k^2\xi^2 + (k^2 + \xi^2)^2 \sin^2 \xi a}.$$

У загальному випадку $R \neq 0$, тобто має місце *надбар'єрне відбиття*. Однак за деяких значень енергії бар'єр може стати взагалі абсолютно прозорим.

Приклад 8.5. Частинки масою m кожна розсіюються на δ -подібному потенціальному бар'єрі: $U(x) = \alpha\delta(x)$, $\alpha > 0$. Знайдіть коефіцієнти відбиття і прозорості як функції енергій частинок E .

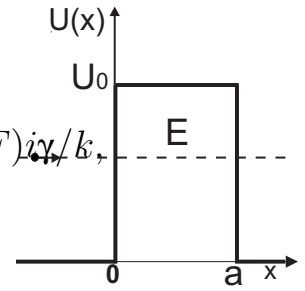


Рис. 8.5

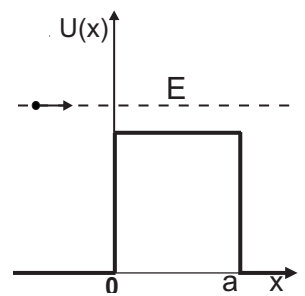


Рис. 8.6

Розв'язання. Подамо хвильову функцію частинки, що рухається зліва направо, у такому вигляді:

$$\Psi(x)\Big|_{x<0} = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, \quad \Psi(x)\Big|_{x>0} = B(k)e^{ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0.$$

Умови зшивок (7.4) задовольняються за таких співвідношень між сталими:

$$1 + A(k) = B(k), \quad ik(B(k) - 1 + A(k)) = 2m\alpha B(k)/\hbar^2.$$

Розв'яжемо цю систему відносно невідомих $A(k)$ і $B(k)$:

$$A(k) = \frac{m\alpha}{ik\hbar^2 - m\alpha}, \quad B(k) = \frac{ik\hbar^2}{ik\hbar^2 - m\alpha}.$$

Коефіцієнти відбиття і прозорості мають вигляд

$$R(E) = |A(k)|^2 = \frac{m^2\alpha^2}{2mE\hbar^2 + m^2\alpha^2}, \quad D(E) = |B(k)|^2 = \frac{2mE\hbar^2}{2mE\hbar^2 + m^2\alpha^2},$$

звідки видно, що виконується рівність $R + D = 1$, при цьому

$$R(E) \approx \frac{m\alpha^2}{2E\hbar^2} \rightarrow 0 \text{ за } E \rightarrow \infty, \quad D(E) \approx \frac{2E\hbar^2}{m\alpha^2} \rightarrow 0 \text{ за } E \rightarrow 0.$$

Завдання для самостійного виконання

1. Частинка масою m падає на потенціальний бар'єр $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_0, & x \geq 0. \end{cases}$

Знайдіть наближені значення коефіцієнта відбиття частинки від бар'єра і коефіцієнта прозорості для таких випадків:

- а) частинка пролітає безпосередньо над бар'єром $E \approx U_0$;
- б) частинка пролітає значно вище за бар'єр $E \gg U_0$.

2. Електрон має енергію $E=10$ еВ. Визначте, у скільки разів зміниться його швидкість v і довжина хвилі де Бройля λ у разі проходження крізь потенціальний бар'єр нескінченної ширини висотою $U_0=6$ еВ.

3. Протон з енергією $E_p=1$ МеВ під час проходження нескінченно широкого потенціального бар'єра ($U \ll E$) змінив довжину хвилі де Бройля λ на 1%. Обчисліть висоту потенціального бар'єра U_0 .

4. Електрон з енергією $E=100$ еВ падає на нескінченно широкий потенціальний бар'єр висотою $U_0=64$ еВ. Визначте ймовірність того, що електрон відіб'ється від бар'єра.

5. Коефіцієнт відбиття R протона від низького потенціального бар'єра нескінченної ширини дорівнює $2,5 \cdot 10^{-5}$. Визначте, який відсоток становить висота бар'єра U_0 від енергії E електронів, що падають.

6. Визначте, за якого відношення висоти U_0 низького потенціального бар'єра нескінченної ширини і енергії E_e електрона, що падає на бар'єр, коефіцієнт відбиття $R = 0,5$.

7. Частинка масою m падає на прямокутний симетричний потенціальний бар'єр $U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ U_0, & x \in [0; a]; \\ 0, & x > a. \end{cases}$ Дослідіть такі граничні випадки:

а) $E \rightarrow \infty$ (фактично $E \gg U_0$);

б) бар'єр малої прозорості $(U_0 - E)ma^2/2\hbar^2 \gg 1$;

в) $E \rightarrow 0$ (фактично $E \ll ma^2U_0^2/\hbar^2$, $E \ll U_0$);

г) $ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$ і $ma^2E/\hbar^2 \ll 1$;

д) $E \approx U_0$.

8. Ширина прямокутного потенційного бар'єра дорівнює 0,2 нм, різниця енергій $U_0 - E = 0,5$ еВ. Обчисліть, у скільки разів зміниться ймовірність проходження електрона крізь бар'єр, якщо різниця енергій зросте в 10 разів.

9. Електрон з енергією $E = 9$ еВ рухається в додатному напрямку осі ОХ. Визначте, за якої ширини потенціального бар'єра коефіцієнт прозорості $D = 0,1$, якщо висота бар'єра $U_0 = 10$ еВ.

10. Протон і електрон пройшли однакову прискорювальну різницю потенціалів $\Delta\phi = 15$ кВ. Обчисліть, у скільки разів відрізняються коефіцієнти прозорості D_e для електрона і D_p протона, якщо висота бар'єра $U_0 = 20$ кеВ, а ширина 0,1 пм.

11. Електрон проходить крізь прямокутний потенціальний бар'єр шириною 0,5 нм. Висота U_0 бар'єра більша за енергію E електрона на 1%. Обчисліть коефіцієнт прозорості D , якщо енергія електрона становить 100 еВ.

12. Частинки масою m кожна розсіюються на системі із двох δ -подібних потенціальних бар'єрів $U(x) = \Omega (\delta(x) + \delta(x - a))$. Визначте, за яких значень енергій частинок система буде абсолютно прозорою для них.

13. Для частинки масою m знайдіть коефіцієнт прозорості D бар'єра, заданого потенціальною кривою $U(x) = U_0 \left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right)$. Розгляньте випадок $E < U_0$.

9. Гармонічний осцилятор

Лінійним гармонічним осцилятором називають частинку, що рухається в потенціальному полі $U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$, де m — маса частинки; k — коефіцієнт квазіпружної сили; $\omega = \sqrt{k/m}$ — власна частота осцилятора. У класичному випадку частинка буде рухатись за законом $x(t) = x_0 \cos(\omega t + \phi_0)$. Амплітуда x_0 однозначно визначена енергією осцилятора, яка може набувати будь-яких значень в інтервалі $x \in (0, \infty)$.

У мікросвіті стаціонарна задача вимагає розв'язку рівняння Шредінгера (7.1) у вигляді

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_E(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \Psi_E(x) = E \Psi_E(x) \quad (9.1)$$

з граничними умовами $\Psi_E(\pm\infty) = 0$ внаслідок фінітного руху.

Відповідно до загальної теорії енергетичний спектр осцилятора буде *дискретним*:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (9.2)$$

Рівні розташовані *еквідистантно* (рис. 9.1) на відстані $\hbar\omega$ один від одного. Вони також не вироджені, тобто кожному відповідає тільки один стан:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} \Psi_n^{\text{osc}} \left(\frac{x}{x_0} \right), \quad \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{n'}(x) \Psi_n(x) dx = \delta_{n'n}, \quad (9.3)$$

де $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ — «природна» одиниця довжини для осцилятора, яка дозволяє суттєво спростити математичний вигляд переходом до безрозмірних величин;

$$\Psi_n^{\text{osc}}(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\zeta) e^{-\zeta^2/2}, \quad (9.4)$$

де $H_n(\zeta) = (-1)^n e^{\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} (e^{-\zeta^2})$, $n = 0, 1, \dots$ — поліноми **Чебишова — Ерміта**.

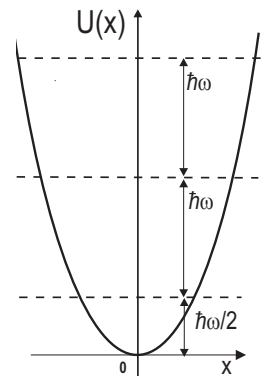


Рис. 9.1

Енергія квантового осцилятора на відміну від класичного залежить від частоти, а не від амплітуди, яка в квантовій теорії взагалі не визначена. Основний стан осцилятора має ненульову енергію $E_0 = \hbar\omega/2$. Це так звана *енергія нульових коливань*. Наявність нульових коливань не суперечить принципу

невизначеностей, що не дозволяє частинці опуститися на «дно». Основному стану відповідає хвильова функція $\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2x_0^2}$.

Оскільки в процесі віддалення від положення рівноваги потенціальна енергія монотонно неперервно зростає, хвильові функції будуть ненульовими й у класично недоступній області, що зумовить ненульове значення густини ймовірності в цій області.

Введемо оператор $\hat{a}$ і ермітово-спряжений йому оператор $\hat{a}^+$ як

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - i \frac{\hat{p}}{p_0} \right), \quad (9.5)$$

де $p_0 = \sqrt{m\hbar\omega}$ має зміст максимального значення імпульсу для стану з енергією $\hbar\omega/2$ у класичній задачі на гармонічний осцилятор. Ці оператори не є ермітовими, але відіграють важливу роль у квантовій механіці й квантовій електродинаміці. Дія цих операторів на власні функції гармонічного осцилятора (9.3) також буде власною функцією осцилятора, але відповідна їм енергія буде на $\hbar\omega$ більша або менша:

$$\hat{a}^+ \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}, \quad \hat{a} \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1}, \quad (9.6)$$

тому оператор $\hat{a}^+$ отримав назву **оператора народження**, а оператор $\hat{a}$ — **оператора знищення** квантів. Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 9.1. Хвильова функція основного стану для частинки, що рухається під впливом квазіпружної сили, має вигляд $\Psi_0(x) = A \exp(-\alpha^2 x^2/2)$, де $\alpha = \sqrt[4]{mk/\hbar^2}$; m — маса частинки; k — коефіцієнт квазіпружної сили. Обчисліть для даного стану ймовірність знаходження частинки поза межами, дозволеними класичною механікою.

Розв'язання. Дана хвильова функція не є нормованою, тому ймовірність знаходження частинки поза межами $(-x_{\max}, x_{\max})$ (рис. 9.2), дозволеними класичною механікою, дорівнює відношенню

$$W = \frac{\int_{-x_{\max}}^{-\infty} \Psi^2 dx + \int_{x_{\max}}^{\infty} \Psi^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2 dx} = \frac{2 \int_{x_{\max}}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx}{2 \int_0^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx} = \frac{\int_{\xi_{\max}}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi}{\int_0^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi},$$

де $\xi = \alpha x$ і $\xi_{\max} = \alpha x_{\max}$.

В основному стані енергія осцилятора є $\hbar\omega/2$. Таким чином, у точці максимального відхилення $x_{\max}$ осцилятора від положення рівноваги його потенціальна енергія дорівнює енергії основного стану:

$$\frac{\hbar\omega}{2} = \frac{kx_{\max}^2}{2} \Rightarrow x_{\max} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{k}}, \quad \xi_{\max} = \sqrt[4]{\frac{m\omega^2}{k}}.$$

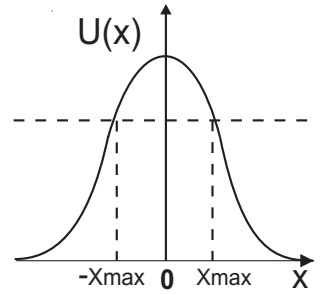


Рис. 9.2

Для власної частоти коливань гармонічного осцилятора виконується співвідношення $\omega^2 = k/m$, тому $\xi_{\max} = 1$.

Застосовуючи інтеграл Пуассона, ймовірність запишемо у вигляді

$$W = \frac{\int_0^\infty e^{-\xi^2} d\xi}{\int_0^\infty e^{-\xi^2} d\xi} = \frac{\int_0^\infty e^{-\xi^2} d\xi - \int_0^1 e^{-\xi^2} d\xi}{\int_0^\infty e^{-\xi^2} d\xi} \approx \frac{\frac{\pi}{2} - 0,843}{\frac{\pi}{2}} \approx 0,049.$$

У результаті ймовірність знаходження в класично недоступній області для даного стану дорівнює 4,9%.

Приклад 9.2. Знайдіть можливі значення енергії квантового гармонічного осцилятора з частотою ω , що перебуває в стані, який описує хвильова функція $\Psi(x) = Be^{-a^2x^2}$.

Розв'язання. Розв'язок рівняння Шредінгера (9.1) для гармонічного осцилятора з частотою ω дасть значення енергії осцилятора E :

$$E = -\frac{1}{\Psi} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2x^2}{2} = -\frac{2\hbar^2a^4x^2}{m} + \frac{\hbar^2a^2}{m} + \frac{m\omega^2x^2}{2}.$$

Оскільки енергія не може залежати від координати, доданки, що містять координату, в сумі повинні дорівнювати нулю:

$$\frac{2\hbar^2a^4x^2}{m} = \frac{m\omega^2x^2}{2} \Rightarrow a^2 = \frac{m\omega}{2\hbar}.$$

Тоді отримуємо відповідь: $E = \frac{\hbar^2a^2}{m} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{m\omega}{2\hbar} = \frac{\hbar\omega}{2}$.

Приклад 9.3. Обчисліть середнє значення квадрата координати $\overline{x^2}$ і середню потенціальну енергію $\overline{U}$ одновимірного гармонічного осцилятора, що перебуває на n -му енергетичному рівні.

Розв'язання. Середнє значення квадрата координати обчислимо за означенням (3.1). Хвильову функцію n -го стану подамо у вигляді

$$\Psi_n(\zeta) = C_n e^{-\zeta^2/2} H_n(\zeta), \text{ де } C_n = \sqrt{\frac{x_0}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2^n n!}}, \quad \zeta = \frac{x}{x_0}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Тоді середнє значення координати має вигляд

$$\overline{x^2} = |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \int \zeta^2 \left(e^{-\zeta^2/2} H_n(\zeta) \right)^2 d\zeta = |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \int \zeta^2 e^{-\zeta^2} H_n^2(\zeta) d\zeta.$$

Замінивши один з поліномів $H_n(\zeta) = (-1)^n e^{\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} (e^{-\zeta^2})$ і проінтегрувавши останній вираз, отримаємо $\overline{x^2} = |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \int e^{-\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} \{ H_n(\zeta) \zeta^2 \} d\zeta$.

Похідні від поліномів подамо у такому вигляді:

$$\frac{d^n}{d\zeta^n} \{ H_n(\zeta) \zeta^2 \} = \frac{d^n}{d\zeta^n} (a_n \zeta^{n+2} + a_{n-2} \zeta^n + \dots) = a_n \frac{(n+2)!}{2!} \zeta^2 + n! a_{n-2}.$$

За допомогою рекурентної формули для коефіцієнтів a_k знайдемо, що $a_n = 2^n$, $a_{n-2} = -a_n \frac{n(n-1)}{4}$. Підставляючи похідну в інтеграл, одержуємо

$$\overline{x^2} = |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \int e^{-\zeta^2} \left(2^n \frac{(n+2)!}{2!} \zeta^2 - n! 2^n \frac{n(n-1)}{4} \right) d\zeta,$$

який за допомогою інтеграла Пуассона перетворюється до такого вигляду:

$$\overline{x^2} = |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \left(2^n \frac{(n+2)!}{2!} \frac{\sqrt{\pi}}{2} - n! 2^n \frac{n(n-1)}{4} \sqrt{\pi} \right) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Середню потенціальну енергію обчислимо, застосовуючи отриманий вище результат:

$$\overline{U} = \frac{m\omega^2 \overline{x^2}}{2} = \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{2}.$$

Розв'язання цієї задачі можна максимально спростити, застосувавши **теорему про віріал**: якщо потенціальна енергія має вигляд $U(\mathbf{r}) = U_0 r^N$, то в довільному стаціонарному стані для середніх кінетичної та потенціальної енергій виконується співвідношення $2\overline{T} = N\overline{U}$.

Для осцилятора $\overline{T} = \overline{U} \Rightarrow \frac{\overline{p^2}}{m} = m\omega^2\overline{x^2}$. За визначенням стаціонарних станів $\frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$. Після спільного розв'язання останніх двох рівнянь одержуємо $\overline{x^2} = x_0^2\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

Приклад 9.4. Подайте оператор Гамільтона гармонічного осцилятора через оператори народження і знищення.

Розв'язання. Застосуємо означення (9.5) і умову $x_0p_0 = \hbar$. Розглянемо добуток $\hat{a}^+\hat{a}$:

$$\hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} - i\frac{\hat{p}}{p_0} \right) \left(\frac{x}{x_0} + i\frac{\hat{p}}{p_0} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{x_0^2} + \frac{\hat{p}^2}{p_0^2} + i\hbar(x\hat{p} - \hat{p}x) \right).$$

Оскільки $x\hat{p} - \hat{p}x \equiv [x, \hat{p}] = i\hbar$, можемо записати

$$\hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{m\omega^2x^2}{2} + \frac{\hat{p}^2}{2m} \right) - \frac{1}{2} \Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} \right).$$

Аналогічно можемо записати оператор Гамільтона в іншому вигляді:

$$\hat{a}\hat{a}^+ = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{m\omega^2x^2}{2} + \frac{\hat{p}^2}{2m} \right) + \frac{1}{2} \Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}\hat{a}^+ - \frac{1}{2} \right).$$

Завдання для самостійного виконання

1. Перевірте співвідношення невизначеностей для координати й імпульсу у випадку одновимірного лінійного гармонічного осцилятора. За допомогою цих співвідношень визначте енергію основного стану осцилятора.

2. Виходячи з того, що $\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$, знайдіть хвильову функцію першого збудженого стану гармонічного осцилятора.

3. Гармонічний осцилятор знаходиться в першому збудженому стані. Обчисліть середню потенціальну $\overline{U}$ і середню кінетичну $\overline{T}$ енергію цього осцилятора.

4. Знайдіть енергетичний спектр і хвильові функції стаціонарних станів частинки в полі $U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ m\omega^2x^2/2, & x > 0. \end{cases}$

5. Нехай хвильова функція гармонічного осцилятора в момент $t = 0$ має вигляд $\Phi(x, 0) = (\Phi_0(x) + 2i\Phi_1(x))/\sqrt{5}$, де $\Phi_0(x)$, $\Phi_1(x)$ — нормовані хвильові функції стаціонарних станів осцилятора. Знайдіть $\Phi(x, t > 0)$. Обчисліть середню енергію осцилятора. Знайдіть ймовірності $W(E_0)$, $W(E_1)$ того, що

осцилятор має енергію E_0, E_1 . Визначте середнє значення координати осцилятора $\overline{x(t)}$.

6. Знайдіть $|\Phi(x, t > 0)|^2$, якщо хвильова функція гармонічного осцилятора в момент $t = 0$ має вигляд $\Phi(x, 0) = \exp\left(-\frac{m\omega(x - x_0)^2}{2\hbar}\right)$.

7. Маса осцилятора m , частота ω , заряд e . На осцилятор діє постійне однорідне електричне поле напруженості ϵ , спрямоване вздовж осі ОХ. Знайдіть енергії стаціонарних станів і відповідні їм хвильові функції.

8. Знайдіть рівні енергії і хвильові функції стаціонарних станів частинки масою m , що рухається в полі $U(x, y) = m(\omega_X^2 x^2 + \omega_Y^2 y^2)/2$ у випадку, коли відношення ω_X/ω_Y не є раціональне число. Розгляньте також випадок, коли ω_X/ω_Y — раціональне число, зокрема випадок колового осцилятора: $\omega_X = \omega_Y = \omega$.

9. Знайдіть рівні енергії і хвильові функції стаціонарних станів частинки масою m , що рухається в полі $U(x, y) = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2) + \alpha xy$, за умови $|\alpha| < m\omega^2$.

10. Знайдіть рівні енергії і хвильові функції стаціонарних станів тривимірного гармонічного осцилятора $U(x, y, z) = m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2)/2$. Розгляньте випадок ізотропного осцилятора.

11. Дві частинки масами m_1 і m_2 , що рухаються одновимірно, з'єднані пружиною твердості κ . Знайдіть енергії стаціонарних станів такої системи та відповідні їм хвильові функції.

12. Обчисліть комутатори $[\hat{H}, (\hat{a}^+)^n]$ і $[\hat{H}, (\hat{a})^n]$ гамільтоніана з операторами народження і знищення кванта енергії гармонічного осцилятора.

13. Для хвильових функцій одновимірного осцилятора доведіть рівності (9.6).

14. За допомогою операторів $\hat{a}^+$ і $\hat{a}$ знайдіть значення енергії і нормовані власні функції гармонічного осцилятора.

10. Рух у центрально-симетричному полі.

Воднеподібний атом

Під час руху частинки масою m у центрально-симетричному полі, коли потенціальна енергія залежить тільки від відстані до силового центра r і не залежить від напрямку радіус-вектора $\mathbf{r}$, стаціонарне рівняння Шредінгера

(5.9) через сферичну симетрію потенціалу зручно розв'язувати у вигляді

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\Psi(r, \theta, \varphi) - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\theta, \varphi}\Psi(r, \theta, \varphi) + U(r)\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi), \quad (10.1)$$

де $\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$ і $\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ — радіальна і кутова частини оператора Лапласа $\Delta_{r, \theta, \varphi}$ у сферичній системі координат відповідно. Гамільтоніан такої системи можемо подати у вигляді

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + U(r), \quad (10.2)$$

де $\hat{p}_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$ і $\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta, \varphi}$ — оператори *радіальної складової імпульсу* та *квадрата орбітального моменту*. Перші два доданки у виразі (10.2) — *оператор кінетичної енергії*. Система, що описана цим гамільтоніаном, може перебувати в станах із певною енергією E , певним значенням квадрата орбітального моменту $\mathbf{L}^2$ і певним значенням проекції моменту на виділений напрямок L_z $\left(\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$. Хвильові функції цих станів водночас є власні функції всіх трьох операторів.

Власні функції і власні значення операторів $\hat{\mathbf{L}}^2$ і $\hat{L}_z$ можуть бути знайдені з розв'язку рівнянь на одиничній сфері:

$$\hat{\mathbf{L}}^2\Psi(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad \hat{L}_z\Psi(\theta, \varphi) = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Власними функціями цих операторів є **сферичні функції**:

$$\Psi(\theta, \varphi) \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (10.3)$$

виражені, у свою чергу, через *приєднані поліноми Лежандра*:

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

Спектри власних значень операторів $\hat{\mathbf{L}}^2$ і $\hat{L}_z$ залежать від **орбітального квантового числа** l та **магнітного квантового числа** m .

«Підвищувальний» (значення проекції моменту на вісь z) $\hat{L}_+$ і «знижувальний» $\hat{L}_-$ оператори визначають як оператори, що діють за правилом

$$\hat{L}_{\pm}\Psi_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2 \mp m}\Psi_{l,m\pm 1}(\theta, \varphi), \quad (10.4)$$

явний вигляд яких у сферичній системі координат такий:

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (10.5)$$

Власними функціями останніх є також функції (10.3).

Розв'язок рівняння Шредінгера (10.1) з гамільтоніаном (10.2) можемо записати у вигляді

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi) = \Phi_{El}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (10.6)$$

де $\Phi_{El}(r)$ — радіальна хвильова функція, яку визначає вигляд потенціальної енергії $U(r)$. Підставляючи вираз (10.6) в рівняння (10.1) для функцій $\Phi_{El}(r)$ одержуємо

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \Phi_{El}(r) + \left(U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) \Phi_{El}(r) = E \Phi_{El}(r) \quad (10.7)$$

з граничною умовою $\Phi_{El}(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ та нормуванням $\int_0^{\infty} \Phi_{El}^2(r) r^2 dr = 1$.

Найчастіше $\Phi_{El}(r)$ подають у вигляді $\Phi_{El}(r) = \frac{1}{r} R_{El}(r)$, що обумовлює еквівалентну форму рівняння (10.7):

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2}{dr^2} R_{El}(r) + \left(U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R_{El}(r) = E R_{El}(r) \quad (10.8)$$

з додатковими умовами $R_{El}(0) = 0$, $R_{El}(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ і $\int_0^{\infty} R_{El}^2(r) dr = 1$. Це

рівняння називають *радіальним рівнянням Шредінгера*. За своєю структурою (10.8) збігається з одновимірним рівнянням Шредінгера (7.1) з потенціалом $U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$. Таким чином, квантова механіка подібно до класичної дозволяє в центральному полі звести тривимірну задачу до одновимірної додаванням доцентрового доданка $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$. При цьому в рівнянні Шредінгера з'являється цілий невід'ємний параметр l . Оскільки за фіксованого l магнітне квантове число m може набувати значення $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ (всього $(2l+1)$ значення), кожен стаціонарний стан з певним значенням l буде $2l+1$ -кратно виродженим. Стани, що відповідають різним значенням l , позначають спектроскопічними символами «s» ($l = 0$), «p» ($l = 1$), «d» ($l = 2$), «f» ($l = 3$) і далі в алфавітному порядку.

Під час руху зарядженої частинки в кулонівському полі (**воднеподібний атом**) $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ стаціонарне рівняння Шредінгера (10.1) набуває вигляду

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi), \quad (10.9)$$

де під μ розуміють *зведену масу*; r — відносну відстань; E — енергію відносного руху.

На рис. 10.1 наведено вигляд ефективного потенціалу радіального рівняння Шредінгера (10.8) у кулонівському полі тяжіння. За $E < 0$ рух фінітний, тому що електрон перебуває в «потенціальній ямі», утвореній зростаючим кулонівським потенціалом і квадратично спадним доцентровим відштовхуванням.

Якщо розв'язок рівняння (10.9) шукати у вигляді (10.6), змінні розділяються і ми одержуємо такі власні нормовані функції:

$$\Phi_{nl}(r) = N_{nl} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l \exp \left(-\frac{Zr}{na_0} \right) {}_1F_1 \left(-n + l + 1, 2l + 2, \frac{2Zr}{na_0} \right), \quad (10.10)$$

а також власні значення енергії:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0}, \quad (10.11)$$

де a_0 — *перший борівський радіус* (для електрона $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$);

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

— нормувальний множник; ${}_1F_1$ — *вироджена гіпергеометрична функція*, виражена через *поліноми Лагерра* $L_k^{(\beta)}(\xi)$:

$${}_1F_1 \left(-n + l + 1, 2l + 2, \frac{2Zr}{na_0} \right) = n! \frac{\Gamma(2l+2)}{\Gamma(n+l+1)} L_{n-l-1}^{(2l+1)} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right),$$

які, у свою чергу, виражені через *формулу Родріга*:

$$L_k^{(\beta)}(\xi) = \frac{1}{n!} \xi^{-\beta} e^{\xi} \frac{d^n}{d\xi^n} (\xi^{k+\beta} e^{-\xi}).$$

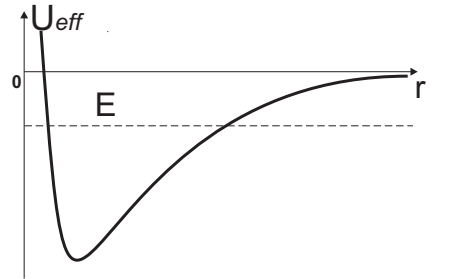


Рис. 10.1

Параметр $n = 1, 2, \dots$ має назву **головного квантового числа**. За фіксованого n число l набуває значень $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Таким чином, кратність виродження рівня дорівнює n^2 . Спектр (10.11) іноді називають *рідбергівським*. Кількість його рівнів нескінченна. Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 10.1. У стані Ψ_{lm} із певним моментом l і його проекцією m на z знайдіть $\overline{L_x}$, $\overline{L_y}$, $\overline{L_x L_y}$, $\overline{L_x^2}$, $\overline{L_y^2}$.

Розв'язання. Спочатку знайдемо середнє значення оператора $\hat{L}_+$:

$$\overline{L_+} = \int \Psi_{lm}^* (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) \Psi_{lm} d\Omega = \hbar \sqrt{l(l+1) - m^2} - m \int \Psi_{lm}^* \Psi_{l,m+1} = 0,$$

де враховано ортогональність власних функцій оператора $\hat{L}_+$, які відповідають різним власним значенням. Звідки $\overline{\hat{L}_x + i\hat{L}_y} = 0$, що дає змогу записати $\overline{L_x} = \overline{L_y} = 0$. Оператор $\hat{L}_+^2$ подамо у вигляді

$$\hat{L}_+^2 = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)^2 = \hat{L}_x^2 - \hat{L}_y^2 + i(\hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_x).$$

Очевидно, що $\overline{\hat{L}_+^2} = 0$, це дає змогу записати

$$\overline{\hat{L}_x^2 - \hat{L}_y^2} = 0 \Rightarrow \overline{L_x^2} = \overline{L_y^2}, \quad \overline{\hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_x} = 0 \Rightarrow \overline{\hat{L}_x \hat{L}_y} = -\overline{\hat{L}_y \hat{L}_x}.$$

Враховуючи комутаційне співвідношення $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$, отримуємо

$$\overline{\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x} = i\hbar m \Rightarrow \overline{\hat{L}_x \hat{L}_y} = -\overline{\hat{L}_y \hat{L}_x} = -\frac{i\hbar m}{2}.$$

Завдяки явному вигляду оператора $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ можемо отримати співвідношення $\overline{\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2} = \overline{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2} \Rightarrow \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m^2 = \overline{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2}$, а за допомогою нього — середні значення квадратів проекцій моменту:

$$\overline{L_x^2} = \overline{L_y^2} = \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m^2).$$

Приклад 10.2. Маємо дві слабковзаємодіючі системи 1 і 2, стани яких характеризують квантовими числами (l_1, m_1) і (l_2, m_2) . Укажіть можливі значення повного моменту L сукупної системи. Оператор сумарного моменту $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}}^{(1)} + \hat{\mathbf{L}}^{(2)}$, $\hat{\mathbf{L}}^{(1)}$ і $\hat{\mathbf{L}}^{(2)}$ — оператори моментів двох систем. Також обчисліть середні значення $\overline{\hat{\mathbf{L}}}$ і $\overline{\hat{\mathbf{L}}^2}$ у даному стані.

Розв'язання. Дві системи назвемо *слабковзаємодіючими*, якщо виконуються співвідношення $[\hat{\mathbf{L}}_i^{(1)}, \hat{\mathbf{L}}_j^{(2)}] = 0$.

За означенням квантові числа системи $(1+2)$ набувають таких значень:

$$M = m_1 + m_2, \quad |l_1 - l_2| \leq L \leq (l_1 + l_2), \quad |M| \leq L,$$

звідки можливі значення моменту L сукупної системи задовольняють умову

$$\max \{|l_1 - l_2|, |m_1 + m_2|\} \leq L \leq (l_1 + l_2).$$

Застосовуючи розв'язки прикл. 10.1, отримуємо шукані середня значення: $\overline{L_x} = \overline{L_y} = 0$, $\overline{L_z} = m_1 + m_2$, а також

$$\overline{\hat{\mathbf{L}}^2} = \overline{\hat{\mathbf{L}}^{(1)2}} + \overline{\hat{\mathbf{L}}^{(2)2}} + 2\overline{\hat{\mathbf{L}}^{(1)}\hat{\mathbf{L}}^{(2)}} = \hbar^2 [l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1)] + 2m_1m_2.$$

Приклад 10.3. Нехай $\Psi_{3,-1}(\theta, \varphi) = Ae^{-i\varphi}(5\cos^2\theta - 1)\sin\theta$ — задана хвильова функція. Знайдіть нормовану функцію $\Psi_{3,-2}$.

Розв'язання. Спочатку пронормуємо задану функцію:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Psi_{3,-1}^* \Psi_{3,-1} \sin\theta d\theta d\varphi = 2\pi A^2 \int_0^\pi (5\cos^2\theta - 1)^2 \sin^3\theta d\theta = \frac{16\pi}{21} A^2 = 1,$$

що дає змогу записати $\Psi_{3,-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{21}{16\pi}} e^{-i\varphi} (5\cos^2\theta - 1) \sin\theta$.

Застосовуючи означення (10.4), маємо $\hat{L}_- \Psi_{3,-1} = \hbar\sqrt{10}\Psi_{3,-2}$. За допомогою (10.5) знайдемо результат дії оператора $\hat{L}_-$ на задану функцію:

$$\hat{L}_- \Psi_{3,-1} = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \Psi_{3,-1} = 10\hbar \sqrt{\frac{21}{16\pi}} e^{-2i\varphi} \cos\theta \sin^2\theta.$$

Таким чином, шукана нормована функція має такий вигляд:

$$\Psi_{3,-2}(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{105}{32\pi}} e^{-2i\varphi} \cos\theta \sin^2\theta.$$

Приклад 10.4. Знайдіть енергетичний спектр і хвильові функції для просторового ротатора з моментом інерції I .

Розв'язання. Ротатор являє собою частинку, що рухається по сфері заданого радіуса $r = a = \text{const}$. Прикладом ротатора може служити двоатомна молекула. Момент інерції такої молекули дорівнює $I = \mu a^2$ (μ — зведена маса молекули), а її енергія в системі центра мас — енергія обертання молекули. Ротатор має тільки дві обертальні степені свободи, які зручно характеризувати кутами θ і φ сферичної системи координат. Рух ротатора вільний, тому

гамільтоніан побудуємо за аналогією з гамільтоніаном вільного поступального руху із заміною $\mathbf{p}$ на $\mathbf{L}$ і маси μ — на I : $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I}$. Тоді стаціонарне рівняння Шредінгера для ротатора набуває вигляду $\hat{\mathbf{L}}^2 \Psi(\theta, \varphi) = 2IE \Psi(\theta, \varphi)$. Воно являє собою рівняння для власних функцій і власних значень оператора $\hat{\mathbf{L}}^2$, які нам відомі:

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

Таким чином, кожному енергетичному рівню ротатора $E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$ відповідають стани, визначені сферичними функціями (10.3) (базис ротатора). Кожен енергетичний рівень E_l вироджений із кратністю $2l+1$. Основний стан ($l=0$) є не вироджений.

Приклад 10.5. Хвильова функція, що описує стан ротатора, має вигляд $\Psi = B(2 \sin \theta \sin \varphi + 3i)$. Визначте сталу нормування B , величини L_z , L^2 і E , які можуть бути знайдені в експерименті, ймовірності їх появи, а також середні значення.

Розв'язання. Розвинемо нашу функцію за власними функціями $\hat{\mathbf{L}}^2$:

$$\begin{aligned} \Psi &= B \left[2 \left(\sqrt{\frac{8\pi}{3}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \frac{1}{2i} e^{i\varphi} - \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \frac{1}{2i} e^{-i\varphi} \right) + 3i \sqrt{4\pi} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \right] = \\ &= B \left[-i \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1,1} + i \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1,-1} + 3i \sqrt{4\pi} Y_{0,0} \right]. \end{aligned}$$

Застосовуючи ортонормованість сферичних функцій, запишемо умову нормування у вигляді $B^2 \left[\frac{8\pi}{3} + \frac{8\pi}{3} + 36\pi \right] = 1$, звідки $B = \sqrt{\frac{3}{124\pi}}$, а нормована функція має вигляд $\Psi = -i \sqrt{\frac{2}{31}} Y_{1,1} + i \sqrt{\frac{2}{31}} Y_{1,-1} + 3i \sqrt{\frac{3}{31}} Y_{0,0}$.

Набір власних функцій, за якими можливе розвинення функції Ψ , містить ті значення величин L_z , L^2 і E , які можуть бути знайдені в експерименті. Ці величини являють собою власні значення операторів, що відповідають тим власним функціям, які входять до функції Ψ . Значення цих величин у різних можливих стаціонарних станах такі:

$$\begin{aligned} l=0, \quad m=0 &\Rightarrow L_z = 0, \quad L^2 = 0, \quad E = 0; \\ l=1, \quad m=1 &\Rightarrow L_z = \hbar, \quad L^2 = 2\hbar^2, \quad E = \hbar^2/I; \\ l=1, \quad m=-1 &\Rightarrow L_z = -\hbar, \quad L^2 = 2\hbar^2, \quad E = \hbar^2/I. \end{aligned}$$

Ймовірності виявлення в експерименті тієї або іншої величини визначаються квадратами модулів коефіцієнтів розвинень за власними функціями. Знаючи значення величин і їх ймовірності, знайдемо середні значення:

$$\overline{L_z} = -\hbar W_{(L_z=-\hbar)} + \hbar W_{(L_z=\hbar)} + 0W_{(L_z=0)} = 0,$$

$$\overline{L^2} = 2\hbar^2 W_{(L^2=2\hbar^2)} + 0W_{(L^2=0)} = \frac{8\hbar^2}{31}, \quad \overline{E} = \frac{\hbar^2}{I} W_{(E=\hbar^2/I)} + 0W_{(E=0)} = \frac{4\hbar^2}{31I}.$$

Приклад 10.6. Знайдіть хвильову функцію вільної частинки в s-стані.

Розв'язання. Рівняння (10.8) для вільної частинки ($U = 0$) в s-стані ($l = 0$) має вигляд

$$\frac{d^2}{dr^2}(r\Phi(r)) + k^2(r\Phi(r)) = 0, \quad \text{де} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Його розв'язок подамо у вигляді $r\Phi(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr)$. Оскільки функція $r\Phi(r)$ обмежена, то $B = 0$ за $r = 0$. Таким чином, для радіальної частини хвильової функції одержуємо $\Phi(r) = a \frac{\sin(kr)}{r}$. Функція $\Phi(r) \rightarrow 0$ за $r \rightarrow \infty$, при цьому жодних додаткових граничних умов не виникає. Звідси одержуємо, що *спектр енергії неперервний*. Коефіцієнт A знайдемо з умови нормування для неперервного спектра:

$$|A|^2 \int_0^\infty \frac{\sin(kr)}{r} \frac{\sin(k'r)}{r} r^2 dr = \frac{1}{2} \int_0^\infty \cos[(k-k')r] dr - \frac{1}{2} \int_0^\infty \cos[(k+k')r] dr = \delta(k-k'),$$

звідки $a = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$. Урахування кутової частини хвильової функції $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

визначає хвильову функцію $\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\pi\sqrt{2}} \frac{\sin(kr)}{r}$.

Приклад 10.7. Електрон в атомі водню перебуває в основному стані, який описує хвильова функція $\Psi(r) = A \exp(-r/r_1)$. Знайдіть енергію E електрона і сталу r_1 розмірності довжини.

Розв'язання. У нашому випадку хвильова функція залежить тільки від координати r , тому рівняння Шредінгера (10.9) буде мати такий вигляд:

$$\frac{d^2}{dr^2}\Psi + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r} + E \right) \Psi = 0.$$

Обчисливши першу і другу похідні даної функції за r , перепишемо останній вираз у такий спосіб: $\left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \right) + \left(\frac{2me^2}{\hbar^2} - \frac{2}{r_1} \right) \frac{1}{r} = 0$. Із цього співвідношення видно, що рівність його нулю за будь-яких значень r можлива лише в тому випадку, коли обидві дужки окремо дорівнюють нулю.

Остаточно $E = -\frac{\hbar^2}{2mr_1^2}$, $r_1 = \frac{\hbar^2}{me^2}$.

Приклад 10.8. Хвильова функція електрона в основному стані атома водню має вигляд $\Psi(r) = C \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$, де a_0 — борівський радіус. Знайдіть:

- а) значення сталої нормування C ;
- б) найбільш ймовірну відстань між електроном і ядром;
- в) середнє значення модуля кулонівської сили, що діє на електрон;
- г) середнє значення потенціальної енергії електрона в полі ядра.

Розв'язання.

а) Для знаходження сталої C застосуємо умову нормування у сферичній системі координат:

$$\int |\Psi(r)|^2 d^3r = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\Psi(r)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = 4\pi \int_0^\infty |\Psi(r)|^2 r^2 dr = 1.$$

Підставляючи у вираз $\Psi(r)$ і інтегруючи за частинами, одержимо $C = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$.

б) Ймовірність того, що частинка перебуває в області від r до $r + dr$: $dw = 4\pi |\Psi(r)|^2 r^2 dr$. Тоді найбільш ймовірна відстань між електроном і ядром відповідає максимуму функції $4\pi |\Psi(r)|^2 r^2$. Диференціюючи її за r і прирівнюючи похідну до нуля, одержуємо $r_{\text{ймов}} = a_0$.

в) Середнє значення кулонівської сили $F(r) = \frac{e^2}{r^2}$, що діє на електрон, визначають за такою формулою:

$$\overline{F(r)} = 4\pi e^2 \int_0^\infty \Psi^2(r) dr = \frac{4e^2}{a_0^3} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2}{a_0}r\right) dr = \frac{2e^2}{a_0^2}.$$

г) Середнє значення потенціальної енергії електрона $U(r) = -\frac{e^2}{r}$ у полі ядра обчислюють аналогічно:

$$\overline{U(r)} = -4\pi e^2 \int_0^\infty \Psi^2(r) r dr = -\frac{4e^2}{a_0^3} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2}{a_0}r\right) r dr = -\frac{e^2}{a_0}.$$

Приклад 10.9. Знайдіть середній електростатичний потенціал, створений 1s-електроном у центрі атома водню.

Розв'язання. Хвильову функцію 1s-стану електрона ($n = 1, l = 0, m = 0$) оберемо з попереднього прикладу. Тоді заряд 1s-електрона — це заряд сферично-симетричної електронної хмари. Густина цієї електронної хмари дорівнює $\rho = -ew(r) = -e|\Psi(r)|^2$. Виділимо тонкий сферичний шар із радіусами r і $r + dr$. Об'єм шару дорівнює $4\pi r^2 dr$. Повний заряд сферичного шару $dq = \rho 4\pi r^2 dr$ створює в центрі атома потенціал $d\phi = \frac{dq}{r} = 4\pi r dr = -4\pi e|\Psi(r)|^2 r dr$.

Сумарний електростатичний потенціал, створений всією електронною хмарою, знайдемо, проінтегрувавши останній вираз за r :

$$\phi_0 = \int d\phi = -4\pi e \int_0^\infty |\Psi(r)|^2 r dr = -\frac{4e}{a_0^3} \int_0^\infty e^{-2r/a_0} r dr = -\frac{e}{a_0} \int_0^\infty e^{-\zeta} \zeta d\zeta = -\frac{e}{a_0}.$$

Приклад 10.10. Знайдіть найбільш ймовірну відстань електрона в 1s-стані від ядра із зарядом Ze .

Розв'язання. Згідно з виразами (10.6), (10.3) та (10.10) повна хвильова функція 1s-стану: $\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = \Phi_{1,0}(r) \cdot Y_{0,0}(\theta, \phi) = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$.

Застосовуючи умову нормування, одержимо

$$\int |\Psi_{1s}(\mathbf{r})|^2 d^3r = \int_0^\infty |\Phi_{1,0}(r)|^2 r^2 dr \int_\Omega |Y_{0,0}(\theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi = \int_0^\infty w_{1,0}(r) dr = 1.$$

Густина ймовірності знаходження електрона у сферичному шарі радіусом r і товщиною dr : $w_{1,0}(r) \sim r^2 \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right)$. Максимальне значення $w_{1,0}$, як нескладно показати, досягається за $r_{\max} = \frac{Z}{a_0}$. Це і є найбільш ймовірна відстань електрона від силового центра. В атомі водню вона дорівнює борівському радіусу.

Помітимо, що ймовірність виявлення електрона на довільній відстані від центра в 1s-стані завжди є *ненульовою*. Однак за великих r вона експоненційно зменшується, так що реальний розмір ядра буде скінченний.

Приклад 10.11. Обчисліть середнє значення r^{-1} в основному стані воднеподібного атома.

Розв'язання. За допомогою явного вигляду хвильової функції основ-

ного стану $\Psi_{1s}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$ маємо

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

Цей результат ми можемо отримати, застосувавши теорему про віріал. Згідно з цією теоремою $2\overline{T} = N\overline{U}$, де $\overline{T}$ і $\overline{U}$ — відповідно середня кінетична й потенціальна енергії системи. В атомі водню $U(r) = -Ze^2/r \sim r^{-1}$. Теорема набуває вигляду $2\overline{T} = -\overline{U}$ у довільному стаціонарному стані.

В 1s-стані $\overline{T} + \overline{U} = E_{1s} = -\frac{1}{2} Z^2 \frac{e^2}{a_0}$. Розв'язуючи останні два рівняння відносно $\overline{U}$, одержуємо

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

Завдання для самостійного виконання

1. Знайдіть явний вигляд операторів $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ у сферичній системі координат.
2. Знайдіть такі комутатори: $[\hat{L}_-, \hat{L}_+]$, $[\hat{L}_\pm, \hat{L}_z]$, $[\hat{L}_\pm, \hat{L}_x]$, $[\hat{L}_\pm, \hat{L}_y]$.
3. Запишіть оператор кінетичної енергії у сферичній системі координат.
4. У стані Ψ_{lm} з певним моментом l і його проекцією m на z знайдіть середнє значення і середню флуктуацію проекції моменту на вісь $\tilde{z}$, що утворює кут α з віссю z .
5. Частинка перебуває в стані з моментом $l = 1$ і його проекцією $m = \pm 1$ на вісь z . Знайдіть ймовірності $W(m', m)$ різних значень проекції моменту m' на вісь z' , що утворює кут α з віссю z .
6. Є дві слабковзаємодіючі системи, стани яких характеризують квантові числа $l_1 = 1$ і $l_2 = 1$ моменту і проекції його на вісь z : $m_1 = 0$ і $m_2 = 0$. Обчисліть ймовірності різних значень сумарного моменту L .
7. Є дві слабковзаємодіючі системи, стани яких характеризують квантові числа $l_1 = l_2 = l$ моменту і проекції його на вісь z : $m_1 = l$ і $m_2 = l - 2$. Обчисліть ймовірності різних значень сумарного моменту L .
8. Стани просторового ротатора описують хвильові функції вигляду $\Psi_1 = A \cos^2 \theta$, $\Psi_2 = B^{2i\varphi}$ і $\Psi_3 = C(3 \sin \theta \cos \varphi + 2i)$. Знайдіть функції розподілу ротатора за енергіями, квадратом моменту і його проекцію на вісь z , а також середні значення цих величин.

9. Кутова частина хвильової функції частинки має вигляд $\Psi = D \cos \theta e^{2i\varphi}$. Визначте ймовірність значення $l = 1$ у цьому стані.

10. Частинка масою M вільно рухається з певним значенням квадрата орбітального моменту. Знайдіть ненормовані хвильові функції стаціонарних станів з енергією E .

11. За заданими хвильовими функціями знайдіть невідомі нормовані функції:

а) $\Psi_{l=2,m=0} = C(3 \cos 2\theta - 1)$, $\Psi_{l=2,m=1}$;

б) $\Psi_{l=3,m=0} = C(5 \cos 3\theta - 3 \cos \theta)$, $\Psi_{l=3,m=1}$;

в) $\Psi_{l=3,m=3} = Ce3i\phi \sin 3\theta$, $\Psi_{l=3,m=2}$.

12. Знайдіть квантові числа станів із хвильовими функціями $\hat{L}_+ \hat{L}_+ \hat{L}_+ \Psi_{lm}$, $\hat{L}_- \hat{L}_+ \hat{L}_- \Psi_{lm}$, $\hat{L}_- \hat{L}_z \hat{L}_+ \Psi_{lm}$, $\hat{L}_+ \hat{L}_- \hat{L}_+ \Psi_{lm}$. Визначте, за яких значень l і m ці хвильові функції дорівнюють нулю.

13. Знайдіть рівні енергії частинки маси μ у сферичній нескінченно глибокій потенціальній ямі радіусом a .

14. Визначте рівні енергії для руху частинки масою μ з моментом $l = 0$ у сферичній потенціальній ямі скінченної глибини $U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a; \\ U_0, & r > a. \end{cases}$ Установіть, за якої мінімальної глибини в ямі наявний лише один рівень.

15. Знайдіть енергетичні рівні дискретного спектра частинки масою μ у двовимірній потенціальній ямі $U(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho > a; \\ -U_0, & \rho < a \end{cases}$ у випадку, коли проекція моменту імпульсу частинки на вісь, перпендикулярну площині руху, дорівнює нулю. Окремо розгляньте випадок неглибокої ями ($\mu a^2 U_0 \ll \hbar^2$), порівняйте цей результат з одновимірним рухом.

16. Обчисліть значення квантових чисел n , n_r , l і m у стані 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f атома водню.

17. Безпосередніми розрахунками доведіть ортогональність хвильових функцій для 1s і 2s-станів воднеподібного атома.

18. Визначте, чому дорівнюють l і m у таких станах:

$$\Psi = A(r) \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \quad \Psi = A(r) \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right), \quad \Psi = A(r) \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}.$$

19. Побудуйте графік радіальної густини ймовірності в таких станах атома водню:

$$\Psi_{1s} = Ae^{-r/a}, \quad \Psi_{2s} = Bre^{-r/2a} \left(1 - \frac{r}{2a} \right), \quad \Psi_{2p} = Cr^2 e^{-r/2a} \cos \theta.$$

Визначте, чому дорівнює енергія атома водню в цих станах ($a = \hbar^2 / me^2$).

20. Знайдіть:
- $\overline{\cos \theta}$ і $\overline{\cos^2 \theta}$ у s-стані просторового ротатора;
 - $\overline{\cos^2 \theta}$ у p-стані просторового ротатора з $m = 0, \pm 1$.
21. Доведіть ортогональність воднеподібних функцій Ψ_{200} і Ψ_{210} , Ψ_{100} і Ψ_{210} . Переконайтеся в неортогональності $\Phi_{20}(r)$ і $\Phi_{21}(r)$, $\Phi_{10}(r)$ і $R_{21}(r)$.
22. Обчисліть середнє значення r^n :
- у 1s-стані воднеподібного атома ($n > -2$);
 - 2s-стані воднеподібного атома ($n > -2$);
 - 2p-стані воднеподібного атома ($n > -4$).
23. Знайдіть середні значення $\mathbf{p}^2$ і r^{-1} у довільному стаціонарному стані воднеподібного атома з головним квантовим числом n .
24. Обчисліть $\bar{\mathbf{r}}$, $\overline{\mathbf{r}^n}$ для електрона в основному стані атома водню.
25. Знайдіть розподіл ймовірностей різних значень імпульсу електрона в основному стані атома водню.
26. Знайдіть дискретний спектр для електрона в полі $U(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\alpha}{r^2}$.
27. З'ясуйте, за якої умови з'являється s-стан дискретного спектра у сферичній ямі $U(r) = \begin{cases} 0, & r > a; \\ -U_0, & r < a. \end{cases}$ Порівняйте отриманий результат із результатами у випадках одновимірного і двовимірного рухів.
28. Знайдіть рівні енергії та нормовані хвильові функції стаціонарних станів сферичного осцилятора, тобто частинки в полі $U(r) = kr^2/2$, ($k > 0$). Розв'яжіть рівняння Шредінгера двома способами — у декартовій і сферичній системах координат.

11. Квазікласичне наближення.

Варіаційний метод Рітца

Сильно збуджені системи за своїми властивостями є майже класичними, або **квазікласичними**, оскільки в цьому випадку класична дія за порядком величини значно перевершує сталу Планка $\hbar$. Проте граничний перехід $\hbar \rightarrow 0$ у самому рівнянні Шредінгера змісту не має. Він здійснюється за допомогою так званого *квазікласичного наближення* або *методу Вентцеля — Крамерса — Бріллюена (ВКБ)*. Суть методу полягає у поданні хвильової функції у вигляді $\Psi = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)$ і розвиненні дії S у ряд за степенями малого параметра $\hbar/i$. В одновимірному випадку хвильова функція частинки із заданою енергією E у полі $U(x)$ з урахуванням лише першої квантової

поправки буде мати вигляд

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \frac{A}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p(x') dx'} + \frac{B}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p(x') dx'}, E > U(x), \\ \Psi(x) &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int |p(x')| dx'} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p(x')| dx'}, E < U(x),\end{aligned}$$

де $p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}$ — класичний імпульс частинки; m — маса частинки; A, B, C і D — довільні сталі.

У зв'язку зі специфічною структурою функцій даний метод отримав назву *методу фазових інтегралів*.

Умовою застосовності цього методу є співвідношення

$$p^2 \gg \hbar \left| \frac{dp}{dx} \right| \Rightarrow \lambda \frac{1}{k} \left| \frac{dk}{dx} \right| \ll 1, \quad \text{в еквівалентній формі} \quad \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad (11.1)$$

де $k = p(x)/\hbar$, $\lambda = 2\pi/k$ — дебройлівська довжина хвилі.

Якщо d — характерний розмір області руху, то остання нерівність зводиться до умови $\lambda \ll d$.

ВКБ-наближення застосовне у випадках руху з досить великими імпульсами, причому класична сила $F = \left| \frac{dU}{dx} \right|$, що діє на частинку, повинна бути не дуже великою. Інакше кажучи, потенціальна енергія повинна змінюватися досить слабо упродовж дебройлівської довжини хвилі.

Правило квантування Бора — Зоммерфельда визначає у ВКБ-наближенні положення енергетичних рівнів дискретного спектра.

Отримаємо правило квантування енергетичних рівнів в одновимірній потенціальній ямі (рис. 11.1). Запишемо хвильову функцію в класично доступній області II ($a < x < b$) біля кожної з точок повороту:

$$\Psi_a(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right], \quad \Psi_b(x) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right],$$

де A і B — довільні сталі.

У будь-якій точці класично доступної області, досить віддаленій від точок повороту, функції $\Psi_a(x)$ і $\Psi_b(x)$ повинні переходити одна в одну, тобто необхідно прирівняти їх логарифмічні похідні:

$$\operatorname{tg} \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4} \right) = \operatorname{tg} \left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right),$$

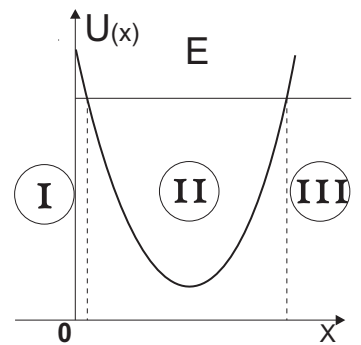


Рис. 11.1

звідки маємо такий вираз:

$$\int_a^b p(x)dx = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (11.2)$$

який і являє собою правило квантування енергетичних рівнів. Точки повороту задані рівнянням $U(x) = E$, тому вираз (11.2) являє собою в загальному випадку трансцендентне рівняння відносно енергії E з цілим невід'ємним параметром n . Фактично правило квантування (11.2) застосовне за великих значень $n \sim \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x)dx = \int_a^b p(x)dx \frac{dx}{\lambda} \sim \frac{d}{\lambda} \gg 1$, оскільки у квазікласичному наближенні дебройлівська довжина хвилі значно менша за розміри області руху.

На відміну від ями в потенціальному бар'єрі класично доступними є області I і III, де розв'язок рівняння Шредінгера осцилює (рис. 11.2). У класично недоступній області II ($a < x < b$) розв'язок містить експоненційно зростаючу і спадну компоненти. Для коефіцієнта прозорості частинок із заданою енергією $0 < E < U_{\max}$ у квазікласичному наближенні виходить також досить проста формула, що не потребує розв'язку рівняння Шредінгера:

$$D = D_0 \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)|dx \right). \quad (11.3)$$

Конкретний вигляд множника D_0 залежить від виду потенціальної енергії і характеру точок повороту. Експоненціальний множник є швидко змінна функція енергії, і потрібно розрахувати саме його. Умова застосовності ВКБ-наближення (11.1) — підбар'єрне значення енергії частинок ($E < U_{\max}$) і досить велика його ширина. У цьому випадку коефіцієнт прозорості буде малий ($D < 1$).

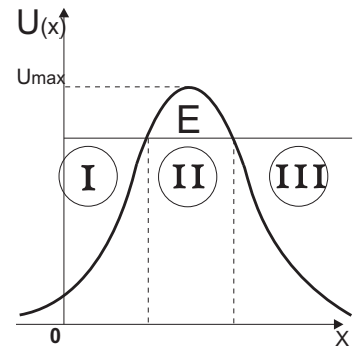


Рис. 11.2

У ряді випадків наближене обчислення перших дискретних станів квантових систем можна здійснити за допомогою **варіаційного методу**.

У ході розрахунків енергії *основного стану* спочатку аналітично вибирають «пробну функцію» $\Psi_0(\zeta, \alpha, \beta, \dots)$, що містить певну кількість невідо-

мих параметрів $\alpha, \beta, \dots$. Після обчислення енергетичного функціонала

$$\mathfrak{S}_0(\alpha, \beta, \dots) = \frac{\int \Psi_0^*(\zeta, \alpha, \beta, \dots) \hat{H} \Psi_0(\zeta, \alpha, \beta, \dots) d\zeta}{\int |\Psi_0(\zeta, \alpha, \beta, \dots)|^2 d\zeta} \quad (11.4)$$

одержуємо вираз, що залежить тільки від цих параметрів. Функціонал має значення середньої енергії системи в стані, заданому функцією Ψ_0 . Мінімізація $\mathfrak{S}(\alpha, \beta, \dots)$ зводиться до розв'язання такої системи рівнянь:

$$\frac{\partial \mathfrak{S}_0}{\partial \alpha} = \frac{\partial \mathfrak{S}_0}{\partial \beta} = \dots = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_{\min}, \beta_{\min}, \dots \quad (11.5)$$

Значення енергії $E = \mathfrak{S}_0(\alpha_{\min}, \beta_{\min}, \dots) \equiv E_0$ у разі вдалого вибору пробної функції буде близьким до дійсного значення, навіть за порівняно малої кількості застосованих параметрів. Ненормована хвильова функція основного стану системи буде приблизно збігатися з функцією $\Psi_0(\zeta, \alpha_{\min}, \beta_{\min}, \dots)$.

Описаний метод відшукування енергії основного стану має назву *прямого варіаційного методу* або **методу Рітца**. Вибір пробних функцій заснований на якісному аналізі розв'язків з урахуванням симетрії задання. Пробна функція насамперед повинна задовольняти стандартні умови і у випадку фінітного руху обертатися в нуль на нескінченності. Якщо гамільтоніан не змінюється під час операції інверсії, пробну функцію основного стану слід вибирати парною.

Аналогічно обчислюють енергію n -го збудженого стану. Відповідну пробну функцію за допомогою додаткових умов підбирають ортогональною до хвильових функцій більш низьких за енергією станів.

Хвильові функції, знайдені варіаційним методом, не обов'язково будуть власними функціями гамільтоніана $\hat{H}$. Вони є такими лише за певного вибору параметризації пробних функцій, що дозволяє підбором параметрів звести їх до точних хвильових функцій стаціонарних станів. Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 11.1. Застосовуючи правила Бора — Зоммерфельда, проквантуйте рух одновимірного гармонічного осцилятора (частинка масою m , яка рухається в потенційному полі $V(x) = m\omega^2 x^2/2$).

Розв'язання. Запишемо в явному вигляді класичний імпульс і координати точок повороту за заданої енергії :

$$p(x) = \sqrt{2m \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right)}, \quad b = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}, \quad a = -b.$$

Врахувавши парність $p(x)$ і зробивши заміну $\frac{x}{b} = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}x = \sin \xi$, маємо:

$$\int_a^b p(x)dx = \sqrt{8mE} \int_0^b \sqrt{1 - \frac{m\omega^2}{2E}x^2}dx = \frac{4E}{\omega} \int_0^{\pi/2} \cos^2 \xi d\xi = \frac{\pi E}{\omega}.$$

За допомогою виразу (11.2) одержуємо енергетичний спектр осцилятора у ВКБ-наближенні $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$, $n = 0, 1, \dots$. Цей результат точно збігається з виразом (9.2), хоча правило квантування Бора — Зоммерфельда правдиве лише для високоезбуджених станів ($n \gg 1$).

Приклад 11.2. За допомогою правила Бора — Зоммерфельда знайдіть спектр енергії та допустимі висоти, на які підіймається частинка масою m , що падає на горизонтальну пластинку і пружно від неї відбивається.

Розв'язання. Потенціальну енергію запишемо у вигляді $U(z) = mgz$, де g — прискорення вільного падіння. Енергія частинки стала $E = \text{const}$.

Частинка не може проникати в область $z < 0$ і тому хвильова функція $\Psi(a) = \Psi(0) = 0$. Хвильова функція також повинна обернутися в нуль і на границі за $z = b$ (стандартні умови потребують неперервності хвильової функції) $\Psi(b) = 0$. У нашому випадку точка повороту $b \equiv h_{\max}$ знаходиться з умови $h_{\max} = \frac{E}{mg}$. Правило квантування в цьому випадку узагальнимо і запишемо у вигляді

$$\int_0^{h_{\max}} p(z)dz = \pi\hbar \left(n + \frac{3}{4}\right), \quad n = 0, 1, \dots$$

Обчислимо інтеграл

$$\int_0^{h_{\max}} p(z)dz = \int_0^{h_{\max}} \sqrt{2gm\sqrt{h_{\max} - z}}dz = \frac{2m\sqrt{2g}}{3} \sqrt{h_{\max}^3}.$$

Застосовуючи останні два вирази, одержуємо енергетичний спектр частинки, що падає на горизонтальну поверхню, і максимальні висоти, на які вона зможе підійматися у ВКБ-наближенні:

$$E_n = \sqrt[3]{\frac{9g^2m}{8}\pi^2\hbar^2 \left(n + \frac{3}{4}\right)^2}, \quad h_{\max,n} = \frac{E_n}{mg}, \quad n = 0, 1, \dots$$

Приклад 11.3. Знайдіть у квазікласичному наближенні (з точністю до експоненціального множника) коефіцієнт прозорості для частинок з масою m і енергією E , що проходять крізь потенціальний бар'єр $U(x) = U_0 \exp\left(-\frac{x}{\alpha}\right)$, де $U_0 > 0$ і $\alpha > 0$ — параметри поля.

Розв'язання. Обчислимо інтеграл у показнику експоненти (11.3). З урахуванням парності підінтегральної функції і поведінки потенціалу маємо

$$\int_a^b |p(x)| dx = 2\sqrt{2mE} \int_0^b \sqrt{\frac{U_0}{E} e^{-x/\alpha} - 1} dx,$$

де a і b — точки повороту; $b = \alpha \ln \frac{U_0}{E}$, $a = -b$.

Інтеграл обчислюють за допомогою заміни змінної: $\sqrt{\frac{U_0}{E} e^{-x/\alpha} - 1} = \zeta$,
 $dx = -\frac{2\zeta\alpha}{\zeta^2 + 1} d\zeta$. У результаті

$$4\alpha\sqrt{2mE} \int_0^{\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}} \frac{\zeta^2 d\zeta}{\zeta^2 + 1} = 4\alpha\sqrt{2mE} \left(\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} - \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} \right).$$

Коефіцієнт прозорості бар'єра визначають за формулою (11.3):

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{8\alpha\sqrt{2mE}}{\hbar} \left(\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} - \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{U_0}{E} - 1} \right) \right\}.$$

Дана формула застосовна за $U_0 \gg E$.

Приклад 11.4. Знайдіть наближене значення енергії основного стану частинки масою m , що перебуває в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a , варіаційним методом, застосовуючи в ролі «пробної» функцію вигляду $\Psi(x) = A \left(\frac{a}{2} - \left| x - \frac{a}{2} \right| \right)$.

Розв'язання. Енергія основного стану дорівнює мінімуму від середнього значення оператора Гамільтона $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Знайдемо середнє значення енергії:

$$\overline{E} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} dx = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \right|^2 dx.$$

Спочатку пронормуємо запропоновану функцію:

$$|A|^2 \int_0^a \left(\frac{a}{2} - \left| x - \frac{a}{2} \right| \right)^2 dx = |A|^2 \left(\int_0^{a/2} x^2 dx + \int_{a/2}^a (a-x)^2 dx \right) = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{12}{a^3}}.$$

Похідна функції $\frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} = A \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{a}{2} - \left| x - \frac{a}{2} \right| \right) = \begin{cases} A, & 0 < x < a/2; \\ -A, & a/2 < x < a. \end{cases}$

Середнє значення енергії $\bar{E} = \frac{\hbar^2 |A|^2}{2m} \left(\int_0^{a/2} 1^2 dx + \int_{a/2}^a (-1)^2 dx \right) = \frac{6\hbar^2}{ma^2}.$

Це значення відповідає пробній функції $\Psi(x) = \sqrt{\frac{12}{a^3}} \left(\frac{a}{2} - \left| x - \frac{a}{2} \right| \right).$

Приклад 11.5. Обчисліть варіаційним методом енергію основного стану лінійного гармонічного осцилятора масою m і частотою ω . «Пробну» функцію оберіть у вигляді $\Psi(x, \gamma) = B \exp(-\gamma x^2/2)$, де B — стала нормування; $\gamma > 0$ — варіаційний параметр.

Розв'язання. Під час вибору пробної функції враховано відсутність вузлів у хвильовій функції основного стану та її парність, а також той факт, що $\Psi(\pm\infty, \gamma) = 0$. Енергетичний функціонал (11.4) обчислюють з гамільтоніаном $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ і заданою пробною функцією $\Psi(x, \gamma)$.

Здійснивши елементарні перетворення, отримаємо остаточний вигляд виразу (11.4):

$$\mathfrak{S}_0(\gamma) = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 \gamma}{m} + \frac{m\omega^2}{\gamma} \right).$$

Мінімум $\mathfrak{S}_0(\gamma)$ відповідає значенню $\gamma_{\min} = \frac{m\omega}{\hbar}$, тому енергія основного стану

$E_0 = \mathfrak{S}_0(\gamma_{\min}) = \frac{\hbar\omega}{2}$, а відповідна нормована хвильова функція має вигляд

$$\Psi_0(x) = \Psi(x, \gamma_{\min}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{x^2}{2x_0^2} \right), \quad x_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega}.$$

У зв'язку зі вдало обраною параметризацією пробної функції значення енергії і вигляд хвильової функції збігаються з точними виразами.

Приклад 11.6. Обчисліть варіаційним методом енергію основного стану воднеподібного атома. «Пробну» функцію з варіаційним параметром $\lambda > 0$ оберіть у вигляді $\Psi(r, \lambda) = D \exp(-\lambda r)$.

Розв'язання. Гамільтоніан воднеподібного атома запишемо у вигляді $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}$. Енергетичний функціонал (11.4) зводиться до вигляду

$$\mathfrak{S}_{1s}(\lambda) = \frac{2\lambda^3\hbar^2}{\mu} \int_0^\infty e^{-\lambda r} \nabla^2 e^{-\lambda r} r^2 dr - 4\lambda^3 Ze^2 \int_0^\infty e^{-2\lambda r} r dr,$$

який за допомогою інтегралів

$$\int_0^\infty e^{-\lambda r} \nabla^2 e^{-\lambda r} r^2 dr = - \int_0^\infty \left(\frac{\partial}{\partial r} e^{-\lambda r} \right)^2 r^2 dr = -\frac{1}{4\lambda}, \quad \int_0^\infty e^{-2\lambda r} r dr = \frac{1}{2\lambda},$$

перетворюється до вигляду $\mathfrak{S}_{1s}(\lambda) = \frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu} - Ze^2\lambda$. З умови мінімуму функціонала (11.5) визначаємо варіаційний параметр $\lambda_{\min} = \frac{Z}{a_0}$. Підставляючи значення $\lambda_{\min}$ у вирази для функціонала і пробної функції, маємо

$$E_{1s} = \mathfrak{S}_{1s}(\lambda_{\min}) = -\frac{Ze^2}{2a_0}, \quad \Psi_{1s}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right).$$

Вирази для енергії та хвильової функції збігаються з точними.

Приклад 11.7. Обчисліть варіаційним методом енергію першого збудженого стану 2s воднеподібного атома. «Пробну» функцію оберіть у вигляді $\Psi(r, \alpha, \chi) = C \left(1 + \chi \frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{\alpha r}{a_0}\right)$ з параметрами $\alpha > 0$ і $\chi < 0$.

Розв'язання. Крім стандартних умов, радіальна хвильова функція 2s-стану повинна мати один вузол (щоб задовольнити осциляційну теорему). Даний факт знаходить висвітлення в параметризації пробної функції.

Додатковою умовою за мінімізації енергетичного функціонала є вимога ортогональності $\Psi(r, \alpha, \chi)$ до хвильової функції 1s-стану, знайденої в прикл. 11.6: $\int \Psi^*(r, \alpha, \chi) \Psi_{1s}(r) d^3r = 0$. Прості обчислення дозволяють одержати зв'язок між варіаційними параметрами у вигляді $\chi = -(Z + \alpha)/3$, що разом із гамільтоніаном та заданою пробною функцією дає можливість одержати енергетичний функціонал (11.4) 2s-стану:

$$\mathfrak{S}_{2s}(\alpha) = \frac{Ze^2}{a_0} \left(-\frac{\alpha}{2} + \frac{7\alpha^2}{6Z} - \frac{Z\alpha^2}{2(\alpha^2 - Z\alpha + Z^2)} \right).$$

З умови мінімуму $\mathfrak{S}_{2s}(\alpha)$ (11.5) маємо $\alpha_{\min} = Z/2$. Підставивши $\alpha_{\min}$ у вираз для енергетичного функціонала і пробної функції, маємо

$$E_{2s} = \mathfrak{S}_{2s}(\alpha_{\min}) = -\frac{Z^2 e^2}{8a_0}, \quad \Psi_{2s}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{8\pi a_0^3}} \left(1 + \frac{Zr}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right).$$

Як і в попередньому прикладі, ми одержали збіг з точними результатами.

Завдання для самостійного виконання

1. У квазікласичному наближенні розгляньте рух частинки в потенціальній ямі шириною b з нескінченно високими «стінками» і плоским «дном»:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < b; \\ \infty, & x < 0, x > b. \end{cases} \quad \text{Порівняйте результат розрахунків енергетичного спектра з точним.}$$

2. Застосовуючи правила квантування Бора — Зоммерфельда, знайдіть спектр плоского ротатора (частинки масою m , що вільно обертається під дією центральної сили, по колу радіусом r).

3. Застосовуючи правила квантування Бора — Зоммерфельда, знайдіть рівні енергії електрона, який рухається по коловій орбіті у воднеподібному атомі (заряд ядра Ze).

4. У квазікласичному наближенні визначте положення енергетичних рівнів частинки масою m , що рухається у полі $U(x) = \alpha|x|$, де α — додатний параметр.

5. Знайдіть у квазікласичному наближенні рівні енергії частинки, що перебуває в одновимірному потенціалі $U(x) = -A/|x|$, де $A > 0$.

6. Отримайте правило квантування енергетичних рівнів і знайдіть відповідні їм квазікласичні хвильові функції у випадку потенціальної ями вигляду

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ F(x), & x > 0, \end{cases} \quad \text{де } F(x) \text{ — функція з додатною першою похідною.}$$

7. Знайдіть у квазікласичному наближенні коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра $U(x) = \begin{cases} U_0 > 0, & 0 \leq x \leq a; \\ 0, & x < 0, x > a. \end{cases}$ Квазікласичний результат порівняйте з точним.

8. Оцініть у квазікласичному наближенні коефіцієнт прозорості бар'єра $U(x) = \begin{cases} U_0 \left(1 - \frac{x}{a}\right), & x > 0; \\ 0, & x < 0, \end{cases}$ де $U_0 > 0$. Знайдіть не тільки експонентний, але й передекспонентний множник, що входить у коефіцієнт прозорості.

9. Обчисліть у квазікласичному наближенні коефіцієнт прозорості параболічного бар'єра $U(x) = \begin{cases} U_0 \left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right), & |x| \leq a; \\ 0, & |x| > a, \end{cases}$ де $U_0 > 0$. Укажіть умови застосування отриманого результату.

10. Знайдіть у квазікласичному наближенні коефіцієнт прозорості потенціального бар'єра $U(x) = \begin{cases} G(a - |x|), & |x| \leq a, \quad G > 0; \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$

11. Отримайте наближене значення енергії основного стану частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі, застосовуючи в ролі пробних хвильові функції: $\Psi_1(x) = A \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ і $\Psi_2(x) = Bx(x - a)$. Порівняйте з точними значеннями.

12. Рух частинки масою m , що перебуває в однорідному полі тяжіння, обмежений знизу абсолютно пружною горизонтальною пластиною. Варіаційним методом отримайте наближені значення енергій основного стану частинки. Пробні функції оберіть двох типів: $\Psi_1(z, \gamma) = Az \exp(-\gamma z)$ і $\Psi_2(z, \gamma) = Bz \exp(-\gamma z^2/2)$, де γ — варіаційний параметр. Вісь OZ спрямована вертикально догори. Прискорення вільного падіння g .

13. Одновимірний лінійний гармонічний осцилятор масою m і частотою ω перебуває в основному стані. Варіаційним методом отримайте наближене значення енергії осцилятора. Пробні функції оберіть двох типів:

$\Psi_1(x, \beta) = A \left(1 + \frac{x^2}{\beta^2}\right)^{-1}$ і $\Psi_2(x, \beta) = B \left(1 + \frac{x^2}{\beta^2}\right)^{-2}$, де β — варіаційний параметр. Порівняйте з точними значеннями енергій.

14. Одновимірний лінійний гармонічний осцилятор масою m і частотою ω перебуває в першому збудженому стані. Варіаційним методом знайдіть наближене значення енергії осцилятора. Пробну функцію оберіть у вигляді $\Psi(x, \lambda) = A x e^{-\lambda|x|}$ з параметром λ .

15. Частинка масою m перебуває в потенціальній ямі $U(x) = -U_0 \delta(x)$, $U_0 > 0$. Варіаційним методом отримайте наближене значення енергії основного стану. Пробну функцію з параметром α оберіть у вигляді $\Psi(x, \alpha) = A \exp(-\alpha x^2/2)$.

16. Для частинки, що перебуває в полі вигляду $U(x) = \begin{cases} kx, & k > 0, x > 0; \\ \infty, & x < 0, \end{cases}$ знайдіть енергію основного стану варіаційним методом, застосовуючи пробні функції для проміжку $x > 0$ з варіаційним параметром α у вигляді $\Psi_1(x) = A x e^{-\alpha x}$ і $\Psi_2(x) = B x e^{-\alpha x^2/2}$.

12. Нерелятивістський спі́н мікрочастинки

Чимало експериментальних фактів (тонка структура спектральних ліній ряду атомів, аномальний ефект Зеемана тощо) вказують на існування у мікрочастинок специфічного *внутрішнього степеня свободи*. Із ним пов'язаний власний момент імпульсу мікрочастинки — **спін**, який не має відношення до її руху в просторі.

Спін є обов'язковою властивістю мікрочастинки (як, наприклад, маса і заряд) і має *суто квантовий характер*. У разі переходу до класичної механіки він обертається в нуль. Величину *власного моменту імпульсу* мікрочастинки визначають за загальними законами квантової механіки спіновим квантовим числом:

$$s^2 = \hbar^2 s(s+1). \quad (12.1)$$

Комутаційні співвідношення для компонент оператора спіну $\hat{s}$ мають той же вигляд, що й для оператора моменту імпульсу:

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{s}_k,$$

тобто $\hat{s}_i$ є лінійними ермітовими операторами. Як і момент імпульсу, спін зручно вимірювати в одиницях $\hbar$. Проекція спіну на заданий напрямок може набувати квантових значень, що відрізняються один від одного на $\hbar$:

$$s_z = m_s \hbar. \quad (12.2)$$

Величину m_s називають **магнітним спіновим квантовим числом**.

Спіновому моменту притаманні властивості, що не мають аналогів у теорії механічного моменту імпульсу. Спін може набувати півцілих значень, наприклад, для електрона, протона, нейтрона $s = \frac{1}{2}$, однак, для фотона $s = 1$. Величина проекції спіну, наприклад, для електрона, протона, нейтрона може набувати тільки двох значень: $\pm \frac{\hbar}{2}$, у той час як спостережувана проекція моменту імпульсу завжди набуває значень, рівних цілому числу $\hbar$. Тому для квантово-механічного опису спіну застосовують матричний вигляд спінових станів мікрочастинок.

Оскільки число спостережуваних значень проекції спіну електрона дорівнює двом, розумно в ролі спінових операторів застосовувати комплексні матриці розмірністю 2×2 . У цьому випадку хвильовими функціями будуть двокомпонентні стовпці комплексних чисел — **спінори**. Стандартні умови, які накладають на спінори, зводяться до того, що їх елементи повинні бути

однозначними й обмеженими. Формально спінори в ході розв'язання задач можна записувати у вигляді матриць розмірністю 2×1 : $\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$ і комплексно-спряжених: $(c^* \ d^*)$.

Вектор спіну має вигляд

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \hbar \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (12.3)$$

де $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ — вектор, компоненти якого виражені в такий спосіб:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (12.4)$$

Останні отримали назву **матриць Паулі**. Вони мають усі властивості операторів проєкцій спіну й відіграють фундаментальну роль у квантовій механіці. Розглянемо деякі характерні приклади.

Приклад 12.1. Частинка зі спіном $s = 1/2$ перебуває в стані з певним значенням $s_z = \hbar/2$. Визначте ймовірності можливих значень проєкції спіну на вісь z' , яка утворює кут ϑ з віссю z .

Розв'язання. Оскільки кут між осями z і z' відомий і дорівнює ϑ , проєкцію спіну на вісь z' подамо у вигляді $\overline{s_{z'}} = \frac{\hbar}{2} \cos \vartheta$.

Оскільки вісь z' не збігається із z , то проєкція спіну вже не буде мати визначеного значення. Унаслідок загальних властивостей його проєкція на будь-який напрямок може набувати тільки двох значень: $s_{z'}^{(\pm)} = \pm \hbar/2$. Застосовуючи теорему про математичне сподівання, маємо

$$\overline{s_{z'}} = W_+ s_{z'}^{(+)} + W_- s_{z'}^{(-)} = \frac{\hbar}{2} W_+ - \frac{\hbar}{2} W_-,$$

де W_+ і W_- — ймовірності проєкції спіну вздовж додатного і від'ємного напрямків осі z' відповідно.

Враховуючи також, що $W_+ + W_- = 1$, отримуємо відповідь:

$$W_+ = \frac{1 + \cos \vartheta}{2} = \cos^2 \frac{\vartheta}{2}, \quad W_- = \frac{1 - \cos \vartheta}{2} = \sin^2 \frac{\vartheta}{2}.$$

Приклад 12.2. Знайдіть власні значення і власні функції оператора $\hat{s}_x$ для частинки зі спіном $s = 1/2$.

Розв'язання. Запишемо власні функції оператора $\hat{s}_x$ у вигляді $\Psi_{s_x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ і $\Psi_{s_x}^* = (a^* \ b^*)$, а власні значення — $s_x = \sigma_x/2$ (в одиницях $\hbar$).

Необхідні нам величини знаходимо з рівняння

$$\hat{s}_x \Psi_{s_x} = s_x \Psi_{s_x} \Rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} b/2 = s_x a, \\ a/2 = s_x b. \end{cases}$$

Розв'язуючи цю систему рівнянь, одержимо $s_x = \pm 1/2$; $a = \pm b$. Для знаходження числових значень a і b застосуємо умову нормування:

$$\int \Psi_{s_x}^* \Psi_{s_x} dV = 1 \Rightarrow \int (a^* b^*) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} dx = \int (|a|^2 + |b|^2) dx = 1 \Rightarrow |a| = |b| = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Таким чином, для власних значень $s_x = \pm 1/2$ одержуємо власні функції оператора $\hat{s}_x$: $\Psi_{s_x=1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\Psi_{s_x=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

Приклад 12.3. Укажіть вигляд оператора проекції спіну на довільний напрямок, заданий одиничним вектором $\mathbf{n}$.

Розв'язання. Оператор проекції спіну на напрямок, заданий одиничним вектором $\mathbf{n}$, можна записати у вигляді $\hat{s}_n = \mathbf{n} \hat{\mathbf{s}}$, де $\mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ і $\hat{\mathbf{s}} = \{s_x, s_y, s_z\}$. Тоді, підставляючи значення компонент, одержимо

$$\begin{aligned} \hat{s}_n &= \frac{\hbar}{2} (\sin \theta \cos \varphi \hat{\sigma}_x + \sin \theta \sin \varphi \hat{\sigma}_y + \cos \theta \hat{\sigma}_z) \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \cos \varphi & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \sin \theta \sin \varphi \\ i \sin \theta \sin \varphi & 0 \end{pmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 \\ 0 & -\cos \theta \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Приклад 12.4. Обчисліть скалярний добуток спінів двох частинок у триплетному ($s = 1$) і синглетному ($s = 0$) станах.

Розв'язання. Спін кожної частинки подамо у вигляді

$$\hat{\mathbf{s}}_1 = \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_1, \quad \hat{\mathbf{s}}_2 = \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_2.$$

Запишемо вираз для квадрата оператора спіну двох частинок:

$$\hat{\mathbf{s}}^2 = \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + 2 (\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2).$$

За допомогою формули (12.1) як у триплетному, так і в синглетному станах можемо розрахувати власні значення $\hat{\mathbf{s}}^2$, $\hat{\mathbf{s}}_1^2$ і $\hat{\mathbf{s}}_2^2$:

$$s^2 = \begin{cases} 2\hbar^2, & s = 1, \\ 0, & s = 0; \end{cases} \quad s_1^2 = s_2^2 = \hbar^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = \frac{3}{4} \hbar^2.$$

Значення скалярного добутку спінів двох частинок

$$\text{у } s = 1 \text{ стані: } (\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2) = \frac{\hbar^2}{4}, \quad \text{у } s = 0 \text{ стані: } (\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2) = -\frac{3\hbar^2}{4}.$$

Відповідно в цих станах: $(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) = 1$ і $(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) = -3$.

Приклад 12.5. Знайдіть залежність від часу спінової хвильової функції і середніх значень компонент вектора спіну частинки зі спіном $s = 1/2$ і магнітним моментом $\boldsymbol{\mu}$, що перебуває в однорідному стаціонарному магнітному полі.

Розв'язання. Направимо вісь z уздовж магнітного поля і запишемо спінову частину гамільтоніана у вигляді: $\hat{H} = -\boldsymbol{\mu}H\hat{\boldsymbol{\sigma}}_z$. При цьому рівняння Шредінгера (5.1) для спінової хвильової функції $\Psi(t) = \begin{pmatrix} A(t) \\ B(t) \end{pmatrix}$ зводиться до системи двох рівнянь:

$$\frac{d}{dt}A(t) = i\omega A(t), \quad \frac{d}{dt}B(t) = -i\omega B(t),$$

де $\omega = \frac{\mu H}{\hbar}$.

Розв'язки цих рівнянь дають вигляд хвильової функції:

$$A(t) = Fe^{i\omega t}, \quad B(t) = Ge^{-i\omega t} \Rightarrow \Psi(t) = \begin{pmatrix} Fe^{i\omega t} \\ Ge^{-i\omega t} \end{pmatrix},$$

де F і G визначаються початковими умовами, а також умовою $|F|^2 + |G|^2 = 1$.

Середні значення компонент вектора спіну $\mathbf{s}(t) = \Psi^*(t)\frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}\Psi(t)$ мають такий вигляд:

$$\begin{aligned} s_x(t) &= s_x(0) \cos 2\omega t + s_y(0) \sin 2\omega t, \\ s_y(t) &= s_y(0) \cos 2\omega t - s_x(0) \sin 2\omega t, \\ s_z(t) &= s_z(0) = \text{const}, \end{aligned}$$

тобто вектор $\mathbf{s}_z(t)$ прецесує навколо поля з кутовою швидкістю 2ω .

Завдання для самостійного виконання

1. Оцініть мінімальний розмір електрона на підставі наявності спіну.
2. Застосовуючи явний вигляд матриць Паулі (12.4), перевірте правильність таких співвідношень (I — одинична матриця 2×2):

$$[\hat{\boldsymbol{\sigma}}_i, \hat{\boldsymbol{\sigma}}_j] = 2i \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_k, \quad \{\hat{\boldsymbol{\sigma}}_i, \hat{\boldsymbol{\sigma}}_j\} = 2\delta_{ij} \hat{1}, \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 = 3I.$$

3. Знайдіть оператори: $\hat{\sigma}_+ = \frac{\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y}{2}$ і $\hat{\sigma}_- = \frac{\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y}{2}$, комутатори цих операторів з операторами $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ і $\hat{\sigma}_z$, а також комутатор $[\hat{\sigma}_+^2, \hat{\sigma}_-^2]$.
4. Пронормуйте спінові хвильові функції: $\Psi_1 = A \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$ і $\Psi_2 = B \begin{pmatrix} 3 \\ 4i \end{pmatrix}$.
5. Для стану $s = 1/2$ знайдіть:
- комутатори $[\hat{s}_i, \hat{s}_j]$ і $[\hat{s}_z, \hat{s}^2]$;
 - спінові матриці;
 - хвильові функції для випадків $s_z = \pm 1/2$;
 - власні функції і власні значення операторів $\hat{s}_y$ і $\hat{s}_z$.
6. Застосовуючи вигляд оператора проекції спіну на довільний напрямок, заданий одиничним вектором $\mathbf{n}$, (прикл. 12.3) знайдіть:
- величину $\overline{s_n}$ у станах з певним значенням проекції спіну на вісь z ;
 - ймовірності значень проекцій спіну ($\pm 1/2$) на напрямок $\mathbf{n}$.
7. Для двох частинок зі спінами $s = 1/2$ доведіть, що стани з визначеним значенням сумарного спіну є власними для оператора $\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2$, де $\hat{\sigma}_1$ і $\hat{\sigma}_2$ — відповідні матриці Паулі обох частинок.
8. Атом водню поміщений у зовнішнє магнітне поле $\mathbf{B}$. Для електрона знайдіть $\frac{d\hat{s}_x}{dt}$ і $\frac{d\hat{s}_y}{dt}$ (вісь OZ спрямована уздовж $\mathbf{B}$).
9. Знайдіть власні значення оператора $\hat{F} = a + \mathbf{b}\hat{\sigma}$, де $\mathbf{b}$ — числовий вектор.
10. Спростіть вираз $(\mathbf{a}\hat{\sigma})^n$, де $\mathbf{a}$ — числовий вектор; $n \geq 0$ — ціле число.

Список рекомендованої літератури

- Бете, Г. Квантовая механика [Текст] / Г. Бете. – М.: Мир, 1965. – 324 с.
- Блохинцев, Д.И. Основы квантовой механики [Текст] / Д.И. Блохинцев. – М.: Наука, 1983. – 664 с.
- Боум, А. Квантовая механика: основы и приложения [Текст] / А. Боум. – М.: Мир, 1990. – 720 с.
- Вакарчук, І.О. Квантова механіка [Текст] / І.О. Вакарчук. – Л.: Львів. нац. ун-т ім. І. Франка, 2004. – 784 с.
- Венгер, Є.Ф. Основи квантової механіки [Текст] / Є.Ф. Венгер, В.М. Грибань, О.В. Мельничук. – К.: Вища шк., 2002. – 286 с.
- Вихман, Э. Берклеевский курс физики [Текст]: в 5 т. / Э. Вихман. – М.: Наука, 1974. – Т. 4. Квантовая физика. – 416 с.
- Галицкий, В.М. Задачи по квантовой механике [Текст] / В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. – М.: Наука, 1992. – 880 с.
- Гольдман, И.И. Сборник задач по квантовой механике [Текст] / И.И. Гольдман, В.Д. Кривченков. – М.: Гостехиздат, 1957. – 275 с.
- Давыдов, А.С. Квантовая механика [Текст] / А.С. Давыдов. – М.: Наука, 1973. – 704 с.
- Джеммер, М. Эволюция понятий квантовой механики [Текст] / М. Джеммер. – М.: Наука, 1985. – 384 с.
- Дирак, П. Принципы квантовой механики [Текст] / П. Дирак. – М.: Наука, 1979. – 480 с.
- Иродов, Е.И. Сборник задач по атомной и ядерной физике [Текст] / Е.И. Иродов. – М.: Наука, 1963. – 344 с.
- Ландау, Л. Д. Теоретическая физика [Текст]: в 10 т. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2001. – Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистский случай) – 803 с.
- Мессиа, А. Квантовая механика [Текст]: в 2 т. / А. Мессиа. – М.: Наука, 1978. – Т. 1. – 480 с.; Т. 2. – 584 с.
- Сборник задач по теоретической физике [Текст] / Л.Г. Гречко, В.И. Сугаков, О.Ф. Томачевич, А.М. Федорченко. – М.: Высш. шк., 1984. – 319 с.
- Соколов, А.А. Квантовая механика [Текст] / А.А. Соколов, И.М. Тернов, В.И. Жуковский. – М.: Наука, 1979. – 528 с.
- Ульянов, В.В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике [Текст] / В.В. Ульянов. – Х.: Вища шк., 1980. – 216 с.
- Фейнман, Р. Квантовая механика и интегралы по траекториям [Текст] / Р. Фейнман, А. Хибс. – М.: Мир, 1968. – 382 с.

Фейнман, Р. Фейнмановские лекции по физике [Текст]: в 10 т. / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М.: Наука, – 2004. – Т. 8. Квантовая механика I. – 270 с.; Т. 9. Квантовая механика II. – 550 с.

Флюгге, З. Задачи по квантовой механике [Текст]: в 2 т. / З. Флюгге. – М.: Мир. – 1974. – Т. 1. – 341 с.

Фок, В.А. Начала квантовой механики [Текст] / В.А. Фок. – М.: Наука, 1976. – 376 с.

Шифф, Л. Квантовая механика [Текст] / Л. Шифф. – М.: Изд-во иностр. лит., 1959. – 473 с.

Юхновський, І.Р. Основи квантової механіки [Текст] / І.Р. Юхновський. – К.: Либідь, 2002. – 390 с.

Зміст

Вступ	3
1. Хвильова функція мікрочастинки та її фізичний зміст	4
2. Оператори в квантовій механіці	9
3. Власні функції та власні значення операторів	17
4. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга	24
5. Рівняння Шредінгера. Стаціонарні стани	27
6. Диференціювання операторів та інтеграли руху	34
7. Потенціальні ями	37
8. Проходження крізь потенціальні бар'єри	46
9. Гармонічний осцилятор	55
10. Рух у центрально-симетричному полі. Воднеподібний атом	60
11. Квазікласичне наближення.	
Варіаційний метод Рітца	72
12. Нерелятивістський спін мікрочастинки	82
Список рекомендованої літератури	87