

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ГОУ ВПО «ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

Физический факультет
Кафедра теоретической физики

А. Н. Валл, О. Н. Солдатенко

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА В ЗАДАЧАХ

Учебно-методическое пособие



УДК 530.145.6(076.2)(075.8)

ББК 22.314я73

В-15

Печатается по решению учебно-методической комиссии физического факультета ИГУ

Рецензенты: д-р физ.-мат. наук Ю. А. Марков, д-р физ.-мат. наук В. Л. Паперный.

Валл А. Н.

Квантовая механика в задачах : учеб.-метод. пособие / А. Н. Валл, О. Н. Солдатенко. — Иркутск : Изд-во Иркут. гос. ун-та, 2010. — 87 с.

В пособии рассматривается широкий круг задач по курсу «Квантовая теория». Предлагаемые задачи посвящены нахождению энергетических спектров и волновых функций нерелятивистских систем. Часть задач связана с вычислением амплитуд рассеяния частиц во внешнем поле и расчетом вероятности квантовых переходов. Некоторые задачи сопровождаются изложением основных теоретических аспектов соответствующих данным физическим явлениям. Это позволяет облегчить и ускорить решение задач.

Пособие предназначено для студентов 3-го курса физического факультета ИГУ всех специальностей.

Пособие подготовлено при финансовой поддержке гранта Президента РФ НШ-3810.2010.2, АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы»: проекты РНП 2.2.1.1/1483, 2.1.1/1539; ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг.:

ГК 02.740.11.5154, ГК П1197, ГК 16.740.11.0154.

УДК 530.145.6(076.2)(075.8)

ББК 22.314я73

© ГОУ ВПО «Иркутский государственный университет», 2010

Основные физические константы

Скорость света $c = 300\,000$ км/с.

Постоянная Планка $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с.

Постоянная Планка (перечеркнутая) $\hbar \equiv h/2\pi =$
 $= 1,054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с $= 6,582 \cdot 10^{-22}$ MeV·с.

1 eV = $1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж.

$\hbar c = 0,197$ GeV·Fm, 1 Fm = 10^{-13} см.

$(\hbar c)^2 = 0,39$ GeV²·mbarn, 1 barn = 10^{-28} м².

Масса электрона $m_e c^2 = 0,51$ MeV.

Масса протона $m_p c^2 = 938,272$ MeV, $m_p = 1836 m_e$.

Масса нейтрона $m_n c^2 = 939,565$ MeV.

Разность масс $(m_n - m_p)c^2 = 1,293$ MeV.

Масса дейтрона $m_d c^2 = 1875,6$ MeV.

Постоянная тонкой структуры $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$.

Классический радиус электрона $r_e = e^2/m_e c^2 = 2,8 \cdot 10^{-13}$ см.

Комптоновская длина электрона $\lambda_c = \hbar/m_e c = 3,86 \cdot 10^{-11}$
см.

Боровский радиус (при $m_p \gg m_e$) $a = \hbar^2/m_e e^2 = 0,53 \text{ \AA}$,
1 $\text{\AA} = 10^{-8}$ см = 0,1 nm.

Магнетон Бора $\mu_B = e\hbar/2m_e = 0,579 \cdot 10^{-8}$ eV/Гаусс.

Магнетон нуклона $\mu_N = e\hbar/2m_p = 0,315 \cdot 10^{-11}$ eV/Гаусс.

Гравитационная постоянная $G = 6,71 \cdot 10^{-39}$ $\hbar c$ (GeV/c²)⁻².

Планковская масса $M_{pl} = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}}$, $M_{pl} \cdot c^2 \approx 1,22 \cdot 10^{19}$ GeV.

Комптоновская длина $l_{pl} = \frac{\hbar}{M_{pl} \cdot c} = 1,6 \cdot 10^{-33}$ см.

Комптоновская длина через фундаментальные константы $l_{pl} =$
 $G^\alpha \hbar^\beta c^\gamma$, где $\alpha = 1/2$, $\beta = 1/2$, $\gamma = -3/2$.

Закон Клапейрона–Менделеева для 1 моля (расширение газа в пустоту): $pV = R(t + 273,15)$, где t – температура в градусах по шкале Цельсия. Величина $T = (t + 273,15)$ называется абсолютной температурой.

Скорость звука в воздухе при температуре $t = 0 \text{ }^\circ\text{C}$ и нормальном давлении равна $v = 331 \text{ м/с}$.

Полный список физических констант можно найти на сайте <http://physics.nist.gov/constants>.

Программа курса «Квантовая теория»

1. Энергия и импульс световых квантов. Гипотеза Планка. Эффект Комптона. Комптоновская длина электрона, ее физический смысл. Радиус сильных взаимодействий (комптоновская длина π -мезона). Лазерная конверсия.
2. Гипотеза Де-Бройля, волновая функция свободной частицы. Длина волны Де-Бройля. Дифракция микрочастиц.
3. Принцип суперпозиции состояний. Борновская интерпретация волновой функции. Разложение произвольного состояния по плоским волнам Де-Бройля. Физический смысл коэффициентов разложения.
4. Формализм Дирака. Линейное функциональное пространство, скалярное произведение, ортонормированный базис. Абстрактный вектор состояния в пространстве Гильберта.
5. Фазовое пространство квантовой системы. Соотношение неопределенности координата–импульс. Оценка энергии основного состояния квантовой системы.
6. Операторный формализм квантовой механики. Самосопряженные операторы в гильбертовом пространстве. Основные свойства собственных функций. Наблюдаемые как эрмитовы операторы в гильбертовом пространстве. Полный набор наблюдаемых. Вычисление вероятностей ре-

результатов измерения динамической величины в произвольном состоянии. Условие одновременной измеримости динамических величин. Операторы координаты и импульса и их собственные функции. Координатное и импульсное представление.

7. Гамильтониан свободной частицы. Бесконечное вырождение состояний.
8. Стационарные состояния. Стационарное уравнение Шредингера. Феноменологическое описание квазистационарных состояний. Естественная ширина спектральных линий и время жизни.
9. Уравнение непрерывности. Плотность тока. Нормировка плоских волн.
10. Одномерное уравнение Шредингера для частицы в произвольном внешнем поле.
11. Эволюция операторов и состояний во времени. Интегралы движения. Гамильтониан как генератор эволюции системы во времени.
12. Квантование гармонического осциллятора. Повышающие и понижающие операторы. Энергетический спектр. Волновая функция основного состояния. Матричные элементы оператора координаты.
13. Среднее значение любой динамической величины в произвольном состоянии. Матрица плотности и функция Вигнера.
14. Движение частицы в периодическом поле. Трансляционная инвариантность. Собственные функции и собственные значения оператора трансляции. Зонная структура

спектра. Разложение спектра на «дне» и «краях» зоны Бриллюэна. Метод «эффективной массы». Теорема Блоха.

15. Квазиклассическое приближение в квантовой механике, область применимости. Квазиклассические волновые функции, их продолжение через точки поворота. Отражение от вертикальной потенциальной стенки.
16. Квантование Борна–Инфельда для частицы в ящике.
17. Квантование момента количества движения методом повышающих и понижающих операторов. Алгебра моментов количества движения. Волновые функции состояния с определенной проекцией количества движения на заданную ось и определенным значением квадрата момента количества движения (сферические функции Лежандра).
18. Реализация алгебры моментов количества движения в матричной форме. Собственный момент количества движения (спин). Спектры квадрата момента и 3-й проекции спина.
19. Частица в сферически-симметричном поле. Разделение переменных. Радиальное уравнение Шредингера, его общие свойства. Классификация состояний в сферически-симметричном поле. Граничное условие при $r = 0$, его обоснование. Падение на центр. Оценка Баргмана для числа связанных состояний с заданным l . ВКБ-приближение для радиального уравнения.
20. Поведение радиальной волновой функции на больших и малых расстояниях. Причина квантования энергии.
21. Атом водорода, его спектр и волновая функция основного состояния и ближайших возбуждений. Вырождение

энергетических уровней и его природа. Токи в атомах, магнитный момент атома.

22. Гамильтониан заряженной частицы в произвольном электромагнитном поле. Атом водорода в постоянном магнитном поле. Волновая функция и энергетический спектр. Частичное снятие вырождения.
23. Квантовое описание двухатомной молекулы. Теплоемкость при различных температурах.
24. Спин электрона. Экспериментальное доказательство существования спина электрона. Оператор спина. Спиновые функции. Уравнение Паули. Движение спина в постоянном и переменном магнитных полях.
25. Стационарная теория возмущения. невырожденный случай.
26. Стационарная теория возмущения. Вырожденный случай.
27. Нестационарная теория возмущения. Резонансный характер квантовых переходов.
28. Простейшие применения теории возмущения. Ангармонический осциллятор. Расщепление спектральных линий в электрическом и слабом магнитном полях.
29. Постановка задачи в теории столкновений микрочастиц. Связь между амплитудой рассеяния и асимптотическим поведением волновой функции. Сечение рассеяния. Борновское приближение для амплитуды рассеяния.
30. Амплитуда рассеяния заряженной частицы на сложном атоме. Формфактор атома.

31. Точная теория рассеяния. Разложение амплитуды на парциальные волны. Фаза рассеяния. Условие упругой унитарности.
32. Учет неупругих вкладов в упругий процесс. Обобщение условия унитарности, оптическая теорема для упругой амплитуды. Модель абсолютно черного диска.
33. Прохождение частиц через потенциальный барьер. Туннельный эффект. Холодная эмиссия металлов. Исчезновение спектральных линий в сильном электрическом поле.
34. Трёхмерный потенциальный барьер. Квазистационарные состояния. Теория радиоактивного распада.
35. Кинематика излучения и поглощения фотона нестабильным свободным ядром. Энергия отдачи ядра и вклад ее в энергию фотона. Доплеровское уширение линий. Определение температуры звезд.
36. Нестабильное ядро в поле осциллятора. Эффект Мессбауэра. Фактор Дебая–Валлера.

Задачи с элементами теории

Эффекты, связанные с квантовой природой фотона

1. Найти изменение длины волны фотона при упругом рассеянии на покоящемся электроне (рис. 1) (эффект Комптона). Дать интерпретацию экспериментальных данных, полученных Комптоном в процессе рассеяния фотонов на парафине (рис. 2).

Указание. Воспользоваться гипотезой Планка–Эйнштейна

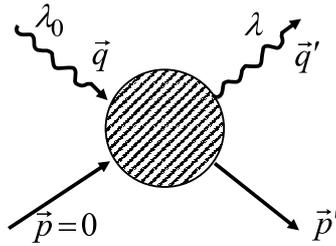


Рис. 1. Эффект Комптона

о связи волновых характеристик фотона (волновой вектор \vec{k} и частота ω) с корпускулярными характеристиками – импульс \vec{p} и энергия E :

$$E = pc, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar},$$

и потребовать для процесса (рис. 1) выполнения закона сохранения энергии–импульса:

$$\vec{q} + \vec{p} = \vec{q}' + \vec{p}',$$

$$E_q + mc^2 = E_{q'} + \sqrt{\vec{p}'^2 + m^2c^4}.$$

Ответ. $\lambda = \lambda_0 + \Delta\lambda$, где $\Delta\lambda = 2\pi\frac{\hbar}{mc}(1 - \cos\theta)$.

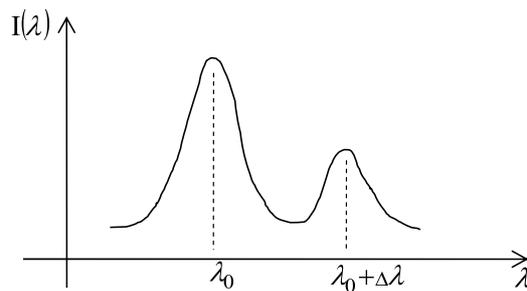


Рис. 2. Рассеяние фотона на парафине

2. Найти изменение энергии фотона при упругом рассеянии на релятивистском электроне на угол $\theta = \pi$ в рамках гипотезы Планка–Эйнштейна (см. предыдущую задачу).

Считать, что $E_q \ll E_p$.

Ответ.

$$E_{q'} = \frac{z}{z+1} E_p, \quad z = \frac{4E_p E_q}{m^2 c^4}, \quad E_p = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}, \quad E_q = qc.$$

3. Найти $E_{q'}$ при $E_q = 1,2$ eV (инфракрасный лазер на неодимовом стекле), $E_p = 46$ GeV (ускоритель SLAC, опыты по нелинейному эффекту Комптона, 1996 г.) и $E_q = 1,2$ eV, $E_p = 5$ GeV (ускоритель ВЭПП-4М, опыты по расщеплению фотона в поле ядра, 1997 г.).
4. Почему свободный электрон не может поглотить или излучить фотон (рис. 3).

Указание. Воспользоваться законом сохранения энергии–импульса и перейти в систему координат, где $\vec{p} = 0$.

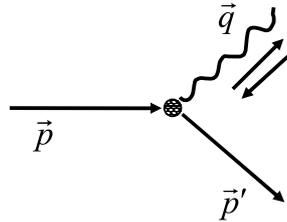


Рис. 3. Поглощение/излучение фотона свободным электроном

5. Найти энергетический спектр излучения абсолютно черного тела, используя соотношения Планка: $E = pc$ и $p = \hbar k$, где $k = 2\pi/\lambda$ – волновой вектор, λ – длина волны фотона.

Гипотеза Де-Бройля, волновая функция свободной частицы

1. Полагая, что для дифракции на кристаллической решетке полезно иметь частицы с $\lambda \approx 10^{-8}$ см, найти энергию фотона, электрона и нейтрона с данной длиной волны.

2. Ультрахолодными называются нейтроны, скорость которых $v \leq 1$ м/с. Найти их длину волны Де-Бройля. *Указание.* Учтеть, что для ультрахолодных нейтронов можно воспользоваться нерелятивистским соотношением $\vec{p} = m\vec{v}$.

Принцип суперпозиции состояний

1. Пусть частица находится в состоянии $\Psi(x) = N \exp(-\frac{x^2}{a^2})$, где N – нормировочный множитель, a – действительная константа. Представить это состояние в виде суперпозиции плоских волн Де-Бройля и проанализировать графически коэффициенты суперпозиции.

Указание. Воспользоваться соотношением

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2 \pm iqx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{b}} \exp\left(-\frac{q^2}{4b}\right).$$

2. Дать физическую интерпретацию величине $|C(\vec{p})|^2$, исходя из интерпретации Борна волновой функции $\Psi(\vec{x})$ и соотношения:

$$\Psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} C(\vec{p}) d\vec{p}.$$

Указание. Воспользоваться представлением δ -функции Дирака:

$$\delta(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{k}\vec{x}} d\vec{k}.$$

Формализм Дирака

Для описания состояний в гильбертовом пространстве Дираком был предложен формализм абстрактных векторов, аналогии которых хорошо прослеживаются в обычном линейном

3-мерном пространстве. Их роль играют три ортонормированных вектора:

$$\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3, \quad \|\vec{e}_j\| = 1, \quad \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Мы будем использовать для этих векторов одно из следующих обозначений:

$$e_i = |e_i\rangle = |i\rangle, \quad i = 1, 2, 3, \dots, N,$$

а их скалярное произведение будем обозначать одним из следующих способов:

$$(e_i, e_j) \equiv \langle e_i | e_j \rangle \equiv \langle i | j \rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots .$$

Если пространство N -мерно, то в соответствующей ортонормированной базисной системе имеется N линейно независимых векторов; N может быть бесконечно большим.

Очень удобно выбрать в качестве базисной системы для пространства физических состояний Φ собственные состояния оператора \hat{A} , отвечающего определенной наблюдаемой рассматриваемой физической системой (обычно в качестве \hat{A} используют оператор энергии \hat{H} , оператор координаты \hat{x}_i или оператор импульса \hat{p}_i). Таким образом, в качестве базисного удобно выбрать набор векторов \vec{e}_i , удовлетворяющих условию

$$\hat{A}\vec{e}_i = a_i\vec{e}_i,$$

где a_i – собственные значения оператора \hat{A} . Эти нормированные собственные вектора будем обозначать

$$\vec{e}_i = |a_i\rangle.$$

Символ $| \rangle$ с буквами ϕ , a или i , обозначающими вектор состояния ϕ , собственные значения a или индекс собственного значения i , называется «кет». Символ $\langle |$ описывает «бра»

состояния и соответствует состояниям пространства, сопряженного пространству состояний кет-векторов.

В 3-мерном пространстве каждый вектор \vec{v} можно разложить по базисной системе векторов:

$$\vec{v} = \sum_i v_i \vec{e}_i, \quad \text{где } v_i = \vec{e}_i \cdot \vec{v}.$$

То же самое можно доказать для любого конечномерного пространства Φ . Это означает, что для любого эрмитова оператора \hat{A} в конечномерном пространстве Φ существует система собственных векторов $|a_i\rangle$:

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle, \quad i = 1, 2, 3, \dots, N,$$

таких, что любой вектор состояния $\phi \in \Phi$ можно написать в виде:

$$|\phi\rangle = \sum_i \langle a_i|\phi\rangle |a_i\rangle. \quad (1)$$

Из векторов $|\phi\rangle$ и $\langle\psi|$, где $|\phi\rangle$ и $|\psi\rangle$ – произвольные состояния, можно построить оператор

$$\hat{K} = |\phi\rangle\langle\psi|,$$

действие которого на любое состояние $|a\rangle$ определяется соотношением:

$$\hat{K}|a\rangle = \langle\psi|a\rangle |\phi\rangle,$$

тогда соотношение (1) можно переписать в следующем виде

$$|\phi\rangle = \left(\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| \right) |\phi\rangle.$$

Отсюда следует, что оператор

$$I = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|$$

является единичным оператором. Такое свойство состояний $|a_i\rangle$ называется условием полноты базиса $\{|a_i\rangle\}$, $i=1, 2, \dots$. Собственные вектора любой динамической величины (энергии, импульса, координаты, момента количества движения и т. д.) образуют полный набор состояний.

Пусть определено действие оператора \hat{F} на любой вектор пространства Φ :

$$\hat{F}|\phi\rangle = |\psi\rangle, \quad |\psi\rangle \in \Phi.$$

В терминах проекции на базисные вектора $|a_i\rangle$ это соотношение имеет вид

$$\langle a_i|\hat{F}|\phi\rangle = \langle a_i|\psi\rangle.$$

Пользуясь условием полноты базиса $|a_i\rangle$, его можно переписать следующим образом:

$$\sum_j \langle a_i|\hat{F}|a_j\rangle \langle a_j|\phi\rangle = \langle a_i|\psi\rangle. \quad (2)$$

Матричный элемент $\langle a_i|\hat{F}|a_j\rangle$ называется оператором \hat{F} в представлении динамической величины A , где $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$.

Пусть $|a_i\rangle$ и $|b_j\rangle$ – два набора базисных состояний наблюдаемых A и B :

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle, \quad \hat{B}|b_j\rangle = b_j|b_j\rangle, \quad i, j = 1, 2, 3, \dots$$

Тогда матричный элемент $\langle b_j|a_i\rangle$ определяет матрицу перехода от представления A к представлению B ; матричный элемент $\langle b_j|\psi\rangle$ называется волновой функцией ψ в B -представлении, а матричный элемент $\langle a_i|\psi\rangle$ называется волновой функцией ψ в A -представлении.

Задачи

1. Вычислить матричный элемент $\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle$, где $|\vec{p}\rangle$, $|\vec{x}\rangle$ – состояния с определенным импульсом и определенной координатой соответственно.

Указание. Воспользоваться явным видом оператора импульса $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, получить дифференциальное уравнение на матричный элемент $\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle$ и решить его.

Ответ: $\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar})$.

Соотношение неопределенности

1. Оценить из соотношения неопределенности энергию основного состояния частицы в поле одномерного гармонического осциллятора. *Указание.* Воспользоваться тем, что при финитном движении $\langle p \rangle = 0$, поэтому $\Delta p = p - \langle p \rangle = p$, а $\Delta x = R$, где R – радиус области локализации. Тогда соотношение неопределенности будет выглядеть так: $p \cdot R \geq \hbar$. Энергия одномерного гармонического осциллятора $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$. *Ответ:* $E_0 = \hbar\omega$.
2. Оценить из соотношения неопределенности энергию основного состояния электрона в атоме водорода. Энергия электрона в атоме водорода в состоянии с орбитальным моментом $l = 0$ равна $E = \frac{p_r^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$. *Ответ:* $E_0 = \frac{-me^4}{2\hbar^2}$.
3. Из квантовой теории поля следует, что любая стабильная частица испускает и поглощает виртуальные частицы с массой m , проходя через возбужденное состояние с массой M^* ,

$$M \leftrightarrow M^* + m.$$

Состояние M^* не является состоянием с определенной энергией с неопределенностью $\Delta E = mc^2$. Время жизни τ такого состояния связано с ΔE соотношением неопределенности Гейзенберга $\tau\Delta E \geq \hbar$. Найти радиус сильного взаимодействия, которое обусловлено обменом виртуальным π -мезоном ($m_\pi c^2 = 137 \text{ MeV}$). *Ответ:* $R = \frac{\hbar}{m_\pi c}$.

Операторный формализм квантовой механики

Оператор \hat{A} называется эрмитовым (самосопряженным), если выполняется равенство:

$$\langle f|\hat{A}|i\rangle = \left(\langle i|\hat{A}|f\rangle\right)^*,$$

где

$$\langle f|\hat{A}|i\rangle \equiv \int \psi_f^*(x)\hat{A}\psi_i(x) d\vec{x}.$$

Собственной функцией оператора координаты является решение уравнения

$$\hat{x} \Psi_{x_0}(x) = x_0 \Psi_{x_0}(x),$$

где $\hat{x} = x$ – оператор умножения в координатном представлении. Решением этого уравнения является

$$\Psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0).$$

Доказательство этого основано на свойствах δ -функции Дирака:

- $\int \delta(x - x_0)f(x) dx = f(x_0)$
- $\int \delta(x - x_0) dx = 1$
- $\psi(x)\delta(x - x_0) = \psi(x_0)\delta(x - x_0)$
- $\delta(\lambda x) = \frac{1}{|\lambda|}\delta(x)$, где λ – положительное число
- $\delta(f(x)) = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \cdot \delta(x - x_i)$, где $f(x_i) = 0$

Задачи

1. Для произвольного линейного оператора \hat{A} доказать эрмитовость операторов:

$$\hat{A} + \hat{A}^+; \quad i(\hat{A} - \hat{A}^+); \quad \hat{A}\hat{A}^+; \quad \hat{A}^+\hat{A}.$$

2. Показать, что произвольный линейный оператор \hat{L} можно представить в виде $\hat{L} = \hat{A} + i\hat{B}$, где \hat{A} и \hat{B} – эрмитовы операторы.

3. Доказать, что для любых операторов \hat{A} , \hat{B} и \hat{C} справедливо тождество

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}].$$

4. Выразить $[\hat{B}\hat{A}, \hat{C}]$ через коммутаторы $[\hat{A}, \hat{B}]$, $[\hat{B}, \hat{C}]$ и $[\hat{A}, \hat{C}]$.

5. Доказать тождество Якоби $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$.

6. Доказать равенство

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

7. Доказать, что если $[\hat{A}, \hat{B}] = ic$, где c есть C -число, то

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = \exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) \exp\left(\frac{-ic}{2}\right).$$

8. Найти разложение $(\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1}$ по степеням параметра λ .

Указание. В задачах 6, 7 и 8 использовать разложение в ряд Тейлора по степеням числового параметра.

9. Является ли оператор комплексного сопряжения а) линейным, б) эрмитовым?

10. Найти операторы, эрмитово сопряженные к операторам

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}, \quad \hat{B} = i\frac{d}{dx}, \quad \hat{C} = m\omega x + \hbar\frac{d}{dx}.$$

11. Для оператора \hat{C} , определенного в предыдущей задаче, найти собственные функции и собственные значения. Проверить, что собственные значения этого оператора могут быть комплексными, а собственные функции, отвечающие различным собственным значениям, не обязательно ортогональны.
12. Показать, что собственные функции эрмитового оператора ортогональны между собой, если они соответствуют различным собственным значениям.
13. Показать, что собственные значения эрмитового оператора всегда действительны.
14. Пусть \hat{L} и \hat{M} – два любых динамических оператора. Показать, что необходимым и достаточным условием существования общей собственной функции является равенство нулю их коммутатора.
15. Найти соотношение неопределенностей между координатой и импульсом при условии $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.
16. Доказать, что операторы $\hat{x} = x$ и $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ являются эрмитовыми.
17. Определим оператор четности \hat{P} соотношением

$$\hat{P}\Psi(x) = \Psi(-x).$$

Показать, что:

$$\hat{P}^+ = \hat{P}, \quad \hat{P}^2 = 1, \quad \hat{P}\hat{x}\hat{P} = -\hat{x}, \quad \hat{P}\hat{p}\hat{P} = -\hat{p},$$

$$\hat{P}\hat{V}(x)\hat{P} = \hat{V}(-x), \quad \hat{P}\hat{H}_0\hat{P} = \hat{H}_0,$$

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0, \quad \text{при условии } \hat{V}(x) = \hat{V}(-x),$$

$$\text{где } \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(x).$$

18. Пусть определен оператор $\hat{T}_a = \exp(a \frac{d}{dx})$, где a есть C -число. Доказать, что $\hat{T}_a \Psi(x) = \Psi(x + a)$.

Указание. Использовать разложение в ряд Тейлора по степеням числового параметра a .

19. Найти условия одновременной измеримости динамических величин.

20. Пусть $\Psi(\vec{x})$ – волновая функция стационарного состояния (состояние с определенной энергией), удовлетворяющая уравнению Шредингера

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\vec{x}) \Psi = E \Psi,$$

а $f(\vec{k})$ – ее Фурье-образ по волновому вектору \vec{k} :

$$\Psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} f(\vec{k}) d\vec{k} \quad \text{– «координатное» представление,}$$

$$f(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \Psi(\vec{x}) d\vec{x} \quad \text{– «импульсное» представление.}$$

Показать, что волновая функция $f(\vec{k})$ удовлетворяет уравнению

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) f(\vec{k}) = - \int W(\vec{k} - \vec{k}') f(\vec{k}') d\vec{k}',$$

$$\text{где } W(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} V(\vec{x}) d\vec{x}.$$

Полученное интегральное уравнение называется уравнением Шредингера в «импульсном» представлении.

Указание. Использовать представление 3-мерной δ -функции

$$\delta(\vec{k} - \vec{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}} d\vec{x}.$$

21. Найти собственные функции оператора импульса и оператора координаты в «координатном» и «импульсном» представлениях.
22. Найти вид оператора $\hat{A} = \frac{1}{r}$ в «импульсном» представлении, где $r = |\vec{x}|$.

Гамильтониан свободной частицы

1. При каких условиях плоская волна Де-Бройля $\Psi(\vec{x}, t) = A \cdot \exp\left(i\frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar} - i\frac{Et}{\hbar}\right)$ будет удовлетворять уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{x}) \right) \Psi(\vec{x}, t) ?$$

2. Показать, что волна Де-Бройля не принадлежит гильбертову пространству.
3. Найти общее решение уравнения Шредингера для свободной частицы и показать, что оно бесконечно вырождено.
Указание. Искать решение в виде интеграла Фурье.

Уравнение непрерывности

1. Исходя из временного уравнения Шредингера получить уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0,$$

где

$$\rho = |\Psi(\vec{x}, t)|^2, \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi(\vec{x}, t) \nabla \bar{\Psi}(\vec{x}, t) - \bar{\Psi}(\vec{x}, t) \nabla \Psi(\vec{x}, t)).$$

2. Свободная частица находится в состоянии $\Psi(\vec{x}) = A \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$. Вычислить нормировочную константу A , связав ее с плотностью тока.

3. Показать, что плотность тока \vec{j} для электрона в основном состоянии атома водорода равна нулю. Следствием этого факта является стабильность атома водорода в основном состоянии. Объяснить почему.

4. Вычислить плотность тока \vec{j} электрона атома водорода в состояниях $n = 2, l = 0, 1$.

Указание. Записать плотность тока в сферической системе координат.

Одномерное уравнение Шредингера для частицы в произвольном внешнем поле

Пусть потенциал $V(x)$ обладает симметрией относительно преобразований $x \rightarrow -x$. В этом случае можно ввести квантовое число «четность» и провести классификацию состояний по этому числу. Введем оператор четности \hat{P} :

$$\hat{P}\Phi(x) = \Phi(-x).$$

Тогда нетрудно показать, что

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

где $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ – гамильтониан системы.

При этом условии существует совместная система уравнений

$$\begin{cases} \hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \\ \hat{P}\Psi(x) = \lambda\Psi(x) \end{cases}$$

Чтобы найти собственные значения λ , заметим что

$$\hat{P}^2\Psi(x) = \lambda^2\Psi(x) = \hat{P}\Psi(-x) = \Psi(x),$$

отсюда следует, что $\lambda^2 = 1$, т. е. $\lambda = \pm 1$.

Таким образом состояние $\Psi(x)$ характеризуется двумя квантовыми числами – энергией E и четностью λ :

$$\Psi_E^{(+)}(x), \quad \Psi_E^{(-)}(x).$$

Задачи

1. Найти нормированные собственные функции и собственные значения гамильтониана для частицы, находящейся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (рис. 4):

$$V = \begin{cases} \infty, & \text{для } |x| \geq a, \\ 0, & \text{для } |x| < a. \end{cases}$$

с граничными условиями $\Psi(-a) = \Psi(a) = 0$. Показать, что решения обладают определенной четностью при преобразованиях $x \rightarrow -x$, если $V(x) = V(-x)$.

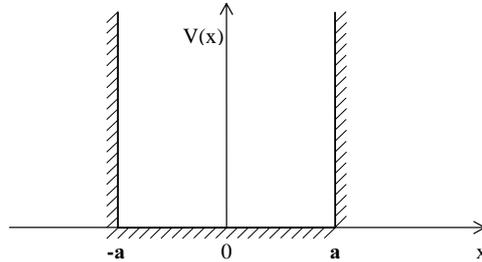


Рис. 4. Потенциал ямы с бесконечными стенками

Ответ: $\Psi_n^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(\frac{\pi(n + 1/2)}{a}x\right)$,

$$E_n^{(+)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$
$$\Psi_n^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right), \quad E_n^{(-)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

2. Показать, что для состояний $\Psi_n^{(\pm)}(x)$ из задачи 1 справед-

ливы следующие соотношения ортогональности

$$\int_{-a}^a \bar{\Psi}_m^{(\pm)}(x) \Psi_n^{(\pm)}(x) dx = \delta_{nm}, \quad \int_{-a}^a \bar{\Psi}_m^{(+)}(x) \Psi_n^{(-)}(x) dx = 0.$$

3. Найти энергетический спектр четных и нечетных связанных состояний частицы в поле симметричной ямы (рис. 5):

$$V = \begin{cases} 0, & \text{для } |x| \geq a, \\ -V_0, & \text{для } |x| < a. \end{cases}$$

Указание. Потребовать непрерывности волновой функции и ее первой производной в точке $x = a$. Получить трансцендентное уравнение на энергетический спектр и провести качественный анализ решений этого уравнения. Показать, что для нечетных решений энергетический уровень будет существовать только в случае, когда $\frac{2mV_0}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4a^2}$ (яма должна быть достаточно глубокой).

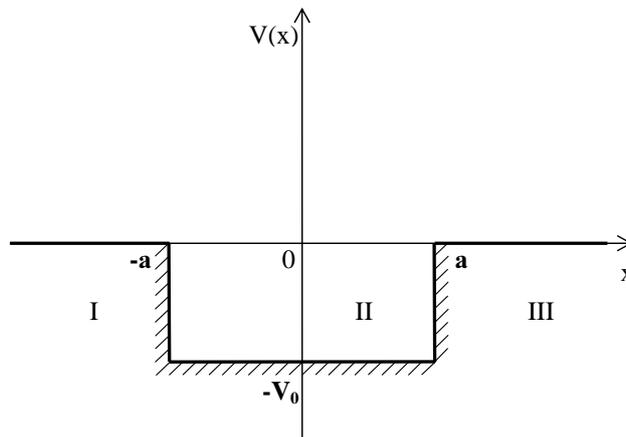


Рис. 5. Потенциал ямы с конечными стенками

4. Найти энергетический спектр и нормированные волновые функции связанных состояний частицы в поле $V(x) = -g \cdot \delta(x)$, где g – положительная постоянная.

Указание. Воспользоваться свойством

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0, \\ 0, & x \neq 0, \end{cases}$$

а также требованием непрерывности волновой функции в точке $x = 0$ и значением скачка производной волновой функции в точке $x = 0$, следующим из уравнения Шредингера.

Ответ: Существует только одно связанное состояние $\Psi(x) = \sqrt{\frac{gm}{\hbar^2}} \cdot \exp\left(\frac{-gm}{\hbar^2} \cdot |x|\right)$ с энергией $E = \frac{-mg^2}{2\hbar^2}$.

5. Найти средние значения кинетической и потенциальной энергий в состоянии задачи 4. Вычислить произведение неопределенностей координаты и импульса. Каков вид волновой функции в импульсном представлении?
6. Найти энергетический спектр и нормированные волновые функции связанных состояний частицы в поле $V(x) = -g(\delta(x+a) + \delta(x-a))$, где g – положительная постоянная.

Указание. Учтеть, что потенциал $V(x)$ инвариантен относительно преобразования $x \rightarrow -x$, поэтому состояния обладают определенной четностью. Потребовать непрерывность волновой функции в точке $x = a$ и обеспечить скачок производной в точке $x = a$, следующий из уравнения Шредингера. Получить трансцендентное уравнение на энергетический спектр и провести качественный анализ решений этого уравнения.

7. По результатам предыдущей задачи построить график вероятности обнаружить частицу в точке x на интервале $-\infty < x < \infty$ для решений с положительной и отрицательной четностью.

8. Найти коэффициенты отражения и прохождения через потенциальный барьер $V(x) = -g \cdot \delta(x)$ потока свободных частиц с энергией E и плотностью тока $j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k}{m}$. Исследовать зависимость от знака константы связи g . Показать, что в комплексной плоскости энергии E коэффициенты прохождения и отражения имеют полюс в точке $E = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}$ (значение энергии связанного состояния в этом потенциале).

Указание. Коэффициент отражения $n_{\text{отр}} = \frac{|j_{\text{отр}}|}{j_{\text{пад}}}$, коэффициент прохождения $n_{\text{пр}} = \frac{|j_{\text{пр}}|}{j_{\text{пад}}}$. Потребовать непрерывность волновой функции в точке $x = 0$ и использовать результаты задачи (4) для выражения скачка производной волновой функции в точке $x = 0$.

Ответ:

$$n_{\text{пр}} = \frac{1}{1 + \frac{m^2 g^2}{k^2 \hbar^4}}, \quad n_{\text{отр}} = \frac{m^2 g^2}{k^2 \hbar^4} n_{\text{пр}}.$$

9. Найти коэффициенты отражения и прохождения потока свободных частиц с энергией E и плотностью тока $j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k}{m}$ в поле потенциала

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x > 0. \end{cases}$$

Рассмотреть случаи $E > V_0$ и $E < V_0$.

Указание. Обеспечить непрерывность волновой функции и ее производной в точке $x = 0$.

Ответ: при $E > V_0$: коэффициент отражения равен

$$n_{\text{отр}} = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right)^2, \quad \text{коэффициент прохождения}$$

$$n_{\text{пр}} = \frac{4\sqrt{E(E - V_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^2}; \quad \text{при } E < V_0: \quad n_{\text{отр}} = 1, \quad n_{\text{пр}} = 0.$$

10. Найти коэффициенты отражения и прохождения потока свободных частиц с энергией E и плотностью тока $j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k}{m}$ в поле потенциала

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > a \\ V_0, & 0 < x < a. \end{cases}$$

Рассмотреть случай $E > V_0$.

Указание. Обеспечить непрерывность волновой функции и ее производной в точках $x = 0$ и $x = a$.

Эволюция операторов и состояний во времени

Для стационарных состояний волновая функция имеет вид

$$\Psi(\vec{x}, t) = \Psi_n(\vec{x}) \exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right),$$

$$\int \Psi_m^*(\vec{x}) \Psi_n(\vec{x}) d\vec{x} = \delta_{nm},$$

$$\sum_n \Psi_n(\vec{x}) \Psi_n^*(\vec{y}) = \delta(\vec{x} - \vec{y}).$$

Плотность вероятности для стационарных состояний $|\Psi(\vec{x}, t)|^2$ не зависит от t .

Общее решение уравнения Шредингера

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n \exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right) \Psi_n(\vec{x}),$$

где

$$c_n = \int \Psi_n^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, 0) d\vec{x}.$$

Эти два соотношения можно переписать в виде

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0) \Psi(\vec{y}, t_0) d\vec{y},$$

$$G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0) = \sum_n \Psi_n(\vec{x}) \Psi_n^*(\vec{y}) \exp\left(\frac{-iE_n(t - t_0)}{\hbar}\right).$$

Функция $G(\vec{x}, t; \vec{y}, t_0)$ носит название функции Грина и удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial G}{\partial t} = \hat{H}(\vec{x}) G$$

с начальным условием при $t = t_0$

$$G(\vec{x}, t_0; \vec{y}, t_0) = \sum_n \Psi_n(\vec{x}) \Psi_n^*(\vec{y}) = \delta(\vec{x} - \vec{y}).$$

Общий вид волновой функции свободной частицы в одномерном случае есть:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} a(p) e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)} dp, \quad (3)$$

где

$$a(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dx. \quad (4)$$

Задачи

1. Пусть $\Psi(x, 0) = \varphi(x) e^{i\frac{p_0 x}{\hbar}}$, где $\varphi(x)$ – действительная функция. Показать, что такая волновая функция описывает волновой пакет, размеры которого определяются величиной $|\varphi(x)|^2$, а сам пакет как целое движется вдоль оси x с импульсом p_0 . Получить это из анализа плотности тока в состоянии $\Psi(x, 0)$.
2. Вычислить функцию Грина для свободной частицы в одномерном случае.

Ответ:

$$G(x, t; y, t = 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} e^{\frac{im}{2\hbar t}(x-y)^2}.$$

Указание: Воспользоваться табличным интегралом

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-p^2 x^2 \pm i q x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{p} e^{-\frac{q^2}{4p^2}}.$$

3. Вычислить $a(p)$ из (4) для волнового пакета $\varphi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$, используя задачу (1).

Ответ: $a(p) = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p - p_0)^2\right)$.

4. Вычислить $\Psi(x, t)$ для волнового пакета $\varphi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$, используя задачу (1).

5. Используя результат предыдущей задачи, найти изменение ширины пакета со временем.

Ответ: $\Delta(t) = \delta \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{m\delta^2}\right)^2\right]^{1/2} \approx \frac{\hbar t}{m\delta}$ при $t \rightarrow \infty$.

6. Найти $|\psi(x, t)|^2$, если $A(k) = A_0 \cdot e^{-(k-k_0)/(2\Delta k)^2}$, для частиц с законом дисперсии $\omega = ck$ (электромагнитные волны в пустоте) и $\omega = \hbar k^2/2m$ (нерелятивистская свободная частица массы m).

Гармонический осциллятор

Гамильтониан одномерного гармонического осциллятора имеет вид

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

Такой параболический потенциал является хорошим приближением для всех физических задач, обладающих точкой равновесия (минимум потенциальной энергии), поэтому задача гармонического осциллятора имеет широкое применение. Для

решения задачи квантования осциллятора воспользуемся формализмом повышающих и понижающих операторов:

$$\hat{a}^{\pm} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} \pm i\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}x.$$

Явные вычисления приводят к соотношениям

$$[\hat{H}, \hat{a}^{\pm}] = \pm\hbar\omega \hat{a}^{\pm}, \quad [\hat{a}^-, \hat{a}^+] = \hbar\omega.$$

Учитывая эти соотношения, гамильтониан \hat{H} можно записать в следующей форме

$$\hat{H} = \hat{a}^+\hat{a}^- + \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Из коммутационных соотношений для гамильтониана следует, что действие оператора \hat{a}^+ на состояние с определенной энергией повышает его энергию на $\hbar\omega$, а \hat{a}^- соответственно понижает энергию на $\hbar\omega$. В общей теории обыкновенных дифференциальных уравнений показывается, что любое состояние линейного гармонического осциллятора может быть получено из основного состояния последовательным действием повышающего оператора \hat{a}^+ . Уравнение $\hat{a}^-\Psi_0(x) = 0$ является дифференциальным уравнением первого порядка, и его решение определяет волновую функцию основного состояния. Волновая функция n -го возбуждения линейного гармонического осциллятора с точностью до нормировочной константы равна $\Psi_n(x) = (\hat{a}^+)^n\Psi_0(x)$.

Задачи

1. Используя формализм повышающих и понижающих операторов, вычислить энергетический спектр и волновые функции частицы в поле линейного гармонического осциллятора. *Ответ для энергетического спектра: $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \dots$.*

2. Вычислить матричные элементы $\langle m|\hat{x}|n\rangle$ и $\langle m|\hat{p}|n\rangle$, где $|n\rangle$ - состояния гармонического осциллятора с энергией E_n .

Ответ: $x_{n,n+1} = x_{n+1,n} = \sqrt{\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}}$, остальные матричные элементы от \hat{x} равны 0;

$$p_{nk} = im\omega_{nk}x_{nk}, \quad \omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}.$$

3. Найти в основном состоянии одномерного гармонического осциллятора средние значения $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ и $\langle p^2 \rangle$. Указание. Воспользоваться интегральными соотношениями

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{4\lambda^3}}.$$

Ответ: $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$, $\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$ и $\langle p^2 \rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}$.

4. Найти энергетический спектр и волновые функции частицы с зарядом e и массой m , находящейся в поле гармонического осциллятора и в постоянном электрическом поле напряженностью \mathcal{E} . Считать волновые функции и спектр линейного гармонического осциллятора заданными. Движение одномерное.

5. Найти волновые функции и энергетический спектр частицы в поле двумерного гармонического осциллятора

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2).$$

Найти кратность вырождения энергетических уровней. Считать известным решение аналогичной задачи для линейного гармонического осциллятора.

Указание. Воспользоваться методом разделения переменных.

Ответ: $\Psi_{nm}(x, y) = H_n(x)H_m(y)e^{-\lambda(x^2+y^2)}$, где $H_n(x)$ -

полиномы Чебышева–Эрмита. $E_N = \hbar\omega(N + 1)$, $N = n + m$, $N = 0, 1, 2, \dots$. Кратность вырождения уровня E_N равна $r = N + 1$.

6. Ядра в кристалле совершают колебания около положения равновесия. В этом случае потенциал взаимодействия ядра с кристаллом в окрестности точки равновесия можно представить в виде

$$V(r) = \frac{m\omega^2}{2}r^2, \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2.$$

Найти волновые функции и энергетический спектр частицы в поле $V(r)$. Определить кратность вырождения энергетических уровней.

Указание. Воспользоваться методом разделения переменных.

Ответ: $\Psi_{nml}(x, y, z) = H_n(x)H_m(y)H_l(z)e^{-\lambda(x^2+y^2+z^2)}$, $E_N = \hbar\omega(N + \frac{3}{2})$, $N = n + m + l$, $N = 0, 1, 2, \dots$. Кратность вырождения уровня E_N равна $r = \frac{(N+1)(N+2)}{2}$.

7. Найти волновую функцию гармонического осциллятора основного состояния в импульсном представлении, если в координатном представлении эта функция равна

$$\Psi_0(x) = N \cdot \exp\left(\frac{-m\omega}{2\hbar}x^2\right), \quad N = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}.$$

Указание. Воспользоваться разложением волновой функции $\Psi(x)$ по состояниям с определенным импульсом:

$$\Psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{px}{\hbar}} C(p) dp,$$

где $C(p)$ - волновая функция в импульсном представлении.

Среднее значение динамических величин и формализм функции Вигнера

Пусть $\Psi(\vec{x}, t)$ – волновая функция, описывающая определенное состояние частицы. Согласно интерпретации Борна величина

$$dW = |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d\vec{x}$$

определяет вероятность обнаружить частицу в элементарном объеме $d\vec{x}$ в окрестности точки \vec{x} . Если волновая функция $\Psi(\vec{x}, t)$ нормирована на единицу

$$\int |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d\vec{x} = 1 ,$$

то величину \bar{f} :

$$\bar{f} = \int \bar{\Psi}(\vec{x}, t) f(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t) d\vec{x} \quad (5)$$

можно интерпретировать как *среднее значение динамической величины* $f(\vec{x})$ в состоянии $\Psi(\vec{x}, t)$.

Разложим состояние $\Psi(\vec{x}, t)$ по состояниям с определенным импульсом:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}} \varphi(\vec{p}, t) d\vec{p} . \quad (6)$$

Коэффициент разложения $\varphi(\vec{p}, t)$ называется волновой функцией состояния $\Psi(\vec{x}, t)$ в импульсном представлении. Из равенства Парсеваля следует, что

$$\int |\varphi(\vec{p}, t)|^2 d\vec{p} = \int |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d\vec{x} = 1 .$$

Таким образом, величину $|\varphi(\vec{p}, t)|^2 d\vec{p}$ можно интерпретировать как вероятность обнаружить у частицы импульс \vec{p} в

окрестности элементарного объема $d\vec{p}$ при условии, что она находится в состоянии $\Psi(\vec{x}, t)$. Среднее значение любой динамической величины $\gamma(\vec{p})$ в состоянии $\Psi(\vec{x}, t)$ равно

$$\bar{\gamma} = \int \bar{\varphi}(\vec{p}, t) \gamma(\vec{p}) \varphi(\vec{p}, t) d\vec{p}. \quad (7)$$

Подчеркнем еще раз, что $\Psi(\vec{x}, t)$ и $\varphi(\vec{p}, t)$ описывают одно и то же состояние частицы. Можно ли выразить среднее значение динамической величины $f(\vec{x})$ в состоянии $\Psi(\vec{x}, t)$ через волновую функцию $\varphi(\vec{p}, t)$? Или среднее значение динамической величины $\gamma(\vec{p})$ через волновую функцию $\Psi(\vec{x}, t)$? Подробное рассмотрение приводит к следующим результатам:

$$\begin{aligned} \bar{\gamma} &= \int \bar{\Psi}(\vec{x}, t) \gamma(\hat{p}) \Psi(\vec{x}, t) d\vec{x}, \\ \bar{f} &= \int \bar{\varphi}(\vec{p}, t) f(\hat{x}) \varphi(\vec{p}, t) d\vec{p}, \end{aligned} \quad (8)$$

где \hat{p}_i – оператор i -й компоненты импульса. Он равен $\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$ и называется оператором импульса в координатном представлении, а \hat{x}_i – оператор i -й компоненты координаты. Он равен $\hat{x}_i = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i}$ и называется оператором координаты в импульсном представлении. Таким образом, возникают правила соответствия: *каждой классической динамической величине в квантовой теории сопоставляется линейный самосопряженный оператор, определенный в пространстве состояний*. Последовательная теория нахождения таких соответствий была сформулирована Вигнером и Вейлем в 1932 г. и известна как **формализм функции Вигнера**. Основные моменты этого формализма могут быть изложены в виде следующих утверждений и соотношений.

Пусть $\Psi(\vec{x}, t)$ – нормированная волновая функция системы. Определим функцию Вигнера $W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ как Фурье–образ

функции перекрытия:

$$\begin{aligned}
W(\vec{r}, \vec{p}, t) &= \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-i\vec{p}\vec{R}/\hbar} \bar{\Psi}(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}, t) \Psi(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}, t) d\vec{R} = \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-i\vec{q}\vec{r}/\hbar} \bar{\varphi}(\vec{p} + \frac{\vec{q}}{2}, t) \varphi(\vec{p} - \frac{\vec{q}}{2}, t) d\vec{q},
\end{aligned} \tag{9}$$

где волновые функции $\Psi(\vec{r}, t)$ и $\varphi(\vec{p}, t)$ связаны между собой соотношением (6). Введенная таким образом функция $W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ обладает следующими свойствами:

1. $\bar{W}(\vec{r}, \vec{p}, t) = W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ – действительность
2. $\int W(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{r} = |\varphi(\vec{p}, t)|^2$
3. $\int W(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{p} = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$
4. $\int W(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{p} d\vec{r} = 1$.

Эти соотношения позволяют интерпретировать $W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ как квазивероятностное распределение в 6-мерном фазовом пространстве (\vec{r}, \vec{p}) . В отличие от вероятностного распределения функция $W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ не является знакоопределенной величиной. Однако она позволяет получать среднее значение любой функции динамических величин \vec{r} и \vec{p} , не прибегая к процедуре сопоставления классическим динамическим величинам соответствующих операторов, так как среднее значение величины $g(\vec{r}, \vec{p})$ равно:

$$\langle g \rangle = \int g(\vec{r}, \vec{p}) W(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{r} d\vec{p}. \tag{10}$$

В то же время существование двух различных представлений для $W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ в (9) позволяет восстановить соответствующие квантово-механические операторы.

Значимость функции Вигнера определяется тем, что она имеет много обобщений в различных физических задачах: квантовое описание системы N -частиц, описание пространственных характеристик в процессах рассеяния, в задачах физической кинетики и т. д.

Задачи

1. Пусть $\langle \hat{A} \rangle = \int \bar{\Psi}(\vec{x}, t) \hat{A} \Psi(\vec{x}, t) d\vec{x}$. Показать, что

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle.$$

Учтите, что волновая функция $\Psi(\vec{x}, t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера

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

2. Используя определение оператора $\hat{A}(t)$ (Гейзенберговское представление оператора \hat{A}):

$$\hat{A}(t) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t},$$

показать, что

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

если оператор \hat{A} не зависит явно от времени.

3. Используя результат задачи (2), показать, что среднее значение импульса в стационарном состоянии дискретного спектра $\langle \hat{p} \rangle = 0$. *Указание.* Использовать соотношение $\hat{p} = m \frac{d}{dt} \hat{r}$.

4. Пусть оператор \hat{A} – эрмитов оператор, $\hat{A} = \hat{A}^+$. Покажите, что среднее значение квадрата этого оператора неотрицательно $\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle \geq 0$.

5. Пусть $\Psi_n(x)$ – собственные состояния оператора энергии частицы в бесконечной яме (см. задачу 1 раздела). Найти отдельно для четных и нечетных решений следующие величины:

$$\begin{aligned} \bar{x}, \quad \overline{x^2}, \quad \Delta_x^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2, \\ \bar{p}, \quad \overline{p^2}, \quad \Delta_p^2 = \overline{p^2} - \bar{p}^2 \end{aligned}$$

и получить для основного состояния значение $\Delta_p \cdot \Delta_x = ?$.

6. Из соотношения

$$\delta(x - y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-y)} dk ,$$

где $\delta(x - y)$ – функция Дирака, доказать равенство Парсеваля.

7. Показать, что среднее значение компоненты импульса p_i , $i = 1, 2, 3$ в состоянии $\Psi(\vec{x}, t)$ равно

$$\bar{p}_i = \int \bar{\Psi}(\vec{x}, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \Psi(\vec{x}, t) d\vec{x} .$$

Указание. Воспользоваться представлением (6).

8. Показать, что функция Вигнера $W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ является действительной функцией. *Указание.* Воспользоваться определением функции Вигнера (9).

9. Выразить функцию Вигнера $W(\vec{r}, \vec{p}, t)$ через волновую функцию в импульсном представлении $\varphi(\vec{p}, t)$. *Указание.* Использовать соотношение (6) и определение функции Вигнера через волновую функцию $\Psi(\vec{r}, t)$.

10. Прямым интегрированием показать, что $\int W(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{r} = |\varphi(\vec{p}, t)|^2$. *Указание.* Воспользоваться пред-

ставлением δ -функции Дирака в виде:

$$\delta(\vec{x} - \vec{y}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{q}(\vec{x}-\vec{y})} d\vec{q}.$$

11. Прямым интегрированием показать, что $\int W(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{p} = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$.
12. Показать, что $\int W(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{p} d\vec{r} = 1$, при условии, что волновая функция $\Psi(\vec{r}, t)$ нормирована на единицу.
13. * Используя соотношение (10), показать, что оператор импульса \hat{p}_i в координатном представлении равен $\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$.
14. * Используя соотношение (10), показать, что оператор координаты \hat{x}_i в импульсном представлении равен $\hat{x}_i = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i}$.

Движение частицы в периодическом поле

1. Определим оператор трансляции \hat{T}_a соотношением $\hat{T}_a \Psi(x) = \Psi(x + a)$.

Показать, что при условии трансляционной инвариантности потенциала $U(x + a) = U(x)$ гамильтониан системы \hat{H} коммутирует с оператором трансляции, т. е.

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0.$$

2. При условиях задачи (1) показать, что система уравнений

$$\begin{cases} \hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \\ \hat{T}_a\Psi(x) = \mu\Psi(x) \end{cases}$$

имеет решение

$$\Psi(x) = e^{iqx} \varphi(x),$$

где $\varphi(x)$ является периодической функцией с периодом a , q – произвольный вещественный параметр (теорема Блоха). Найти собственные значения μ .

Указание. Непосредственной подстановкой убедиться, что в такой форме $\Psi(x)$ является собственной функцией оператора трансляции и гамильтониана.

3. Найти энергетический спектр и волновые функции частицы в поле

$$U(x) = g \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - an), \quad g - \text{константа связи.}$$

Указание. Исключить на оси x точки $x = an$, $n = 0, \pm 1, \dots$. Тогда во всей оставшейся области уравнение на $\Psi(x)$ – это свободное уравнение Шредингера. Рассмотреть области: $a(n-1) < x < an$ и $an < x < a(n+1)$. В каждой из этих областей будет два независимых решения (рис. 6):

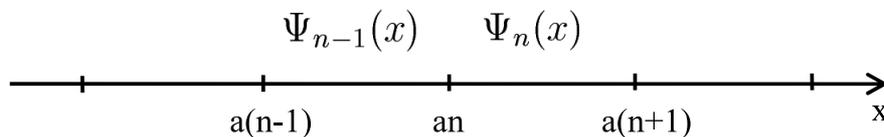


Рис. 6. Разбиение одномерного пространства в периодическом потенциале

$$\Psi_n(x) = A_n e^{ik(x-an)} + B_n e^{-ik(x-an)}, \quad an < x < a(n+1),$$

$$\Psi_{n-1}(x) = A_{n-1} e^{ik(x-a(n-1))} + B_{n-1} e^{-ik(x-a(n-1))},$$

$$a(n-1) < x < an.$$

Из условия трансляционной инвариантности следует, что $\Psi_n(x+a) = \mu \Psi_{n-1}(x)$. Это условие позволит выразить A_{n-1} через A_n . Потребовать непрерывности волновой функции $\Psi(x)$ и ее первой производной в точке $x = an$. Это

приведет к однородной относительно коэффициентов A_n и B_n системе уравнений. Требование равенства нулю детерминанта этой системе приводит к трансцендентному уравнению на энергетический спектр. Проанализировать решение этого уравнения графически и найти запрещенные и разрешенные зоны.

Квантование Борна–Инфельда для частицы в ящике

Задачи

1. Найти ортонормированные решения на интервале $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$ свободного уравнения Шредингера

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

удовлетворяющие периодическим граничным условиям $\Psi(x + L) = \Psi(x)$.

Ответ: $\Psi_n(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(ik_n x - i\frac{E_n}{\hbar}t\right)$, $k_n = \frac{2\pi}{L}n$,
 $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$.

2. Решить предыдущую задачу для трехмерного случая.

Ответ: $\Psi_{\vec{n}}(\vec{x}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp\left(i\vec{x}\vec{k}_n - i\frac{E_{\vec{n}}}{\hbar}t\right)$,
 $\vec{k}_n = \frac{2\pi}{L}\vec{n}$, $n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$,
 $n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$.

3. Найти коэффициенты разложения произвольной функции $\Psi(x)$ по ортонормированной системе $\Psi_n(x)$ (из задачи 1). *Указание.* Воспользоваться ортонормируемостью системы $\Psi_n(x)$.

4. Вычислить предел $\lim_{L \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{L} \sum_n f(k_n) \right\}$ (переход к бесконечному ящику), где $f(z)$ – произвольная функция, а k_n

определено в задаче (1).

Ответ:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{L} \sum_n f(k_n) \right\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) dk.$$

Орбитальный момент количества движения

Операторы компонент момента количества движения в координатном представлении имеют вид

$$\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} x_j \hat{p}_k, \quad \hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad i, j, k = 1, 2, 3.$$

При этом

$$[x_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} - \text{канонический коммутатор.}$$

Введем повышающий и понижающий операторы:

$$\hat{L}^{\pm} = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2.$$

В терминах этих операторов \hat{L}^2 имеет вид

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_3^2 + \hbar \hat{L}_3 - \hat{L}^- \hat{L}^+.$$

Используя коммутационные соотношения для \hat{L}_i нетрудно получить

$$[\hat{L}_3, \hat{L}^{\pm}] = \pm \hbar \hat{L}^{\pm}, \quad [\hat{L}^+, \hat{L}^-] = 2\hbar \hat{L}_3.$$

Отсюда следует, что если $|l_3\rangle$ – есть состояние с определенным значением проекции момента на ось z , т. е. $\hat{L}_3 |l_3\rangle = \hbar l_3 |l_3\rangle$, то:

$$\hat{L}_3 (\hat{L}^{\pm} |l_3\rangle) = \text{const} |l_3 \pm 1\rangle.$$

Таким образом, оператор \hat{L}^+ повышает, а \hat{L}^- понижает значение проекции момента на ось z на величину \hbar .

При фиксированном значении длины вектора орбитального

момента $|\vec{L}|$ его проекция на ось z всегда ограничена. В классической физике $L_{zmax} = |\vec{L}|$. В квантовой теории это соотношение не выполняется.

Пусть $\hbar l_{zmax} = \hbar l$ – максимальное значение проекции момента при фиксированной длине $|\vec{L}|$. Тогда из свойств \hat{L}^\pm следует, что

$$\hat{L}^+|l\rangle = 0, \quad \hat{L}^-|-l\rangle = 0, \quad \hat{L}^2|l\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l\rangle.$$

Из коммутационных соотношений следует, что система уравнений

$$\begin{cases} \hat{L}^2 \Psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1) \Psi_{lm}, & l = 0, 1, 2, \dots \\ \hat{L}_3 \Psi_{lm} = \hbar m \Psi_{lm} & m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \end{cases}$$

имеет нетривиальные решения. В сферической системе координат она представляет собой систему дифференциальных уравнений второго порядка по переменным θ и φ (азимутальный и полярный углы). Ее решениями являются сферические функции Лежандра

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

где $P_l^{|m|}(z)$ – присоединенный полином Лежандра.

Сферические функции Лежандра образуют ортонормированную систему на сфере:

$$\int Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \sin \theta \, d\theta d\varphi = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Частные значения:

$$P_l^0(z) \equiv P_l(z) \text{ – полином Лежандра,}$$

$$P_0(z) = 1, \quad P_1(z) = z, \quad P_2(z) = \frac{1}{2}(1 - z^2), \quad \text{и т. д.}$$

Задачи

1. Показать, что справедлива следующая система коммутационных соотношений

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k,$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0, \quad \hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2, \quad i = 1, 2, 3.$$

Указание. Воспользоваться явным видом операторов \hat{L}_i и каноническим коммутатором.

2. Исходя из представления оператора \hat{L}^2 через повышающие и понижающие операторы получить что собственные значения оператора \hat{L}^2 и третьей проекции момента равны $\hbar^2 l(l+1)$ и $\hbar m$ соответственно, т. е.

$$\begin{cases} \hat{L}^2 \Psi_{lm} = \hbar^2 l(l+1) \Psi_{lm}, & l = 0, 1, 2, \dots \\ \hat{L}_3 \Psi_{lm} = \hbar m \Psi_{lm} & m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \end{cases}$$

3. Используя только канонический коммутатор, вычислить следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{L}_i, \hat{x}^2], \quad [\hat{L}_i, \hat{p}^2], \quad [\hat{L}_i, (\hat{x}_j \hat{p}_j)], \quad [\hat{L}_i, (\hat{x}_j \hat{p}_j)^2],$$

$$[\hat{L}_i, (\hat{x}_j \hat{p}_j) \hat{x}_k], \quad [\hat{L}_i, (\hat{x}_j \hat{p}_j) \hat{p}_k], \quad [\hat{L}_i, (a\hat{x}_j + b\hat{p}_j)],$$

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j \hat{x}_l], \quad [\hat{L}_i, \hat{p}_j \hat{p}_l], \quad [\hat{L}_i, \hat{x}_j \hat{p}_l],$$

где $\hat{x}^2 = \hat{x}_i \hat{x}_i$, $\hat{p}^2 = \hat{p}_i \hat{p}_i$, a, b – постоянные величины.

Указание. Использовать правило перестановки двух операторов:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} + [\hat{A}, \hat{B}].$$

4. Показать, что в сферической системе координат оператор кинетической энергии равен:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2},$$

где \hat{T}_r – оператор радиальной кинетической энергии

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}.$$

Указание. Найти выражение оператора \hat{L}^2 в сферической системе координат.

Сферически-симметричное поле

Взаимодействие называется *сферически-симметричным*, если потенциал $V(r, \theta, \varphi)$ не зависит от углов θ и φ . Из всех типов взаимодействия оно является выделенным, поскольку в этом случае стационарное уравнение Шредингера допускает разделение переменных. Уравнение Шредингера при таком взаимодействии имеет вид:

$$\hat{T}_r \Psi(r, \theta, \varphi) + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} \Psi(r, \theta, \varphi) + V(r) \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi), \quad (11)$$

где \hat{T}_r – оператор радиальной кинетической энергии, равный

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr}.$$

Будем искать решение в факторизованном виде:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

После подстановки в уравнение (11) получим для радиальной волновой функции $R(r)$ уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} R(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R(r) + V(r) R(r) = E R(r). \quad (12)$$

Это уравнение называется *радиальным уравнением Шредингера*.

Таким образом, полная волновая функция $\Psi(r, \theta, \varphi) = \Psi_{Elm}(r, \theta, \varphi)$ при сферически-симметричном взаимодействии характеризуется тремя квантовыми числами – энергией E , орбитальным моментом l и проекцией момента на ось z m .

Подстановкой $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ уравнение (12) сводится к виду

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = 0 \quad (13)$$

с граничным условием $u(r=0) = 0$, которое обеспечивает конечность волновой функции $R(r)$ в точке $r = 0$.

Задачи

1. Частица движется в сферически-симметричном поле. Уравнение для радиальной части волновой функции $R(r)$ преобразовать к виду уравнения Шредингера для одномерного движения (13).

2. Оценить радиус дейтрона из экспериментально измеренной энергии связи дейтрона $\epsilon = 2,23$ MeV. Считать массы протона и нейтрона одинаковыми.

Указание. Найти асимптотическое выражение для волновой функции дейтрона в системе центра масс протон–нейтрон.

Ответ: $R = \frac{\hbar}{\sqrt{m_p \epsilon}} = 4,3$ F.

3. Найти радиальную волновую функцию частицы в сферически-симметричном поле в квазиклассическом приближении.

Указание. Искать решение в виде $u(r) = A(r) \exp \left\{ i \frac{S(r)}{\hbar} \right\}$, где $A(r)$ и $S(r)$ – действительные функции. Приравнивая к нулю отдельно действительную и мнимую части уравнения, получить систему уравнений на $A(r)$ и $S(r)$ и решить ее в пределе $\hbar \rightarrow 0$.

Ответ:

$$S(r) = \int \sqrt{2\mu(E - V(r)) - \frac{\hbar^2(l + 1/2)^2}{r^2}} dr ,$$

$$A(r) = \frac{const}{\sqrt[4]{2\mu(E - V(r)) - \frac{\hbar^2(l+1/2)^2}{r^2}}} .$$

4. Взаимодействие между протоном и нейтроном можно приближенно описать потенциалом $V(r) = -Ae^{-r/a}$. Найти волновую функцию основного состояния ($l = 0$). Определить связь между глубиной ямы A и величиной a , характеризующей радиус действия сил, если эмпирическое значение энергии связи дейтрона $E = -2,2$ МэВ.

Указание. В уравнении (13) перейти от переменной r к новой независимой переменной $\xi = e^{-r/(2a)}$. Воспользоваться дифференциальным уравнением для функции Бесселя $J_k(z)$:

$$J_k''(z) + \frac{1}{z}J_k'(z) + \left(1 - \frac{k^2}{z^2}\right)J_k(z) = 0$$

Ответ: $R(r) = \frac{const}{r}J_k(ce^{-r/(2a)})$, где c определяется из требования конечности радиальной волновой функции $R(r)$ в точке $r = 0$. Это приводит к соотношению $J_k(c) = 0$, из которого следует связь между A и a .

5. Определить энергетические уровни и волновые функции частицы, находящейся в сферическом-симметричном поле

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ \infty, & r > a. \end{cases}$$

Рассмотреть случай $l = 0$.

Указание. Переходя в уравнении для радиальной функции $R(r)$ к новой функции $\chi(r) = \sqrt{r}R(r)$, получить урав-

нение

$$\chi'' + \frac{1}{r}\chi' + \left\{ k^2 - \frac{l+1/2}{r^2} \right\} \chi = 0 ,$$

и найти его решение при граничном условии $\chi(r = a) = 0$. Воспользоваться уравнением для функции Бесселя и точным соотношением:

$$J_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin z .$$

6. Определить дискретный спектр энергии частицы с моментом $l = 0$, находящейся в сферически-симметричном потенциальном поле

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a, \\ 0, & r > a . \end{cases}$$

Указание. Это задача соответствует одномерному уравнению Шредингера с потенциалом

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & 0 < x < a, \\ 0, & x > a , \\ \infty, & x < 0 . \end{cases}$$

Необходимо потребовать непрерывности функции и ее первой производной в точке $x = a$ и выполнения условия $\Psi(x = 0) = 0$. Это приведет к трансцендентному уравнению для волнового вектора k (т. е. энергетического спектра E)

$$ka = n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}} , \quad n = 0, 1, 2, \dots ,$$

которое необходимо проанализировать графически.

Поведение радиальной волновой функции на больших и малых расстояниях

Стационарное уравнение Шредингера позволяет описать два типа процессов. Первый – нахождение и описание связанного состояния частицы в заданном поле, второй – рассеяние частицы в этом же поле. Таким образом, вид уравнения один и тот же, а процессы различные. Фиксация типа процесса заложена в выборе граничных условий на решения. В процессах упругого рассеяния на потенциале энергия E рассеиваемой частицы является положительной величиной, а в задаче о связанном состоянии она может быть как положительной, так и отрицательной величиной.

В радиальном уравнении Шредингера (12) перейдем от $R(r)$ к $u(r)$:

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}.$$

В терминах $u(r)$ радиальное уравнение Шредингера примет вид одномерного уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(r) + U_{\text{эфф}}(r)u(r) = Eu(r), \quad (14)$$

где эффективный потенциал $U_{\text{эфф}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$, а первое слагаемое носит название *центробежного барьера*.

1. Рассмотрим процесс рассеяния и исследуем поведение волновой функции на больших и малых расстояниях.

а) пусть $r \gg R$, где R – эффективный радиус действия потенциала. Будем предполагать, что $V(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. В этом случае можно написать

$$u''_{\infty}(r) + k^2 u_{\infty}(r) = 0.$$

Здесь $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ – квадрат волнового вектора частицы с импульсом $p = \hbar k$ и длиной волны Де-Бройля $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$.

Это уравнение имеет два линейных независимых решения, поэтому в общем случае решение имеет вид

$$R_\infty(r) = A \frac{e^{ikr}}{r} + B \frac{e^{-ikr}}{r},$$

т. е. является суперпозицией расходящейся и сходящейся сферических волн. Произвольные константы A и B фиксируются значением плотности тока рассеиваемых частиц;

б) рассмотрим поведение $R(r)$ в окрестности точки $r = 0$. Будем предполагать, что $\frac{1}{r^2} \gg \frac{1}{r}$ при $r \rightarrow 0$. Тогда уравнение Шредингера в окрестности точки $r = 0$ можно записать в виде

$$-u''(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}u(r) = 0.$$

Будем искать решение этого уравнения в виде

$$u(r) = r^\gamma(1 + ar + br^2 + \dots),$$

где γ – неизвестная пока константа. Подставляя это разложение в уравнение и выделяя слагаемое при минимальной степени r , получим условие:

$$-\gamma(\gamma - 1)r^{\gamma-2} + l(l + 1)r^{\gamma-2} = 0.$$

Отсюда следует

$$\gamma(\gamma - 1) = l(l + 1).$$

Это условие представляет собой квадратичное уравнение относительно γ , которое имеет два решения:

$$\gamma_1 = -l, \quad \gamma_2 = l + 1.$$

В соответствии с этим результатом волновую функцию $u(r)$ можно написать в виде

$$u(r) = Ar^{-l} + Br^{l+1}, \quad r \rightarrow 0, \quad (15)$$

A и B – произвольные константы.

Волновая функция, описывающая состояние рассеяния, не принадлежит гильбертову пространству (она нормируется на плотность тока рассеиваемых частиц), поэтому в этом случае на константы A и B нет никаких ограничений.

2. Теперь рассмотрим случай $E < 0$ (связанные состояния). В этом случае волновая функция должна быть квадратично интегрируема. В терминах функции $u(r)$ это означает, что

$$\int_0^{\infty} |u(r)|^2 dr < \infty.$$

а) рассмотрим поведение $u(r)$ на больших расстояниях. Как и в случае (1) предполагаем, что потенциал $V(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Тогда для $u_{\infty}(r)$ получается следующее уравнение

$$u_{\infty}''(r) - \Omega^2 u_{\infty}(r) = 0, \quad \Omega^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}.$$

Это уравнение имеет два независимых решения, поэтому

$$u_{\infty}(r) = Ae^{-\Omega r} + Be^{\Omega r},$$

где A и B – произвольные константы. Из требования квадратичной интегрируемости следует, что $B \equiv 0$. Таким образом, из выбора правильного поведения на больших расстояниях в решении $u(r)$ остается одна произвольная константа, которая может быть зафиксирована условием нормировки

$$\int_0^{\infty} |u(r)|^2 dr = 1.$$

Значит, требование правильного поведения волновой функции в области $r \gg R$ и выполнение условия нормировки

полностью устраняют произвол в решении уравнения Шредингера;

б) анализ решения уравнения Шредингера в окрестности точки $r = 0$ в случае, когда $E < 0$, в точности повторяет рассуждения случая $E > 0$. Однако при $E < 0$ волновая функция $R(r)$ должна быть конечна в точке $r = 0$, т. е.

$$u(0) = 0.$$

Поэтому из двух независимых решений уравнения Шредингера для $u(r)$ (соотношение (15)) нужно выбрать только одно решение

$$u(r) = \text{const} \cdot r^{l+1}.$$

Уравнение Шредингера (14) является уравнением второго порядка, поэтому содержит две произвольные константы. Эти константы можно зафиксировать требованием правильного асимптотического поведения решения при $r \rightarrow \infty$ и условием нормировки. Разложение полученного таким образом решения в окрестности точки $r = 0$ будет содержать два слагаемых, одно из которых будет сингулярным при $r = 0$. Условие исчезновения этого слагаемого является условием на энергетический спектр и приводит к тому, что решение будет существовать ни при всех значениях энергии E , а только при определенных значениях, равных E_1, E_2, E_3, \dots . Таким образом, квантование энергии есть следствие обеспечения правильных граничных условий на малых и больших расстояниях. Эта процедура известна как фиксация струны на концах, после чего она (струна) начинает проявлять свои собственные колебания.

Атом водорода

1. Найти волновую функцию и энергию основного состояния атома водорода.

Указание: искать решения для радиальной волновой функции в виде $R(r) = N \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$, где N и a – неизвестные константы.

Ответ: N – произвольная константа, определяемая из условия нормировки $4\pi \int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1$.

Тогда $N^2 = \frac{1}{\pi a^3}$, $a = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ см, энергия основного состояния $E_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \approx -13,55$ eV.

2. Электрон в кулоновском поле ядра заряда Z находится в основном состоянии. Показать, что средний электростатический потенциал в пространстве, создаваемый ядром и электроном, равен

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{e(Z-1)}{r} + e \left(\frac{Z}{a} + \frac{1}{r} \right) e^{-\frac{2Zr}{a}}.$$

Обратить внимание на эффект экранировки заряда ядра при $Z = 1$.

Указание: Использовать уравнение Пуассона $\Delta\varphi(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r})$, где $\rho(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2$.

Воспользоваться интегральными соотношениями:

$$\int \frac{e^{-r/a}}{r} e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{r} = \frac{4\pi}{1/a^2 + k^2}, \quad \int \frac{e^{-i\vec{k}\vec{r}}}{1/a^2 + k^2} d\vec{k} = 2\pi^2 \cdot \frac{e^{-r/a}}{r},$$
$$\int e^{-r/a} e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{r} = \frac{8\pi/a}{(1/a^2 + k^2)^2}.$$

3. Вычислить волновую функцию и энергетический спектр электрона в атоме водорода, помещенном в постоянное магнитное поле, направленное вдоль оси z .

4. Показать, что в основном состоянии атома водорода наиболее вероятное значение r равно $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ (радиус Бора).
5. Найти среднее значение величин $\frac{1}{r}$ и $\frac{1}{r^2}$ в основном состоянии атома водорода.
Ответ: $\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{a}$, $\langle \frac{1}{r^2} \rangle = \frac{2}{a^2}$.
6. Вычислить в основном состоянии атома водорода $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$, дисперсии $\Delta_r^2 = \overline{r^2} - \bar{r}^2$, $\Delta_p^2 = \overline{p^2} - \bar{p}^2$ и произведение $\Delta_r \cdot \Delta_p$.
7. Найти волновую функцию основного состояния атома водорода в импульсном представлении. Построить графически распределение по импульсам.
Указание. Воспользоваться определением (6).
8. Вычислить кратность вырождения энергетического уровня атома водорода E_n , где $n = n_r + l + 1$.
Ответ: кратность вырождения равна n^2 .

Квантовое описание двухатомной молекулы

Взаимодействие атомов A и B с массами m_A и m_B в молекуле определяется силами Ван-дер-Ваальса и имеют вид, представленный на рис. 7.

В системе центра масс движение двух частиц сводится к движению одной частицы с приведенной массой μ :

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$$

и движению системы как целого. Гамильтониан, описываю-

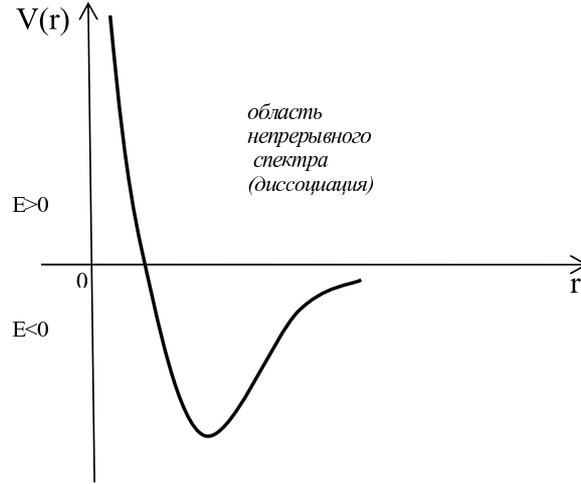


Рис. 7. Потенциал Ван-дер-Ваальса, r – расстояние между атомами

щий относительное движение, равен

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r), \quad (16)$$

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr}.$$

В силу сферической симметрии потенциала $V(r)$ стационарное решение уравнения Шредингера имеет вид

$$\Psi(\vec{r}) = R(r) P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (17)$$

при этом для $u(r)$, где $R = \frac{u(r)}{r}$, получаем уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} u + V(r)u = Eu,$$

здесь l – относительный орбитальный момент, m – проекция момента на ось z .

Введем эффективный потенциал:

$$W(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r),$$

тогда уравнение Шредингера запишется в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + W(r)u = Eu. \quad (18)$$

Первое слагаемое в эффективном потенциале $W(r)$ носит название центробежного барьера, оно имеет сингулярность в точке $r = 0$, которая существенно модифицирует потенциал в окрестности этой точки. При достаточно больших значениях l вклад центробежного барьера в эффективный потенциал может стать доминирующим. На рис. 8 приведена зависимость $W(r)$ от значения орбитального момента l . Здесь учтен характер зависимости $V(r)$ от r . Таким образом, при малых значениях орбитального момента l эффективный потенциал имеет минимум. Это приводит к тому, что молекула может иметь связанные состояния в области отрицательных значений энергии.

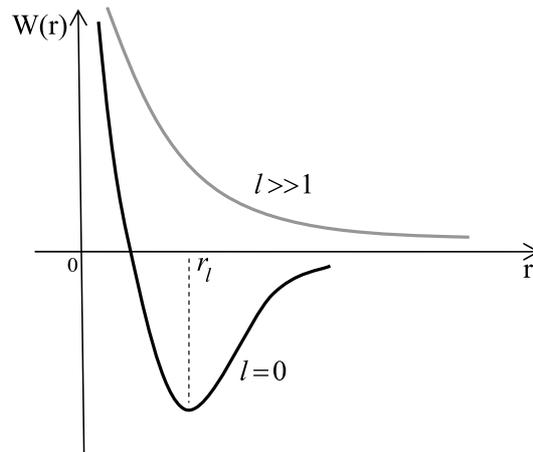


Рис. 8. Зависимость эффективного потенциала от орбитального момента l

Разложим $W(r)$ в окрестности минимума $r = r_l$. Имеем:

$$W(r) = W(r_l) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 W(r)}{dr^2} \right|_{r=r_l} \cdot (r - r_l)^2 + \dots ,$$

$$W(r_l) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r_l^2} + V(r_l) .$$

Введем обозначения

$$\left. \frac{d^2 W(r)}{dr^2} \right|_{r=r_l} = \mu \omega_l^2 , \quad \mu r_l^2 = I_l , \quad r - r_l = x .$$

Таким образом, x – это отклонение от положения равновесия, I_l – момент инерции, а ω_l – частота осциллятора. В этих обозначениях уравнение (18) примет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dx^2} + \left\{ V(r_l) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I_l} + \frac{1}{2} \mu \omega_l^2 x^2 \right\} u = E u . \quad (19)$$

Это уравнение является уравнением Шредингера для радиальной части волновой функции в предположении существования минимума в эффективном потенциале $W(r)$ и аппроксимации его потенциалом гармонического осциллятора.

Задачи

1. Используя уравнение (19), найти энергетический спектр и волновые функции двухатомной молекулы.

Ответ: $E_{nl} = V(r_l) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I_l} + \hbar \omega_l \left(n + \frac{1}{2} \right),$

$u_{nl}(r) = H_n(r) \exp\left(-r^2 \frac{\mu \omega_l}{2\hbar}\right)$, где волновая функция $u(r)$ связана с $\Psi_{nlm}(\vec{r})$ соотношением (17).

2. Проанализировать все степени свободы молекулы: движение молекулы как целого, вращательное движение, вибрационное движение. Определить число соответствующих степеней свободы и их относительный вклад в энергетический спектр при изменении температуры молекулярного газа. В качестве примера рассмотреть молекулу водорода H_2 , для которой $\hbar \omega_0 = 8,75 \cdot 10^{-13}$ эрг, $\frac{\hbar^2}{2I} = 1,15 \cdot 10^{-14}$ эрг (пренебречь зависимостью I_l от орбитального момента l , считая, что $r_l = r_0$, $\omega_l = \omega_0$). Что происходит с теплоемкостью молекулярного газа H_2 при T , стремящейся к нулю?
3. Вычислить отношение разностей энергии между двумя первыми вращательными ($l = 0$, $l = 1$) и двумя первыми

колебательными уровнями ($n = 0, n = 1$) молекулы HF . Момент инерции HF равен $I = 1,35 \cdot 10^{-40}$ г·см² и частота $\omega_l = 8\pi c \cdot 10^3$ см⁻¹.

Ответ: $\frac{\Delta E_{\text{вр}}}{\Delta E_{\text{кол}}} \approx 0,01$.

Спин электрона

1. Найти собственные значения и собственные функции оператора $(\hat{S}\vec{n})$, где \vec{n} – единичный вектор, а \hat{S} – оператор спина, для частицы со спином $1/2$ (фермион).
2. Найти среднее значение проекции спина на оси x, y в состоянии фермиона с определенным значением проекции спина на ось z .
3. Найти среднее значение энергии связи фермиона в постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси z .

Стационарная теория возмущения

1. На одномерный гармонический осциллятор зарядом e действует возмущающая сила со стороны постоянного электрического поля с напряженностью E , приложенного в положительном направлении x . Вычислить изменения каждого энергетического уровня в первом порядке теории возмущения. Показать, что эта задача допускает точное решение, и сравнить его с приближенным выражением, полученным при помощи теории возмущения.
2. Найти поправку к энергетическому уровню с $n = 2$ и $n = 3$ для атома водорода в постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси z , в первом порядке теории возмущения. Сравнить с точным решением.

3. Найти в первом порядке теории возмущения сдвиг энергетических уровней двумерного гармонического осциллятора в постоянном электрическом поле, направленном вдоль оси x .
Указание. Считать заданными энергетические уровни и волновые функции одномерного гармонического осциллятора.
4. На одномерный гармонический осциллятор наложено возмущение вида bx^3 . Вычислить сдвиг энергетических уровней в первом порядке теории возмущения.
5. Найти сдвиг энергетических уровней атома водорода с $n = 3$ в постоянном электрическом поле, направленном вдоль оси z (эффект Штарка).
6. Вычислить поправку в первом порядке теории возмущения к энергии основного состояния водородоподобного атома, обусловленную неточечностью ядра. Ядро считать сферой радиуса R , по поверхности которой равномерно распределен заряд.
7. Вычислить поправку в первом порядке теории возмущения к энергии основного состояния водородоподобного атома, обусловленную неточечностью ядра. Ядро считать шаром радиуса R с равномерно распределенным по объему зарядом. Оценить поправку для атома водорода, считая $R \approx 10^{-13}$ см.
8. Вычислить поправку в первом порядке теории возмущения к энергии состояния атома водорода с $n = 2$, $l = 1$, обусловленную неточечностью ядра. Ядро считать шаром радиуса R с равномерно распределенным по объему зарядом.

Нестационарная теория возмущения

Рассмотрим систему, стационарное состояние которой описывается волновой функцией:

$$\Psi_n^{(0)}(\vec{x}, t) = \Psi_n(\vec{x})e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}, \quad \hat{H}_0\Psi_n(\vec{x}) = E_n\Psi_n(\vec{x}). \quad (20)$$

Пусть на эту систему в некоторый момент времени начинает действовать возмущение $W(\vec{x}, t)$. Под действием этого возмущения система переходит из состояния $\Psi_n^{(0)}(\vec{x}, t)$ в какое-то состояние $\Psi_n(\vec{x}, t)$, которое уже не будет собственным состоянием гамильтониана \hat{H}_0 . Это можно представить в виде следующей цепочки соотношений:

$$\Psi_n^{(0)}(\vec{x}, t) \xrightarrow{W(\vec{x}, t)} \Psi_n(\vec{x}, t) = \sum_k C_{nk}(t)\Psi_k(\vec{x})e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}. \quad (21)$$

Квантовый переход $\Psi_n^{(0)}(\vec{x}, t) \longrightarrow \Psi_m^{(0)}(\vec{x}, t)$ предполагает «включение» $W(\vec{x}, t)$ в какой-то момент времени $t = 0$ и процесс измерения энергии после «выключения» $W(\vec{x}, t)$ (редукция волнового пакета). Вероятность такого перехода задается коэффициентом $C_{nm}(t)$:

$$\omega(m|n, t) = |C_{nm}(t)|^2,$$

где $\omega(m|n, t)$ – вероятность перехода $n \rightarrow m$ за время t . Вычислим эту вероятность в первом порядке малости возмущения $W(\vec{x}, t)$. Имеем для волновой функции $\Psi(\vec{x}, t)$ уравнение Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + W(\vec{x}, t)\right)\Psi(\vec{x}, t). \quad (22)$$

Будем искать решение $\Psi_n(\vec{x}, t)$ в виде ряда по стационарным состояниям $\Psi_n^{(0)}(\vec{x}, t)$. Индекс «n» у волновой функции

$\Psi_n(\vec{x}, t)$ указывает, что до момента «включения» $W(\vec{x}, t)$ система находилась в состоянии $\Psi_n^{(0)}(\vec{x}, t)$. Подставляя разложение (21) в уравнение (22), получим для коэффициентов $C_{nm}(t)$ следующие уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial C_{nm}(t)}{\partial t} = \lambda \sum_k W_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} C_{nk}(t) , \quad (23)$$

$$W_{mk}(t) = \int \bar{\Psi}_m(\vec{x}) W(\vec{x}, t) \Psi_k(\vec{x}) d\vec{x} , \quad \omega_{mk} = \frac{E_m - E_k}{\hbar} ,$$

где n – фиксированный индекс, а $m = 1, 2, \dots$ – перечисляет все дискретные состояния. Здесь мы ввели эффективную константу λ , которую в конечных результатах будем полагать равной 1. Она позволяет отслеживать степень возмущения $W(\vec{x}, t)$, тем самым эффективно построить процедуру нахождения решения в рамках теории возмущения. Эта теория основана на том факте, что параметр λ входит в уравнение (23) явно в аналитическом виде. Поэтому, согласно общей теории, решение $C_{nm}(t)$ будет аналитической функцией этого параметра: $C_{nm}(t) \equiv C_{nm}(t, \lambda)$. Будем искать решение в виде ряда по степеням λ :

$$C_{nm}(t, \lambda) = C_{nm}^{(0)}(t) + \lambda C_{nm}^{(1)}(t) + \lambda^2 C_{nm}^{(2)}(t) + \dots . \quad (24)$$

Случай $\lambda = 0$ соответствует «выключению» возмущения $W(\vec{x}, t)$. Поэтому, в соответствии с вышесказанным, должно выполняться условие:

$$\sum_k C_{nk}^{(0)}(t) \Psi_k(\vec{x}) e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t} = \Psi_n(\vec{x}) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} .$$

Отсюда получаем, что $C_{nk}^{(0)}(t) = \delta_{nk}$. Таким образом, разложение (24) примет вид:

$$C_{nm}(t, \lambda) = \delta_{nm} + \lambda C_{nm}^{(1)}(t) + \lambda^2 C_{nm}^{(2)}(t) + \dots . \quad (25)$$

Подставляя разложение (25) в уравнение (23), собирая слагаемые при одинаковых степенях λ и приравнивая их к нулю, получим рекуррентные соотношения для коэффициентов $C_{nm}^{(\alpha)}(t)$, $\alpha = 1, 2, \dots$. Это и есть процедура решения уравнения методом теории возмущения.

В первом порядке теории возмущения получим уравнение

$$i\hbar \frac{\partial C_{nm}^{(1)}(t)}{\partial t} = W_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t},$$

отсюда:

$$C_{nm}(t) = \delta_{nm} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t W_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt, \quad \lambda = 1. \quad (26)$$

Выбор такого решения уравнения (23) соответствует тому, что возмущение $W(\vec{x}, t)$ «включено» в момент времени $t = 0$. Таким образом, вероятность перехода $\omega(m|n, t)$ в первом порядке теории возмущения равна:

$$\omega(m|n, t) = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t W_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2, \quad n \neq m. \quad (27)$$

Если $t > T$, где T – время «выключения» возмущения $W(\vec{x}, t)$, то пределы интегрирования можно продолжить на интервал $-\infty < t < \infty$. В этом случае, интеграл в правой части соотношения (27) характеризует распределение по частотам сигнала $W_{mn}(t)$.

В качестве модели $W_{mn}(t)$ возьмем суперпозицию монохроматических сигналов с частотами ω_α :

$$W_{mn}(t) = \sum_{\alpha} B_{\alpha} e^{-i\omega_{\alpha}t},$$

тогда для $\omega(m|n, t)$ при $t > T$ получим:

$$\omega(m|n, t) = \frac{4}{\hbar^2} \left| \sum_{\alpha} B_{\alpha} \frac{\sin \left\{ (\omega_{mn} - \omega_{\alpha}) \frac{T}{2} \right\}}{\omega_{mn} - \omega_{\alpha}} \right|^2. \quad (28)$$

Отсюда видно, что основной вклад в сумму по α дает слабое, в котором $\omega_{\alpha} \sim \omega_{mn}$, т. е. возмущение $W_{mn}(t)$ должно содержать частоту, близкую к частоте перехода ω_{mn} . Этот факт определяет резонансный характер квантовых переходов между стационарными состояниями.

Задачи

1. Атом водорода, находящийся в основном состоянии, помещен между пластинами конденсатора. На последние подается импульс напряжения, в связи с чем в конденсаторе возникает однородное электрическое поле, изменяющееся со временем по закону:

$$E = 0, \quad t < 0; \quad E = E_0 e^{-it/\tau}, \quad t > 0.$$

В первом порядке теории возмущения вычислить вероятность того, что спустя большой промежуток времени t ($t \gg \tau$) атом окажется в состоянии $n = 2, l = 0$.

2. При условиях предыдущей задачи вычислить вероятность перехода в состояния $n = 2, l = 1$.
3. Вычислить поправку второго порядка к вероятности перехода $\omega(m|n, t)$ (28).

Борновское приближение для амплитуды рассеяния

1. В борновском приближении вычислить амплитуду рассеяния частицы на юкавском потенциале $V(r) = g \frac{e^{-r/R}}{r}$.

2. Используя результат задачи (1), вычислить амплитуду рассеяния частицы на кулоновском потенциале $V(r) = g\frac{1}{r}$. Исследовать поведение дифференциального сечения в окрестности угла рассеяния $\theta = 0$.
3. В борновском приближении вычислить амплитуду рассеяния частицы на потенциале $V(r) = ge^{-r/R}$.

**Амплитуда рассеяния заряженной частицы на сложном атоме.
Формфактор атома**

1. Вычислить формфактор атома водорода, находящегося в основном состоянии.
Указание. Использовать волновую функцию электрона в основном состоянии атома водорода.
2. Вычислить формфактор системы точечных зарядов с плотностью

$$\rho(\vec{r}) = e \sum_{j=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) .$$

Унитарность амплитуды упругих процессов

В квантовой теории большую роль играет понятие асимптотических состояний $|in\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} |t\rangle$ и $|out\rangle = \lim_{t \rightarrow +\infty} |t\rangle$. Считается, что в этих состояниях система является свободной. Эти два состояния связаны между собой операторным соотношением

$$|out\rangle = \hat{S}|in\rangle ,$$

где оператор \hat{S} носит название S-матрицы. Этот оператор является функционалом полей, описывающих рассматриваемую систему, и обладает важным свойством унитарности:

$$\hat{S}\hat{S}^+ = \hat{I} , \quad \text{где } \hat{I} \text{ — единичный оператор.}$$

Используя методы построения пространства Фока можно показать, что свойство унитарности S-матрицы приводит для амплитуды упругого рассеяния к нелинейному интегральному уравнению:

$$\text{Im} f(\vec{q}; \vec{p}) = \frac{\kappa}{4\pi} \int d\Omega_k \bar{f}(\vec{k}; \vec{q}) f(\vec{k}; \vec{p}), \quad |\vec{q}| = |\vec{k}| = |\vec{p}| = p = \kappa \hbar, \quad (29)$$

где κ – волновой вектор. Относительное расположение векторов \vec{q} , \vec{k} , \vec{p} и обозначения углов приведено на рис. (9).

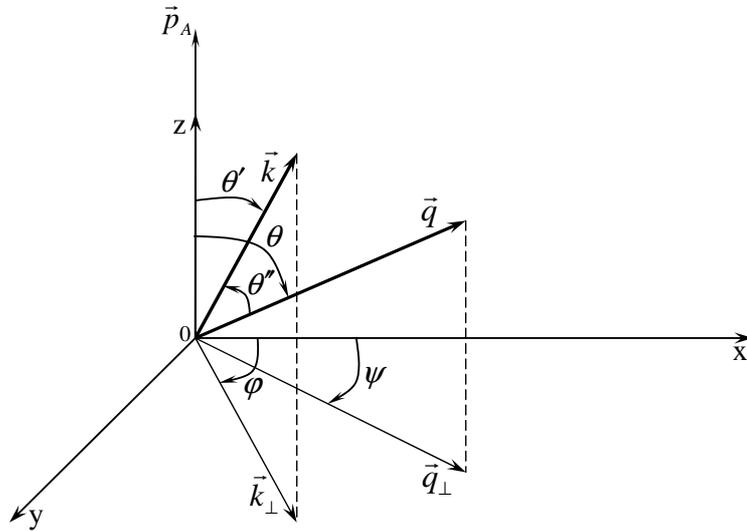


Рис. 9. Определение углов φ , ψ , θ , θ' и θ''

В амплитуде $f(\vec{q}; \vec{p})$ аргумент \vec{p} – импульс частицы до рассеяния, а \vec{q} – импульс частицы после рассеяния. Амплитуда нормирована таким образом, что

$$\int d\Omega_k |f(\vec{k}; \vec{p})|^2 = \sigma_{el}, \quad (30)$$

где σ_{el} – упругое сечение рассеяния, $d\Omega_k = \sin \theta d\theta d\varphi$, $\cos \theta = \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{p^2}$.

Положим в уравнении унитарности (29) $\vec{k} = \vec{p}$, что соот-

ветствует рассеянию на нулевой угол. Тогда получим:

$$\text{Im}f(\theta = 0) = \frac{\kappa}{4\pi} \sigma_{el}. \quad (31)$$

Это соотношение известно как *оптическая теорема*.

Вернемся к уравнению унитарности (29) и найдем его решение. Будем искать решение в виде ряда по полиномам Лежандра:

$$f(\vec{k}; \vec{q}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(c_2), \quad c_2 = \cos \theta = \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{p^2}. \quad (32)$$

Представление амплитуды в таком виде является довольно сильным предположением, так как функция $f(\vec{k}; \vec{q})$, с учетом условия $|\vec{q}| = |\vec{k}| = |\vec{p}| = p = \text{const}$, в общем случае, есть функция четырех переменных – угловые координаты на сфере двух независимых векторов \vec{k} , \vec{q} , а не одной переменной c_2 , как это следует из предполагаемого решения.

Покажем, что это предположение согласовано с уравнением унитарности. Подставляя разложение (32) в уравнение унитарности, получим:

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \text{Im} a_l P_l(c) = \\ & = \frac{\kappa}{4\pi} \sum_{l,m=0}^{\infty} (2l+1)(2m+1) \bar{a}_l a_m \int dc_1 d\varphi P_l(c_2) P_m(c_1). \end{aligned}$$

Здесь в подынтегральном выражении $c = \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{p^2}$, $c_1 = \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}}{p^2}$, а ось z выбрана вдоль вектора \vec{p} . Из рис. (9) нетрудно получить, что

$$c_2 = c \cdot c_1 + \sqrt{1-c^2} \cdot \sqrt{1-c_1^2} \cdot \cos(\varphi - \psi),$$

где φ – полярный угол вектора \vec{k} , а ψ – полярный угол вектора \vec{q} . Теперь воспользуемся теоремой сложения для полиномов Лежандра:

$$\begin{aligned} P_n(zz' - \sqrt{1-z^2}\sqrt{1-z'^2}\cos\varphi) = \\ = P_n(z)P_n(z') + 2\sum_{m=1}^n (-1)^m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(z)P_n^m(z') \cos m\varphi. \end{aligned}$$

Интегрируя левую и правую части этого соотношения по φ в пределах $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ и учитывая, что $\int_0^{2\pi} \cos m\varphi \, d\varphi = 0$, получим:

$$\int_0^{2\pi} P_l(c_2) \, d\varphi = 2\pi P_l(c) P_l(c_1) .$$

С учетом этого соотношения и условия ортогональности полиномов Лежандра

$$\int_{-1}^1 P_l(c_1)P_m(c_1) \, dc_1 = \frac{2}{2l+1}\delta_{lm}$$

получим:

$$\int P_l(c_2)P_m(c_1) \, dc_1 = \frac{4\pi}{2l+1}\delta_{lm}P_l(c) .$$

Таким образом, уравнение унитарности (29) сводится к виду:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)Ima_l P_l(c) = \kappa \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)|a_l|^2 P_l(c) , \quad -1 \leq c \leq 1 .$$

Отсюда в силу линейной независимости полиномов Лежандра $P_l(c)$ получаем:

$$Ima_l = \kappa |a_l|^2 . \quad (33)$$

Это соотношение называется *условием упругой унитарности*. Прямой подстановкой легко убедиться, что a_l в виде

$$a_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2i\kappa}, \quad \text{Im}\delta_l = 0 \quad (34)$$

тождественно удовлетворяет условию упругой унитарности. Величина $\delta_l \equiv \delta_l(p)$ называется *фазой рассеяния*.

Если $\delta_l(p) = 0$, то парциальная волна $a_l(p)$ равна нулю и амплитуда $f(\vec{k}; \vec{q}) \equiv 0$. Значение фазы $\delta_l(p) = \frac{\pi}{2}$ соответствует резонансному рассеянию, при этом $|a_l(p)|^2$ принимает максимальное значение $|a_l(p)|^2 = \kappa^{-2}$. Подводя итог рассмотрению вопроса о решении уравнения унитарности отметим, что амплитуда

$$f(\vec{k}; \vec{q}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l(p)} - 1}{2i\kappa} P_l(c), \quad c = \frac{\vec{q} \cdot \vec{p}}{p^2} \quad (35)$$

удовлетворяет уравнению унитарности (29) при любых действительных фазах $\delta_l(p)$.

Существует одно замечательное обобщение этого результата, позволяющее феноменологически учесть неупругие промежуточные вклады в упругий двухчастичный процесс. Точные расчеты в рамках квантовой теории поля показывают, что неупругие промежуточные вклады приводят к появлению мнимой части фазы рассеяния. Это эквивалентно замене фазы $\delta_l(p) \rightarrow \delta_l(p) + \frac{i}{2}\Delta_l(p)$, причем $\Delta_l(p) \geq 0$. При этом парциальная волна $a_l(p)$ модифицируется следующим образом:

$$a_l(p) = \frac{\eta_l(p) \cdot e^{2i\delta_l(p)} - 1}{2i\kappa}, \quad \eta_l(p) = e^{-\Delta_l(p)}. \quad (36)$$

Величина $\eta_l(p)$ называется *коэффициентом неупругости*. Поскольку $\Delta_l(p) \geq 0$, то $0 \leq \eta_l(p) \leq 1$. Правая граница $\eta_l(p) = 1$ соответствует полному отсутствию неупругих промежуточных вкладов. Левая граница $\eta_l(p) = 0$ соответствует процессу

полного поглощения. Наличие у $a_l(p)$ коэффициента неупругости приводит к модификации условия унитарности. В этом случае имеем:

$$\text{Im}a_l(p) = \kappa|a_l|^2 + \frac{1 - \eta_l^2(p)}{4\kappa} . \quad (37)$$

Особенность упругих процессов в области высоких энергий сталкивающихся частиц состоит в том, что в сумме (37) по парциальным волнам $a_l(p)$ все слагаемые при различных « l » одного порядка, и необходимо привлечение методов эффективного суммирования таких рядов. Основным методом, используемым в теории рассеяния, является переход к квазиклассическому приближению. Он основан на классической интерпретации величины $\hbar l$:

$$\hbar l \approx pb , \quad l \gg 1 ,$$

где величина b как «прицельный» параметр частицы. Это позволяет от суммирования по « l » перейти к интегрированию по непрерывному параметру b в соответствии с соотношением

$$(\Delta l) = 1 = \kappa(\Delta b).$$

В теории полиномов Лежандра показывается, что

$$P_l(\cos \theta) \cong J_0(b\kappa\theta) , \quad \theta \ll 1 , \quad l \gg 1 .$$

Все это позволяет получить важное для практических расчетов соотношение:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) a_l P_l(\cos \theta) \cong 2\kappa^2 \int_0^{\infty} b db a(b) J_0(b\kappa\theta) , \quad (38)$$

$$\kappa R \gg 1 , \quad \theta \ll 1 , \quad a(b) \equiv a_{l=\kappa b} .$$

Здесь R – некий эффективный радиус, определяемый асимптотическим поведением $a(b)$ при больших значениях b .

С учетом унитарного представления для $a_l(p)$ (формула 36) можно принять, что

$$f(\vec{q}; \vec{p}) = 2\kappa^2 \int_0^\infty b \, db \frac{\eta(b) \cdot e^{2i\delta(b)} - 1}{2i\kappa} J_0(b\kappa\theta) . \quad (39)$$

Такое представление амплитуды упругого процесса называется «эйкональным» приближением. Оно справедливо при больших импульсах p и при малых углах рассеяния.

Задачи

1. Показать, что парциальная волна $a_l = \frac{1}{2i\kappa} (e^{2i\delta_l} - 1)$ удовлетворяет уравнению упругой унитарности (33) при условии $Im \delta_l = 0$.
2. Найти уравнение (обобщенное уравнение унитарности), которому удовлетворяет парциальная волна $a_l(p) = \frac{1}{2i\kappa} (\eta_l(p)e^{2i\delta_l(p)} - 1)$ при условии, что $Im \eta_l(p) = Im \delta_l(p) = 0$.
3. Используя разложение амплитуды на парциальные волны

$$f(\vec{q}; \vec{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l(p)} - 1}{2i\kappa} P_l(\cos \theta) ,$$

условие ортогональности полиномов Лежандра, а также выражение для упругого сечения (формула 30)

$$\sigma_{el} = \int d\Omega_q |f(\vec{q}; \vec{p})|^2 ,$$

получить выражение для σ_{el} через фазы рассеяния $\delta_l(p)$.

Ответ: $\sigma_{el} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l(p)|^2 .$

4. Используя результат предыдущей задачи, доказать оптическую теорему

$$\text{Im } f(\theta = 0) = \frac{\kappa}{4\pi} \sigma_{el} .$$

5. Используя представление амплитуды с учетом неупругих промежуточных вкладов

$$f(\vec{q}; \vec{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \frac{\eta_l(p) e^{2i\delta_l(p)} - 1}{2i\kappa} P_l(\cos \theta) ,$$

и обобщенное уравнение унитарности (формула 37), получить оптическую теорему

$$\text{Im } f(\theta = 0) = \frac{\kappa}{4\pi} (\sigma_{el} + \sigma_{in}) = \frac{\kappa}{4\pi} \sigma_{tot} \quad (40)$$

и выражение σ_{in} через параметры неупругости $\eta_l(p)$.

6. Вычислить амплитуду $f(\vec{q}; \vec{p})$ в эйкональном приближении (39) для модели абсолютно черного диска:

$$\eta(b) = \begin{cases} 0, & b \leq R \\ 1, & b > R \end{cases} ; \quad \delta(b) = 0 , \text{ при } b > R .$$

Указание. Воспользоваться дифференциальным уравнением для функции Бесселя $J_0(z)$:

$$J_0''(z) + \frac{1}{z} J_0'(z) + J_0(z) = 0$$

и свойством

$$\frac{dJ_0}{dz} = -J_1(z) .$$

7. Используя результат задачи (3), получить σ_{el} в модели абсолютно черного диска (см. задачу 6).

Указание. Использовать правило перехода от суммы по

моментам l к интегрированию по прицельному параметру b :

$$\sum_l \dots \rightarrow \kappa \int db \dots$$

Ответ: $\sigma_{el} = \pi R^2$.

8. Используя результат задачи (5) для σ_{in} и указание предыдущей задачи, вычислить σ_{in} в модели абсолютно черного диска. *Ответ:* $\sigma_{in} = \pi R^2$.
9. Используя результат задачи (6), а также соотношение (40), вычислить полное сечение σ_{tot} .

Прохождение частиц через потенциальный барьер. Туннельный эффект

1. Найти коэффициент прохождения потока свободных частиц через потенциальный барьер (рис. 10)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > a \\ V_0, & 0 < x < a \end{cases}$$

при условии, что плотность падающего потока $j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k}{m}$, где k – волновой вектор частиц, а энергия падающих частиц $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} < V_0$.

Указание. Коэффициент прохождения $D = \frac{j_{\text{прох}}}{j_{\text{пад}}}$, где $j_{\text{прох}}$ – плотность тока прошедших через барьер частиц. В точном решении перейти к пределу $\hbar \ll 1$ (квазиклассический предел).

Ответ: $D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot a\right)$.

2. Найти решение задачи (1) при условиях, что потенциал

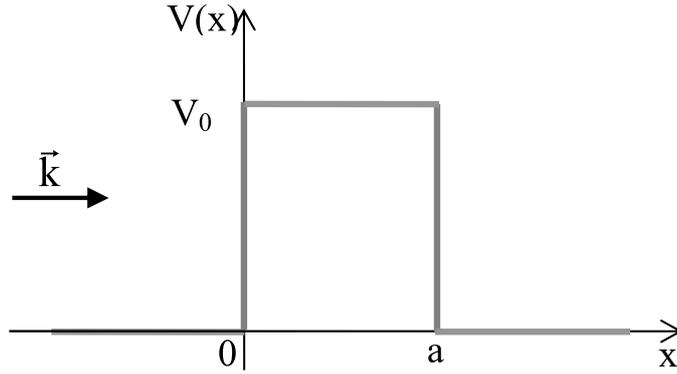


Рис. 10. Одномерный барьер

$V(x)$ равен:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ \text{непрерывная, падающая на бесконечности} & \\ \text{функция,} & x \geq 0. \end{cases}$$

Указание. Разбить область $0 \leq x \leq \infty$ на бесконечно-малые промежутки и считать, что вероятность прохождения на конечном интервале равна произведению вероятностей прохождения через соответствующие промежутки.

Ответ: $D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right)$, где x_1, x_2 – корни уравнения $V(x_i) - E = 0$, $i = 1, 2$, а $E < V_{\max}(x)$, где $V_{\max}(x)$ – максимальное значение $V(x)$ на интервале (x_1, x_2) .

3. Вычислить коэффициент прохождения D для случая холодной эмиссии металла:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0 - eEx, & x > 0, \end{cases}$$

где V_0 – работа выхода электрона из металла, E – напряженность электрического поля. Получить зависимость электрического тока J от напряженности E (аналог закона Ома) и проанализировать графически.

Трёхмерный потенциальный барьер

1. Найти время жизни квазистационарного состояния частицы, находящейся в поле сферически-симметричного потенциала (рис. 11)

$$U(r) = \begin{cases} < U_{max}, & r < r_0, \\ U_{max}, & r = r_0, \\ < U_{max}, & r > r_0 \end{cases}$$

при условии, что при $t = 0$ частица находилась в квазистационарном состоянии с энергией $E = E_0$.

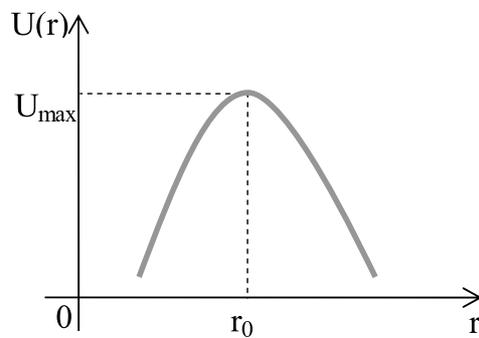


Рис. 11. Сферически-симметричный барьер

Решение. По условию задачи волновая функция, описывающая состояние такой частицы, должна представлять собой на больших расстояниях расходящуюся сферическую волну:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \frac{e^{ikr}}{r}, \quad r \gg r_0 \quad (\text{условие излучения}). \quad (41)$$

Покажем, что волновая функция, удовлетворяющая таким граничным условиям, описывает нестационарное состояние. Действительно, из уравнения непрерывности

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \bar{\Psi} - \bar{\Psi} \nabla \Psi)$$

следует, что

$$\frac{d}{dt} \int_V |\Psi|^2 d\vec{r} = - \int_V \operatorname{div} \vec{j} d\vec{r} = - \int_S j_r \cdot r^2 d\Omega = -4\pi |A|^2 \frac{\hbar k}{m} < 0,$$

здесь Ψ – волновая функция асимптотического состояния (41), для которого радиальная компонента плотности тока равна $j_r = \frac{\hbar k}{mr^2} |A|^2$. Таким образом, $|\Psi|^2$ зависит от времени, т. е. описывает нестационарное состояние.

Для решения поставленной задачи нам необходимо решить временное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(r) \Psi. \quad (42)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде, факторизованном по переменным t и \vec{r} :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar} t}. \quad (43)$$

Нестационарность состояния учтем, добавив к энергии комплексную величину:

$$E = E_0 - \frac{i\hbar}{2} \lambda,$$

где λ – положительный действительный параметр, физический смысл которого будет ясен ниже.

Учитывая, что потенциал $U(r)$ является сферически-симметричным, переходя в уравнении (42) в сферическую систе-

му координат, и подставляя в него представление (43), получим для радиальной волновой функции $R(r)$ уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + U(r)u(r) = (E_0 - \frac{i\hbar}{2}\lambda)u(r), \quad (44)$$

где $u(r) = rR(r)$.

Такое уравнение соответствует стационарному уравнению Шредингера с неэрмитовым гамильтонианом (его собственные значения не являются действительными числами). Решим урав-

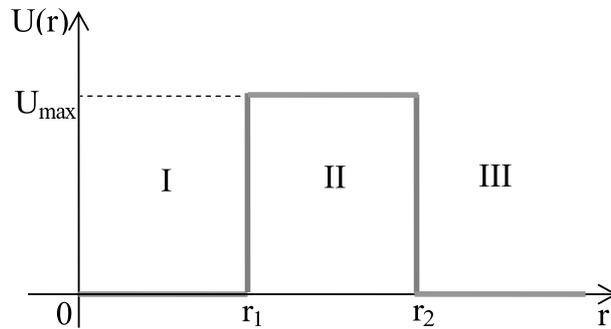


Рис. 12. Аппроксимация барьера

нение (44) в случае простейшей аппроксимации потенциала $U(r)$ (рис. 12). Тогда, уравнение в областях I, II, III имеет вид:

$$\begin{cases} I : & u'' + k^2 u = 0, & k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - \frac{i\hbar}{2}\lambda), \\ II : & u'' - q^2 u = 0, & q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_{max} - E_0 + \frac{i\hbar}{2}\lambda), \\ III : & u'' + k^2 u = 0. \end{cases} \quad (45)$$

решение этих уравнений в соответствующих областях имеет вид

$$\begin{cases} I : & u = a \sin kr, \\ II : & u = \alpha e^{qr} + \beta e^{-qr}, \\ III : & u = b e^{ikr}, \end{cases}$$

где a, b, α, β – произвольные константы, которые фиксируются из требования непрерывности волновой функции $u(r)$ и ее первой производной в точках $r = r_1$ и $r = r_2$. Эти условия приводят к системе однородных уравнений на коэффициенты a, b, α, β . Нетривиальное решение существует при условии, что детерминант $\Delta(k)$ этой системы равен нулю:

$$\Delta(k) = e^{-ql} \left(\frac{q}{k} \operatorname{tg} kr_1 - 1 \right) \frac{ik + q}{ik - q} + e^{ql} \left(\frac{q}{k} \operatorname{tg} kr_1 + 1 \right) = 0 ,$$

где $l = r_2 - r_1$.

(46)

В силу того, что величины q и k являются комплексными числами, соотношение (46) представляет собой два уравнения, отдельно для реальной и мнимой частей соответственно. Несложный анализ этих уравнений приводит для постоянной распада λ к следующему выражению:

$$\lambda = \frac{\hbar k_0}{mr_1} \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_{max} - E_0)} l \right\} ,$$
(47)

где E_0 – энергия одного из стационарных состояний в «яме» при $r_2 \rightarrow \infty$, $k_0^2 = \frac{2mE_0}{\hbar^2}$.

Кинематика излучения и поглощения фотона нестабильным свободным ядром

1. Используя гипотезу Планка–Эйнштейна для энергии фотона $E = \hbar k c$ найти зависимость длины фотона, излученного ядром в процессе $M^* \rightarrow M$, от скорости ядра. (Процесс $M^* \rightarrow M$ соответствует переходу ядра из возбужденного состояния в основное.)

Указание. Воспользоваться законом сохранения энергии–импульса в процессе $M^* = \gamma + M$.

Ответ: $\lambda = \lambda_0 \left(1 - \frac{\vec{v} \vec{n}_\gamma}{c} \right)$, где \vec{v} – скорость ядра, \vec{n}_γ –

единичный вектор вдоль волнового вектора излученного фотона.

Эффект Мессбауэра

Спектр излучения свободного ядра

Рассмотрим ядро, которое может находиться в различных возбужденных состояниях и двигаться как целое. Будем описывать его гамильтонианом $\hat{H} = \hat{m} + \hat{H}_0$, где \hat{m} – массовый оператор, спектр которого описывается возбуждением ядра, \hat{H}_0 – часть гамильтониана, описывающая свободное движение.

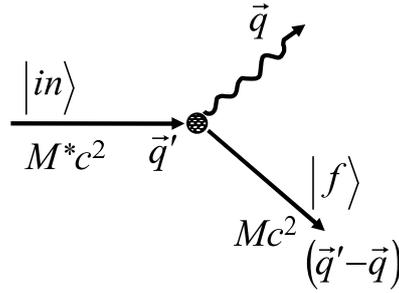


Рис. 13. Процесс излучения

Рассмотрим процесс (рис. 13), при этом

$$\hat{m}|in \rangle = M^*|in \rangle, \quad \hat{m}|f \rangle = M|f \rangle,$$

$$\hat{H}_0|in \rangle = E_{in}|in \rangle, \quad \hat{H}_0|f \rangle = E_f|f \rangle,$$

где вектора $|in \rangle$ и $|f \rangle$ – начальное и конечное состояния ядра соответственно, M^* – масса возбужденного ядра, M – масса ядра в основном состоянии, а E_{in} , E_f – кинетическая энергия ядра в соответствующих состояниях.

Здесь предполагается, что коммутатор $[\hat{m}, \hat{H}_0] = 0$, т. е. внутренние степени свободы можно рассматривать независи-

мо от движения системы как целого. Пусть $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2M}$, где \vec{p} – импульс ядра.

Ясно, что массы ядра до излучения и после будут различны (M^* и M). Однако в нерелятивистском приближении будем считать их одинаковыми. Тогда из закона сохранения энергии:

$$M^*c^2 + E_{in} = Mc^2 + E_f + E_\gamma$$

получим для энергии излученного фотона E_γ выражение:

$$E_\gamma = E_0 + E_{in} - E_f, \quad (48)$$

где $E_0 = (M^* - M)c^2$ (рис. 14).

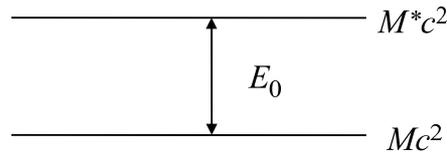


Рис. 14. Энергетический спектр ядра

С учетом закона сохранения импульса можно написать:

$$E_f = E_{in} + R - E_\gamma \frac{\vec{v} \cdot \vec{n}_\gamma}{c}, \quad (49)$$

где $\vec{v} = \vec{q}'/M$ – начальная скорость ядра, \vec{n}_γ – единичный вектор вдоль направления улетающего фотона, $E_\gamma = \hbar kc$, k – волновой вектор улетающего фотона, $R = \hbar^2 k^2 / (2M)$ – энергия отдачи, которую испытывает ядро при излучении фотона с импульсом $\hbar k$.

Объединяя соотношения (48) и (49), получим

$$E_\gamma^{изл} = \frac{E_0 - R}{1 - \frac{\vec{v} \cdot \vec{n}_\gamma}{c}} = (E_0 - R) \left\{ 1 + \frac{\vec{v} \cdot \vec{n}_\gamma}{c} + \left(\frac{\vec{v} \cdot \vec{n}_\gamma}{c} \right)^2 + \dots \right\}, \quad (50)$$

т. е. энергия улетающего фотона определяется спектром возбуждения ядра E_0 и начальной скоростью ядра \vec{v} .

Чтобы оценить энергию отдачи R приведем некоторые характерные данные и покажем, что R определяется только E_0 и не зависит от начальной скорости ядра (слабо зависит). Для ядра ^{57}Fe имеем: $E_0 = 1,4 \cdot 10^4 \text{ eV}$, $Mc^2 \approx 10^9 \text{ eV}$. Тогда для покоящегося ядра ($\vec{v} = 0$) имеем $R = \frac{(E_0 - R)^2}{2Mc^2}$. Предполагая, что R мало по сравнению с E_0 и пренебрегая в правой части R , получим $R \approx \frac{E_0^2}{2Mc^2} \sim 2 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$, что согласуется с исходным предположением. Поэтому с хорошей точностью R определяется только значением E_0 . Отметим, что естественная ширина спектральной линии возбужденного состояния порядка 10^{-5} eV .

Если система ядер находится в тепловом равновесии, то распределение по скоростям определит распределение по энергии излученного фотона E_γ^{uzl} .

Пусть $\rho(\vec{v})$ – нормированная функция распределения по скоростям, тогда:

$$\int \rho(\vec{v}) d\vec{v} = 1, \quad \int_0^\infty v^2 \rho(\vec{v}) dv = \frac{1}{4\pi}, \quad \langle v^2 \rangle = 4\pi \int_0^\infty v^4 \rho(\vec{v}) dv,$$

$$\langle (\vec{v} \cdot \vec{n})^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle, \quad \langle \vec{v} \cdot \vec{n} \rangle = 0,$$

где \vec{n} – произвольный единичный вектор.

С учетом этих соотношений получим для энергии фотона E_γ^{uzl} из (50) следующие выражения:

$$\begin{aligned}
\langle E_\gamma \rangle &= (E_0 - R) \left(1 + \frac{\langle v^2 \rangle}{3c^2} \right), \\
\langle E_\gamma^2 \rangle &= (E_0 - R)^2 \left(1 + \frac{\langle v^2 \rangle}{c^2} \right), \\
\langle E_\gamma \rangle^2 &= (E_0 - R)^2 \left(1 + \frac{2\langle v^2 \rangle}{3c^2} \right),
\end{aligned} \tag{51}$$

отсюда получаем

$$\langle E_\gamma^2 \rangle - \langle E_\gamma \rangle^2 = \frac{1}{3} (E_0 - R)^2 \frac{\langle v^2 \rangle}{c^2}. \tag{52}$$

Итак, центр спектра излучения приходится на энергию фотона $E_\gamma = E_0 - R$ с шириной спектра пропорциональной $\langle v^2 \rangle \sim T$, где T – температура системы ядер. Увеличивая температуру, можно сделать спектр более широким и тем самым увеличить число фотонов с энергией $E_\gamma = E_0$.

Спектр поглощения свободного ядра

Рассмотрим процесс, в котором ядро, находящееся в основном состоянии, поглощает фотон (рис. 15).

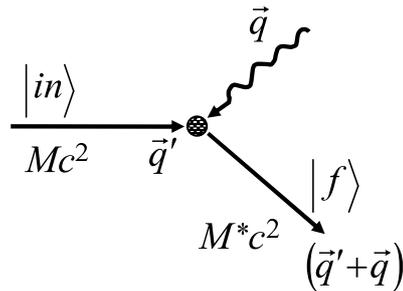


Рис. 15. Процесс поглощения

В этом случае закон сохранения энергии–импульса приводит к соотношению

$$E_\gamma = E_0 + R + E_\gamma \frac{\vec{v} \cdot \vec{n}_\gamma}{c},$$

отсюда:

$$E_{\gamma}^{погл} = \frac{E_0 + R}{1 - \frac{\vec{v} \cdot \vec{n}_{\gamma}}{c}} = (E_0 + R) \left\{ 1 + \frac{\vec{v} \cdot \vec{n}_{\gamma}}{c} + \left(\frac{\vec{v} \cdot \vec{n}_{\gamma}}{c} \right)^2 + \dots \right\}, \quad (53)$$

сравнивая с (50), можно увидеть, что отличия между $E_{\gamma}^{изл}$ и $E_{\gamma}^{погл}$ в знаке энергии отдачи R . Соотношения для средних получаются из (51) заменой R на $(-R)$.

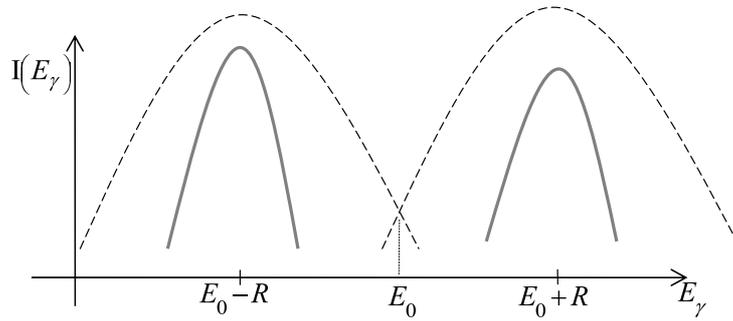


Рис. 16. Интенсивность излучения и поглощения при различных температурах: сплошная линия соответствует температуре T_1 , пунктирная – температуре T_2 , причем $T_2 > T_1$

Объединение спектра интенсивности процессов излучения и поглощения можно представить графически следующим образом (рис. refmessbauer). Из рисунка видно, что пики в интенсивности процессов излучения и поглощения разнесены на величину $2R$.

Рассмотрим два сосуда, разнесенных в пространстве, в одном из которых помещены возбужденные ядра, а в другом – ядра в основном состоянии. Как следует из проведенного анализа, фотоны, излученные из первого сосуда, не могут перевести ядра во втором сосуде из основного состояния в возбужденное, так как $E_{\gamma}^{изл} - E_{\gamma}^{погл} = 2R \neq 0$. Поэтому через некоторое время (время жизни возбужденного состояния) электромагнитное излучение между сосудами исчезнет, если

спектры излучения и поглощения не перекрываются (низкая температура T). При увеличении температуры ширины спектров увеличиваются (52), появляется область перекрытия, которая обеспечивает рождение и поглощение фотонов с энергией E_0 . Таким образом, между сосудами возникает стабильный поток фотонов в обоих направлениях. Как уже отмечалось выше, этот поток исчезает при понижении температуры. Ниже будет показано, что если ядра находятся в связанном состоянии (например, ядра в кристалле), то при понижении температуры резко возрастает число фотонов, рождаемых и поглощаемых с энергией E_0 . Это и составляет содержание эффекта Мессбауэра.

Спектр излучения и поглощения связанным ядром

Рассмотрим ядро, описывающееся гамильтонианом $\hat{H} = \hat{m} + \hat{H}_0$, где \hat{m} соответствует внутренним степеням свободы ядра, а \hat{H}_0 имеет вид:

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2M} + \frac{M\varpi^2}{2}x^2 .$$

Такой гамильтониан описывает движение ядра в одномерном кристалле с осцилляторными силами. Имеем

$$\hat{H}_0|n \rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n \rangle , \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

По внутренним степеням свободы ядро может находиться в основном состоянии

$$\hat{m}|0 \rangle = Mc^2|0 \rangle$$

и в возбужденном состоянии

$$\hat{m}|* \rangle = M^*c^2|* \rangle .$$

Возбужденное ядро переходит из состояния $|* \rangle$ в состояние $|0 \rangle$ с излучением фотона. Такое состояние, вообще говоря, не будет собственным состоянием гамильтониана \hat{H}_0 , т. е. не будет определенным состоянием по гармоническому осциллятору. После измерения энергии в таком состоянии (процесс редукции) система перейдет в какое-то состояние n_f , и тогда закон сохранения энергии можно записать в виде

$$M^* c^2 + \hbar\omega \left(n_{in} + \frac{1}{2} \right) = M c^2 + \hbar\omega \left(n_f + \frac{1}{2} \right) + E_\gamma .$$

Отсюда для энергии излученного фотона E_γ получим

$$E_\gamma = E_0 + \hbar\omega(n_{in} - n_f) , \quad E_0 = (M^* - M)c^2 .$$

Переход ядра из $|* \rangle$ в состояние $|0 \rangle$ с излучением фотона при условии $n_{in} = n_f$ и есть эффект Мессбаура ($E_\gamma = E_0$). Вычислим вероятность такого процесса, следуя монографии [6].

Начальное состояние ядра по гармоническому осциллятору $\Psi_{n_{in}}(x)$ является суперпозицией состояний с определенным импульсом:

$$\Psi_{n_{in}}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{kx}{\hbar}} C_{n_{in}}(k) dk .$$

Поскольку излученный фотон не уносит никаких квантовых чисел, кроме импульса, то, следуя монографии [6], напомним для волновой функции ядра в конечном состоянии $\Psi_f(x)$ следующее выражение

$$\Psi_f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{(k-q)x}{\hbar}} C_{n_{in}}(k) dk , \quad (54)$$

где q – импульс излученного фотона. Отсюда следует:

$$\Psi_f(x) = e^{-i\frac{qx}{\hbar}} \Psi_{n_{in}}(x).$$

Это состояние не является определенным состоянием по гармоническому осциллятору, а является суперпозицией таких состояний:

$$e^{-i\frac{qx}{\hbar}}\Psi_{n_{in}}(x) = \sum_n C_n \Psi_n(x) ,$$

где $\Psi_n(x)$ – волновая функция состояния гармонического осциллятора.

Величина $|C_n|^2$ задает вероятность обнаружить ядро в состоянии гармонического осциллятора $\Psi_n(x)$. Таким образом, вероятность перехода ядра из состояния n_{in} в состояние n_f при излучении фотона равна:

$$W_{n_{in} \rightarrow n_f}(q) = |C_{n_f}(q)|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\Psi}_{n_f}(x) e^{-i\frac{qx}{\hbar}} \Psi_{n_{in}}(x) dx \right|^2 .$$

Для нас представляет интерес переход $n_{in} \rightarrow n_{in}$. Амплитуда вероятности такого перехода $W(q)$ носит название фактора Дебая–Валлера и равна

$$W(q) = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{n_{in}}(x)|^2 e^{-i\frac{qx}{\hbar}} dx .$$

Он определяет вероятность рождения фотона с энергией $E_\gamma = E_0$ (эффект Мессбауэра).

Задачи

1. Вычислить фактор Дебая–Валлера в случае, когда $\Psi_{n_{in}}(x)$ есть волновая функция основного состояния гармонического осциллятора.
2. Вычислить фактор Дебая–Валлера в случае, когда $\Psi_{n_{in}}(x)$ есть волновая функция возбужденного состояния гармонического осциллятора с $n = 1$. Сравнить с результатом предыдущей задачи.

Список литературы

- [1] Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики / Д. И. Блохинцев. — 5-е изд., перераб. — М. : Наука, 1976. — 664 с.
- [2] Ландау Л. Д. Квантовая механика / Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — 3-е изд., перераб. и доп. — М. : Наука, 1974. — 752 с.
- [3] Давыдов А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. — 2-е изд., перераб. — М. : Наука, 1973. — 648 с.
- [4] Дирак П. Принципы квантовой механики / П. Дирак. — 2-е изд. — М. : Наука, 1979. — 480 с.
- [5] Паули В. Принципы волновой механики / В. Паули. — М. ; Л. : ГИТТЛ, 1947. — 332 с.
- [6] Липкин Г. Квантовая механика. Новый подход к некоторым проблемам / Г. Липкин. — М. : Мир, 1977. — 592 с.
- [7] Бом Д. Квантовая теория / Д. Бом. — 2-е изд. — М. : Наука, 1965. — 732 с.
- [8] Вейль Г. Теория групп и квантовая механика / Г. Вейль. — М. : Наука, 1986. — 497 с.
- [9] Wigner E. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium / E. Wigner // Phys. Ref. — 1932. — Vol. 40. — P. 749—759.
- [10] Галицкий В. М. Задачи по квантовой механике / В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. — 2-е изд., перераб. и доп. — М. : Наука, 1992. — 880 с.

- [11] Гольдман И. И. Сборник задач по квантовой механике / И. И. Гольдман, В. Д. Кривченков. — М. : ГИТТЛ, 1957. — 275 с.
- [12] Елютин П. В. Квантовая механика с задачами / П. В. Елютин, В. Д. Кривченков. — М. : Наука, 1976. — 336 с.
- [13] Сербо В. Г. Квантовая механика : учеб. пособие / В. Г. Сербо, И. Б. Хриплович. — Новосибирск : НГУ, 2000. — 136 с.
- [14] Соколов А. А. Квантовая механика / А. А. Соколов, И. М. Тернов, В. Ч. Жуковский. — М. : Наука, 1979. — 528 с.
- [15] Флюгге З. Задачи по квантовой механике / З. Флюгге. — М. : Мир, 1974. — т. 1. — 344 с.
- [16] Хриплович И. Б. Теоретический калейдоскоп : учеб. пособие / И. Б. Хриплович. — Новосибирск : НГУ, 2007. — 104 с.
- [17] Тимофеевская А. Н. Лекции по квантовой механике / А. Н. Тимофеевская, О. А. Хрусталева. — М. ; И. : РХД, 2007. — 316 с.

Содержание

Основные физические константы	3
Программа курса «Квантовая теория»	4
Задачи с элементами теории	8
Эффекты, связанные с квантовой природой фотона	8
Гипотеза Де-Бройля, волновая функция свободной частицы	10
Принцип суперпозиции состояний	11
Формализм Дирака	11
Соотношение неопределенности	15
Операторный формализм квантовой механики . . .	16
Гамильтониан свободной частицы	20
Уравнение непрерывности	20
Одномерное уравнение Шредингера для частицы в произвольном внешнем поле	21
Эволюция операторов и состояний во времени . . .	26
Гармонический осциллятор	28
Среднее значение динамических величин и форма- лизм функции Вигнера	32
Движение частицы в периодическом поле	37
Квантование Борна–Инфельда для частицы в ящике	39
Орбитальный момент количества движения	40
Сферически-симметричное поле	43
Поведение радиальной волновой функции на боль- ших и малых расстояниях	47
Атом водорода	51
Квантовое описание двухатомной молекулы	52
Спин электрона	56
Стационарная теория возмущения	56

Нестационарная теория возмущения	58
Борновское приближение для амплитуды рассеяния	61
Амплитуда рассеяния заряженной частицы на слож- ном атоме. Формфактор атома	62
Унитарность амплитуды упругих процессов	62
Прохождение частиц через потенциальный барьер. Туннельный эффект	70
Трёхмерный потенциальный барьер	72
Кинематика излучения и поглощения фотона неста- бильным свободным ядром	75
Эффект Мессбауэра	76
Список литературы	84