

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
УКРАЇНИ
(КПІ ім. Ігоря Сікорського)

О.П. Кобушкін, Я.Д. Кривенко-Еметов

Збірник задач з квантової механіки

Київ 2019

Розглянуто задачі та методи їх розв'язку відповідно до навчальної програми з курсу «Квантова механіка». Для студентів, аспірантів та викладачів фізичних та фізико-технічних спеціальностей.

Зміст

Передмова	5
1 Лінійні оператори	7
1.1 Задачі	9
1.2 Відповіді та розв'язки	10
2 Квантовий рух в одновірному просторі	13
2.1 Задачі	14
2.2 Відповіді та розв'язки	18
3 Метод квазікласичного наближення	29
3.1 Задачі	30
3.2 Відповіді та розв'язки	32
4 Теорія представлень	39
4.1 Задачі	39
4.2 Відповіді та розв'язки задач	40
5 Квантові рівняння руху	45
5.1 Задачі	46
5.2 Відповіді та розв'язки задач	47
6 Теорія кутового моменту. Спін частинки	49
6.1 Задачі	50
6.2 Відповіді та розв'язки задач	52
7 Рух в центральному полі	55
7.1 Задачі	56
7.2 Відповіді та розв'язки задач	57
8 Стаціонарна теорія збурень	63
8.1 Задачі	65
8.2 Відповіді та розв'язки задач	66
9 Адіабатичне наближення та варіаційний метод Рітца	71
9.1 Задачі	72
9.2 Відповіді та розв'язки задач	72

10	Частинка у зовнішньому електромагнітному полі	77
10.1	Задачі	78
10.2	Відповіді та розв'язки задач	78
11	Нестационарна теорія збурень	83
11.1	Задачі	84
11.2	Відповіді та розв'язки задач	84
12	Багаточастинкові системи. Принцип тотожності. Формалізм представлення чисел заповнення	87
12.1	Задачі	88
12.2	Відповіді та розв'язки задач	89
13	Квантова теорія розсіювання	91
13.1	Задачі	93
13.2	Відповіді та розв'язки задач	93
14	Релятивістська квантова механіка	97
14.1	Задачі	99
14.2	Відповіді та розв'язки задач	100
	Список літератури	104
A	Додаток	105
A.1	Функції Ейрі	105
A.2	Поліноми та приєднані поліноми Лежандра	106
A.3	Сферичні функції Бесселя	107
A.4	Деякі інтеграли, які зводяться до Г-функції	108

Передмова

Неодмінною складовою любого курсу з фізики та теоретичної фізики є розв'язання задач. Звичайно, курс квантової механіки не є виключенням. У даному збірнику приведені задачі, які на протязі довгого часу були опробовані на семінарських заняттях та в розрахункових роботах студентів з квантової механіки при підготовці бакалаврів з спеціальності «Прикладна фізика» в Київському політехнічному інституті ім. Ігоря Сікорського.

Задачі охоплюють широке коло принципів питань нерелятивістської квантової механіки (розд. 1-13), квазікласичне наближення, теорія представлень, теорія кутового моменту, багаточастинкові системи, теорія розсіяння, а також методи розв'язку рівняння Шрьодінгера. Деякі питання релятивістської квантової механіки розглянуто у розд. 14. Частина задач оригінальна, проте більшість було взято з відомих підручників [8,9,11,12]. Для допомоги студентам при вивченні предмету до усіх задач дано розв'язки та/або відповіді. Для тих, хто хоче глибше закріпити свої знання можна запропонувати задачі підвищеного рівня складності з книги [13].

Розділ 1

Лінійні оператори

1. *Оператором* називають дію, яка переводить кожний елемент g множини \mathcal{G} у елемент g' множини \mathcal{G}' .

2. Оператор \widehat{F} називають *лінійним*, якщо для довільних елементів g_1 та g_2 множини \mathcal{G} виконується рівність

$$\widehat{F}(a_1g_1 + a_2g_2) = a_1\widehat{F}g_1 + a_2\widehat{F}g_2,$$

де a_1 та a_2 — довільні комплексні числа.

3. *Добутком* операторів \widehat{F}_1 і \widehat{F}_2 називають послідовну дію операторів на довільний елемент g множини \mathcal{G} :

$$\widehat{F}_1\widehat{F}_2g = \widehat{F}_1(\widehat{F}_2g).$$

У добутку операторів важлив порядок дії окремих операторів.

4. Величину $[\widehat{F}_1, \widehat{F}_2] = \widehat{F}_1\widehat{F}_2 - \widehat{F}_2\widehat{F}_1$ називають *комутатором* операторів \widehat{F}_1 та \widehat{F}_2 . Якщо комутатор дорівнює нулеві, то говорять, що оператори комутують, якщо ні — то говорять, що оператори не комутують.

5. *Одичним* оператором називають такий оператор, який любий елемент множини \mathcal{G} переводить сам у себе

$$\widehat{I}g = g.$$

6. Оператором *оберненим* до оператора \widehat{F} називають такий оператор \widehat{F}^{-1} , для якого

$$\widehat{F}^{-1}\widehat{F} = \widehat{F}\widehat{F}^{-1} = \widehat{I}.$$

7. Функцію від оператора $f(\widehat{F})$ визначають як ряд Маклорена

$$f(\widehat{F}) = f(0)\widehat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0)\widehat{F}^n,$$

де $f^{(n)}(0)$ — n -та похідна від функції $f(x)$ в точці $x = 0$.

8. Скалярним добутком двох хвильових функцій $\varphi(\mathbf{x})$ та $\psi(\mathbf{x})$ називають число¹

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d^3x, \quad \text{де} \quad d^3x \equiv dxdydz.$$

Часто скалярний добуток записують через «бра» та «кет» вектори:

$$\langle \varphi | \psi \rangle \equiv (\varphi, \psi) = \int \varphi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d^3x.$$

9. Скалярний добуток

$$\langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle \equiv (\varphi, \hat{F}\psi) = \int \varphi^*(\mathbf{x})\hat{F}\psi(\mathbf{x})d^3x,$$

називають *матричним елементом* оператора \hat{F} між функціями $\psi(\mathbf{x})$ та $\varphi(\mathbf{x})$. У випадку, коли ці функції співпадають і хвильова функція нормована на одиницю $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, матричний елемент $\langle F \rangle \equiv \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle$ називають *середнім значенням* оператора \hat{F} по цій функції.

10. Оператор \hat{F}^\dagger називають *спряженим* до оператора \hat{F} , якщо справджується рівність

$$\langle \varphi | \hat{F} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{F}^\dagger | \varphi \rangle^*.$$

Оператори, для яких спряжений оператор співпадає із самим оператором

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F},$$

називають *ермітовими* або *самоспряженими*.

11. Якщо для оператора \hat{F} знайдено таку функцію $\psi(\mathbf{x})$, для якої виконується співвідношення

$$\hat{F}\psi(\mathbf{x}) = f\psi(\mathbf{x}),$$

де f — комплексне число, то функцію $\psi(\mathbf{x})$ називають *власною функцією* оператора, а число f — *власним числом*. Для ермітових операторів власні значення дійсні числа, а власні функції взаємно ортогональні.

12. Якщо спряжений оператор дорівнює своєму оберненому оператору, то такий оператор називають *унітарним*

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F}^{-1}, \quad \text{або} \quad \hat{F}^\dagger \hat{F} = \hat{F} \hat{F}^\dagger = \hat{I}.$$

¹Тут і далі зірочка означає комплексне спряження.

1.1 Задачі

1.1. Довести, що сума двох лінійних операторів є теж лінійним оператором.

1.2. \hat{A} та \hat{B} два ермітових оператора. Чи будуть ермітовими оператори $\hat{A}\hat{B}$ та $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$?

1.3. Для довільного оператора \hat{L} показати наступне:

1. $(\hat{L}^\dagger)^\dagger = \hat{L}$;
2. оператори $\hat{L}^\dagger\hat{L}$ та $\hat{L}\hat{L}^\dagger$ ермітові;
3. оператори $\hat{L}^\dagger + \hat{L}$ та $i(\hat{L} - \hat{L}^\dagger)$ ермітові;
4. $[\hat{A}, \hat{A}^n] = 0$;
5. $\hat{A}^{-1}\hat{B}^n\hat{A} = (\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^n$;
6. $\hat{A}^{-1}f(\hat{B})\hat{A} = f(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})$.

1.4. Довести, що для операторів, які задовольняють умові $[\hat{A}, \hat{B}] = C$, де C — число, виконується наступне співвідношення $[f(\hat{A}), \hat{B}] = C f'(\hat{A})$, де $f'(x) = \frac{df(x)}{dx}$.

Вказівка: Спочатку розглянути окремий випадок, коли $f(\hat{A}) = \hat{A}^n$.

1.5. Довести, що $e^{\xi\hat{A}}\hat{B}e^{-\xi\hat{A}} = \hat{B} - C\xi$, якщо $[\hat{B}, \hat{A}] = C$, де C та ξ довільні числа.

1.6. Довести тотожність

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

1.7. Довести тотожність Якобі $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$.

1.8. Оператор \hat{A} ермітов. Показати, що оператор $\hat{U} = \exp(i\hat{A})$ унітарний.

1.9. Довести, що для двох ермітових операторів \hat{A} та \hat{B} комутатор є $i\hat{F}$, де \hat{F} — ермітовий оператор.

1.10. Знайти оператор спряжений до $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$. При яких значеннях n з цей оператор ермітов?

1.11. Показати, що наступні оператори є ермітовими

1. оператор імпульсу $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$;
2. оператор моменту імпульсу $\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{x} \times \hat{\mathbf{p}}$;
3. $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

1.12. Розглянути оператори

1. інверсії \widehat{P} : $\widehat{P}\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x})$,

2. зсуву $\widehat{T}_{\mathbf{a}}$: $\widehat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{a})$,

Які з цих операторів є ермітовими?

1.13. Знайти власні функції та власні значення оператора інверсії.

1.14. Знайти у явному вигляді дію наступних операторів на хвильову функцію

(1) $\exp(i\pi\widehat{P})$, де \widehat{P} оператор інверсії;

(2) $\widehat{T}_{\mathbf{a}} = \exp(\mathbf{a}\nabla)$.

1.15. Для стану, що описується хвильовою функцією

$$\psi(x) = C \exp \left[i \frac{p_0 x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{2\sigma} \right],$$

де p_0 , x_0 — дійсні параметри, в σ — додатне число, знайти середні значення та флюктуації координати та імпульсу.

Примітка: Флюктуація є $\overline{(\Delta L)^2} = \langle \widehat{L}^2 \rangle - \langle \widehat{L} \rangle^2$.

1.16. Довести, що $\langle (\widehat{p} - \langle \widehat{p} \rangle)^2 \rangle \langle (\widehat{x} - \langle \widehat{x} \rangle)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$. Для яких хвильових функцій нерівність перетворюється на рівність?

1.2 Відповіді та розв'язки

1.1. $(\widehat{A} + \widehat{B})(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\widehat{A}\psi_1 + c_1\widehat{B}\psi_1 + c_2\widehat{A}\psi_2 + c_2\widehat{B}\psi_2 = c_1(\widehat{A} + \widehat{B})\psi_1 + c_2(\widehat{A} + \widehat{B})\psi_2$.

1.2. $\widehat{A}\widehat{B}$ — ні, $\widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}\widehat{A}$ — так.

1.3. Тотожності 1.–5. доводяться елементарно. Для встановлення тотожності 6. потрібно розкласти в ряд $f(\widehat{A})$ по степенях \widehat{A} і застосувати тотожність 5.

1.4. Розглянемо випадок, коли $f(\widehat{A}) = \widehat{A}^n$:

$$[\widehat{A}^n, \widehat{B}] = [\widehat{A}^{n-1}, \widehat{B}]\widehat{A} + C\widehat{A}^{n-1} = \dots = nC\widehat{A}^{n-1} = Cf'(\widehat{A}).$$

В загальному випадку:

$$[f(\widehat{A}), \widehat{B}] = \sum_{n=0}^{\infty} c_n [\widehat{A}^n, \widehat{B}] = Cf'(\widehat{A}).$$

1.5. Використати результат попередньої задачі.

1.6. Розглянемо функцію $\widehat{F}(t) = e^{t\widehat{A}}\widehat{B}e^{-t\widehat{A}}$ і розложимо її в ряд по параметру t :

$$\widehat{F}(t) = \widehat{F}(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left. \frac{d^n \widehat{F}(\xi)}{d\xi^n} \right|_{\xi=0}.$$

По індукції легко показати, що

$$\frac{d^n \widehat{F}(\xi)}{d\xi^n} \Big|_{\xi=0} = e^{t\widehat{A}} \underbrace{[\widehat{A}, [\widehat{A}, \dots [\widehat{A}, \widehat{B}]] \dots]}_n e^{-t\widehat{A}} \Big|_{\xi=0} = \underbrace{[\widehat{A}, [\widehat{A}, \dots [\widehat{A}, \widehat{B}]] \dots]}_n.$$

Тоді

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

1.7. Доводиться прямою підстановкою.

1.8. $U^\dagger = \left(e^{i\widehat{A}} \right)^\dagger = e^{-i\widehat{A}^\dagger} = e^{-i\widehat{A}} = U^{-1}.$

1.9. $[\widehat{A}, \widehat{B}]^\dagger = \widehat{B}^\dagger \widehat{A}^\dagger - \widehat{A}^\dagger \widehat{B}^\dagger = [\widehat{B}, \widehat{A}] = -[\widehat{A}, \widehat{B}].$ Якщо записати комутатор як $[\widehat{A}, \widehat{B}] = i\widehat{F}$, то маємо $(i\widehat{F})^\dagger = -i\widehat{F}$ або $\widehat{F}^\dagger = \widehat{F}.$

1.10. $(-1)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}.$ Ермітовим є оператор з парним $n.$

1.11.

- $(\varphi, \widehat{\mathbf{p}}\psi) = \frac{\hbar}{i} \int \varphi(\mathbf{x}) \nabla \psi(\mathbf{x}) d^3x = \frac{\hbar}{i} \int [\nabla(\varphi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})) - \psi(\mathbf{x})\nabla\varphi^*(\mathbf{x})] d^3x =$
 $= \left[\frac{\hbar}{i} \int \psi(\mathbf{x}) \nabla \varphi^*(\mathbf{x}) d^3x \right]^* = (\psi, \widehat{\mathbf{p}}\varphi)^*.$

2. Аналогічно задачі 1.

3. Використати результат задачі 1.

1.12. \widehat{P} — ермітов, \widehat{T}_a — не ермітов.

1.13. Усі парні та непарні функції є власними функціями оператора інверсії, яким відповідають власні функції $P = +1$ та -1

1.14. Розкладаючи в ряд одержимо:

- $\exp(i\pi\widehat{P})\psi(\mathbf{x}) = \left(1 - \frac{\pi^2}{2!} + \frac{\pi^4}{4!} + \dots \right) \psi(\mathbf{x}) + i \left(\pi - \frac{\pi^3}{3!} + \dots \right) \psi(-\mathbf{x}) =$
 $= \cos \pi \psi(\mathbf{x}) + i \sin \pi \psi(-\mathbf{x}) = -\psi(\mathbf{x});$

- $\widehat{T}_a \psi(\mathbf{x}) = \exp(\mathbf{a}\nabla) \psi(\mathbf{x}) = \left[1 + \mathbf{a}\nabla + \frac{1}{2!}(\mathbf{a}\nabla)^2 + \dots \right] \psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{a}).$

1.15. З умови нормування одержимо $C = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\sigma}}$. Тоді:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}} \int dx x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma}} = x_0, \quad \langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}} \int dx x^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma}} = x_0^2 + \frac{\sigma}{2}, \quad \overline{(x)^2} = \frac{\sigma}{2}.$$

Аналогічно для імпульса:

$$\langle \widehat{p} \rangle = p_0, \quad \langle \widehat{p}^2 \rangle = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{2\sigma}, \quad \overline{(\widehat{p})^2} = \frac{\hbar^2}{2\sigma}.$$

1.16. Розглянемо нерівність

$$\int |\alpha(\hat{p} - a) - i(\hat{x} - b)| \Psi(x)|^2 dx \geq 0, \quad (1.1)$$

де α , a та b довільні дійсні числа. Використовуючи наступні співвідношення

$$\begin{aligned} & \int (\hat{p}^* - a)\Psi^*(x)(\hat{p} - a)\Psi(x)dx = \\ & = -\frac{\hbar}{i} \int \frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x)(\hat{p} - a)\Psi(x)] dx + \int \Psi^*(x)(\hat{p} - a)^2\Psi(x)dx = \\ & = \langle (\hat{p} - a)^2 \rangle, \\ & \int (\hat{x}^* - b)\Psi^*(x)(\hat{p} - a)\Psi(x)dx = \langle (\hat{x} - b)^2 \rangle, \\ & - \int [(\hat{p}^* - a)\Psi^*(x)(\hat{x} - b)\Psi(x) - (\hat{x} - b)\Psi^*(x)(\hat{p} - a)\Psi(x)] dx = \\ & = \frac{\hbar}{i} \int \frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x)(\hat{p} - a)\Psi(x)] dx - \\ & - \int \Psi^*(x)(\hat{p} - a) [(\hat{p} - a), (\hat{x} - b)] \Psi(x)dx = i\hbar \end{aligned}$$

перепишемо ліву нерівності у вигляді

$$\alpha^2 \langle (\hat{p} - a)^2 \rangle + \alpha\hbar + \langle (\hat{x} - b)^2 \rangle \geq 0.$$

Для того, щоб ліва частина була невід'ємною, потрібно вимагати

$$\langle (\hat{p} - a)^2 \rangle \langle (\hat{x} - b)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Покладаючи $a = \langle \hat{p} \rangle$ та $b = \langle \hat{x} \rangle$ одержимо необхідну рівність.

Співвідношення (1.1) перетворюється на рівність у випадку, коли підінтегральний вираз дорівнює нулю, $[\alpha(\hat{p} - a) - i(\hat{x} - b)] \Psi(x) = 0$.

Перепишемо це рівняння у вигляді

$$\alpha \frac{d\Psi(x)}{\Psi(x)} = \frac{1}{\hbar} \left(-\frac{x}{\alpha} + l \right) dx, \quad \text{де} \quad l = ia + \frac{b}{\alpha},$$

і проінтегруємо його:

$$\Psi(x) = N \exp \left(-\frac{x^2}{2\hbar\alpha} + \frac{lx}{\hbar} \right) = \tilde{N} \exp \left(-\frac{(x - \langle \hat{x} \rangle)^2}{2\sigma} + \frac{ix\langle \hat{p} \rangle}{\hbar} \right).$$

Для того, щоб хвильова функція була нормованою, необхідно, щоб σ було додатнім числом.

Розділ 2

Квантовий рух в одновірному просторі

1. В одновірному просторі *стаціонарне рівняння Шрьодінгера* є

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.1)$$

де m та E — маса та енергія частинки, $\psi(x)$ — її хвильова функція.

2. *Рівняння неперервності* для одновірного простору має наступний вигляд:

$$\frac{\partial \rho(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial j(t, x)}{\partial x} = 0,$$

де

$$\begin{aligned} \rho(t, x) &= |\psi(t, x)|^2, \\ j(t, x) &= \frac{\hbar^2}{2mi} \left[\psi^*(t, x) \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*(t, x)}{\partial x} \psi(t, x) \right], \end{aligned} \quad (2.2)$$

відповідно, густина ймовірності та густина струму ймовірності.

3. Від потенціала $U(x)$ не обов'язково вимагати неперервності, в деяких точках він може змінюватись стрибком. Якщо в точці розриву $x = x_0$ потенціал змінюється на кінцеву величину, то вимагається виконання двох умов — неперервності хвильової функції та її першої похідної:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi(x_0 - \epsilon) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi(x_0 + \epsilon), \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi'(x_0 - \epsilon) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi'(x_0 + \epsilon). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Якщо ж в точці розриву потенціал зростає на безмежну величину, то від хвильової функції вимагається тільки її неперервності в точці розриву:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi(x_0 - \epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi(x_0 + \epsilon). \quad (2.4)$$

4. При невеликих відхиленнях x від положення рівноваги потенціал можна розкласти в ряд по степенях x . Враховуючи, що в точці рівноваги $U'(x)|_{x=0} = 0$, потенціал зводиться до потенціалу гармонічного осцилятора

$$U(x) \approx \frac{1}{2}\kappa x^2 \psi(x),$$

де κ параметр пружності. В класичній фізиці частинка під дією сили $F = -\kappa x$ виконує гармонічні коливання з частотою $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$, де $\omega = \sqrt{\kappa/m}$ — кругова частота. Її енергія може приймати довільні додатні значення. В квантовому випадку енергія квантується¹:

$$E_n = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + n\right), \quad \text{де} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

Відповідні хвильові функції є

$$\psi_n(x) \equiv |n\rangle = A_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \quad (2.6)$$

де

$$\xi = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} x \quad \text{і} \quad A_n = \sqrt{\frac{\omega m}{\pi \hbar}} (2^n n!)^{-\frac{1}{2}},$$

а $H_n(\xi)$ — поліном Ерміта n -го порядку. З властивостями останніх можна ознайомитись у Математичних доповненнях. Тут варто лише сказати, що поліном Ерміта є парною функцією при парному n та непарною функцією при непарному n . Явні вирази для декількох поліномів Ерміта наведено нижче

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, & H_1(\xi) &= 2\xi, & H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, & H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Поліноми Ерміта мають важливу властивість

$$\xi H_n(\xi) = \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) + n H_{n-1}(\xi). \quad (2.8)$$

Звідси випливає, що

$$x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}} \left(\sqrt{\frac{n+1}{2}} |n+1\rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} |n-1\rangle \right). \quad (2.9)$$

2.1 Задачі

2.1. Знайти спектр енергії та хвильові функції для частинки, яка знаходиться в потенціальній ямі безмежної глибини (рис. 2.1).

2.2. Частинка утримується в ямі обмеженої глибини, яку зображено на рис. 2.2. Її гамільтоніан комує з оператором інверсії (не змінюється при заміні $x \rightarrow -x$). Це означає, що власні функції гамільтоніана є одночасно власними функціями оператора інверсії і, таким чином, розв'язки діляться на такі, які відповідають парним

¹Розв'язок рівняння Шрьодінгера для гармонічного осцилятора можна знайти у будь-якому підручнику з квантової механіки або атомної фізики. Тому тут приводимо лише остаточну відповідь для енергетичного спектру та відповідні хвильові функції.

та непарним хвильовим функціям. Показати це шляхом прямого розв'язку рівняння Шрьодінгера.

2.3. Знайти умову на параметри U_0 та a потенціала рис. 2.2, при якій частинка має лише один дискретний енергетичний рівень.

Вказівка: Скористатися результатом попередньої задачі.

2.4. Частинка знаходиться в потенціалі

$$U(x) = -\alpha\delta(x),$$

причому $\alpha > 0$. Знайти дискретний енергетичний спектр та відповідні хвильові функції.

Вказівка: Розглядати потенціал як граничний перехід ями, яку зображено на рис. 2.2 з $a = \epsilon$ та $U_0 = \frac{\alpha}{2\epsilon}$, коли $\epsilon \rightarrow 0$.

2.5. При описі властивостей двоатомних молекул часто використовують потенціал Морза (рис. 2.3)

$$U(r) = D_0 (e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}),$$

де r — відстань між ядрами, $x = r - r_0$ — відхилення від положення рівноваги r_0 , D_0 — потенціал в точці рівноваги, а α — параметр моделі. Знайти дискретний спектр молекули та відповідні хвильові функції.

Вказівки:

- По визначенню $x = r - r_0$ і тому $-r_0 \leq x \leq \infty$. Проте, враховуючи те, що при $r \rightarrow 0$ потенціал різко зростає вважати, що $-\infty \leq x \leq \infty$.
- В рівнянні Шрьодінгера перейти до нової змінної

$$z = \sqrt{\frac{8mD_0}{\hbar^2\alpha^2}} e^{-\alpha x}.$$

- Показати, що: $\psi \sim z^\nu$ при $z \rightarrow 0$ (знайти ν), та $\psi \sim e^{-\frac{1}{2}z}$ при $z \rightarrow \infty$.
- Шукати розв'язок у вигляді $\psi(z) = Nz^\nu e^{-\frac{1}{2}z} w(z)$. Записати рівняння для $w(z)$.
- Шукати розв'язок одержаного рівняння у вигляді полінома

$$w(z) = \sum_{\mu=0}^n a_\mu z^\mu$$

та знайти рекурентне співвідношення для коефіцієнтів a_μ .

2.6. Знайти дискретний енергетичний спектр та відповідні хвильові функції для частинки, яка знаходиться у полі $U(x) = -\frac{U_0}{\text{ch}^2 \alpha x}$.

Вказівки:

- В рівнянні Шрьодінгера (2.1) перейти до нової змінної $z = \text{th} \alpha x$, $-1 \leq z \leq 1$.
- Показати, що при $z \rightarrow \pm 1$ хвильова функція $\psi(z) \sim (1 \mp z)^\sigma$. Знайти σ .

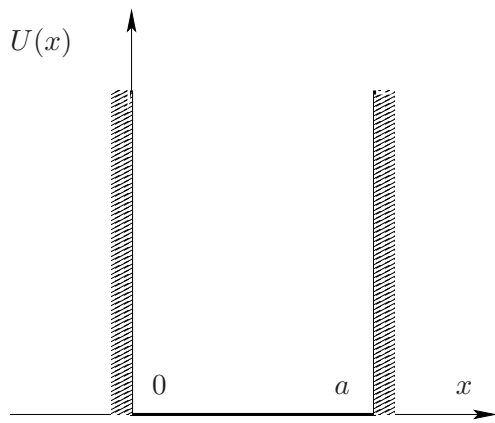


Рис. 2.1: Потенціальна яма безмежної глибини (до задачі 2.1)

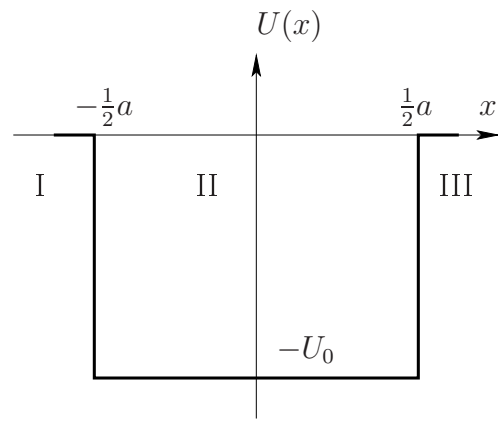


Рис. 2.2: Потенціальна яма обмеженої глибини (до задач 2.2, 2.3 та 2.8)

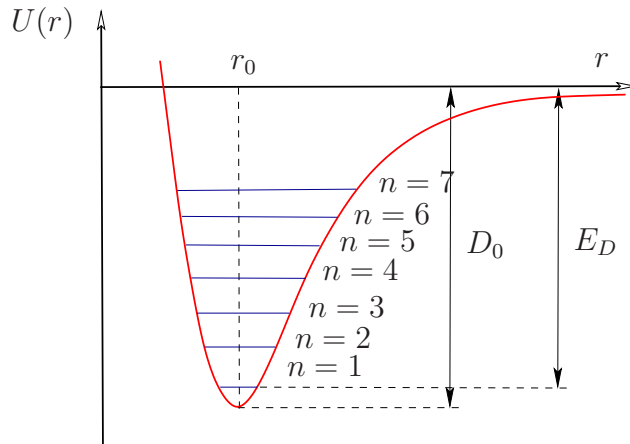


Рис. 2.3: Потенціал Морза (до задачі 2.5)

- Шукати розв'язок у вигляді $\psi(z) = (1 - z^2)^\sigma w(z)$, де $w(z)$ поліном степені n : $w(z) = \sum_{\mu=0}^n a_\mu z^\mu$. Знайти рекурентне співвідношення для коефіцієнтів a_n .

2.7. Розрахувати коефіцієнти проходження D та відбиття R частинки, яка рухається у полі зображеному на рис. 2.4 (а) та (б).

Вказівка: Коефіцієнти проникливості та відбивання визначаються як відношення $D = j'/j$, $R = j_v/j$, де j , j' та j_v потоки ймовірності падаючої хвилі, хвилі, що пройшла, та відбитої хвилі.

2.8. Розрахувати коефіцієнти проходження D та відбиття R частинки, яка рухається у полі зображеному на рис. 2.2. При якій умові $D = 1$ (це явище називають резонансом)?

2.9. Знайти коефіцієнт проходження частинки, яка рухається у полі зображеному на рис. 2.5 з енергією, яка менша за енергію сходинки, $E < U_0$.

2.10. Розрахувати коефіцієнти проходження D та відбиття R для частинки, яка рухається в потенціалі $U(x) = \alpha\delta(x)$, $\alpha > 0$.

Вказівка: Скористатися результатом попередньої задачі.

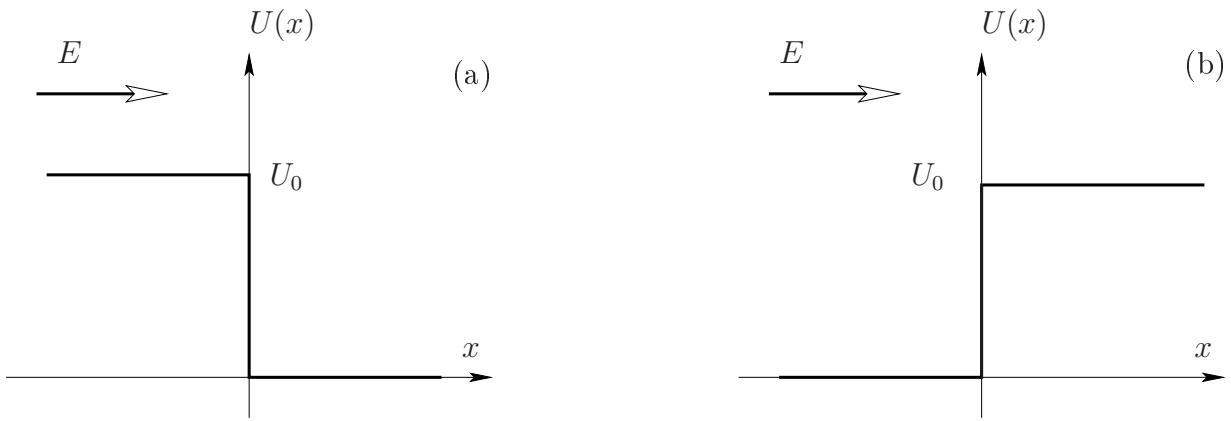


Рис. 2.4: До задачі 2.6

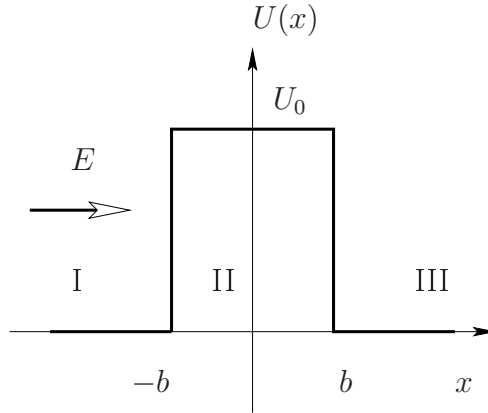


Рис. 2.5: До задачі 2.8. Тунельний ефект

2.11. Розрахувати матричний елемент $\langle n' | x | n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_{n'}(x) x \psi_n(x)$ між двома квантовими станами гармонічного осцилятора.

2.12. Використовуючи результат попередньої задачі знайти середньоквадратичне відхилення від положення рівноваги гармонічного осцилятора в квантовому стані n .

2.13. Потенціал взаємодії двох частинок з різними масами (m_1 та m_2) є $U(x_1, x_2) = \frac{1}{2}\kappa(x_1 - x_2)^2$, де x_1 та x_2 — координати частинок. Знайти енергетичний спектр системи та відповідні хвильові функції.

2.14. Оператор Гамільтона системи двох взаємодіючих між собою частинок з однаковими масами є

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}\kappa(x_1^2 + x_2^2) + \alpha x_1 x_2.$$

1. При яких умовах на параметри задачі κ та α система має скінченну енергію (вважити $\kappa > 0$)?
2. Знайти енергетичний спектр складної частинки та відповідні хвильові функції.
3. Знайти середньоквадратичний розмір та область локалізації центра мас складної частинки.

2.15. Три частинки з однаковими масами взаємодіють попарно між собою

$$U(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{2}\kappa [(x_1 - x_2)^2 + (x_1 - x_3)^2 + (x_2 - x_3)^2],$$

де x_i — координата відповідної частинки. Знайти енергетичний спектр системи та відповідні хвильові функції.

Вказівка: Ввести нові змінні — координату центра мас X та дві відносні координати x і ρ (їх називають координатами Якобі, див. рис. 2.7)

2.16. Знайти зсув енергетичних рівнів та хвильових функцій стаціонарних станів зарядженого одновимірного гармонічного осцилятора при накладанні на нього однорідного електричного поля, яке направлено вздовж коливань осцилятора.

2.2 Відповіді та розв'язки

2.1. Загальний розв'язок рівняння Шрьодінгера в області $0 < x < a$ є: $\psi(x) = A \sin(kx + \varphi)$, де $k = \sqrt{2mE}$, а A та φ — константи інтегрування. В інших областях, $x < 0$ та $x > a$, хвильова функція дорівнює нулю, $\psi(x) = 0$. Накладаючи на хвильову функцію $\psi(x)$ умови $\psi(0) = \psi(a) = 0$ одержимо $\varphi = 0$ та умову квантування енергії $k_n = \frac{n\pi}{a}$, де $n = 1, 2, 3, \dots$; константу A знаходиться з умови нормування:

$$E_n = \frac{(\hbar\pi n)^2}{2ma^2}, \quad \psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} & \text{при } 0 \leq x \leq a, \\ 0 & \text{при } x \leq 0 \text{ та } x \geq a. \end{cases}$$

2.2.² По умові задачі частинка утримується в ямі і тому її енергія від'ємна, $E < 0$, а хвильова функція має спадати до нуля, коли частинка знаходиться далеко від ями:

$$\psi(x) \rightarrow 0, \quad \text{якщо } x \rightarrow \pm\infty.$$

Тому в областях I та III (див. рис. 2.2) потрібно вибрати наступні розв'язки рівняння Шрьодінгера (2.1)

$$\psi_I(x) = A_1 e^{\kappa x}, \quad \psi_{III}(x) = A_3 e^{-\kappa x}, \quad \text{де } \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}.$$

В області II загальний розв'язок є:

$$\psi_{II}(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, \quad \text{де } k = \frac{\sqrt{2m(U_0 + E)}}{\hbar}.$$

Константи інтегрування A_1 , A_2 , A_3 та B_2 визначаються з умов неперервності (2.3), які в нашому випадку зводиться до

$$\begin{aligned} A_1 e^{-\kappa a} &= A_2 e^{-ika} + B_2 e^{ika}, \\ \kappa A_1 e^{-\kappa a} &= ik (A_2 e^{-ika} - B_2 e^{ika}), \\ A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika} &= A_3 e^{-\kappa a}, \\ ik (A_2 e^{ika} - B_2 e^{-ika}) &= -\kappa A_3 e^{-\kappa a}. \end{aligned} \tag{2.10}$$

²Детальний аналіз задачі про частинку в такому потенціалі можна знайти в [10].

Додатково на хвильову функцію необхідно ще накласти умову нормування, що дає ще одне рівняння. Таким чином маємо переозначену систему — 5 рівнянь на 4 коефіцієнти і для того, щоб задовольнити систему рівнянь потрібно розглядати енергію, як додаткову невідому.

Запишемо умову сумісності рівнянь (2.10)

$$\begin{vmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{-ika} & -e^{ika} & 0 \\ \kappa e^{-\kappa a} & -i\kappa e^{-ika} & i\kappa e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} & e^{-ika} & -e^{-\kappa a} \\ 0 & i\kappa e^{ika} & -i\kappa e^{-ika} & \kappa e^{-\kappa a} \end{vmatrix} = 0$$

і будемо розглядати її як рівняння на енергію. Обчислюючи детермінант отримаємо, що енергетичний спектр має задовольняти рівнянню:

$$\kappa^2 - k^2 + 2k\kappa \operatorname{ctg}(2ka) = 0. \quad (2.11)$$

Розв'яжемо його відносно κ :

$$\kappa = \begin{cases} k \operatorname{tg}(ka), & \text{(a)} \\ -k \operatorname{ctg}(ka). & \text{(b)} \end{cases} \quad (2.12)$$

З перших двох рівнянь системи (2.10) виразимо константи A_2 та B_2 через A_1 :

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{k - i\kappa}{2k} e^{-(\kappa - ik)a} A_1, \\ B_2 &= \frac{k + i\kappa}{2k} e^{-(\kappa + ik)a} A_1. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Підставляючи (2.13) в третє рівняння системи (2.10) одержимо

$$A_3 = \left[\cos(2ka) + \frac{\kappa}{k} \sin(2ka) \right] A_1. \quad (2.14)$$

Беручи до уваги (2.12–2.14) отримаємо:

для випадку (а) хвильова функція є парною

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\kappa x} & \text{при } x \leq -a, \\ A \cos(kx) & \text{при } -a \leq x \leq a, \\ A_1 e^{-\kappa x} & \text{при } x \geq a, \end{cases} \quad (2.15)$$

для випадку (b) хвильова функція є непарною

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\kappa x} & \text{при } x \leq -a, \\ A' \sin(kx) & \text{при } -a \leq x \leq a, \\ -A_1 e^{-\kappa x} & \text{при } x \geq a, \end{cases} \quad (2.16)$$

де $A = \frac{e^{-\kappa a}}{\cos(ka)} A_1$ та $A' = -\frac{e^{-\kappa a}}{\sin(ka)} A_1$.

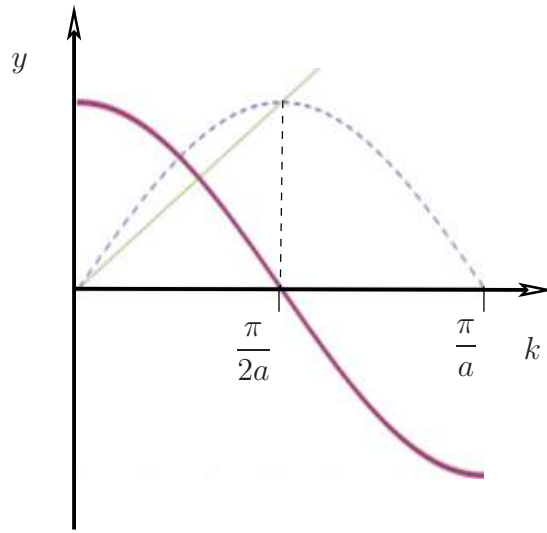


Рис. 2.6: До задачі 2.4. Функція $y = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \cos(ka)$ зображена неперервною жирною лінією, $y = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \sin(ka)$ пунктиром, а $y = k$ тонкою неперервною лінією

2.3. Враховуючи те, що $k^2 + \kappa^2 = 2mU_0/\hbar^2$, вирази (2.12) перетворяться на рівняння для k :

$$k = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \cos(ka), \quad (\text{a}) \quad (2.17)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \sin(ka). \quad (\text{b})$$

Рівняння (2.17) розв'язуються графічно (див. [10]). В зв'язку з тим, що κ та k не можуть бути від'ємними, впливає, що у випадку (а) $\text{tg}(ka)$ має бути додатнім, а у випадку (б) — від'ємним. Тому найнижчі енергетичні рівні відповідають області $k \leq \frac{\pi}{2a}$ (для симетричної хвильової функції) та $\frac{\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$ (для антисиметричної хвильової функції). Як легко бачити з рис. 2.6 при умові

$$\frac{\pi}{2a} > \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \quad (2.18)$$

залишається лише один рівень, який відповідає симетричній функції (2.15).

2.4. Перш за все покажемо, що

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_\epsilon(x), \quad \text{де} \quad \delta_\epsilon(x) = \begin{cases} 0, & x < -\epsilon, \\ (2\epsilon)^{-1}, & -\epsilon < x < \epsilon, \\ 0, & x > \epsilon. \end{cases} \quad (2.19)$$

Дійсно, інтегруючи функцію $\delta_\epsilon(x)$ з будь-якою функцією $f(x)$, яка не має особливостей в околі точки $x = 0$, одержимо $\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta_\epsilon(x) = f(0) + \mathcal{O}(\epsilon)$. Тому $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta_\epsilon(x) = f(0)$, що і є визначенням δ -функції.

Легко бачити, що при $\epsilon \rightarrow 0$ нерівність (2.18) виконується, і тому існує лише один рівень, який відповідає парній хвильовій функції $\psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}$, де $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$.

В точці $x = 0$ ця хвильова функція має неперервний характер, проте її похідна має розрив. Розрив похідної пов'язан з тим, що потенціал має безмежно великий стрибок при $x \rightarrow 0$.

Для того щоб знайти енергію скористаємось рівнянням (2.17.а) де

$$k = \sqrt{\frac{\alpha m + 2\epsilon m E}{\epsilon \hbar^2}}.$$

В результаті одержимо рівняння для енергії

$$\sqrt{\alpha + 2\epsilon E} = \sqrt{\alpha} \cos \frac{\sqrt{\epsilon \alpha m + 2\epsilon^2 m E}}{\hbar}. \quad (2.20)$$

Розкладаючи праву та ліву частини рівняння (2.20) по степеням ϵ одержимо значення енергії:

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}.$$

2.5. Після заміни

$$z = \lambda e^{-\alpha x}, \quad 0 \leq z \leq \infty,$$

рівняння Шрьодінгера (2.1) приймає вигляд:

$$\psi'' + z^{-1}\psi' + \left(\frac{\lambda^2 E}{4D_0} z^{-2} + \frac{\lambda}{2} z^{-1} - \frac{1}{4} \right) \psi = 0, \quad (2.21)$$

де $\lambda = \frac{\sqrt{8mD_0}}{\alpha \hbar}$.

Знайдемо поведінку хвильової функції у граничних випадках:

- При $z \rightarrow 0$ рівняння перетворюється на

$$\psi'' + z^{-1}\psi' + \frac{\lambda^2 E}{4D_0} z^{-2}\psi = 0.$$

Його розв'язок, який прямує до нуля, є

$$\psi \sim z^\nu, \quad \nu = \frac{\lambda}{2} \sqrt{-\frac{E}{D_0}}.$$

- При $z \rightarrow \infty$ одержимо

$$\psi'' = \frac{1}{4}\psi, \quad \psi \sim e^{-\frac{1}{2}z}.$$

Тому розв'язок рівняння будемо шукати у вигляді

$$\psi = z^\nu e^{-\frac{1}{2}z} w(z), \quad (2.22)$$

де $w(z)$ поліном степені n :

$$w(z) = \sum_{\mu=0}^n a_\mu z^\mu.$$

Підставляючи (2.22) у рівняння (2.21) одержимо

$$\sum_{\mu=1}^n \mu(\mu + 2\nu)a_{\mu}z^{\mu-1} + \sum_{\mu=0}^n \left(-\mu + \frac{1}{2}\lambda - \frac{1}{2} - \nu\right) a_{\mu}z^{\mu} = 0.$$

Після заміни $\mu - 1 \rightarrow \mu$ індекса сумування в першому доданку і прирівнюючи до нуля коефіцієнти при однакових степенях z одержимо рекурентне рівняння на коефіцієнти a_{μ}

$$a_{\mu+1} = \frac{\mu - \frac{1}{2}\lambda + \frac{1}{2} + \nu}{(\mu + 1)(\mu + 2\nu + 1)} a_{\mu}, \quad \mu \leq n - 1, \quad (2.23)$$

та умову обривання ряду

$$\nu = \frac{1}{2}\lambda - \frac{1}{2} - n. \quad (2.24)$$

Останнє визначає енергетичний спектр:

$$E_n = -\frac{(\alpha\hbar)^2}{2m} \left(\frac{\sqrt{2mD_0}}{\alpha\hbar} - \frac{1}{2} - n \right)^2, \quad 0 \leq n < \frac{1}{2}\lambda - \frac{1}{2}.$$

Обмеження зверху на n виникає з умови, що ν не може бути від'ємним.

Підставляючи (2.24) в (2.23) одержимо остаточне рекурентне рівняння:

$$a_{\mu+1} = \frac{\mu - n}{(\mu + 1)(\mu + \lambda - n)} a_{\mu}.$$

Отже, усі коефіцієнти виражаються через a_0 . Останній визначається з умови нормування.

2.6. Після заміни

$$z = \text{th } \alpha x, \quad -1 \leq z \leq 1,$$

рівняння Шрьодінгера приймає вигляд:

$$\frac{d}{dz} (1 - z^2) \frac{d\psi(z)}{dz} + \left(\lambda - \frac{\nu}{1 - z^2} \right) \psi(z) = 0, \quad (2.25)$$

де $\lambda = \frac{2mU_0}{(\alpha\hbar)^2}$ та $\nu = -\frac{2mE}{(\alpha\hbar)^2}$.

Знайдемо поведінку хвильової функції при $z \rightarrow \pm 1$. В цих областях рівняння Шрьодінгера перейде в

$$4 \frac{d}{dz} (1 \pm z) \frac{d\psi(z)}{dz} - \frac{\nu}{1 \pm z} \psi(z) = 0.$$

Його розв'язки, які прямують до нуля при $z \rightarrow \pm 1$, є:

$$\psi \sim (1 \pm z)^{\frac{1}{2}\sqrt{\nu}}.$$

Тому слід шукати розв'язок повного рівняння у вигляді

$$\psi(z) = (1 - z^2)^{\frac{1}{2}\sqrt{\nu}} w(z),$$

де невідома функція $w(z)$, представляє собою поліном кінцевої степені,

$$w(z) = \sum_{\mu=0}^n a_{\mu} z^{\mu}.$$

Підставляючи цей вираз у рівняння (2.25) одержимо

$$\sum_{\mu=0}^n \{ [\lambda - \nu - \sqrt{\nu} - 2\mu(1 + \sqrt{\nu})] z^{\mu} + (1 - z^2) \mu(\mu - 1) z^{\mu-2} \} a_{\mu} = 0,$$

або

$$\begin{aligned} & \sum_{\mu=0}^n [\lambda - \nu - \sqrt{\nu} - 2\mu(1 + \sqrt{\nu}) - \mu(\mu - 1)] a_{\mu} z^{\mu} + \\ & + \sum_{\mu=0}^{n-2} (\mu + 2)(\mu + 1) a_{\mu+2} z^{\mu} = 0. \end{aligned}$$

Прирівнюючи до нуля коефіцієнти при однакових степенях z одержимо:

$$\begin{aligned} \lambda - \nu - \sqrt{\nu} - 2n(1 + \sqrt{\nu}) - n(n - 1) &= 0, \\ a_{n-1} &= 0, \\ a_{\mu+2} &= \frac{-\lambda + \nu + \sqrt{\nu} + 2 - 2\mu\sqrt{\nu} + \mu(\mu - 1)}{(\mu + 2)(\mu + 1)} a_{\mu}, \quad \text{при} \quad \mu \leq n - 2. \end{aligned}$$

З першого з цих рівнянь одержимо енергетичний спектр

$$E_n = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m} \left(-1 - 2n + \sqrt{1 + 4\lambda} \right)^2, \quad \text{де} \quad 0 \leq n < -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4\lambda}.$$

Верхнє обмеження на n виникає із умови, що ν має бути додаднім.

Наступні два рівняння визначають (з точністю до норміровки) поліном $w(z)$. Легко бачити, що останній містить лише парні або непарні степені.

2.7. Розглянемо випадок (а). В лівій напівплощині існують дві хвилі, що пройшла, та та, що відбилась, а в правій — тільки та, що пройшла. Тому в окремих областях маємо такі розв'язки рівняння Шррьодінгера:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{л}}(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad x < 0, \\ \psi_{\text{п}}(x) &= A_2 e^{ik'x}, \quad x > 0, \end{aligned}$$

де $k = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}$ та $k' = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Використовуючи в точці $x = 0$ умови неперервності отримаємо наступні обмеження на коефіцієнти

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2, \\ k(A_1 - B_1) &= k' A_2. \end{aligned}$$

Звідси маємо

$$A_2 = \frac{2k}{k + k'} A_1, \quad B_1 = \frac{k - k'}{k + k'} A_1.$$

Розраховуючи відповідні потоки одержимо:

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

У випадку (b) задача розв'язується аналогічно, причому відповідь буде тією самою.

2.8. В зв'язку з тим, що $E > 0$ розв'язки в усіх трьох областях мають осцилюючий характер:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_1 e^{ik_0 x} + B_1 e^{-ik_0 x}, \\ \psi_{II}(x) &= A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, \\ \psi_{III}(x) &= A_3 e^{ik_0 x} + B_3 e^{-ik_0 x}, \end{aligned}$$

де $k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $k = \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar}$. Далі будемо вважати, що потік частинок падає зліва направо, тому в області III існує лише хвиля, яка пройшла, і потрібно покласти $B_3 = 0$. В області I існують дві хвилі — та, що падала, і та, що відбилась.

Використовуючи (2.2) розрахуємо струми $j_{\text{п}}$ (для хвилі, що падає), $j_{\text{в}}$ (для хвилі, що відбилась) і $j_{\text{пр}}$ (для хвилі, що пройшла):

$$j_{\text{п}} = \frac{\hbar k_0}{m} A_1, \quad j_{\text{в}} = \frac{\hbar k_0}{m} B_1, \quad j_{\text{пр}} = \frac{\hbar k_0}{m} A_3.$$

Звідси випливає, що коефіцієнти проходження та відбивання визначаються наступним чином:

$$D = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2, \quad R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2.$$

Умови неперервності на границях областей (2.3) зводяться до чотирьох лінійних рівнянь

$$\begin{aligned} A_1 e^{-ik_0 a} + B_1 e^{ik_0 a} &= A_2 e^{-ika} + B_2 e^{ika}, \\ k_0 (A_1 e^{-ik_0 a} - B_1 e^{ik_0 a}) &= k (A_2 e^{-ika} - B_2 e^{ika}), \\ A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika} &= A_3 e^{ik_0 a}, \\ k (A_2 e^{ika} - B_2 e^{-ika}) &= k_0 A_3 e^{ik_0 a}. \end{aligned}$$

Звідси випливає

$$\begin{aligned} A_1 &= (4kk_0)^{-1} [(k_0 + k)^2 e^{2i(k_0 - k)a} - (k_0 - k)^2 e^{2i(k_0 + k)a}] A_3, \\ B_1 &= \frac{i}{2} \left(\frac{k}{k_0} - \frac{k_0}{k} \right) \sin(2ka) A_3. \end{aligned}$$

В результаті отримаємо:

$$D = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right)^2 \sin^2(2ka) \right]^{-1} \quad \text{та} \quad R = 1 - D.$$

Явище резонансу відбувається при умові $2kb = n\pi$.

2.9. Можна скористатись формулами попередньої задачі, де

$$k = i\kappa, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}.$$

Тоді

$$D = \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{\kappa} + \frac{\kappa}{k_0} \right)^2 \operatorname{sh}^2(2b\kappa) \right]^{-1} \quad \text{та} \quad R = 1 - D.$$

$$\mathbf{2.10.} \quad D = \frac{2\hbar^2 E}{2\hbar^2 E + \alpha^2 m}, \quad R = \frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2 E + \alpha^2 m}.$$

$$\mathbf{2.11.} \quad \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n',n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n',n+1} \right).$$

$$\mathbf{2.12.} \quad \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

2.13. Перейдемо до нових змінних: координати центра мас X та відносної координати x між частинками,

$$X = \frac{m_1}{m_1 + m_2} x_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2} x_2, \quad x = x_1 - x_2. \quad (2.26)$$

Відповідні канонічно спряжені до них імпульси є

$$\begin{aligned} \hat{P} &= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} \right), \\ \hat{p} &= -i\hbar \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial x_2} \right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

(Перевірте, що між новими операторами координат та імпульсів зберігаються комутаційні співвідношення.)

В нових змінних рівнянні Шрьодінгера (2.1) є

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\kappa}{2} x^2 \right) \psi(X, x) = E\psi(X, x), \quad (2.28)$$

де $M = m_1 + m_2$, та $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

Рівняння (2.28) дозволяє розділення змінних:

$$\begin{aligned} \psi(X, x) &= \Phi(X)\phi(x), \quad E = T + \varepsilon, \\ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \Phi(X) &= T\Phi(X), \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\kappa}{2} x^2 \right) \phi(x) &= \varepsilon\phi(x). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Перше з рівнянь (2.29) описує вільний рух частинки з масою M , а друге — частинку із зведеною масою μ , яка знаходиться в осциляторному полі. Розв'язки обох рівнянь добре відомі (див., наприклад, [7]). Отже, маємо:

$$\begin{aligned} E_{pn} &= T_p + E_n, \\ \text{де } T_p &= \frac{p^2}{2M}, \quad E_{0n} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \\ \Phi_p(X) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{pX}{\hbar}}, \quad \phi_n(x) = A_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \end{aligned}$$

A_n та ξ визначені в п. 4 передмови до цього розділу, p — довільний імпульс, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, $\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{\mu}}$.

Систему можна розглядати як вільну частинку, яка має масу M та імпульс p , середньоквадратичний розмір якої є

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_n &= A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} = \\ &= \frac{\hbar}{\mu\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right). \end{aligned}$$

2.14. Запишемо гамільтоніан задачі в змінних (2.26) та (2.27), де $m_1 = m_2 = m$:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + (\kappa + \alpha)X^2 + \frac{\kappa - \alpha}{4}x^2, \\ M &= 2m, \quad \mu = \frac{1}{2}m, \\ X &= \frac{1}{2}(x_1 + x_2), \quad x = x_1 - x_2. \end{aligned}$$

Розділяючи змінні у відповідному стаціонарному рівнянні Шрьодінгера одержимо два рівняння Шрьодінгера для частинок з масами $2m$ та $m/2$, які знаходяться в полі гармонічного осцилятора:

$$\begin{aligned} E_{Nn} &= E_N + E_n, \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + (\kappa + \alpha)X^2\right) \Phi_N(x) &= E_N \Phi_N(x), \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\kappa - \alpha}{4}x^2\right) \phi_n(x) &= E_n \phi_n(x). \end{aligned} \tag{2.30}$$

1. З (2.30) видно, що система має скінченну енергію, коли $\kappa > \alpha > -\kappa$.
2. Розв'язуючи рівняння (2.30) одержимо:

$$\begin{aligned} E_{Nn} &= \hbar\Omega \left(N + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \\ \psi_{Nn}(X, x) &= A_N a_n H_N(\rho) H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}(\rho^2 + \xi^2)}, \quad N, n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

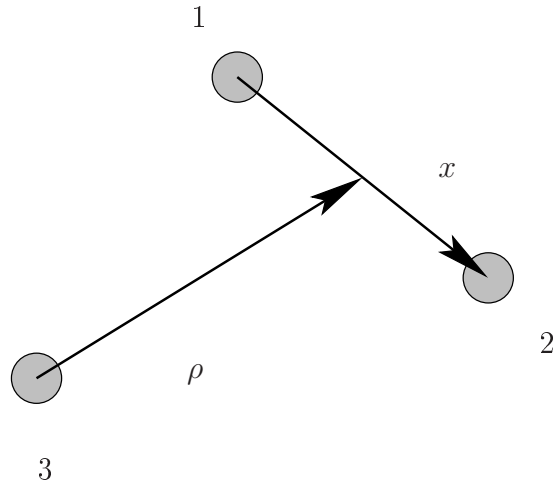


Рис. 2.7: До задачі 2.15. Координати Якобі

де

$$\begin{aligned}\Omega &= \sqrt{\frac{\kappa + \alpha}{m}}, & \omega &= \sqrt{\frac{\kappa - \alpha}{m}}, \\ \rho &= \sqrt{\frac{\Omega M}{\hbar}} X, & \xi &= \sqrt{\frac{\omega \mu}{\hbar}} x, \\ A_N &= \sqrt[4]{\frac{\Omega M}{4\pi}} (2^N N!)^{-1/2}, & a_n &= \sqrt[4]{\frac{\omega \mu}{4\pi}} (2^n n!)^{-1/2}.\end{aligned}$$

3. $r^2 = \langle x_n^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} (n + \frac{1}{2})$; центр мас локалізований в крузі з центром в початку координат $(x_1 = x_2 = 0)$ з радіусом

$$R = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega} \left(N + \frac{1}{2} \right)}.$$

2.15. Введемо координати Якобі:

$$\begin{aligned}X &= \frac{1}{3} (x_1 + x_2 + x_3), \\ x &= x_1 - x_2, & \rho &= \frac{x_1 + x_2}{2} + x_3.\end{aligned}$$

Тоді після розділення координат одержимо:

$$\begin{aligned}E_{pn_1n_2} &= \hbar\omega (n_1 + n_2 + 1) + \frac{p^2}{2M}, \\ \omega &= \sqrt{\frac{3\kappa}{m}}, & M &= 3m, \\ \psi_{pn_1n_2}(X, x, \rho) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{pX}{\hbar}} A_{n_1} A_{n_2} H_{n_1}(\xi_1) H_{n_2}(\xi_2) e^{-\frac{1}{2}(\xi_1^2 + \xi_2^2)},\end{aligned}$$

де p — довільний імпульс, а $n_1, n_2 = 0, 1, 2, 3, \dots$

2.16. Запишемо гамільтоніан:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\kappa}{2} x^2 - \mathcal{E}Qx,$$

де Q — заряд частинки, а \mathcal{E} — напруженість поля. Зробимо заміну $x \rightarrow y = x - \frac{\mathcal{E}Q}{\kappa}$ і гамільтоніан перетвориться на

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{\kappa}{2} y^2 - \frac{Q^2 \mathcal{E}^2}{2\kappa},$$

звідки очевидно, що усі рівні енергії зсунуться на сталу величину $\Delta E = -\frac{Q^2 \mathcal{E}^2}{2\kappa}$,

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{Q^2 \mathcal{E}^2}{2\kappa},$$

а аргумент хвильових функцій зміститься на $\Delta\xi = -\sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} \frac{\mathcal{E}Q}{\kappa}$,

$$\psi_n(x) = A_n H_n(\xi + \Delta\xi) e^{-\frac{(\xi + \Delta\xi)^2}{2}}.$$

Розділ 3

Метод квазікласичного наближення

1. *Квазікласичним наближенням* називають розклад рівняння Шрьодінгера та його розв'язків по степеням \hbar . Цей метод розв'язання рівняння Шрьодінгера також називають *методом Вентцеля-Крамерса-Бріллоена (ВКБ)*.

2. В нульовому порядку розкладу рівняння Шрьодінгера зводиться до класичного рівняння Гамільтона-Якобі. Наступні порядки розкладу відповідають за квантові властивості системи. Приймаючи до уваги члени порядку \hbar можна одержати наступний вираз для одномірної хвильової функції стаціонарного стану частинки у потенціальному полі $U(x)$ (див., наприклад, [7]):

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dy p(y) \right] + \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dy p(y) \right], \quad (3.1)$$

де x_0 — деяка довільна точка, а

$$p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}.$$

3. *Умовою допустимості* квазікласичного розкладу (у випадку одномірного руху) є

$$|p| \gg \sqrt[3]{\hbar m \left| \frac{dU(x)}{dx} \right|}.$$

4. У випадку фінітного руху частинки (див. рис. 3.1) з умови «зшивання» хвильової функції в точках x_0 та x_1 випливають¹:

- *правило квантування Бора-Зоммерфельда*

$$I = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad I \equiv \int_{x_0}^{x_1} dy p(y), \quad (3.2)$$

де n — ціле число і інтегрування охоплює область допустимої для руху класичної частинки;

¹Точки x_0 та x_1 називають точками повороту бо в них класична частинка рухаючись у потенціалі змінює напрямок руху.

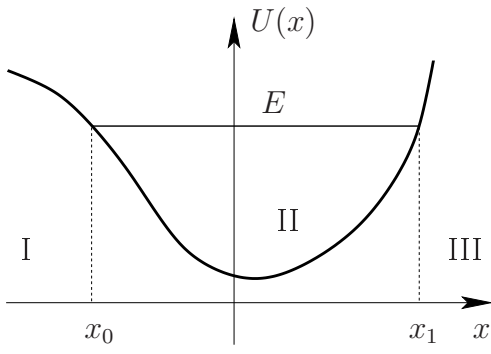


Рис. 3.1: Класично допустимою областю руху частинки при фінітному русі є $x_0 \leq x \leq x_1$

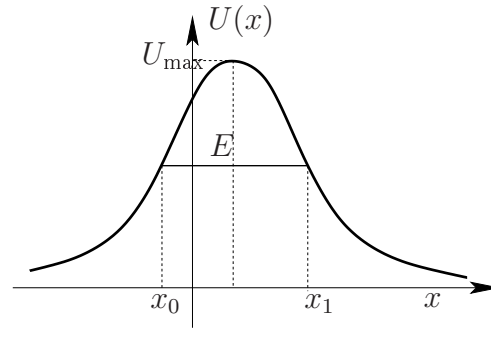


Рис. 3.2: Класично допустимі області руху частинки при інфінітному русі лежать зліва від точки x_0 та справа від точки x_1

- умови на коефіцієнти хвильових функції з різних областей, рис. 3.1:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{N}{2\sqrt{\tilde{p}_n(x)}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \tilde{p}_n(y) dy \right], & x < x_0, \\ \frac{N}{\sqrt{p_n(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p_n(x) dy + \frac{\pi}{4} \right], & x_0 < x < x_1, \\ \frac{(-1)^n N}{2\sqrt{\tilde{p}_n(x)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \tilde{p}_n(y) dy \right], & x > x_1, \end{cases} \quad (3.3)$$

$$\text{де } \tilde{p}_n(x) = \sqrt{2m[U(x) - E_n]} \quad \text{та} \quad p_n(x) = \sqrt{2m[E_n - U(x)]}.$$

5. У випадку інфінітного руху (див. рис. 3.2) метод ВКБ дає можливість розрахувати коефіцієнт проходження потенціального бар'єру

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} dy \sqrt{2m[U(y) - E]} \right\}. \quad (3.4)$$

3.1 Задачі

3.1. Використовуючи правило квантування Бора-Зоммерфельда знайти енергетичні рівні для частинки, яка знаходиться у полі одновимірного гармонічного осцилятора. Порівняти з точними розв'язками та зясувати умови застосування метода квазікласичного наближення.

3.2. Використовуючи правило квантування Бора-Зоммерфельда знайти енергетичні рівні для частинки, яка знаходиться у полі потенціала Морза (задача 2.5). Порівняти з точним розв'язком.

Вказівка: При обчисленні інтеграла зробити заміну $z = e^{-\alpha x}$.

3.3. Використовуючи правило квантування Бора-Зоммерфельда знайти енергетичні рівні для частинки, яка знаходиться у полі

$$U(x) = -\frac{U_0}{\text{ch}^2 \alpha x}.$$

Порівняти з точним розв'язком.

Вказівка: При обчисленні інтеграла в умові Бора-Зоммерфельда зробити дві заміни: $z = \text{th}(\alpha x)$ і далі тригонометричну заміну.

3.4. Як зміниться умова квантування Бора-Зоммерфельда для потенціала зображеного на рис. 3.3.

3.5. Методом квазікласичного наближення знайти рівні енергії частинки, яка знахо-

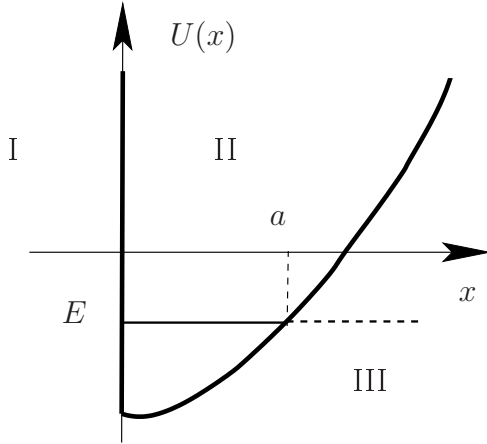


Рис. 3.3: До задачі 3.4

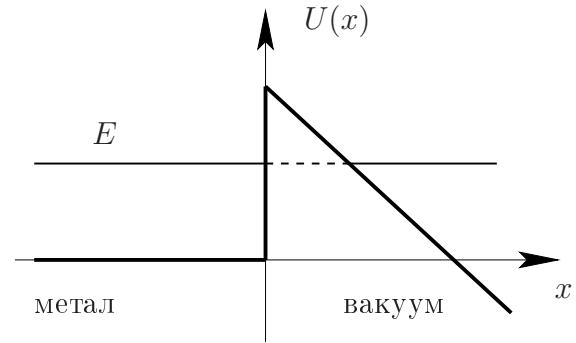


Рис. 3.4: Холодна емісія електронів

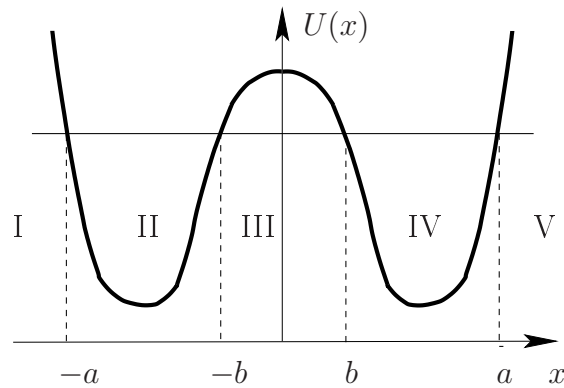


Рис. 3.5: До задачі 3.9

диться в полі

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & \text{при } x < 0, \\ \lambda x, & \text{при } x > 0, \end{cases}$$

де $\lambda > 0$.

3.6. Виходячи з наближення ВКБ одержати вираз для зсуву енергетичних рівнів частинки при зміні потенціала на величину $\delta U(x)$.

Примітка: Знехтувати зсувом точок повороту.

3.7. На основі метода квазікласичного розкладу знайти коефіцієнт проходження D

через параболічний потенціальний бар'єр

$$U(x) = \begin{cases} U_0 \left[1 - \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right], & \text{при } |x| < a, \\ 0, & \text{при } |x| > a. \end{cases}$$

3.8. При накладанні на металевий провідник зовнішнього сильного електричного поля відбувається явище холодної емісії електронів з металу. Пояснюється це явище тунелюванням електронів через бар'єр, який зображений на рис. 3.4

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{при } x < 0, \\ W - e\mathcal{E}x, & \text{при } x > 0, \end{cases}$$

де W — робота виходу електрона із зразка. Використовуючи метод ВКБ розрахувати залежність коефіцієнта проходження бар'єру від величини електричного поля \mathcal{E} .

3.9. Поле $U(x)$ являє собою дві однакові ями, які розділені бар'єром (рис. 3.5). Якби бар'єр був непроникливим, то існував би один двічі вироджений рівень E , що відповідає руху частинки в окремих ямах. Можливість проникнення крізь бар'єр призводить до зняття виродження. Використовуючи метод квазікласичного наближення знайти величину розщеплення рівня.

3.2 Відповіді та розв'язки

3.1. Враховуючи що $-x_0 = x_1 = \sqrt{2E/\kappa}$ запишемо умову квантування Бора-Зоммерфельда (3.2)

$$\int_{-\sqrt{2E/\kappa}}^{\sqrt{2E/\kappa}} dx \sqrt{2m \left(E - \frac{\kappa}{2} x^2 \right)} = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Інтеграл береться тригонометричною підстановкою. В результаті одержимо енергетичний спектр

$$E = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}},$$

який співпадає з точним розв'язком. Це результат того, що точний розв'язок пропорційний \hbar . Щоб з'ясувати умови застосування ВКБ-метода потрібно порівняти хвильові функції.

Інтеграли, які фігурують в хвильових функціях (3.3), легко беруться

$$\begin{aligned} \xi_I(\rho_n) &= \hbar^{-1} \int_{x_0}^x \tilde{p}(y) dy = \left(n + \frac{1}{2} \right) \left\{ \alpha_1(\rho_n) - \frac{1}{2} \text{sh}[2\alpha_1(\rho_n)] \right\}, \\ \xi_{II}(\rho_n) &= \hbar^{-1} \int_{x_0}^x p(y) dy = \left(n + \frac{1}{2} \right) \left\{ -\alpha_2(\rho_n) + \frac{1}{2} \sin[2\alpha_2(\rho_n)] \right\}, \\ \xi_{III}(\rho_n) &= -\hbar^{-1} \int_{x_1}^x \tilde{p}(y) dy = \xi_I(\rho_n), \end{aligned}$$

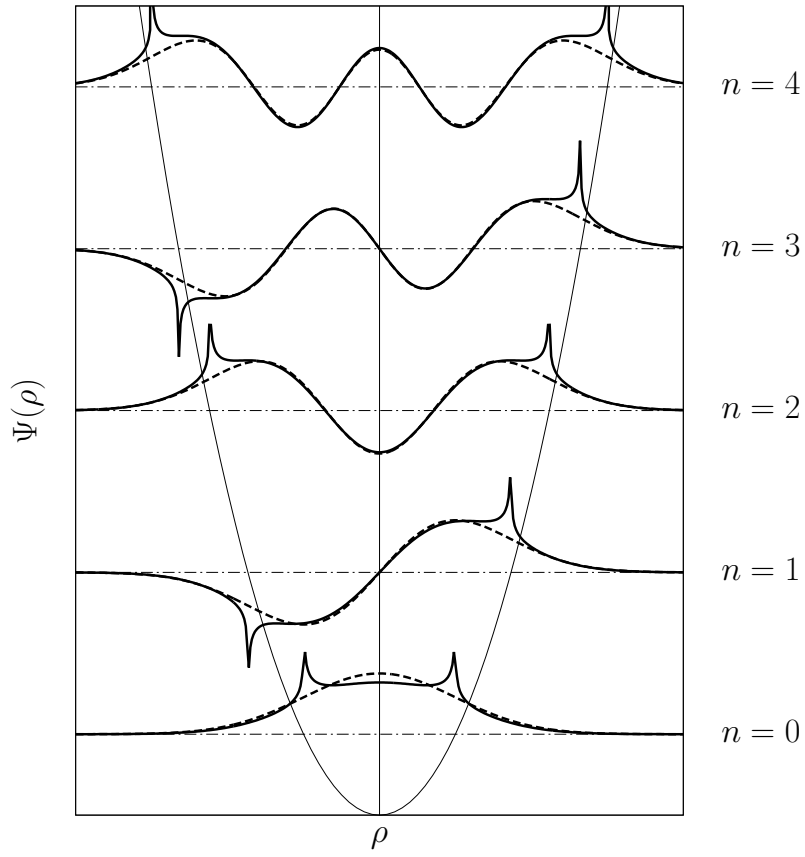


Рис. 3.6: Хвильові функції гармонічного осцилятора у квазікласичному наближенні (неперервні лінії), пунктирні лінії — точні розв'язки

де $\rho_n = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} \frac{x}{\sqrt{2n+1}}$, $\alpha_1(\rho) = \operatorname{arcsch}|\rho|$ та $\alpha_2(\rho) = \operatorname{arccos}\rho$, і хвильова функція є:

$$\psi(\rho) = \begin{cases} \frac{N e^{\xi_1(\rho_n)}}{2^4 \sqrt{\frac{1}{2}\rho^2 - n - \frac{1}{2}}}, & \text{при } \rho < -\sqrt{2n+1}, \\ \frac{N \sin[\xi_{II}(\rho_n) + \frac{\pi}{4}]}{\sqrt{4n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rho^2}}, & \text{при } -\sqrt{2n+1} < \rho < \sqrt{2n+1}, \\ (-1)^n \frac{N e^{\xi_{III}(\rho_n)}}{2^4 \sqrt{\frac{1}{2}\rho^2 - n - \frac{1}{2}}}, & \text{при } \rho > \sqrt{2n+1}. \end{cases}$$

Константа N визначається з умови нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\rho \psi^2(\rho) = 1.$$

Слід сказати, що в точках $\rho = \pm\sqrt{2(n + \frac{1}{2})}$ підінтегральна функція має особливості, проте ці особливості є інтегровані.

На рис. 3.6 проведено порівняння хвильових функцій розрахованих у квазікласичному наближенні з точними розв'язкам. Легко бачити, що різниця між наближеним

розрахунком і точним зменшується з ростом головного квантового числа n , звичайно, за виключенням вузьких областей в околі точок повороту.

3.2. В новій змінній інтеграл, який входить в умову Бора-Зоммерфельда (3.2), буде

$$I = \alpha^{-1} \sqrt{2mD_0} \int_{1-\sqrt{1+E/D_0}}^{1+\sqrt{1+E/D_0}} \frac{dz}{z} \sqrt{-z^2 + 2z + \frac{E}{D_0}},$$

де $E < 0$. Для того, щоб взяти інтеграл використаємо тотожність

$$\int \frac{X^{1/2} dx}{x} = X^{1/2} + \frac{b}{2} \int \frac{dx}{X^{1/2}} + a \int \frac{dx}{xX^{1/2}}, \quad \text{де } X^{1/2} = \sqrt{a + bx + cx^2}. \quad (3.5)$$

При $a < 0$ та $4ac - b^2 < 0$ інтеграли в правій частині (3.5) є (див. [17] (2.261) та (2.266))

$$\int \frac{dx}{X^{1/2}} = \frac{-1}{(-c)^{1/2}} \arcsin \frac{2cx + b}{\sqrt{b^2 - 4ac}},$$

$$\int \frac{dx}{xX^{1/2}} = \frac{1}{(-a)^{1/2}} \arcsin \frac{bx + 2a}{x\sqrt{b^2 - 4ac}}.$$

В результаті з умови квантування Бора-Зоммерфельда (3.2) одержимо наступне рівняння для енергії:

$$\alpha^{-1} \sqrt{2mD_0} \left(1 + \sqrt{-\frac{E_n}{D_0}} \right) = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

або

$$E_n = -D_0 \left[1 - \frac{\alpha \hbar}{\sqrt{2mD_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2. \quad (3.6)$$

В зв'язку з тим, що метод ВКБ дає правильну відповідь з точністю до членів $\sim \mathcal{O}(\hbar^2)$ у виразі (3.6) члени $\sim \mathcal{O}(\hbar^2)$ потрібно відкинути. Таким чином остаточна відповідь є

$$E_n = -D_0 \left[1 - \alpha \hbar \sqrt{\frac{2}{mD_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right], \quad 0 \leq n < (\alpha \hbar)^{-1} \sqrt{\frac{mD_0}{2}} - \frac{1}{2}.$$

Обмеження на n виникає з умови, що енергія не може бути додатньою, бо інакше зникає верхня точка повороту.

Результат співпадає з точним розв'язком, якщо в останньому знехтувати членом $\sim \hbar^2$.

3.3. При обчисленні інтеграла в умові Бора-Зоммерфельда зробимо заміну $z = \text{th}(\alpha x)$. Тоді інтеграл стане

$$I = \frac{2\sqrt{2m(E+U_0)}}{\alpha} \int_0^{z_0} \frac{dz}{1-z^2} \sqrt{1 - \frac{U_0}{E+U_0} z^2},$$

де

$$z_0 = \sqrt{\frac{E+U_0}{U_0}}.$$

Далі з допомогою тригонометричної заміни

$$\sin \varphi = \sqrt{\frac{U_0}{E + U_0}} z, \quad 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2},$$

інтеграл зводиться до

$$I = \frac{2(E + U_0)}{\alpha} \sqrt{2mU_0} \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi \cos^2 \varphi}{-E + (E + U_0) \cos^2 \varphi}.$$

Останній інтеграл легко береться якщо використати формулу (2.562.2) [17]

$$\int \frac{d\varphi \cos^2 \varphi}{a + b \cos^2 \varphi} = \frac{\varphi}{b} + \frac{\operatorname{sign} a}{b} \sqrt{\frac{a}{a+b}} \operatorname{arctg} \left(\sqrt{\frac{a+b}{a}} \operatorname{tg} \varphi \right), \quad \text{при } \frac{b}{a} > -1.$$

Таким чином умова Бора-Зоммерфельда дає:

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\alpha} \left(1 - \sqrt{-\frac{E_n}{U_0}} \right) = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

або

$$E_n = -U_0 \left[1 - \frac{\alpha \hbar}{\sqrt{2mU_0}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2.$$

Як відомо метод ВКБ дає правильну відповідь для енергії лише в першому порядку по \hbar . Тому член порядку \hbar^2 потрібно відкинути:

$$E_n = -U_0 + \alpha \hbar \sqrt{\frac{U_0}{2m}} (2n + 1), \quad n < \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt{2mU_0}}{\alpha \hbar} - 1 \right). \quad (3.7)$$

Звичайно, результат (3.7) впливає з точного розв'язку (задача 2.6), якщо знехтувати членами порядку $\mathcal{O}(\hbar^2)$.

3.4. При $x < 0$ хвильова функція $\psi_I(x) = 0$. З іншого боку, з неперервності хвильової функції та її похідної в точці $x = a$ випливає, що (див., наприклад, формулу (2.38) [7])

$$\psi_{II}(x) \sim \sin \left[\hbar^{-1} \int_x^a \sqrt{2m[E - U(y)]} dy + \frac{\pi}{4} \right].$$

Тому, для того, щоб хвильова функція була неперервна в точці $x = 0$, потрібно вимагати

$$\sin \left[\hbar^{-1} \int_0^a \sqrt{2m[E - U(y)]} dy + \frac{\pi}{4} \right] = 0.$$

Звідси одержуємо правило квантування

$$\int_0^a p(x) dx = \pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

3.5. Використовуючи результат попередньої задачі пишемо

$$\int_0^a \sqrt{2m(E_n - \lambda x)} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{3}{4} \right), \quad a = E/\lambda, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Обчислюючи інтеграл одержимо:

$$E_n = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{9\pi^2(\hbar\lambda)^2}{m} \left(n + \frac{3}{4} \right)^2}.$$

3.6. Нехтуючи зсувом точок повороту (які дають внесок в енергію другого порядку) пишемо умову квантування Бора-Зоммерфельда для зсунених рівнів:

$$\int_a^b \sqrt{2m[E_n^0 - U(x) + \delta E_n - \delta U(x)]} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Розкладаючи інтеграл до членів першого порядку по δU та δE_n одержимо:

$$\delta E_n = \frac{\int_a^b \delta U(x) [E_n^0 - U_0(x)]^{-1/2} dx}{\int_a^b [E_n^0 - U_0(x)]^{-1/2} dx}.$$

3.7. Використовуючи (3.4) отримаємо:

$$D = \exp \left[-\frac{\pi a}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{U_0}} (U_0 - E) \right].$$

Інтеграл береться з допомогою тригонометричної підстановки.

3.8. Використовуючи (3.4) отримаємо:

$$D = D_0 \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m} (W - E)^{3/2}}{3\hbar e \mathcal{E}} \right].$$

3.9. В області I потрібно відібрати розв'язок, який зникає при $x \rightarrow -\infty$,

$$\psi_I = \frac{A_1}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp \left[\hbar^{-1} \int_{-a}^x \tilde{p}(y) dy \right].$$

«Зшиваючи» цей розв'язок з загальним розв'язком із області II одержимо:

$$\begin{aligned} \psi_I &= \frac{A}{2\sqrt{\tilde{p}(x)}} \exp \left[\hbar^{-1} \int_{-a}^x \tilde{p}(y) dy \right], \\ \psi_{II} &= \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\hbar^{-1} \int_{-a}^x p(y) dy + \frac{\pi}{4} \right], \end{aligned}$$

де $\tilde{p}(x)$ та $p(x)$ визначені в (3.3).

З другого боку, в області II хвильову функцію можна записати як

$$\begin{aligned}\psi_{\text{II}} &= \frac{A'}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\hbar^{-1} \int_x^{-b} p(y) dy + \frac{\pi}{4} + \phi_2 \right] = \\ &= (-1)^n \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\hbar^{-1} \int_{-a}^x p(y) dy + \frac{\pi}{4} - \phi \right],\end{aligned}\quad (3.8)$$

де

$$\phi = \hbar^{-1} \int_{-a}^{-b} p(y) dy + \frac{\pi}{4} + \phi_2 = \pi n.$$

Виконуючи стандартну процедуру лінеаризації потенціала в околі точки $x = -b$ (див., наприклад, [7])

$$U(x) \approx U(-b) + F(b+x)$$

легко записати хвильову функцію (3.8) через функції Ейрі 1-го та 2-го роду (див. Математичні додатки А.1)

$$\begin{aligned}\psi_{\text{II}} &\approx \frac{A'}{\sqrt{p(x)}} \left[\cos \phi_2 \sin \left(\frac{2}{3} |\rho|^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) + \sin \phi_2 \cos \left(\frac{2}{3} |\rho|^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \right] \sim \\ &\sim \frac{A'}{\sqrt{p(x)}} [2 \cos \phi_2 \text{Ai}(\rho) + \sin \phi_2 \text{Bi}(\rho)], \quad \rho = (b+x) \left(\frac{2Fm}{\hbar^2} \right)^{1/3}.\end{aligned}\quad (3.9)$$

В зв'язку з тим, що потенціал $U(x)$ симетричний відносно заміни $x \rightarrow -x$, розв'язками рівняння Шрьодінгера в області III будуть парні або непарні функції:

$$\psi_{\text{III}} = \frac{A_3}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \left\{ \exp \left[\hbar^{-1} \int_0^x \tilde{p}(y) dy \right] \pm \exp \left[-\hbar^{-1} \int_0^x \tilde{p}(y) dy \right] \right\}. \quad (3.10)$$

Для того, щоб «зшити» розв'язки в околі точки $x = -b$ слід переписати (3.10) наступним чином

$$\psi_{\text{III}} = \frac{A_3}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} \left\{ R \exp \left[\hbar^{-1} \int_{-b}^x \tilde{p}(y) dy \right] \pm R^{-1} \exp \left[-\hbar^{-1} \int_{-b}^x \tilde{p}(y) dy \right] \right\},$$

де $R = \exp \left[-\hbar^{-1} \int_{-b}^0 \tilde{p}(y) dy \right]$. Звідси випливає, що в околі точки $x = -b$ хвильову функцію можна записати як

$$\begin{aligned}\psi_{\text{III}} &\approx \frac{A_3}{\sqrt{\tilde{p}(x)}} [R \exp \left(\frac{2}{3} \rho^{3/2} \right) \pm R^{-1} \exp \left(-\frac{2}{3} \rho^{3/2} \right)] \sim \\ &\sim R \text{Bi}(\rho) \pm R^{-1} \text{Ai}(\rho).\end{aligned}\quad (3.11)$$

Співставляючи (3.9) та (3.11) знайдемо фазу ϕ_2 :

$$\phi_2 = \pm \arctg \left(\frac{1}{2} R^2 \right). \quad (3.12)$$

Підставляючи цю фазу в умову Бора-Зоммерфельда (3.9) одержимо рівняння на енергію E . У випадку, коли $R = 0$, енергії для парного та непарного розв'язків співпадають

з енергією в одній з ям, $E_+ = E_- = E_0$. Явним чином зсув енергій $\Delta E_{\pm} = E_{\pm} - E_0$ можна одержати у випадку, коли $R \ll 1$. З цією метою вираз для $p(x)$ розкладемо в ряд по ΔE_{\pm} , а в виразі для фази (3.12) проведемо заміну E на E_0 . В результаті отримаємо:

$$\Delta E_{\pm} = \mp \frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^b \sqrt{2m(U(x) - E_0)} dx \right],$$

$$\omega = \frac{2\pi}{T}, \quad T = 2 \int_{-a}^{-b} \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m} [E^0 - U(x)]}}.$$

Розділ 4

Теорія представлень

1. Перехід від одного представлення до іншого відбувається з допомогою унітарного оператора \widehat{U} : хвильові функції перетворюються за правилом $\psi \rightarrow \psi' = \widehat{U}\psi$, а оператори $\widehat{F} \rightarrow \widehat{F}' = \widehat{U}\widehat{F}\widehat{U}^{-1}$.

2. Перехід від координатного представлення до імпульсного відбувається з допомогою інтегрального перетворення

$$\phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \exp\left(-\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right) \psi(\mathbf{x}). \quad (4.1)$$

Обернене перетворення (від імпульсного до координатного представлення) задається

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \exp\left(\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right) \phi(\mathbf{p}). \quad (4.2)$$

4.1 Задачі

4.1. У квантовій механіці рух потоку вільних частинок з імпульсом \mathbf{q} описується плоскою хвилею

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right).$$

Знайти плоску хвилю у імпульсному представленні.

4.2. Нормувати хвильову функцію

$$\psi(\mathbf{x}) = N \exp\left[i\frac{\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{x}}{\hbar} - \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{2a^2}\right]$$

і знайти її у імпульсному представленні.

4.3. В загальному випадку дію лінійного оператора \widehat{L} на хвильову функцію у координатному представленні можна представити як інтегральний оператор:

$$\psi'(\mathbf{x}) = \widehat{L}\psi(\mathbf{x}) = \int d^3x' G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}'). \quad (4.3)$$

Показати, що у імпульсному представленні цей оператор теж буде інтегральним оператором та знайти його ядро $g(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$.

4.4. Використовуючи результат попередньої задачі записати стаціонарне рівняння Шрьодінгера в імпульсному представленні.

4.5. Знайти в імпульсному представленні

(1) осциляторний потенціал $U(\mathbf{x}) = \frac{\kappa}{2}\mathbf{x}^2$,

(2) лінійно зростаючий потенціал $U(x) = \lambda x$?

4.6. Використовуючи результати задач 4.3 та 4.5(2) знайти точний розв'язок (енергетичний спектр та хвильові функції) для частинки, яка знаходиться у потенціалі

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & \text{при } x < 0, \\ \lambda x, & \text{при } x > 0. \end{cases}$$

Порівняти з результатом квазікласичного наближення (задача 3.5) для трьох нижніх рівнів.

4.7. Знайти дію операторів інверсії \hat{P} та зсуву \hat{T}_a (див. задачу 1.14) на хвильову функцію в імпульсному представленні.

4.8. Знайти оператори Гамільтона, координати та імпульса для лінійного гармонічного осцилятора в енергетичному представленні.

4.9. Перша модель ядерних взаємодій, що була розроблена Х. Юкава в 1934 р., виходила з того, що взаємодія між нуклонами (спільна назва для протона та нейтрона) зумовлена обміном між ними масивних частинок (π -мезонів). В результаті це приводить до такого потенціалу взаємодії між складовими ядра (потенціал Юкави)

$$U(r) = -g_{\pi NN}^2 \frac{e^{-kr}}{r},$$

де r — відстань між нуклонами, $g_{\pi NN}$ — константа взаємодії та k — константа пропорційна масі π -мезона. Знайти потенціал Юкави у імпульсному представленні.

4.10. Знайти імпульсний розподіл електрона в атомі водню в основному стані.

4.2 Відповіді та розв'язки задач

4.1. $\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x \exp\left(\frac{i(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q})$.

4.2. Записуючи умову нормування знайдемо $N = \left(\frac{1}{a^2\pi}\right)^{3/4}$. Використовуючи формулу (4.1) перейдемо до імпульсного представлення:

$$\phi(\mathbf{p}) = \left(\frac{1}{4a\hbar\pi^3}\right)^{3/4} \int d^3x \exp\left[\frac{i(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}}{\hbar} - \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{2a^2}\right].$$

Після інтегрування одержимо:

$$\phi(\mathbf{p}) = \left(\frac{a^2}{\hbar^2 \pi} \right)^{3/4} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}_0 - \frac{a^2}{2\hbar^2} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)^2 \right].$$

4.3. $g(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3x d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}$.

4.4. Приймаючи до уваги, що за визначенням (4.3) ядро оператора Гамільтона є

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{H}$$

і враховуючи результат задачі 4.3 знайдемо ядро для оператора Гамільтона в імпульсному представленні

$$\begin{aligned} g(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}'^2} + U(\mathbf{x}') \right] e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'} = \\ &= \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + u(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \end{aligned}$$

де

$$u(\mathbf{p}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} U(\mathbf{x}).$$

Тоді рівняння Шрьодінгера в імпульсному представленні буде:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Phi(\mathbf{p}) + \int d^3q u(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Phi(\mathbf{q}) \right] = E \Phi(\mathbf{p}).$$

Слід зауважити, що в загальному випадку оператор потенціальної енергії в імпульсному представленні стає інтегральним оператором.

4.5. (1) Використовуючи результати задачі 4.4 знайдемо дію осціляторного потенціала на хвильову функцію в імпульсному просторі:

$$\begin{aligned} \int u(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \phi(\mathbf{p}') d^3p' &= \frac{\kappa}{2} \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \int d^3x d^3p' e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}} x^2 \phi(\mathbf{p}') = \\ &= -\frac{\kappa}{2} \frac{\hbar^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{p}^2} \int d^3x d^3p' e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}} \phi(\mathbf{p}') = \\ &= -\frac{\kappa \hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{p}^2} \int d^3p' \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \phi(\mathbf{p}') = -\frac{\kappa \hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{p}^2} \phi(\mathbf{p}). \end{aligned}$$

Отже оператор осціляторного потенціалу в імпульсному просторі є оператором диференціювання:

$$-\frac{\kappa \hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{p}^2}.$$

(2) Аналогічно знаходимо оператор лінійно зростаючого потенціалу в імпульсному представленні: $i\lambda \hbar \frac{d}{dp}$.

4.6. Використовуючи результати задач 4.4 та 4.5(2) рівняння Шрьодінгера можна записати у наступному вигляді:

$$\frac{d\phi}{\phi} = \frac{i}{\lambda\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} - E \right) dp. \quad (4.4)$$

Інтегруючи праву і ліву частини рівняння (4.4) одержимо:

$$\phi(p) = N \exp \left[\frac{i}{\hbar\lambda} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right) \right].$$

Виконуючи обернене Фур'є-перетворення знаходимо хвильову функцію у координатному представленні

$$\begin{aligned} \psi(x) &\sim \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[p \left(x - \frac{E}{\lambda} \right) + \frac{p^3}{6\lambda m} \right] \right\} \sim \\ &\sim \int_0^{\infty} dz \cos \left(\rho z + \frac{z^3}{3} \right) \sim \text{Ai}(\rho), \end{aligned}$$

де $\rho = \sqrt[3]{\frac{2m\lambda}{\hbar^2}} \left(x - \frac{E}{\lambda} \right)$ та $z = \frac{p}{\sqrt[3]{2m\lambda\hbar}}$.

Тепер треба задовольнити умові $\psi(\rho)|_{x=0} = 0$. Це дає умову квантування енергії

$$E_n = -\rho_{n+1} \sqrt[3]{\frac{(\hbar\lambda)^2}{2m}} \equiv \varepsilon_n \sqrt[3]{\frac{(\hbar\lambda)^2}{2m}}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

де ρ_n — значення аргументу при якому функція Ейрі дорівнює нулю.

Порівняємо результати точного розрахунку з розрахунком у ВКБ наближенні:

n	ε_n	$\varepsilon_n^{\text{ВКБ}}$	$\Delta E_n/E_n$ (%)
1	2,3381	2,3203	8
2	4,0879	4,0818	0,15
3	5,5205	5,5172	0,08

4.7. $\hat{P}\Phi(\mathbf{p}) = \Phi(-\mathbf{p})$, $\hat{T}_a\Phi(\mathbf{p}) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}\Phi(\mathbf{p})$.

4.8. В енергетичному представленні оператор Гамільтона представляє собою діагональну матрицю, по діагоналі якої стоять власні значення енергії

$$\langle n' | \hat{H} | n \rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\hbar\omega & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2}\hbar\omega & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

а оператором координати є матриця

$$\langle n' | \hat{x} | n \rangle = \int dx \psi_{n'}(x) x \psi_n(x), \quad (4.5)$$

яку було знайдено в задачі 2.11, $\langle n' | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1})$, або

$$\langle n' | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

Для того, щоб знайти матрицю для оператора імпульсу скористаємось комутаційним співвідношенням між операторами координати та імпульсу, яке в даному разі виглядає як

$$\sum_{n''} \langle n' | \hat{p} | n'' \rangle \langle n'' | \hat{x} | n \rangle - \sum_{n''} \langle n' | \hat{x} | n'' \rangle \langle n'' | \hat{p} | n \rangle = -i\hbar\delta_{n'n}. \quad (4.7)$$

Виходячи із структури співвідношення (4.7) зауважимо, що

1. матричні елементи матриці $\langle n' | \hat{p} | n \rangle$ чисто уявні,
2. матриця для оператора імпульсу містить ненульові елементи лише над і під головною діагоналлю.

В зв'язку з властивістю (1) для того, щоб матриця була ермітовою, потрібно вимагати її антисиметрію відносно взаємної заміни стрічок та стовпчиків. Після цих зауважень матриця $\langle n' | \hat{p} | n \rangle$ повинна мати наступну структуру

$$\langle n' | \hat{p} | n \rangle = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & a_1 & 0 & 0 & \cdots \\ -a_1 & 0 & a_2 & 0 & \cdots \\ 0 & -a_2 & 0 & a_3 & \cdots \\ 0 & 0 & -a_3 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

де a_n дійсні числа. Їх легко знайти з комутаційного співвідношення (4.7), $a_n = \sqrt{n}$. Остаточно маємо наступний вираз для матриці імпульсу:

$$\langle n' | \hat{p} | n \rangle = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

4.9. Використовуючи, що в нашому випадку ядро перетворення (див. задачу 4.4) є $G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')U(r)$, одержимо

$$\begin{aligned} V(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= V(\mathbf{Q}) = \frac{g_{\pi NN}^2}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x r^{-1} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{Q} \cdot \mathbf{x} - kr\right) = \\ &= -\frac{g_{\pi NN}^2}{2\pi^2\hbar(\hbar^2k^2 + Q^2)}, \quad \text{де } \mathbf{Q} = \mathbf{p} - \mathbf{q}. \end{aligned}$$

4.10. Хвильова функція основного стану атома водню є (див. передмову до розд. 2)

$$\psi_{1s}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\rho/2}.$$

Імпульсний розподіл визначається як

$$dw(\mathbf{p}) = |\phi_{1s}(\mathbf{p})|^2 d^3p,$$

де $\phi_{1s}(\mathbf{p})$ — хвильова функція у імпульсному представленні:

$$\phi_{1s}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \psi_{1s}(\mathbf{x}) = \left(\frac{a_0}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{8}}{\pi} \left[1 + \left(\frac{a_0 p}{\hbar}\right)^2\right]^{-2}.$$

Розділ 5

Квантові рівняння руху

1. У представленні Шрьодінгера хвильова функція залежить від часу, а оператори координати та імпульсу не залежать від часу. Розвиток у часі квантової системи описується оператором еволюції $\hat{S}(t) = \exp\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)$:

$$\Psi_{\text{III}}(\mathbf{x}, t) = \hat{S}(t)\Psi_{\text{III}}(\mathbf{x}, 0),$$

де \hat{H} — оператор Гамільтона. Повна похідна від деякого оператора \hat{F} по часу визначається як

$$\frac{d\hat{F}_{\text{III}}}{dt} = \frac{\partial\hat{F}_{\text{III}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_{\text{III}}].$$

2. У представленні Гайзенберга хвильова функція не залежить від часу, проте оператори координати та імпульсу залежать від часу. Хвильова функція у представленні Гайзенберга співпадає з хвильовою функцією у представленні Шрьодінгера в момент часу $t = 0$:

$$\Psi_{\text{I}}(\mathbf{x}) = \Psi_{\text{III}}(\mathbf{x}, 0) = \hat{S}^{-1}(t)\Psi_{\text{III}}(\mathbf{x}, t).$$

Рівняння руху:

$$\frac{d\hat{F}_{\text{I}}}{dt} = \frac{\partial\hat{F}_{\text{I}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_{\text{I}}].$$

3. Представлення взаємодії використовують у випадку, коли оператор Гамільтоніан можна розбити на дві частини $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, де \hat{H}_0 оператор Гамільтона для невзаємодіючої квантової частинки, а \hat{H}_1 — взаємодія. При цьому хвильова функція наступним чином визначається через хвильову функцію $\Psi_{\text{III}}(\mathbf{x}, t)$

$$\Psi_{\text{вз}}(\mathbf{x}, t) = \hat{U}(t)\Psi_{\text{III}}(\mathbf{x}, 0), \quad \text{де} \quad \hat{U}(t) = \exp\left(i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}\right).$$

Рівняння руху мають вигляд

$$\frac{d\hat{F}_{\text{вз}}}{dt} = \frac{\partial\hat{F}_{\text{вз}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{\text{вз}}, \hat{F}_{\text{вз}}],$$

де $\hat{H}_{\text{вз}} = \hat{U}(t)\hat{H}_1\hat{U}^{-1}(t)$ — оператор взаємодії у представленні взаємодії.

5.1 Задачі

5.1. Показати, що для добутку двох операторів виконується звичайне правило диференціювання

$$\frac{d\widehat{F}_1\widehat{F}_2}{dt} = \frac{d\widehat{F}_1}{dt}\widehat{F}_2 + \widehat{F}_1\frac{d\widehat{F}_2}{dt}.$$

5.2. Знайти оператори координати та імпульсу для вільної кванової частинки у представленні Гайзенберга.

5.3. Знайти оператори координати та імпульсу у представленні Гайзенберга для кванової частинки, що рухається у полі

(1) $U(\mathbf{x}) = -\mathbf{F} \cdot \mathbf{x};$

(2) гармонічного осцилятора $U(\mathbf{x}) = \frac{\kappa}{2}\mathbf{x}^2.$

5.4. Чому дорівнює середнє значення оператора, який явним чином не залежить від часу, по стаціонарним станам дискретного спектру?

5.5. Як розвивається у часі квантовий стан, який в момент часу $t = 0$ є суперпозицією декількох квантових станів з певним значенням енергії

$$\Psi(\mathbf{x}, t = 0) = \sum_{i=1}^N c_i \psi_i(\mathbf{x}), \quad \widehat{H}\psi_i(\mathbf{x}) = E_i \psi_i(\mathbf{x})?$$

Розглянути випадок, коли $N = 2$. Показати, що такий квантовий стан змінюється періодично та знайти період осциляцій квантового стану.

5.6. Частинка знаходиться в безмежноглибокій потенціальній ямі завширшки a (див. рис. 2.1). В момент часу $t = 0$ її квантовий стан описується хвильовою функцією $\Psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a - x)$, при $0 \leq x \leq a$ і $\Psi(x, t = 0) = 0$ в інших випадках. Знайти хвильову функцію у довільний час t .

5.7. Знайти оператор взаємодії в представленні взаємодії, якщо $\widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, а

(1) $\widehat{H}_1 = -\mathbf{F} \cdot \mathbf{x};$

(2) $\widehat{H}_1 = \frac{\kappa}{2}\mathbf{x}^2.$

5.2 Відповіді та розв'язки задач

5.1. По визначенню повної похідної від оператора по часу:

$$\begin{aligned}\frac{d\widehat{F}_1\widehat{F}_2}{dt} &= \frac{\partial\widehat{F}_1}{\partial t}\widehat{F}_2 + \widehat{F}_1\frac{\partial\widehat{F}_2}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{F}_1\widehat{F}_2] = \\ &= \frac{\partial\widehat{F}_1}{\partial t}\widehat{F}_2 + \widehat{F}_1\frac{\partial\widehat{F}_2}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left(\widehat{H}\widehat{F}_1\widehat{F}_2 - \widehat{F}_1\widehat{H}\widehat{F}_2 + \widehat{F}_1\widehat{H}\widehat{F}_2 + \widehat{F}_1\widehat{F}_2\widehat{H}\right) = \\ &= \frac{\partial\widehat{F}_1}{\partial t}\widehat{F}_2 + \widehat{F}_1\frac{\partial\widehat{F}_2}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left([\widehat{H}, \widehat{F}_1]\widehat{F}_2 + \widehat{F}_1[\widehat{H}, \widehat{F}_2]\right) = \frac{d\widehat{F}_1}{dt}\widehat{F}_2 + \widehat{F}_1\frac{d\widehat{F}_2}{dt}.\end{aligned}$$

5.2. За означенням оператори в представленні Гайзенберга наступним чином виражаються через відповідні оператори в представленні Шрьодінгера:

$$\widehat{F}_\Gamma(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}\widehat{F}_{\text{III}}e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}.$$

Тому використовуючи результат задачі 1.6 маємо:

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{x}}_\Gamma(t) &= \widehat{\mathbf{x}}_{\text{III}} + \frac{i}{\hbar}t[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{x}}_{\text{III}}] + \frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^2[\widehat{H}, [\widehat{H}, \widehat{\mathbf{x}}_{\text{III}}]] + \dots, \\ \widehat{\mathbf{p}}_\Gamma(t) &= \widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}} + \frac{i}{\hbar}t[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}}] + \frac{1}{2!}\left(\frac{i}{\hbar}t\right)^2[\widehat{H}, [\widehat{H}, \widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}}]] + \dots,\end{aligned}\tag{5.1}$$

де $\widehat{\mathbf{x}}_{\text{III}} = \mathbf{x}$ і $\widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}$. Враховуючи те, що для вільної частинки відповідні комутатори є

$$[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{x}}_{\text{III}}] = \frac{\hbar\widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}}}{im}, \quad [\widehat{H}, [\widehat{H}, \widehat{\mathbf{x}}_{\text{III}}]] = 0, \quad [\widehat{H}, \widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}}] = 0,$$

одержимо

$$\widehat{\mathbf{p}}_\Gamma(t) = \widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}}, \quad \widehat{\mathbf{x}}_\Gamma(t) = \widehat{\mathbf{x}}_{\text{III}} + \frac{\widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}}}{m}t,$$

5.3. Скористаємось формулою (5.1) і знайдемо відповідні комутатори.

(1) Відмінними від нуля будуть наступні комутатори:

$$[\widehat{H}, \mathbf{x}] = \frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m}, \quad [\widehat{H}, [\widehat{H}, \mathbf{x}]] = \frac{\mathbf{F}t}{m}, \quad [\widehat{H}, \widehat{\mathbf{p}}] = \mathbf{F}t.$$

Тоді $\widehat{\mathbf{x}}_\Gamma(t) = \widehat{\mathbf{x}}_{\text{III}} + \frac{\widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}}}{m}t + \frac{\mathbf{F}t^2}{2m}$, $\widehat{\mathbf{p}}_\Gamma(t) = \widehat{\mathbf{p}}_{\text{III}} + \mathbf{F}t$. Аналогія з рівноприскореним рухом частинки в класичній механіці очевидна.

(2) Знайдемо комутатори:

$$\begin{aligned}[\widehat{H}, \mathbf{x}] &= \frac{\hbar}{im}\widehat{\mathbf{p}}, \quad [\widehat{H}, [\widehat{H}, \mathbf{x}]] = \hbar^2\omega^2\mathbf{x}, \quad \left[\widehat{H}, [\widehat{H}, [\widehat{H}, \mathbf{x}]]\right] = \frac{\hbar^3\omega^2}{im}\widehat{\mathbf{p}}, \quad \dots \\ [\widehat{H}, \widehat{\mathbf{p}}] &= i\hbar m\omega^2\mathbf{x}, \quad [\widehat{H}, [\widehat{H}, \widehat{\mathbf{p}}]] = \hbar^2\omega^2\widehat{\mathbf{p}}, \quad \left[[\widehat{H}, [\widehat{H}, \nabla]]\right] = i\hbar^3\omega^4m\mathbf{x}, \quad \dots\end{aligned}$$

$$\text{Тоді } \hat{\mathbf{x}}_{\Gamma}(t) = \hat{\mathbf{x}}_{\text{III}} \cos \omega t + \frac{\hat{\mathbf{p}}_{\text{III}}}{m\omega} \sin \omega t, \quad \hat{\mathbf{p}}_{\Gamma}(t) = \hat{\mathbf{p}}_{\text{III}} \cos \omega t - \hat{\mathbf{x}}_{\text{III}} m\omega \sin \omega t.$$

5.4. Нулю.

$$\text{5.5. } \Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N c_i e^{-i\frac{E_i t}{\hbar}} \psi_i(\mathbf{x}),$$

$$T = \frac{\hbar}{2\pi|\Delta E|}, \text{ де } \Delta E = E_1 - E_2.$$

5.6. В загальному випадку хвильова функція є наступною суперпозицією станів $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \frac{\pi n x}{a}$ частинки в безмежноглибокій потенціальній ямі (див. задачу 2.1):

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n(x), \quad \text{де} \quad E_n = \frac{(\hbar\pi n)^2}{2ma^2}.$$

Коефіцієнти c_n визначається інтегралом перекриття функцій $\Psi(x, 0)$ та $\psi_n(x)$:

$$c_n = \int_0^a dx \Psi(x, 0) \psi_n(x) = 2 \frac{\sqrt{15}}{a^3} \int_0^a dx x(a-x) \sin \frac{\pi n x}{a} =$$

$$= \begin{cases} 0, & n \text{ парне,} \\ \frac{8\sqrt{15}}{(\pi n)^3}, & n \text{ непарне.} \end{cases}$$

$$\text{Остаточно маємо } \Psi(x, t) = \frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-i\frac{E_{2k+1} t}{\hbar}}}{(2k+1)^3} \psi_{2k+1}(x).$$

5.7. Використовуючи результат задачі 1.6 маємо:

$$V_{\text{вз}}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} t \hat{H}_0\right) \hat{H}_1 \exp\left(-i\frac{i}{\hbar} t \hat{H}_0\right) = \hat{H}_1 + \frac{i}{\hbar} t [\hat{H}_0, \hat{H}_1] + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} t\right)^2 [\hat{H}_0, [\hat{H}_0, \hat{H}_1]] + \dots$$

Знайдемо необхідні комутатори:

$$(1) \frac{i}{\hbar} t [\hat{H}_0, \hat{H}_1] = -t \frac{\mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{p}}_{\text{III}}}{m}, \quad \left(\frac{i}{\hbar} t\right)^2 [\hat{H}_0, [\hat{H}_0, \hat{H}_1]] = 0. \text{ Тоді}$$

$$\hat{V}_{\text{вз}}(t) = -\mathbf{F} \cdot \left(\hat{\mathbf{x}}_{\text{III}} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_{\text{III}}}{m} t\right) = -\mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}_{\Gamma}(t).$$

$$(2) \frac{i}{\hbar} t [\hat{H}_0, \hat{H}_1] = \frac{\kappa}{2} \left(2\mathbf{x}_{\text{III}} \cdot \hat{\mathbf{p}}_{\text{III}} - 3\frac{i\hbar t}{m}\right), \quad \left(\frac{i}{\hbar} t\right)^2 [\hat{H}_0, [\hat{H}_0, \hat{H}_1]] = \kappa \frac{\hat{\mathbf{p}}_{\text{III}}^2}{m^2} t^2,$$

$$\left(\frac{i}{\hbar} t\right)^3 [\hat{H}_0, [\hat{H}_0, [\hat{H}_0, \hat{H}_1]]] = 0. \text{ Тоді}$$

$$\hat{H}_{\text{вз}}(t) = \frac{\kappa}{2} \left(\hat{\mathbf{x}}_{\text{III}} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_{\text{III}}}{m} t\right)^2 = \frac{\kappa}{2} \hat{\mathbf{x}}_{\Gamma}^2(t).$$

Тут $\mathbf{x}_{\Gamma}(t)$ — оператор координати вільної частинки в представленні Гайзенберга (див. задачу 5.2.), а $\hat{\mathbf{x}}_{\text{III}}$ і $\hat{\mathbf{p}}_{\text{III}}$ — оператори координати та імпульсу в представленні Шрьодінгера.

Розділ 6

Теорія кутового моменту. Спін частинки

1. Компоненти оператора моменту кількості руху \hat{J}_1 , \hat{J}_2 та \hat{J}_3 задовольняють наступним комутаційним співвідношенням

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{J}_k,$$

де ϵ_{ijk} — повністю антисиметричний тензор. Звідси випливає, що одночасно можна виміряти лише квадрат моменту кількості руху $\hat{\mathbf{J}}^2$ та одну з проєкцій квадрат моменту кількості руху.

2. Надалі будемо вважати, що відомі власні значення $\hat{\mathbf{J}}^2$ та \hat{J}_z :

$$\hat{\mathbf{J}}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle, \quad \hat{J}_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle.$$

Числа j та m можуть бути лише цілими або півцілими. При фіксованому j число m приймає одне з $2j+1$ значень, таких що

$$-j \leq m \leq j.$$

3. У jm -представленні оператори проєкцій моменту кількості руху представляють собою матриці розмірності $(2j+1) \times (2j+1)$. Їх ненульові елементи наступні:

$$\begin{aligned} \langle j(m+1)|\hat{J}_x|jm\rangle &= \langle jm|\hat{J}_x|j(m+1)\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \\ \langle j(m+1)|\hat{J}_y|jm\rangle &= -\langle jm|\hat{J}_y|j(m+1)\rangle = -i\frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \\ \langle jm|\hat{J}_z|jm\rangle &= \hbar m. \end{aligned} \tag{6.1}$$

Хвильова функція представляє матрицю-стовбчик з $2j+1$ елементів.

4. У випадку $j = \frac{1}{2}$ оператор моменту кількості руху, зокрема, представляє спіні електрона. Оператор спіна електрона $\hat{\mathbf{s}}$ записується через матриці розмірності 2×2 :

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z),$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Матриці σ_x , σ_y та σ_z називають матрицями Паулі.

5. Важлива властивість матриць Паулі:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \sigma_k.$$

6.1 Задачі

6.1. Знайти середні значення наступних операторів по функціям $|jm\rangle$:

(1) $\langle \hat{J}_x \rangle, \langle \hat{J}_y \rangle;$

(2) $\langle \hat{J}_x \hat{J}_y \rangle, \langle \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle;$

(3) $\langle \hat{J}_x^2 \rangle, \langle \hat{J}_y^2 \rangle.$

6.2. Знайти власні функції та власні значення операторів \hat{s}_x та \hat{s}_y .

6.3. Знайти явний вигляд операторів

(1) $|\boldsymbol{\sigma}|;$

(2) $|\sigma_i|;$

(3) $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\sigma}).$

6.4. Для матриць Паулі знайти явний вигляд підвищуючого та понижаючого операторів $\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$. Як вони діють на власну функцію оператора σ_z ? Чому дорівнюють оператори σ_{\pm}^2 ?

6.5. Знайти середні значення операторів проєкції спіна електрона на вісі x , y та z по хвильовій функції

$$\chi = C \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

6.6. Спростити вираз $\hat{F} = \exp(i\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, де \mathbf{b} звичайний вектор.

6.7. Оператор повного спіна атома гелія задається оператором $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}(1) + \hat{\mathbf{s}}(2)$, де $\hat{\mathbf{s}}(1)$ та $\hat{\mathbf{s}}(2)$ — оператори спіна першого та другого електронів. Цей оператор діє на

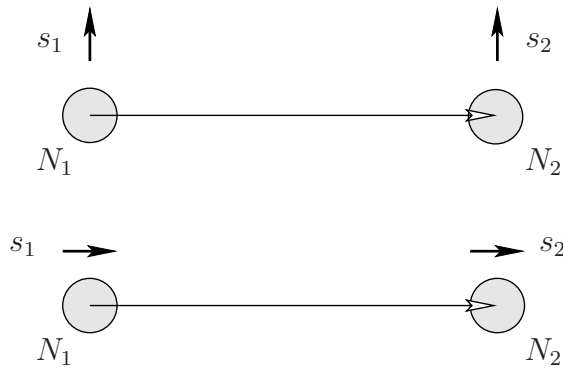


Рис. 6.1: До задачі 6.11

спінову хвильову функцію $\Psi = \chi_1\chi_2$, де χ_1 та χ_2 — спінові хвильові функції першого та другого електронів. Показати, що хвильові функції

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2,$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right],$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right].$$

(1) взаємно ортонормовані,

(2) є власними функціями операторів $\widehat{\mathbf{S}}^2$ та \widehat{S}_z , знайти власні значення операторів $\widehat{\mathbf{S}}^2$ та \widehat{S}_z при дії їх на функції Ψ_1 , Ψ_2 , Ψ_3 та Ψ_4 .

6.8. В jm представлені записати оператор моменту кількості руху для випадку $j = \frac{3}{2}$.

6.9. Спростити вираз $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha\widehat{J}_i\right)\widehat{J}_k\exp\left(\frac{i}{\hbar}\alpha\widehat{J}_i\right)$. Окремо розглянути випадки, коли $i = k$ та $i \neq k$.

Вказівка: Скористатися результатом задачі 1.6.

6.10. Найбільш загальний вигляд хвильової функції атома гелію в основному стані є функція трьох змінних, $\psi(x, r_1, r_2)$, де \mathbf{r}_1 та \mathbf{r}_2 — координати електронів, а $x = \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$, $r_1 = |\mathbf{r}_1|$, $r_2 = |\mathbf{r}_2|$. Очевидно, що ця функція не є власною функцією операторів квадрата орбітального моменту окремих електронів, \mathcal{L}_1^2 та \mathcal{L}_2^2 . Показати, що $\psi(x, r_1, r_2)$ є власною функцією квадрата оператора повного орбітального моменту \mathbf{L}^2 . Чому дорівнює L ?

6.11. Відомо, що ядерний потенціали (енергія взаємодії між двома нуклонами) не є центральним, зокрема він включає тензорний потенціал

$$V_T = \widehat{S}_{12}(\mathbf{r})v_T(r),$$

де

$$\widehat{S}_{12}(\mathbf{r}) = 3 \frac{(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^2} - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$$

— тензорний оператор, $\boldsymbol{\sigma}_1$ та $\boldsymbol{\sigma}_2$ — матриці Паулі для першого та другого нуклонів, а $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Розглянути випадки, коли спіни обох нуклонів (1) перпендикулярні та (2) паралельні до \mathbf{r} (рис. 6.1) і знайти чому дорівнює середнє значення тензорного оператора в залежності від взаємної орієнтації сумарного спіна нуклонів та вектора \mathbf{r} ?

6.2 Відповіді та розв'язки задач

6.1.

(1) $\langle \widehat{J}_x \rangle = \langle \widehat{J}_y \rangle = 0$, це впливає безпосередньо з виразів для відповідних матричних елементів (6.1);

(2) Розглянемо перший матричний елемент:

$$\langle \widehat{J}_x \widehat{J}_y \rangle \equiv \langle jm | \widehat{J}_x \widehat{J}_y | jm \rangle = \sum_{m'} \langle jm | \widehat{J}_x | jm' \rangle \langle jm' | \widehat{J}_y | jm \rangle.$$

Використовуючи формули (6.1) одержимо:

$$\begin{aligned} \langle \widehat{J}_x \widehat{J}_y \rangle &= \langle jm | \widehat{J}_x | j(m+1) \rangle \langle j(m+1) | \widehat{J}_y | jm \rangle + \langle jm | \widehat{J}_x | j(m-1) \rangle \langle j(m-1) | \widehat{J}_y | jm \rangle = \\ &= \frac{i}{2} \hbar^2 m, \end{aligned}$$

$$\langle \widehat{J}_y \widehat{J}_x \rangle = \langle \widehat{J}_x \widehat{J}_y - i \hbar \widehat{J}_z \rangle = -\frac{i}{2} \hbar^2 m.$$

$$(3) \langle \widehat{J}_x^2 \rangle = \langle \widehat{J}_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2].$$

6.2. Для оператора \widehat{s}_x власні значення дорівнюють $\frac{\hbar}{2}$ та $-\frac{\hbar}{2}$, які відповідають власним функціям

$$\chi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{та} \quad \chi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Для оператора \widehat{s}_y власні значення теж дорівнюють $\frac{\hbar}{2}$ та $-\frac{\hbar}{2}$, які відповідають власним функціям

$$\chi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{та} \quad \chi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

6.3.

(1) За означенням $|\boldsymbol{\sigma}| = \sqrt{\boldsymbol{\sigma}^2}$, тому $|\boldsymbol{\sigma}| = \sqrt{3}$.

(2) $|\sigma_i| = \sqrt{\sigma_i^2} = 1$.

(3) В зв'язку з тим, що $[\sigma_i, \sigma_j] \neq 0$ векторний добуток $\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\sigma} \neq 0$. Розписуючи цей векторний добуток одержимо $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\sigma}) = 6i$.

$$6.4. \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\sigma_+\chi_+ = 0; \quad \sigma_+\chi_- = \chi_+, \quad \sigma_-\chi_+ = \chi_+, \quad \sigma_-\chi_- = 0;$$

$$\sigma_{\pm}^2 = 0.$$

6.5. З умови нормування одержимо $C = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Тоді:

$$\langle \hat{s}_x \rangle = \frac{2\sqrt{2}}{3}, \quad \langle \hat{s}_y \rangle = 0, \quad \langle \hat{s}_z \rangle = -\frac{1}{3}.$$

6.6. За означенням

$$\hat{F} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})^n,$$

беручи до уваги те, що при парному n вираз $(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})^n = b^n$ одержимо:

$$\begin{aligned} \hat{F} &= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m)!} b^{2m} + i \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1}}{(2m+1)!} b^{2m+1} \right) \frac{\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{|\mathbf{b}|} = \\ &= \cos |\mathbf{b}| + i \frac{\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{|\mathbf{b}|} \sin |\mathbf{b}|. \end{aligned}$$

6.7.

(1) Показується прямим обчисленням скалярних добутків $\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle$.

(2) Запишемо оператор $\hat{\mathbf{S}}^2$ через підвищуючі та понижаючі оператори Паулі для першого та другого електронів $\sigma_{\pm}(1)$ і $\sigma_{\pm}(2)$ (див. задачу 6.4):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^2 &= [\hat{\mathbf{s}}(1) + \hat{\mathbf{s}}(2)]^2 = \frac{\hbar^2}{4} [\boldsymbol{\sigma}(1) + \boldsymbol{\sigma}(2)]^2 = \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [3 + 2\sigma_+(1)\sigma_-(2) + 2\sigma_-(1)\sigma_+(2) + \sigma_z(1)\sigma_z(2)] \end{aligned}$$

Дія операторів $\sigma_{\pm}(i)$ та $\sigma_z(i)$ на спінові хвильові функції електронів визначена в розв'язку задачі 6.4 і ми легко знаходимо:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^2 \Psi_{1,2,3} &= 2\hbar^2 \Psi_{1,2,3}, \quad \hat{\mathbf{S}}^2 \Psi_4 = 0, \\ \hat{S}_z \Psi_1 &= \hbar \Psi_1, \quad \hat{S}_z \Psi_2 = -\hbar \Psi_1, \quad \hat{S}_z \Psi_{3,4} = 0. \end{aligned}$$

6.8. Користуючись (6.1) одержимо:

$$\begin{aligned} j_1 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad j_2 = -\frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ -\sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \\ j_3 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

6.9. \hat{J}_k , при $i = k$; $\cos \alpha \hat{J}_k + \sin \alpha \sum_n \epsilon_{nik} \hat{J}_n$, при $i \neq k$.

6.10. За означенням $\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\boldsymbol{\ell}}_1 + \widehat{\boldsymbol{\ell}}_2$ і тому дія оператора $\widehat{\mathbf{L}}$ на $\psi(x, r_1, r_2)$ є

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{L}}\psi(x, r_1, r_2) &= \frac{\hbar}{i} \left(\mathbf{r}_1 \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{r}_2 \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} \right) \psi(x, r_1, r_2) = \\ &= \frac{\hbar}{i} (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1) \frac{\partial \psi(x, r_1, r_2)}{\partial x} = 0.\end{aligned}$$

Звідси очевидно, що $\psi(x, r_1, r_2)$ є власною функцією $\widehat{\mathbf{L}}^2$ з власним значення 0.

6.11. У випадку (1) $\langle \widehat{S}_{12}(\mathbf{r}) \rangle = 2$, у випадку (2) $\langle \widehat{S}_{12}(\mathbf{r}) \rangle = -1$.

Розділ 7

Рух в центральному полі

1. Виходячи із симетрії задачі зручно замість декартових координат (x, y, z) використовувати сферичні координати (r, θ, φ) . Гамільтоніан частинки, яка знаходиться в центральному полі $U(r)$, комутує як з компонентами оператора *орбітального моменту* $\hat{\mathbf{L}}$, так і з оператором квадрата орбітального моменту $\hat{\mathbf{L}}^2$. Тому можна говорити про стани, які мають певне значення енергії, квадрата орбітального моменту $\hbar^2\ell(\ell+1)$ та z -проеції орбітального моменту $\hbar m$. Квантові числа ℓ і m називають *орбітальним* та *магнітним* квантовими числами. В рівнянні Шрьодінгера радіальна, r , і кутові, θ та φ , змінні розділяються і хвильова функція є

$$\psi_{\ell m}(\theta, \varphi, r) = Y_{\ell m}(\theta, \varphi)r^{-1}R_{\ell}(r),$$

де множник r^{-1} винесено з радіальної хвильової функції для зручності.

2. В загальному випадку енергетичні рівні залежать від орбітального квантового числа ℓ , а по магнітному квантовому числу m , як це впливає з симетрії гамільтоніана, відбувається виродження.

3. Радіальна хвильова функція $R_{\ell}(r)$ задовольняє рівнянню, яке має вигляд одностороннього рівняння Шрьодінгера на півосі $r \in (0, \infty)$, з ефективним потенціалом, який включає суму потенціала $U(r)$ та обертальну енергію

$$-\frac{\hbar^2}{2m}R_{\ell}''(r) + \left[\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2r^2m} + U(r) \right] R_{\ell}(r) = ER_{\ell}(r). \quad (7.1)$$

Для того щоб радіальна хвильова функція була регулярною в точці $r = 0$ на неї треба наложити умову $R_{\ell}(0) = 0$.

4. Кутова частина хвильової функції $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ є власною функцією операторів $\hat{\mathbf{L}}^2$ та \hat{L}_z :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 Y_{\ell m}(\theta, \varphi) &= \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \\ \hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta, \varphi) &= \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \end{aligned}$$

причому $\ell = 0, 1, 2, \dots, m = -\ell, (-\ell+1), \dots, (\ell-1), \ell$. Функції $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ називають *сферичними функціями*. Вони виражаються через приєднані поліноми Лежандра $P_{\ell}^m(\cos \theta)$: при $m \geq 0$

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-1)!}{4\pi(\ell+m)!}} P_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

при $m < 0$

$$Y_{\ell-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{\ell m}(\theta, \varphi).$$

Сферичні функції нормовані умовою

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell' m'}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \delta_{m m'} \delta_{\ell \ell'}.$$

5. Радіальна хвильова функція атома водня для станів з головним квантовим числом $n \leq 3$ є:

$$\begin{aligned} R_{1s}(r) &= \frac{2\rho}{\sqrt{a_0}} e^{-\rho}, \\ R_{2s}(r) &= \frac{\rho}{\sqrt{2a_0}} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\frac{1}{2}\rho}, \quad R_{2p}(r) = \frac{\rho^2}{2\sqrt{6a_0}} e^{-\frac{1}{2}\rho}, \\ R_{3s}(r) &= \frac{2\rho}{3\sqrt{3a_0}} \left(1 - \frac{2\rho}{3} + \frac{2\rho^2}{27}\right) e^{-\frac{1}{3}\rho}, \quad R_{3p}(r) = \frac{8\rho^2}{27\sqrt{6a_0}} \left(1 - \frac{\rho}{6}\right) e^{-\frac{1}{3}\rho}, \\ R_{3d}(r) &= \frac{4\rho^3}{81\sqrt{30a_0}} e^{-\frac{1}{3}\rho}, \end{aligned} \tag{7.2}$$

де введено безрозмірну змінну $\rho = \frac{r}{a_0}$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{Mee^2}$ — радіус Бора. Хвильові функції нормовані умовою

$$\int_0^{\infty} dr R_{n\ell}^2(r) = 1.$$

7.1 Задачі

7.1. Визначити поведінку радіальної хвильової функції $R_{\ell}(r)$ при $r \rightarrow 0$ вважаючи, що при цьому потенціал $U(r)$ скінчений, або зростає не швидше, ніж $r^{-2+\varepsilon}$, де ε любе число більше нуля.

7.2. Знайти рівні енергії та відповідні хвильові функції тривимірного осцилятора. Задачу розв'язати в декартових та сферичних координатах. Чому дорівнює парність станів. Знайти ступень виродженості окремого енергетичного рівня.

7.3. Розглянути класифікацію станів по квантовим числам n, ℓ та парності P найнижчих п'яти енергетичних рівнів для частинки, яка знаходиться в тривимірній осциляторній ямі.

7.4. Знайти енергетичний спектр для частинки, яка знаходиться в потенціалі

$$U(r) = \frac{A}{r^2} + \frac{\kappa}{2} r^2.$$

Вказівка: Скористатися розв'язком для осциляторного потенціала у сферичних координатах.

7.5. Знайти енергетичний спектр та відповідні хвильові функції для частинки, яка знаходиться в сферичній ямі радіуса R з абсолютно твердою стінкою

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{при } r < R, \\ \infty, & \text{при } r \geq R. \end{cases}$$

У явному вигляді одержити енергетичний спектр для випадку, коли орбітальний момент $\ell = 0$.

7.6. Тривімірний гармонічний осцилятор знаходиться у зовнішньому постійному електричному полі напругою \mathcal{E} . Знайти енергетичний спектр осцилятора.

7.7. Знайти середнє значення потенціальної енергії атома водню в основному стані.

7.8. Визначити середню відстань електрона від ядра в атомі водню у станах $1S$, $2S$ та $2P$.

7.9. Знайти середньоквадратичний радіус атома водню у станах $1S$, $2S$ та $2P$.

7.10. Атом водню знаходиться в основному стані. Знайти потенціал, який створює атом на відстані r від центра атома. Розглянути випадки коли $r \ll a_0$ та $r \gg a_0$.

7.11. Дві частинки з різними масами взаємодіють між собою. Їх потенціал залежить від відстані між частинками $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$.

(1) Розділити рух центра мас та відносний рух частинок.

(2) Показати що перехід до нових змінних є канонічним перетворенням.

bf 7.12. Чому дорівнює відношення середньоквадратичних радіусів мюонія і атома водню в основному стані ($\frac{m_\mu}{m_e} \approx 207$).

7.2 Відповіді та розв'язки задач

7.1. При $r \rightarrow 0$ рівняння (7.1) стає

$$-R_\ell''(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R_\ell(r) = 0, \quad (7.3)$$

його розв'язок шукаємо у вигляді $R_\ell(r) \sim r^\nu$. Підставляючи цей вираз у рівняння (7.3) отримаємо, що $\nu_1 = \ell + 1$ та $\nu_2 = -\ell$. Другий розв'язок не задовольняє початковій умові $R_\ell(0) = 0$ і тому

$$R_\ell(r) \sim r^{\ell+1}.$$

7.2.

Декартові координати. Розділяючи змінні в стаціонарному рівнянні Шрьодінгера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{\kappa}{2} (x^2 + y^2 + z^2) \right] \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) = E\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$$

одержимо три незалежних одномірних осцилятора, які мають енергії

$$E_x = \hbar\omega \left(n_x + \frac{1}{2} \right), \quad E_y = \hbar\omega \left(n_y + \frac{1}{2} \right), \quad E_z = \hbar\omega \left(n_z + \frac{1}{2} \right),$$

де $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \dots$.

Отже, якщо визначити головне квантове число як $n = n_x + n_y + n_z + 1$, де $n = 1, 2, 3, \dots$, то:

$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A H_{n_x}(\rho_x) H_{n_y}(\rho_y) H_{n_z}(\rho_z) e^{-\frac{1}{2}(\rho_x^2 + \rho_y^2 + \rho_z^2)},$$

$$A = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{\pi\omega m}} \right)^{3/2} (2^n n_x! n_y! n_z!)^{-1/2}, \quad \rho_x = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} x, \quad \text{і т.д.}$$

При фіксованих n та n_x числа n_y і n_z приймають $n - n_x$ значення. Тому кратність виродження рівня дорівнює

$$g = \sum_{n_x=0}^n (n-1)(n-n_x) = \frac{(n+1)n}{2}.$$

Сферичні координати. Радіальна частина хвильової функції задовольняє рівнянню

$$-R''(\rho) + \left[\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \rho^2 - \varepsilon \right] R(\rho) = 0, \quad \text{де } \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}, \quad \rho = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} r. \quad (7.4)$$

Легко бачити, що при $\rho \gg 1$ радіальна частина хвильової функції є $R \sim e^{-\frac{1}{2}\rho^2}$, а при $\rho \ll 1$ вона прямує до $R \sim \rho^{\ell+1}$ (задача 7.1). Тому розв'язок будемо шукати у вигляді

$$R(\rho) = \sum_{\nu=0}^N a_\nu \rho^{\nu+\ell+1} e^{-\frac{1}{2}\rho^2}.$$

Підставляючи цей вираз в рівняння (7.4) одержимо

$$\sum_{\nu=1}^N a_\nu \nu(\nu+2\ell+1) \rho^{\nu+\ell-1} - \sum_{\nu=0}^N a_\nu [2(\nu+\ell)+3-\varepsilon] \rho^{\nu+\ell+1} = 0. \quad (7.5)$$

Якщо в першій сумі зробити заміну $\nu \rightarrow \nu - 2$, то рівняння (7.5) зведеться до

$$2a_1(1+\ell)\rho^\ell + \sum_{\nu=0}^{N-2} \{a_{\nu+2}(\nu+2)(\nu+2\ell+3) - a_\nu [2(\nu+\ell)+3-\varepsilon]\} \rho^{\nu+\ell+1} - a_{N-1} [2(N-1+\ell)+1-\varepsilon] \rho^{N+\ell} - a_N [2(N+\ell)+3-\varepsilon] \rho^{N+\ell+1} = 0.$$

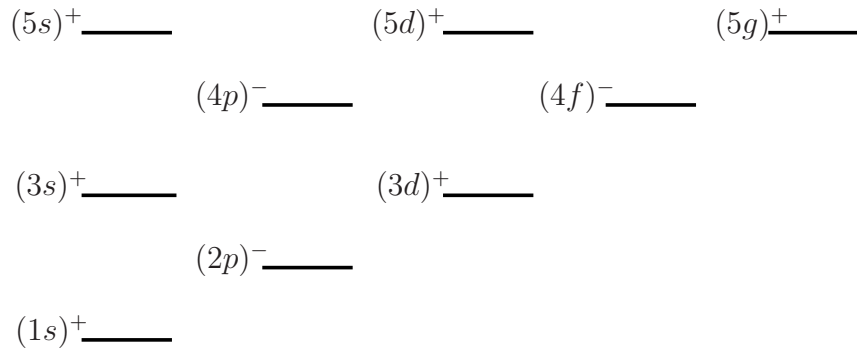


Рис. 7.1: Квантові стани $(n\ell)^P$ тривимірного гармонічного осцилятора

Прирівнюючи до нуля коефіцієнти при різних степенях ρ одержимо наступні рівняння:

$$a_1 = 0, \quad (7.6)$$

$$a_{\nu+2} = \frac{2(\nu + \ell) + 3 - \varepsilon}{(\nu + 2)(\nu + 2\ell + 3)} a_\nu, \quad \nu \leq N - 2, \quad (7.7)$$

$$a_{N-1} [2(N - 1 + \ell) + 1 - \varepsilon] = 0, \quad (7.8)$$

$$a_N [2(N + \ell) + 3 - \varepsilon] = 0. \quad (7.9)$$

З (7.6) та (7.7) випливає, що відмінні від нуля лише a_ν з парним ν і, таким чином, N є парним числом. Тоді (7.8) виконується автоматично, а (7.9) визначає спектр безрозмірної енергії:

$$\varepsilon_{N\ell} = 2(N + \ell) + 3.$$

Покладаючи $N = 2n_r$ одержимо наступний енергетичний спектр

$$E_{n\ell} = \hbar\omega \left(2n_r + \ell + \frac{3}{2}\right), \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (7.10)$$

Підставляючи $\varepsilon_{N\ell}$ в (7.7) одержимо рекурентне співвідношення:

$$a_{\nu+2} = \frac{2\nu - n_r}{(\nu + 2)(\nu + 2\ell + 3)} a_\nu. \quad (7.11)$$

Отже, усі коефіцієнти виражаються через a_0 , а останній фіксується умовою нормування.

7.3. Прівнюючи спектр тривимірного гармонічного осцилятора в декартових та сферичних координатах (див. попередню задачу) знайдемо зв'язок між головним та радіальним квантовими числами:

$$2n_r + \ell = n.$$

Парність визначається орбітальним моментом $P = (-1)^\ell$. Відповідні рівні зображені на рис. 7.1. Слід зауважити, що, на відміну від спектру атома водню, в один вироджений рівень входять стани з однаковим значенням праності.

7.4. апишемо рівняння для радіальної хвильової функції:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} R_{n\ell}''(r) + \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2} + \frac{A}{r^2} + \frac{\kappa}{2} r^2 \right) R_{n\ell}(r) = E_{n\ell} R_{n\ell}(r).$$

Об'єднаємо в один члени, які обернено пропорційні r^2 ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}R_{n\ell}''(r) + \left(\frac{\hbar^2\tilde{\ell}(\tilde{\ell}+1)}{2mr^2} + \frac{\kappa}{2}r^2 \right) R_{n\ell}(r) = E_{n\ell}R_{n\ell}(r), \quad \tilde{\ell}(\tilde{\ell}+1) = \ell(\ell+1) + \frac{2Am}{\hbar^2},$$

і підставимо в формулу (7.10) $\tilde{\ell}$ замість ℓ , в результаті чого одержимо:

$$E_{n\ell} = \hbar\omega \left(2n_r + 1 + \frac{1}{2}\sqrt{(2\ell+1)^2 + \frac{8mA}{\hbar^2}} \right).$$

7.5. Розв'язки для радіальної хвильової функції в окремих областях є

$$R_{n\ell}(r) = \begin{cases} \text{const } j_\ell(k_{n\ell}r), & \text{при } r < R, \\ 0, & \text{при } r \geq R, \end{cases} \quad (7.12)$$

де $j_\ell(z)$ сферичні функції Бесселя. В точці $r = R$ на розв'язок (7.12) необхідно наложити умову неперервності

$$j_\ell(k_{n\ell}R) = 0, \quad (7.13)$$

яка є рівнянням на $k_{n\ell}$. (Умову неперервності похідної вимагати непотрібно, бо потенціал в цій точці робить безмежно великий стрибок.)

Отже:

$$E_{n\ell} = \frac{(\hbar k_{n\ell})^2}{2m}.$$

Рівняння (7.13) може бути розв'язано лише чисельними методами за винятку випадку, коли $\ell = 0$. Підставляючи $j_0(z) = \frac{\sin z}{z}$ в (7.13) отримаємо:

$$k_{n0} = \frac{n\pi}{R}, \quad E_{n0} = \frac{(\hbar n\pi)^2}{2R^2m}.$$

7.6. $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2}{2\kappa}\mathbf{E}^2$, де $n = 1, 2, 3, \dots$ — головне квантове число.

7.7. $\langle U \rangle = -\frac{e^2}{a_0}$.

7.8. $\langle r \rangle_{1S} = \frac{3}{2}a_0, \quad \langle r \rangle_{2S} = 6a_0, \quad \langle r \rangle_{2P} = 5a_0,$

7.9. Використовуючи (7.2) одержимо:

$$\langle r^2 \rangle_{1S}^{1/2} = \sqrt{3}a_0, \quad \langle r^2 \rangle_{2S}^{1/2} = \sqrt{42}a_0, \quad \langle r^2 \rangle_{2P}^{1/2} = \sqrt{30}a_0.$$

7.10. Потенціал в точці \mathbf{r} визначається як сума потенціалу $\varphi_{\mathbf{я}}(\mathbf{r})$, який створює ядро (вважається, що ядро представляє точковий заряд),

$$\varphi_{\mathbf{я}}(\mathbf{r}) = \frac{e}{r},$$

та потенціалу $\varphi_e(\mathbf{r})$, який створює електрон. Останній є

$$\varphi_e(\mathbf{r}) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r',$$

де $\rho(\mathbf{r})$ — густина заряду електронної «хмари»

$$\rho(\mathbf{r}) = -e |\psi_{1S}(\mathbf{r})|^2, \quad \psi_{1S}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp(-r/a_0).$$

Будемо працювати в системі, де вісь z направлена вздовж вектора \mathbf{r} . Якщо скористися формулою (Д.12) інтеграл легко взяти

$$\begin{aligned} \varphi_e(\mathbf{r}) &= -\frac{e}{\pi a_0^3} \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta P_{\ell}(\cos \theta) \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \left(\frac{r'}{r}\right)^{\ell} \exp(-2r'/a_0) + \int_r^{\infty} dr' r' \left(\frac{r}{r'}\right)^{\ell} \exp(-2r'/a_0) \right\} = \\ &= -\frac{4e}{a_0^3} \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \exp(-2r'/a_0) + \int_r^{\infty} dr' r' \exp(-2r'/a_0) \right\} = \\ &= e \frac{\exp(-2r/a_0)(a_0 + r)}{a_0 r} - \frac{e}{r}. \end{aligned}$$

Тому

$$\varphi(r) = e \frac{\exp(-2r/a_0)(a_0 + r)}{a_0 r}.$$

При $r \ll a_0$ цей потенціал переходить у потенціал ядра $\varphi_{\text{я}}(\mathbf{r}) = \frac{e}{r}$, а при $r \gg a_0$ потенціал експоненціально спадає.

7.11. (1) Координата та імпульс центра мас:

$$\mathbf{R} = \frac{m_1}{M} \mathbf{r}_1 + \frac{m_2}{M} \mathbf{r}_2, \quad \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2;$$

відносні координата та імпульс:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \hat{\mathbf{p}} = \frac{m_2}{M} \hat{\mathbf{p}}_1 - \frac{m_1}{M} \hat{\mathbf{p}}_2;$$

хвильова функція:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}).$$

Рівняння Шрьодінгера розділяється на два рівняння: рівняння руху центра мас

$$\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} \Phi(\mathbf{R}) = T \Phi(\mathbf{R})$$

та рівняння для енергії зв'язку

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(r) \right] \phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r}).$$

Тут $M = m_1 + m_2$, T — кінетична енергія зв'язаного стану.

(2) Канонічність переходу означає, що комутаційні співвідношення зберігаються для нових координат та імпульсів

$$\left[\widehat{P}_i, R_j \right] = \left[\widehat{p}_i, r_j \right] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}, \quad \left[\widehat{P}_i, r_j \right] = \left[\widehat{p}_i, R_j \right] = 0.$$

(3) Враховуючи результат задачі 3.9 середньоквадратичний радіус мюонія в основному стані є $\sqrt{\langle r^2 \rangle_{1S}^\mu} = \sqrt{3} a_0^\mu$, де $a_0^\mu = \frac{\hbar^2}{e^2 \mu}$ — борівський радіус мюонія, $\mu = \frac{m_\mu m_e}{m_\mu + m_e}$ — зведена маса для мюонія. Тому відношення середньоквадратичних радіусів буде:

$$1 + \frac{m_e}{m_\mu} = 1,00483.$$

Розділ 8

Стаціонарна теорія збурень

1. Одним із методів наближеного розв'язку рівняння Шрьодінгера є теорія збурень, яка використовується коли гамільтоніан системи може бути записаним у вигляді суми гамільтоніана \widehat{H}_0 , для якого відомо точний розв'язок (його називають незбуреним гамільтоніаном), і малої добавки \widehat{H}_1 (збурення):

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_1 = \widehat{H}_0 + \lambda \widehat{W}, \quad \lambda \ll 1.$$

У разі, коли збурення не залежить від часу, теорію збурень називають *стаціонарною*. У цьому випадку задача полягає в тому, щоб знайти енергетичні рівні і відповідні хвильові функції рівняння Шрьодінгера для повного гамільтоніана:

$$\widehat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle.$$

Розв'язок шукається шляхом розкладу хвильової функції та енергії по степеням λ :

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots = |\tilde{\psi}_n^{(0)}\rangle + \lambda |\tilde{\psi}_n^{(1)}\rangle + \dots, \\ E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots = \epsilon_n^{(0)} + \lambda \epsilon_n^{(1)} + \lambda^2 \epsilon_n^{(2)} + \dots, \end{aligned}$$

де n нумерує енергетичні рівні, а $E_n^{(0)}$ та $|\psi_n^{(0)}\rangle$ — розв'язки незбуреного рівняння Шрьодінгера:

$$\widehat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle. \quad (8.1)$$

2. Якщо серед розв'язків незбуреного рівняння Шрьодінгера (8.1) відсутні вироджені стани, то поправки до енергетичних рівнів та хвильових функцій в першому порядку теорії збурень є

$$E_n^{(1)} = \lambda \langle n | \widehat{W} | n \rangle, \quad (8.2)$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \lambda \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n | \widehat{W} | n' \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} |\tilde{\psi}_{n'}^{(0)}\rangle. \quad (8.3)$$

В другому порядку поправка до енергії є

$$E_n^{(2)} = \lambda^2 \epsilon_n^{(2)} = \lambda^2 \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n | \widehat{W} | n' \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}}. \quad (8.4)$$

3. Умовою застосування теорії збурень є необхідність виконання нерівностей

$$\left| E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)} \right| \gg \lambda |\langle n | \widehat{W} | n' \rangle| \quad (8.5)$$

для усіх значень n та n' .

4. У випадку, коли не виконується критерій 3, тобто у нульовому порядку існує r рівнів, які співпадають або близькі один до одного, хвильову функцію шукають у вигляді суперпозиції хвильових функцій вироджених станів:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^r C_k |\psi_k\rangle, \quad \sum_{i=1}^r C_i^2 = 1.$$

Тоді рівняння Шрьодінгера зводиться до системи лінійних алгебраїчних рівнянь на коефіцієнти C_k :

$$\sum_{l=1}^r H_{kl} C_l - E C_k = 0,$$

де $H_{kl} = \langle k | \widehat{H}_0 + \widehat{H}_1 | l \rangle$. Умовою сумісності цих рівнянь є рівняння

$$\begin{vmatrix} (H_{11} - E) & H_{12} & \cdots & H_{1r} \\ H_{21} & (H_{22} - E) & \cdots & H_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{r1} & H_{r2} & \cdots & (H_{rr} - E) \end{vmatrix} = 0,$$

яке в загальному випадку дає r розв'язків для енергії E . Його називають *секулярним рівнянням*.

Для двох близьких рівнів n та m з секулярного рівняння одержимо

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left[H_{mm} + H_{nn} \pm \sqrt{(H_{mm} - H_{nn})^2 + 4|H_{nm}|^2} \right], \quad (8.6)$$

при цьому хвильові функції є

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle = \cos \varphi |\psi_m^{(0)}\rangle + \sin \varphi |\psi_n^{(0)}\rangle, \\ |\psi_2\rangle = -\sin \varphi |\psi_m^{(0)}\rangle + \cos \varphi |\psi_n^{(0)}\rangle, \end{cases} \quad (8.7)$$

де

$$\cos \varphi = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}, \quad \sin \varphi = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}},$$

$$x = \frac{H_{nn} - H_{mm} + \sqrt{(H_{mm} - H_{nn})^2 + 4|H_{nm}|^2}}{2H_{nm}}.$$

8.1 Задачі

8.1. На частинку, яка знаходиться у безмежно глибокій потенціальній ямі (рис. 2.1), діє збурення $H_1 = -Fx$. Розрахувати поправку до енергетичних рівнів в першому порядку теорії збурень та знайти умову застосування теорії збурень.

8.2. На одномірний гармонічний осцилятор діє збурення $H_1 = V \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$. Знайти умову застосування теорії збурень та розрахувати поправки першого порядку до основного та першого збудженого рівнів.

8.3. Для лінійного ангармонічного осцилятора

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\kappa x^2 + \alpha x^3 + \beta x^4\right) \psi(x) = E\psi(x)$$

знайти поправки до енергії в першому та другому порядках та до хвильових функцій в першому порядку. У якості збурення розглядати ангармонічні члени αx^3 та βx^4 . З'ясувати умови застосування теорії збурень.

8.4. Валентний електрон у атомі літія знаходиться у потенціалі, який екранований двома електронами з першої повністю заповненої оболонки. Цей потенціал можна апроксимувати таким виразом

$$U(r) = -\frac{e^2}{r} - \frac{e^2 d}{r^2},$$

де d — параметр розмірності довжини. Розглядаючи другий член гамільтоніана як збурення знайти у першому порядку теорії збурень розщеплення рівнів атома літія у станах з $n = 2$. Порівняти з точним результатом.

8.5. В енергетичному представленні незбурений гамільтоніан є

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix}.$$

Знайти поправки в першому та другому порядках теорії збурень до енергії та поправки до хвильових функцій у першому порядку теорії збурень під дією збурення

$$\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix}.$$

8.6. Розглядаючи в гамільтоніані задачі 2.14 доданок $\alpha x_1 x_2$ як збурення знайти:

1. поправку до основного рівня в першому та другому порядку та поправку до хвильової функції в першому порядку;
2. поправки до другого рівня та відповідні хвильові функції.

Порівняти одержані результати з точним результатом.

8.2 Відповіді та розв'язки задач

8.1. Скористаємось результатом розв'язку задачі 2.1 і знайдемо наступний матричний елемент

$$\begin{aligned}
 \langle n'|x|n\rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a dx x \sin \frac{\pi n' x}{a} \sin \frac{\pi n x}{a} = \\
 &= \frac{1}{a} \int_0^a dx x \left[\cos \frac{\pi(n' - n)x}{a} - \cos \frac{\pi(n' + n)x}{a} \right] = \\
 &= \frac{a}{\pi^2} \left\{ \frac{\pi \sin [\pi(n - n')]}{n - n'} - \frac{\pi \sin [\pi(n' + n)]}{n' + n} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\cos [\pi(n - n')] - 1}{(n - n')^2} + \frac{1 - \cos [\pi(n' + n)]}{(n' + n)^2} \right\}.
 \end{aligned} \tag{8.8}$$

Випадок, коли $n = n'$ треба розглядати, як граничний перехід $n' \rightarrow n$ у виразі (8.8). В результаті $\langle n|x|n\rangle = \frac{a}{2}$ і на основі формули (8.2) одержимо поправку в першому порядку теорії збурень:

$$E_n^{(1)} = -\frac{1}{2}Fa.$$

При $n' \neq n$ (і цілих n і n') вираз (8.8) приймає вигляд:

$$\langle n'|x|n\rangle = \begin{cases} -\frac{4nn'a}{\pi^2(n^2 - n'^2)^2} & \text{при } n + n' \text{ не парне,} \\ 0 & \text{при } n + n' \text{ парне,} \end{cases}$$

і тому при парному $n + n'$ умова (8.5) виконується автоматично. Отже, необхідно розглянути випадок непарного $n + n'$.

З умови застосування теорії збурень (8.5) випливає, що при заданому n має виконуватись нерівність при усіх $n' \neq n$

$$\frac{8ma^3F}{\hbar^2\pi^4} \ll \frac{|n^2 - n'^2|^3}{nn'}. \tag{8.9}$$

Задача полягає в тому, щоб знайти такі n' та n , при яких права частина нерівності (8.9) буде мінімальною.

Відмітимо, що вираз $\frac{|n^2 - n'^2|^3}{nn'}$ симетричний відносно заміни $n' \leftrightarrow n$, тому достатньо розглянути випадок коли $n' > n$. Легко бачити, що в цьому випадку зазначений вираз монотонно зростає із збільшенням n' при сталому n ¹. Тому він приймає найменше значення при $n' = n + 1$ і

$$\frac{|n^2 - n'^2|^3}{nn'} \rightarrow \frac{(2n + 1)^3}{n(n + 1)}.$$

Так само легко впевнитись, що $\frac{(2n + 1)^3}{n(n + 1)}$ монотонно зростає із збільшенням n і тому приймає найменше значення при $n = 1$. Отже, умовою застосування теорії збурень є

¹В цьому легко переконатись взявши похідну по dn' і впевнившись у тому, що вона завжди додатна.

нерівність:

$$\frac{ma^3 F}{\hbar^2 \pi^4} \ll \frac{27}{16}.$$

$$8.2. E_0^{(1)} = \left(\frac{\omega ma^2}{\omega ma^2 + \hbar} \right)^{1/2} V, \quad E_1^{(1)} = \left(\frac{\omega ma^2}{\omega ma^2 + \hbar} \right)^{3/2} V.$$

8.3. Спочатку знайдемо матричні елементи $\langle n'|x^3|n\rangle$ та $\langle n'|x^4|n\rangle$. З цією метою на основі умови повноти перепишемо ці вирази у вигляді

$$\langle n'|x^3|n\rangle = \sum_{n'=0}^{\infty} \langle n|x|n'\rangle \langle n'|x^2|n\rangle, \quad \langle n'|x^4|n\rangle = \sum_{n'=0}^{\infty} \langle n|x^2|n'\rangle \langle n'|x^2|n\rangle.$$

В свою чергу, матричний елемент $\langle n'|x|n\rangle$ був знайдений в задачі 2.11

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{(n+1)} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \right],$$

а $\langle n'|x^2|n\rangle$ знаходимо використовуючи умову повноти:

$$\begin{aligned} \langle n'|x^2|n\rangle &= \sum_{n''=0}^{\infty} \langle n'|x|n''\rangle \langle n''|x|n\rangle = \\ &= \frac{\hbar}{2\omega m} \left[(2n+1) \delta_{n',n} + \sqrt{n(n-1)} \delta_{n',n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{n',n+2} \right]. \end{aligned}$$

Звідси одержимо остаточний результат для матричних елементів $\langle n|x^3|n\rangle$ та $\langle n|x^4|n\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle n'|x^3|n\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^{3/2} \left[\sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)} \delta_{n',n+3} + 3(n+1)\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} + \right. \\ &\quad \left. + 3n\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n(n-1)(n-2)} \delta_{n',n-3} \right], \\ \langle n'|x^4|n\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^2 \left[\sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)} \delta_{n',n+4} + \right. \\ &\quad \left. + 2(2n+3)\sqrt{(n+2)(n+1)} \delta_{n',n+2} + 3(2n^2+2n+1) \delta_{n',n} + \right. \\ &\quad \left. + 2(2n-1)\sqrt{n(n-1)} \delta_{n',n-2} + \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \delta_{n',n-4} \right]. \end{aligned} \quad (8.10)$$

На основі формул (8.2), (8.4) та (8.10) знайдемо поправки до енергії:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \frac{3}{4} \beta \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 (2n^2 + 2n + 1), \\ E_n^{(2)} &= - \frac{\alpha^2}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^3 (30n^2 + 30n + 11) - 2 \frac{\beta^2}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^4 (34n^3 + 51n^2 + 59n + 21). \end{aligned} \quad (8.11)$$

Поправка до хвильової функції першого порядку буде:

$$\begin{aligned}
|\psi_n^{(1)}\rangle = & \frac{\alpha}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^{3/2} \left[-\frac{1}{3} \sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)} |n+3\rangle - \right. \\
& - 3(n+1)\sqrt{n+1} |n+1\rangle + 3n\sqrt{n} |n-1\rangle + \\
& \left. + \frac{1}{3} \sqrt{n(n-1)(n-2)} |n-3\rangle \right] + \\
& + \frac{\beta}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^2 \left[-\frac{1}{4} \sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)} |n+4\rangle - \right. \\
& - (2n+3)\sqrt{(n+2)(n+1)} |n+2\rangle + (2n-1)\sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle + \\
& \left. + \frac{1}{4} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} |n-4\rangle \right]. \tag{8.12}
\end{aligned}$$

Для нашого випадку умови (8.5) записуються як

$$\alpha \frac{\langle n' | x^3 | n \rangle}{|n' - n| \hbar \omega} \ll 1, \quad n' = n \pm 3, \quad n' = n \pm 1, \tag{8.13}$$

$$\beta \frac{\langle n' | x^4 | n \rangle}{|n' - n| \hbar \omega} \ll 1, \quad n' = n \pm 4, \quad n' = n \pm 2. \tag{8.14}$$

Підставляючи в (8.13) та (8.14) матричні елементи $\langle n' | x^3 | n \rangle$ та $\langle n' | x^4 | n \rangle$ (формули (8.10)) легко знайти, що ліва частина нерівності (8.13) набуває масимального значення при $n' = n + 1$, а для нерівності (8.14) — при $n' = n + 2$. Тому умовами застосування теорії збурень будуть

$$\begin{aligned}
\frac{\alpha}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^{3/2} 3(n+1)\sqrt{n+1} & \ll 1, \\
\frac{\beta}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{2\omega m} \right)^2 (2n+3)\sqrt{(n+2)(n+1)} & \ll 1.
\end{aligned}$$

Звідси випливає, що при любых α та β завжди знайдеться таке значення $n = n_{\max}$, починаючи з якого теорія збурень для лінійного ангармонічного осцилятора не виконується.

8.4. Поправка в першому порядку теорії збурень до рівня nl дається

$$E_{nl}^{(1)} = -e^2 d \int d^3x |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 r^{-4} R_{nl}^2(\rho),$$

де $R_{nl}(\rho)$ — радіальна хвильова функція воднеподібного атома (див. Розділ 3). Беручи інтеграл для станів $2s$ та $3p$ одержимо $E_{2s}^{(1)} = -\frac{e^2 d}{4a_0^2}$, $E_{2p}^{(1)} = -\frac{e^2 d}{12a_0^2}$.

Точний розв'язок див. в [7] Задача 5.2:

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2(n-\sigma)^2 a_0}, \quad \sigma = \frac{d}{(\ell + \frac{1}{2}) a_0}.$$

Розкладаючи в ряд по σ енергію E_{nl} одержимо:

$$E_{nl} \approx -\frac{e^2}{2n^2 a_0} + \frac{e^2 d}{a_0^2 (\ell + \frac{1}{2}) n^3}.$$

Легко бачити, що одержана поправка для $2s$ та $3p$ станів співпадає, відповідно, з $E_{2s}^{(1)}$ і $E_{2p}^{(1)}$.

$$\begin{aligned} \mathbf{8.5.} \quad E_1^{(1)} &= V_{11}, \quad E_2^{(1)} = V_{22}, \quad E_1^{(2)} = -E_2^{(2)} = \frac{|V_{12}|^2}{E_1 - E_2}; \\ \psi_1^{(1)} &= -\frac{V_{12}^*}{E_1 - E_2} \psi_2^{(0)}, \quad \psi_2^{(1)} = -\frac{V_{12}}{E_1 - E_2} \psi_1^{(0)}, \\ \text{де } \psi_1^{(0)} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

8.6. Спочатку запишемо розв'язок у випадку, коли $\alpha = 0$. В цьому випадку енергія є

$$E_{n_1 n_2}^{(0)} = \hbar\omega_0 (n_1 + n_2 + 1),$$

де $\omega_0 = \sqrt{\kappa/m}$, а відповідні хвильові функції є добутком двох хвильових функцій одновимірного осцилятора з частотою ω_0 ,

$$\psi_{n_1 n_2}^{(0)} \equiv |n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle,$$

де $|n_1\rangle$ і $|n_2\rangle$ залежать від змінних x_1 і x_2 , відповідно.

1. Використовуючи результат задачі 2.11 маємо

$$\langle 0|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_0 m}} \delta_{n1}. \quad (8.15)$$

Тому в першому порядку поправка до основного стану дорівнює нулю,

$$E_{00}^{(1)} = \alpha \langle 0|x_1|0\rangle \langle 0|x_2|0\rangle = 0,$$

а в другому порядку вона є:

$$E_{00}^{(2)} = -\alpha^2 \sum_{n, n'} \frac{\langle 0|x_1|n\rangle \langle 0|x_2|n'\rangle \langle n|x_1|0\rangle \langle n'|x_2|0\rangle}{2\hbar\omega_0} = -\frac{\hbar\alpha^2}{8\omega_0^3 m^2}. \quad (8.16)$$

Запишемо поправка до хвильової функції першого порядку

$$\psi_{00}^{(1)} = -\alpha \sum_{n, n'} \frac{\langle 00|x_1 x_2|nn'\rangle}{\hbar\omega_0(n+n')} |nn'\rangle \quad (8.17)$$

і використовуючи результат задачі 2.11 одержимо

$$\psi_{00}^{(1)} = -\frac{\alpha}{4\omega_0^2 m} |1\rangle |1\rangle.$$

Точний розв'язок для енергії є (див. задачу 2.14) $E_{00} = \frac{1}{2}\hbar\Omega + \frac{1}{2}\hbar\omega$. Розкладаючи Ω та ω в ряд по α до другого порядку, $\Omega \approx \omega_0 \left(1 + \frac{\alpha}{2\kappa} - \frac{\alpha^2}{8\kappa^2}\right)$, $\omega \approx \omega_0 \left(1 - \frac{\alpha}{2\kappa} - \frac{\alpha^2}{8\kappa^2}\right)$, одержимо

$$E_{00} \approx \hbar\omega_0 - \frac{\alpha^2 \hbar}{8\omega_0^3 m^2},$$

що співпадає з результатом теорії збурень.

У разі точного розв'язку хвильова функція основного стану записана у змінних x_1 та x_2 є

$$\psi_{00} = \sqrt[4]{\frac{\Omega\omega m^2}{(4\pi)^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{4} \frac{m}{\hbar} [(\Omega + \omega)(x_1^2 + x_2^2) + 2(\Omega - \omega)x_1x_2] \right\}.$$

Розкладаючи Ω та ω в ряд до першого порядку по α одержимо

$$\psi_{00} = |0\rangle|0\rangle - \frac{\alpha}{4\omega_0 m} |1\rangle|1\rangle,$$

що співпадає з результатом теорії збурень в першому порядку.

2. Другий енергетичний рівень двічі вироджений, $E_{10}^{(0)} = E_{01}^{(0)} = 2\hbar\omega_0$, тому потрібно застосовувати теорію збурення для близьких рівнів. Користуючись формулою (8.6) знайдемо енергію з урахуванням доданків першого порядку по α :

$$E_{1,2} = 2\hbar\omega_0 \pm \frac{\alpha\hbar}{2m\omega_0}.$$

Легко бачити, що саме такий результат одержуємо розкладаючи точний розв'язок в першому порядку по α . Відповідні хвильові функції визначаються з (8.7):

$$|\psi_{1,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle|0\rangle \pm |0\rangle|1\rangle).$$

Цей результат співпадає з хвильовими функціями для точного розв'язку в нульовому порядку по α .

Розділ 9

Адіабатичне наближення та варіаційний метод Рітца

1. Адіабатичне наближення (його ще називають наближенням Бора-Оппенгеймера) використовують у випадку, коли фізична система складається із частинок двох сортів, які рухаються швидко (легкі частинки), та повільних (важких) частинок. При цьому збуренням вважається кінетична енергія повільних частинок.

2. На першому етапі «заморожується» рух важких частинок, і розв'язується рівняння Шрьодінгера для легких частинок що рухаються у полі нерухомих важких частинок. В результаті знаходять хвильові функції та енергетичний спектр легких частинок, які залежать від координат важких частинок \mathbf{X}_i як від параметрів:

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n; \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_N), \quad \varepsilon(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_N).$$

3. На другому етапі «розморожують» рух важких частинок і шукають повну хвильову функцію системи у вигляді добутка

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n; \mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N) = C(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N) \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n; \mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N),$$

де коефіцієнти $C(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N)$ задовольняють рівнянню Шрьодінгера, у якого в якості потенціала виступає енергія легких частинок

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{M_i} \Delta_i + \varepsilon(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N) \right] C(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N) = EC(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N).$$

4. Варіаційний метод Рітца полягає в тому, що наближений розв'язок для енергії та хвильової функції основного стану квантової системи знаходиться з умови мінімуму середнього значення її гамільтоніана

$$E(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = \int d^3x \psi^*(\alpha_1, \dots, \alpha_n; \mathbf{x}) \hat{H} \psi(\alpha_1, \dots, \alpha_n; \mathbf{x})$$

по пробній функції $\psi(\alpha_1, \dots, \alpha_n; \mathbf{x})$ нормованою на одиницю,

$$\int d^3x |\psi^*(\alpha_1, \dots, \alpha_n; \mathbf{x})|^2 = 1.$$

Варіація відбувається по параметрам $\alpha_1, \dots, \alpha_n$.

9.1 Задачі

9.1. Гамільтоніан квантової системи має вигляд

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2M_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2M_2} + \frac{\kappa}{2} (x_1^2 + x_2^2) + \alpha x_1 x_2,$$

причому $|\alpha| < \kappa$ та $M_1 \gg M_2$. Знайти рівні енергії та відповідні хвильові функції використовуючи адіабатичне наближення.

9.2. На основі варіаційного метода Рітца оцінити енергію основного стану тривимірного гармонічного осцилятора використовуючи пробну функцію $\psi(r) = Ne^{-ar}$ і розглядаючи a як варіаційний параметр. Результат порівняти з точним результатом.

9.3. (1) На основі варіаційного метода Рітца знайти наближене значення енергії основного стану для частинки, яка знаходиться у потенціалі $U(x) = \lambda x^4$. Пробну функцію взяти у вигляді $\psi(x) = Ne^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$, де α — варіаційний параметр.

(2) Те саме, що в задачі (1), але в тривимірному просторі ($U(\mathbf{r}) = \lambda r^4$, $\psi(\mathbf{r}) = Ne^{-\frac{1}{2}\alpha r^2}$).

9.4. На основі варіаційного метода Рітца знайти енергію частинки, яка знаходиться в полі

$$U(x) = \begin{cases} \lambda x & \text{при } x > 0, \\ \infty & \text{при } x \leq 0. \end{cases}$$

В якості пробної функції обрати:

$$(1) \quad \psi(x, \alpha) \sim \begin{cases} xe^{-\alpha x} & \text{при } x > 0, \\ 0 & \text{при } x \leq 0. \end{cases}$$

$$(2) \quad \psi(x, \alpha) \sim \begin{cases} xe^{-\alpha x^2} & \text{при } x > 0, \\ 0 & \text{при } x \leq 0. \end{cases}$$

Обґрунтувати, чому у пробної функції введено множник x перед експонентою.

9.5. На основі варіаційного метода знайти хвильові функції та енергію атома водню у станах $1S$ та $2S$ використовуючи наступну пробну функцію

$$\psi(r) = (A_0 + A_1 r)e^{-\alpha r},$$

де A_0 , A_1 і α варіаційні параметри. Умову нормування врахувати з допомогою множника Лагранжа (такий метод називають методом Рілея-Рітца).

9.2 Відповіді та розв'язки задач

9.1. Будемо вважати збуренням кінетичну енергію важкої частинки,

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2M_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2},$$

і далі шукати розв'язок у вигляді

$$\Psi(x_1, x_2) = C(x_1)\psi(x_2).$$

Для хвильової функції легкої частинки $\psi(x_2)$ маємо наступне рівняння Шрödінгера, розглядаючи при цьому змінну x_1 як параметр:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\kappa}{2} (x_1^2 + x_2^2) + \alpha x_1 x_2 \right] \psi(x_1, x_2) = \varepsilon(x_1) \psi(x_1, x_2). \quad (9.1)$$

Зробимо в рівнянні (9.1) заміну $y = x_2 + \frac{\alpha}{\kappa} x_1$ і одержимо рівняння для гармонічного осцилятора

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M_2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\kappa}{2} y^2 \right) \psi(y) = \left[\varepsilon(x_1) - \frac{\kappa^2 - \alpha^2}{2\kappa} x_1^2 \right] \psi(y),$$

з якого випливає що

$$\varepsilon(x_1) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\kappa^2 - \alpha^2}{2\kappa} x_1^2, \quad \omega = \sqrt{\frac{\kappa}{M_2}}$$

і хвильова функція задається формулою (2.6).

Тепер розглянемо рівняння для функцій $C_{Nn}(x_1)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\kappa^2 - \alpha^2}{2\kappa} x_1^2 \right] C_{Nn}(x_1) = E_{Nn} C_{Nn}(x_1).$$

Це знову рівняння гармонічного осцилятора і його розв'язок дає

$$E_{Nn} = \hbar\Omega \left(N + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{де} \quad \Omega = \sqrt{\frac{\kappa^2 - \alpha^2}{\kappa M_1}}.$$

9.2. Знайдемо коефіцієнт нормування

$$N = \sqrt{\frac{a^3}{\pi}}.$$

При цьому середні кінетична та потенціальна енергії будуть:

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= -\frac{\hbar^2 N^2}{2m} \int d^3 r e^{-ar} \Delta e^{-ar} = \frac{(\hbar a)^2}{2m}, \\ \langle U \rangle &= \frac{\kappa N^2}{2} \int d^3 r r^2 e^{-2ar} = \frac{3\kappa}{2a^2}. \end{aligned} \quad (9.2)$$

Мінімум середнього значення гамільтоніана $E(a) = \langle T \rangle + \langle U \rangle$ досягається при $a^2 = \sqrt{\frac{3\kappa m}{\hbar^2}}$. Підставляючи це значення у вираз для $E(a)$ одержимо наближенне значення енергії основного стану $E_{\text{осн}} \approx \sqrt{3} \hbar\omega \approx 1,73 \hbar\omega$, що дещо більше точного значення $E_{\text{осн}} = \frac{3}{2} \hbar\omega$ (див. задачу 3.2).

9.3. (1) Нормована пробна функція є $\psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$ і середнє значення гамільтоніана буде:

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{4m} \alpha + \frac{3}{4} \frac{\lambda}{\alpha^2}.$$

Мінімум $E(\alpha)$ відповідає

$$\alpha = \sqrt[3]{\frac{6\lambda m}{\hbar^2}}.$$

В результаті отримаємо

$$E_{\text{осн}} \approx \frac{3}{4} \left(\frac{3\hbar^4\lambda}{4m^2} \right)^{1/3}.$$

$$(2) E_{\text{осн}} \approx \frac{9}{8} \left(10 \frac{\hbar^4\lambda}{m^2} \right)^{1/3}.$$

9.4. Множник x введено щоб пробна функцію була неперервною в точці $x = 0$. Зауважимо, що від похідної пробної функції не потрібно вимагати неперервності в цій точці, бо потенціал робить нескінченно великий стрибок.

(1) Знайдемо квадрат коефіцієнта нормування та середнє значення гамільтоніана

$$\begin{aligned} N^2 &= \left(\int_0^\infty dx x^2 e^{-2\alpha x} \right)^{-1} = 4\alpha^3, \\ E(\alpha) &= \langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle U \rangle, \\ \langle \hat{T} \rangle &= -\frac{\hbar^2 N^2}{2m} \int_0^\infty dx x e^{-\alpha x} \frac{d^2}{dx^2} x e^{-\alpha x} = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m}, \\ \langle U \rangle &= \lambda N^2 \int_0^\infty dx x^3 e^{-2\alpha x} = \frac{3\lambda}{2\alpha}. \end{aligned}$$

Знайдемо мінімум $E(\alpha)$:

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = \frac{d}{d\alpha} \left(\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} + \frac{3\lambda}{2\alpha} \right) = \frac{\alpha \hbar^2}{m} - \frac{3\lambda}{2\alpha^2} = 0.$$

Звідки

$$\alpha = \sqrt[3]{\frac{3\lambda m}{2\hbar^2}}.$$

Підставляючи це значення в $E(\alpha)$ одержимо

$$E = \frac{3}{2} \sqrt[3]{\frac{9}{2}} \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m}} = \varepsilon_1^{\text{вар.}} \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m}} = 2,47645 \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m}}.$$

(2) Знайдемо квадрат коефіцієнта нормування та середнє значення гамільтоніана

$$N^2 = \frac{4(2\alpha)^{3/2}}{\sqrt{\pi}}, \quad E(\alpha) = \frac{3\hbar^2\alpha}{2m} + \frac{2\lambda}{\sqrt{2\pi\alpha}}, \quad \alpha = \sqrt[3]{\frac{2\lambda^2 m^2}{9\pi\hbar^4}}.$$

Тоді

$$E = 3 \sqrt[3]{\frac{3}{2\pi}} \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m}} = \varepsilon_2^{\text{вар.}} \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m}} = 2,34478 \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m}}.$$

Зауважимо, що точне значення $\varepsilon = 2,3381$ (див. [7]). Отже у випадку (1) відносна похибка складає 5,9%, а у випадку (2) — 0,28%.

9.5. Перш за все зауважимо, що параметри A_0 , A_1 і α не є незалежними, бо на пробну

функцію потрібно накласти умову нормування. Врахуємо це за допомогою множника Лагранжа, тобто в якості варіаційної функції будемо використовувати

$$E(A_0, A_1, \alpha) = \lambda N(A_0, A_1, \alpha) + \langle \hat{H} \rangle$$

де λ множник Лагранжа, а

$$N(A_0, A_1, \alpha) = \int d^3r \psi^2(r) = 4\pi \frac{2}{(2\alpha)^3} \left(A_0^2 + 3 \frac{A_0 A_1}{\alpha} + 3 \frac{A_1^2}{\alpha^2} \right),$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle V \rangle,$$

$$\langle \hat{T} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \int d^3r \psi(r) \Delta \psi(r) = 4\pi \frac{2}{(2\alpha)^3} \frac{\hbar^2}{2m_e} (A_0^2 \alpha^2 + A_0 A_1 \alpha + A_1^2),$$

$$\langle V \rangle = -4\pi \frac{1}{(2\alpha)^3} e^2 \left(2A_0^2 \alpha + 4A_0 A_1 + 3 \frac{A_1^2}{\alpha} \right)$$

вважаючи далі параметри A_0 , A_1 і α незалежними.

Запишемо умови екстремуму варіаційної функції $E(A_0, A_1, \alpha)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(A_0, A_1, \alpha)}{\partial A_0} &\sim 2A_0 \alpha (-2e^2 m \alpha + 2m\lambda + \alpha^2 \hbar^2) + \\ &+ A_1 (-4e^2 m \alpha + 6m\lambda + \alpha^2 \hbar^2) = 0, \end{aligned} \quad (9.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(A_0, A_1, \alpha)}{\partial A_1} &\sim A_0 \alpha (-4e^2 m \alpha + 6m\lambda + \alpha^2 \hbar^2) + \\ &+ 2A_1 (-3e^2 m \alpha + 6m\lambda + \alpha^2 \hbar^2) = 0, \end{aligned} \quad (9.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(A_0, A_1, \alpha)}{\partial \alpha} &\sim \frac{e^2 (A_0^2 \alpha^2 + 3A_1 A_0 \alpha + 3A_1^2)}{\alpha^4} - \\ - \frac{\hbar^2 (A_0^2 \alpha^2 + 2A_1 A_0 \alpha + 3A_1^2)}{4m^4} - \frac{3\lambda (A_0^2 \alpha^2 + 4A_1 A_0 \alpha + 5A_1^2)}{2\alpha^5} &= 0. \end{aligned} \quad (9.5)$$

Умова сумісності рівнянь (9.3) та (9.4) дає рівняння на λ

$$\begin{vmatrix} 2\alpha (-4e^2 m \alpha + 6m\lambda + \alpha^2 \hbar^2) & (-4e^2 m \alpha + 6m\lambda + \alpha^2 \hbar^2) \\ \alpha (-4e^2 m \alpha + 6m\lambda + \alpha^2 \hbar^2) & 2(-3e^2 m \alpha + 6m\lambda + \alpha^2 \hbar^2) \end{vmatrix} = 0, \quad (9.6)$$

звідки

$$\lambda = \frac{\alpha(6e^2 m - 5\alpha \hbar^2 \pm 2\sqrt{3e^4 m^2 - 6e^2 m \alpha \hbar^2 + 4\alpha^2 \hbar^4})}{6m}. \quad (9.7)$$

Підставляючи цей вираз в рівняння (9.3) або (9.4) знайдемо зв'язок між параметрами A_0 та A_1 :

$$A_1 = -\frac{2\alpha (-\hbar^2 \alpha \pm \sqrt{3e^4 m^2 - 6e^2 m \alpha \hbar^2 + 4\alpha^2 \hbar^4})}{3(-e^2 m + 2\alpha \hbar^2 \pm \sqrt{3e^4 m^2 - 6e^2 m \alpha \hbar^2 + 4\alpha^2 \hbar^4})} A_0. \quad (9.8)$$

Підставляючи (9.7) та (9.8) в (9.5) приходимо до рівняння, яке визначає параметр α :

$$\begin{aligned} -9e^6 m^3 + 36e^4 m^2 \alpha \hbar^2 - 51e^2 m \alpha^2 \hbar^4 + 28\alpha^3 \hbar^6 = \\ = \pm \sqrt{3e^4 m^2 - 6e^2 m \alpha \hbar^2 + 4\alpha^2 \hbar^4} (3e^4 m^2 - 12e^2 m \alpha \hbar^2 + 13\alpha^2 \hbar^4). \end{aligned} \quad (9.9)$$

Підводячи до квадрата праву та ліву частини цього рівняння отримаємо

$$(e^2 m - 2\alpha \hbar^2) (e^2 m - \alpha \hbar^2)^5 = 0,$$

тобто

$$\alpha_1 = \frac{e^2 m}{\hbar^2} = \frac{1}{a_0}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2a_0},$$

де a_0 — радіус Бора. Підставляючи ці значення в (9.9) одержимо, що α_1 відповідає випадку, коли перед коренем обирається знак «+», а α_2 — коли обирається знак «-». При цьому (9.8) зводиться до $A_1 = 0$ (в першому випадку) і до $A_1 = -\frac{A_0}{2a_0}$ (в другому випадку). В кожному випадку параметр A_0 отримаємо з умови нормування. Легко бачити, що перший випадок відповідає $1S$ стану, а в другий випадок — $2S$ стану атома водню.

Розділ 10

Частинка у зовнішньому електромагнітному полі

1. Властивості частинки, яка має спін $\frac{1}{2}$, заряд q та знаходиться у зовнішньому електромагнітному полі, описуються рівнянням Паулі

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + q\varphi - \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} \right] \Psi(\mathbf{x}, t), \quad (10.1)$$

де φ та \mathbf{A} — скалярний та векторний потенціали електромагнітного поля, q — заряд частинки, а $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ — оператор спінового магнітного моменту частинки. Останній пов'язаний з оператором спіна $\hat{\mathbf{S}}$ співвідношенням

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = 2\mu\hat{\mathbf{S}}.$$

Коефіцієнт μ , який називають величиною спінового магнітного моменту, є значенням проекції магнітного моменту μ_z , яке відповідає проекції спіну (в одиницях \hbar) $s_z = \frac{1}{2}$.

Оператор спіна $\frac{1}{2}$ записується через матриці Паулі $\boldsymbol{\sigma}$

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma},$$

де $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ є наступний триплет матриць 2×2 :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Для електрона останній член гамільтоніана в правій частині рівняння (10.1) є

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}.$$

де $\mu_B = \frac{e\hbar}{2M_e c}$ — магнетон Бора, e — елементарний електричний заряд.

2. Хвильова функція представляє собою двурядну матрицю-стовпчик (спінор)

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{x}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}.$$

Умова нормування:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t) = \int d^3x [|\Psi_1(\mathbf{x}, t)|^2 + |\Psi_2(\mathbf{x}, t)|^2].$$

10.1 Задачі

10.1. Отримати рівняння неперервності для частинки без спіна (такою може бути, наприклад заряджений π -мезон), яка знаходиться у зовнішньому магнітному полі. Що буде струмом густини ймовірності?

10.2. Знайти оператор прискорення для зарядженої частинки без спіна у зовнішньому електромагнітному полі. Дати фізичну інтерпретацію результату.

10.3. Знайти похідну по часу від оператора спіна електрона, який знаходиться у зовнішньому магнітному полі.

10.4. Нейтрон знаходиться у зовнішньому магнітному полі \mathbf{B} . Знайти оператор його прискорення. Відомо, що електричний заряд у нейтрона відсутній, проте магнітний момент відмінний від нуля і становить $\mu_n \approx -1,913$ ядерних магнетонів.

10.5. Нейтрон знаходиться у зовнішньому магнітному полі, яке змінюється по закону

$$\begin{aligned} B_1 &= B_{\perp} \cos \omega t, & B_2 &= B_{\perp} \sin \omega t, \\ B_3 &= B, & B &= \text{const.} \end{aligned}$$

Знайти закон зміни ймовірності різних значень проекції спіна нейтрона s_3 з часом при умові, що в початковий момент часу $t = 0$ проекція спіна $s_z(t = 0) = \frac{1}{2}$. Розглянути випадок, коли $B_{\perp} \ll B_3$.

Вказівки:

- Зробити заміну для компонент спінора

$$\Psi_1 = e^{-\frac{i\omega t}{2}} \phi_1 \quad \text{та} \quad \Psi_2 = e^{\frac{i\omega t}{2}} \phi_2.$$

Одержати систему рівнянь на функції ϕ_1 та ϕ_2 .

- Шукати розв'язок системи рівнянь у вигляді

$$\phi_1 = C_1 e^{i\Omega t} + C_2 e^{-i\Omega t} \quad \text{та} \quad \phi_2 = C_3 e^{i\Omega t} + C_4 e^{-i\Omega t}.$$

10.7 Знайти діамагнітну спийнятливність атомарного водню. Вважати, що атоми перебувають в основному стані.

10.2 Відповіді та розв'язки задач

10.1. У разі, коли спін частинки дорівнює нулю, $\hat{\boldsymbol{\mu}} = 0$ і замість рівняння (10.1) маємо

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + q\varphi \right] \Psi(\mathbf{x}, t), \quad (10.2)$$

причому $\Psi(\mathbf{x}, t)$ буде просто комплексною функцією. Домножимо це рівняння зліва на $\Psi^*(\mathbf{x}, t)$. В результаті після нескладних перетворень одержимо

$$i\hbar\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2M} \left\{ -\hbar^2 [\nabla(\Psi^*\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\nabla\Psi] + \right. \\ \left. + \frac{i\hbar q}{c} (|\Psi|^2 \operatorname{div}\mathbf{A} + 2\mathbf{A} \cdot \Psi^*\nabla\Psi) + \right. \\ \left. + \left(\frac{q^2}{c^2} \mathbf{A}^2 + q\varphi \right) |\Psi|^2 \right\}. \quad (10.3)$$

Візьмемо рівняння комплексно спряжене до (10.2) і домножимо його справа на $\Psi(\mathbf{x}, t)$:

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi = \frac{1}{2M} \left\{ -\hbar^2 [\nabla((\nabla\Psi^*)\Psi) - (\nabla\Psi^*)\nabla\Psi] - \right. \\ \left. - \frac{i\hbar q}{c} (|\Psi|^2 \operatorname{div}\mathbf{A} + 2\mathbf{A} \cdot \nabla(\Psi^*)\Psi) + \right. \\ \left. + \left(\frac{q^2}{c^2} \mathbf{A}^2 + q\varphi \right) |\Psi|^2 \right\}. \quad (10.4)$$

Від рівняння (10.3) віднімемо рівняння (10.4), в результаті чого прийдемо до наступної рівності:

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} = \operatorname{div} \left[\frac{\hbar}{2iM} ((\nabla\Psi^*)\Psi - \Psi^*\nabla\Psi) + \frac{\hbar q}{mc} \mathbf{A} |\Psi|^2 \right].$$

Отже струмом ймовірності є вектор

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2iM} ((\nabla\Psi^*(\mathbf{x}, t))\Psi(\mathbf{x}, t) - \Psi^*(\mathbf{x}, t)\nabla\Psi(\mathbf{x}, t)) + \frac{\hbar q}{mc} \mathbf{A} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2.$$

10.2. Оператор прискорення визначається як

$$\hat{\mathbf{a}} = \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt} = \frac{\partial\hat{\mathbf{v}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{v}}],$$

де оператор швидкості є

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{M} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right).$$

Беручи до уваги те, що оператор імпульсу не залежить від часу, одержимо

$$\frac{\partial\hat{\mathbf{v}}}{\partial t} = -\frac{q}{c} \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t},$$

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{v}}] = \frac{M}{2} [\hat{\mathbf{v}}^2, \hat{\mathbf{v}}] + \frac{q}{M} [\varphi, \hat{\mathbf{p}}] = \frac{M}{2} [\hat{\mathbf{v}}^2, \hat{\mathbf{v}}] + i\hbar(\nabla\varphi),$$

$$\hat{\mathbf{a}} = -\frac{q}{c} \left(\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \nabla\varphi \right) + \frac{i}{2\hbar M} [\hat{\mathbf{v}}^2, \hat{\mathbf{v}}].$$

Нагадаємо, що для частинки у зовнішньому магнітному полі різні компоненти оператора швидкості не комутують,

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = \frac{iq\hbar}{M^2 c} \sum_k \varepsilon_{ijk} B_k,$$

тому

$$[\widehat{\mathbf{v}}^2, \widehat{\mathbf{v}}] = -\frac{iq\hbar}{M^2c} (\widehat{\mathbf{v}} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \widehat{\mathbf{v}}).$$

в результаті чого отримаємо

$$\widehat{\mathbf{a}} = \frac{q}{M} \boldsymbol{\mathcal{E}} + \frac{q}{2Mc} (\widehat{\mathbf{v}} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \widehat{\mathbf{v}}),$$

де $\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ — напруженність електричного поля.

Якщо помножити праву та ліву частину виразу для прискорення на масу частинки, то одержимо силу Лоренца.

10.3. Використовуючи визначення похідної по часу одержимо

$$\frac{d\widehat{s}_1}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\widehat{H}, \widehat{s}_1] = \frac{i}{2} [\widehat{H}, \sigma_i] = \frac{i\mu_B}{2} [\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \sigma_i].$$

Беручи до уваги комутаційне співвідношення між компонентами матриць Паулі одержимо

$$\frac{d\widehat{\mathbf{s}}}{dt} = \mu_B \mathbf{B} \times \boldsymbol{\sigma}.$$

10.4. В зв'язку з тим, що для нейтрона $q = 0$, гамільтоніан нейтрона в зовнішньому магнітному полі є

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M_n} \Delta - \mu_n \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

а оператор швидкості $\widehat{\mathbf{v}} = \frac{\hbar}{iM_n} \nabla$. Тоді

$$\widehat{\mathbf{a}} = \frac{i}{\hbar} [\widehat{H}, \widehat{\mathbf{v}}] = -\frac{\mu_n}{M_n} [\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \nabla] = \frac{\mu_n}{M_n} \nabla (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}).$$

10.5. Розпишемо рівняння (10.2) по компонентам спінора $\Psi_1(t)$ і $\Psi_2(t)$:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\Psi_1(t)}{dt} = -\mu_n B_{\perp} e^{-i\omega t} \Psi_2(t) - \mu_n B \Psi_1(t), \\ i\hbar \frac{d\Psi_2(t)}{dt} = -\mu_n B_{\perp} e^{i\omega t} \Psi_1(t) + \mu_n B \Psi_2(t). \end{cases} \quad (10.5)$$

Зробимо заміну

$$\Psi_1(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \phi_1(t), \quad \Psi_2(t) = e^{i\frac{\omega t}{2}} \phi_2(t),$$

в результаті чого система (10.5) перейде в

$$\begin{cases} i\dot{\phi}_1 = -\gamma_1 \phi_1 - \gamma_2 \phi_2, \\ i\dot{\phi}_2 = \gamma_1 \phi_2 - \gamma_2 \phi_1, \end{cases} \quad (10.6)$$

де $\gamma_1 = \frac{\omega}{2} + \frac{\mu_n B}{\hbar}$ та $\gamma_2 = \frac{\mu_n B_{\perp}}{\hbar}$.

Будемо шукати розв'язок системи (10.6) у вигляді

$$\begin{aligned}\phi_1(t) &= C_1 e^{i\Omega t} + C_2 e^{-i\Omega t}, \\ \phi_2(t) &= C_3 e^{i\Omega t} + C_4 e^{-i\Omega t}.\end{aligned}\tag{10.7}$$

Підставляючи (10.7) в (10.6) отримаємо наступну систему лінійних рівнянь на коефіцієнти C_n

$$\begin{cases} (\gamma_1 - \Omega)C_1 = -\gamma_2 C_3, \\ (\gamma_1 + \Omega)C_2 = -\gamma_2 C_4, \\ (\gamma_1 + \Omega)C_3 = \gamma_2 C_1, \\ (\gamma_1 - \Omega)C_4 = \gamma_2 C_2.\end{cases}\tag{10.8}$$

З перших двох рівнянь знайдемо зв'язок між коефіцієнтами

$$\begin{aligned}C_3 &= \frac{\Omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_1, \\ C_4 &= \frac{\Omega + \gamma_1}{\gamma_2} C_2.\end{aligned}$$

Підставивши ці співвідношення у два останніх рівняння одержимо одне й те саме рівняння (одне з чотирьох рівнянь в (10.8) є залежним), яке визначає частоту Ω :

$$\Omega = \sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}.$$

Згідно з умовою задачі в момент часу $t = 0$ хвильова функція є

$$\Psi(0) = \Psi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Звідси випливають дві умови на коефіцієнти C_1 та C_2

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = 1, \\ \frac{\Omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_1 - \frac{\Omega + \gamma_1}{\gamma_2} C_2 = 0,\end{cases}$$

розв'язуючи які одержимо

$$\begin{aligned}C_1 &= \frac{\Omega + \gamma_1}{2\Omega}, \\ C_2 &= \frac{\Omega - \gamma_1}{2\Omega}, \\ C_3 &= -C_4 = \frac{\gamma_2}{2\Omega}.\end{aligned}$$

Отже, хвильова функція є

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(t) \\ \Psi_2(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2\Omega} \begin{pmatrix} [(\Omega + \gamma_1)e^{i\Omega t} + (\Omega - \gamma_1)e^{-i\Omega t}] e^{-\frac{i\omega t}{2}} \\ 2i\gamma_2 \sin \Omega t e^{\frac{i\omega t}{2}} \end{pmatrix}.$$

Ймовірність того, що нейтрон має $s_z = \frac{1}{2}$ або $-\frac{1}{2}$, визначається як $|\Psi_1(t)|^2$ та $|\Psi_2(t)|^2$, відповідно:

$$w_{\uparrow} = |\Psi_1(t)|^2 = \frac{1}{2\Omega^2} (2\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + \gamma_2^2 \cos^2 \Omega t),$$
$$w_{\downarrow} = |\Psi_2(t)|^2 = \frac{\gamma_2^2 \sin^2 \Omega t}{2\Omega^2}.$$

Якщо $B_{\perp} \ll B$, $\gamma_2 \ll \gamma_1 \sim \Omega$, тому $w_{\uparrow} \approx 1$ і $w_{\downarrow} \ll 1$. Проте, коли $B \approx -\frac{\hbar\omega}{2\mu_n}$, то настає резонансне зростання ймовірності w_{\downarrow} .

Розділ 11

Нестационарна теорія збурень

1. Нестационарна теорія збурень вживається для опису квантових переходів. Допускається, що гамільтоніан системи можна записати у вигляді

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(\mathbf{x}, t),$$

де \hat{H}_0 не залежить від часу, а збурення $\hat{H}_1(\mathbf{x}, t)$ залежить від часу явним чином.

2. Розв'язок нестационарного рівняння Шрьодінгера шукається у вигляді

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(\mathbf{x}),$$

де $\psi_n(\mathbf{x})$ — розв'язок стаціонарного рівняння Шрьодінгера

$$\hat{H}_0 \psi_n(\mathbf{x}) = E_n \psi_n(\mathbf{x}).$$

3. Якщо до моменту часу $t = 0$ система знаходилась у квантовому стані m , то ймовірність її переходу за час τ у стан n визначається як

$$w_{m \rightarrow n}(\tau) = |c_n(\tau)|^2. \quad (11.1)$$

4. Коефіцієнти $c_n(\tau)$ розраховуються по теорії збурень, тобто коефіцієнт розкладається в ряд по степені взаємодії

$$c_n(\tau) = c_n^{(0)}(\tau) + c_n^{(1)}(\tau) + c_n^{(2)}(\tau) + \dots$$

і далі послідовно розраховуються окремі доданки цього ряду (докладно див. [7]):

$$\begin{aligned} c_n^{(0)}(\tau) &= \delta_{nm}, \\ c_n^{(k)}(\tau) &= \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^k \sum_{r_1, r_2, \dots, r_{k-1}} \int_0^\tau dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{k-1}} dt_{k-1} \times \\ &\times \exp \left[i (\omega_{nr_1} t_1 + \omega_{r_1 r_2} t_2 + \cdots + \omega_{mr_{k-1}} t_{k-1}) \right] \times \\ &\times W_{nr_1}(t_1) W_{r_1 r_2}(t_2) \cdots W_{r_{k-1} m}(t_{k-1}), \quad \text{при } k \geq 1. \end{aligned}$$

Тут введено такі позначення:

$$\omega_{r_i r_j} = \frac{E_{r_i} - E_{r_j}}{\hbar}, \quad W_{r_i r_j}(t) = \int \psi_{r_i}^*(\mathbf{x}) \hat{H}_1(\mathbf{x}, t) \psi_{r_j}(\mathbf{x}) d^3 r. \quad (11.2)$$

В першому порядку теорії збурень

$$c_n^{(1)}(\tau) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\tau dt e^{i\omega_{nm}t} W_{nm}(t). \quad (11.3)$$

11.1 Задачі

11.1. На частинку, яка знаходиться у безмежно глибокій потенціалній ямі завширшки a ($0 < x < a$), діє збурення $\hat{H}_1(x, t) = V(x)F(t)$, де

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{при } b < x < a - b, \\ 0, & \text{у інших випадках.} \end{cases}$$

В момент часу $t = -\infty$ частинка знаходилась у стані n . В першому порядку теорії збурень знайти ймовірність, з якою частинка перейде у стан n' в момент часу $t = \infty$. Вважати, що (1) $F(t) = \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)$, (2) $\exp\left(-\frac{|t|}{\tau}\right)$, (3) $\left[1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right]^{-1}$.

11.2. Лінійний гармонічний осцилятор з зарядом Q знаходиться у зовнішньому однорідному електричному полі, яке змінюється з часом $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 F(t)$. В момент часу $t = -\infty$ частинка знаходилась у стані n . В першому порядку теорії збурень

- (1) вивести правила відбору;
 - (2) знайти ймовірність, з якою частинка перейде у стан n' в момент часу $t = \infty$.
- Залежність від часу обрати таку, як і в попередній задачі.

11.3. Квантова система має два стаціонарних стан ψ_1 та ψ_2 , які відповідають енергії $E_1 = \hbar\omega_1$ та $E_2 = \hbar\omega_2$. При $t < 0$ система знаходиться у стані ψ_1 . В момент часу $t = 0$ вмикається збурення \hat{H}_1 надалі незалежне від часу. В першому порядку теорії збурень знайти:

- (1) хвильову функцію системи $\Psi(t)$ в момент часу $t > 0$,
- (2) ймовірність переходу $w_{1 \rightarrow 2}(t)$.

11.2 Відповіді та розв'язки задач

11.1. Скористаємось формулою (11.2) і одержимо

$$\begin{aligned} W_{nn'}(t) &= F(t) I_{nn'}, \\ I_{nn'} &= \frac{2V_0}{a} \int_b^{a-b} dx \sin \frac{\pi n' x}{a} \sin \frac{\pi n x}{a} = \\ &= \frac{2V_0}{\pi} \times \begin{cases} 0, & \text{якщо } n + n' \text{ непарне,} \\ \frac{1}{n - n'} \sin \frac{\pi(n - n')b}{a} - \frac{1}{n + n'} \sin \frac{\pi(n + n')b}{a}, & \text{якщо } n + n' \text{ парне.} \end{cases} \end{aligned}$$

Тоді $w_{n \rightarrow n'} = |c_{n'}|^2$, де $c_{n'}$ визначається формулою (11.3)

$$c_{n'} = \frac{I_{nn'}}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt F(t) e^{i\omega_{nn'}t} = \frac{\tau I_{nn'}}{\hbar} \mathcal{F}_{nn'}, \quad \omega_{nn'} = \frac{\hbar\pi^2(n'^2 - n^2)}{2md^2}$$

i

$$\mathcal{F}_{nn'} = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}}{i} \exp\left(-\frac{\omega_{nn'}^2 \tau^2}{4}\right), & (1) \\ \frac{2}{\hbar(1 + \tau^2 \omega_{nn'}^2)}, & (2) \\ \frac{\pi}{\hbar} \exp\left(-\frac{|\omega_{nn'}| \tau}{4}\right). & (3) \end{cases} \quad (11.4)$$

Умова застосування теорії збурень: $\frac{2V_0\tau}{\pi\hbar} \ll 1$, (1); $\frac{2V_0\tau}{\sqrt{\pi}\hbar} \ll 1$, (2); $\frac{2V_0\tau}{\hbar} \ll 1$, (3).

11.2. (1) Враховуючи те, що збурення є $H_1(x, t) = Q\mathcal{E}_0 x F(t)$, маємо (див. задачу 2.11):

$$\begin{aligned} W_{nn'}(t) &= Q\mathcal{E}_0 F(t) \langle n|x|n' \rangle = Q\mathcal{E}_0 F(t) \sqrt{\frac{\hbar}{2n\omega}} \left(\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \right) \equiv \\ &\equiv I_+ \delta_{n',n-1} + I_- \delta_{n',n+1}. \end{aligned}$$

Звідси одержуємо правило відбору $\Delta n = \pm 1$.

(2) Відповідно до (11.1) та (11.3) $w_{n \rightarrow n\pm 1} = (\hbar^{-1} I_{pm} \mathcal{F}_{n,n\pm 1})^2$, де $\mathcal{F}_{n,n\pm 1}$ визначається однією з формул (11.4).

11.3. (1) З умови задачі в нульовому порядку теорії збурень $c_1^{(0)}(t) = 1$, а $c^{(0)2}(t) = 0$. Користуючись формулою (11.3) одержимо поправки до коефіцієнтів розкладу $c_i(t)$ в першому порядку нестационарної теорії збурень:

$$\begin{aligned} c_1^{(1)}(t) &= \frac{W_{12}}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{12}t'} = \frac{W_{12}}{i\hbar\omega_{12}} (e^{i\omega_{12}t} - 1), \\ c_2^{(1)}(t) &= \frac{W_{21}}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{21}t'} = \frac{W_{12}}{i\hbar\omega_{12}} (1 - e^{-i\omega_{12}t}) = -c_1^{(1)}(t), \end{aligned}$$

де $\omega_{12} = -\omega_{21} = \omega_1 - \omega_2$, а $W_{12} = W_{21} = \int d^3x \psi_1^*(\mathbf{x}) \widehat{H}_1(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{x})$. Отже, в першому порядку теорії збурень хвильова функція буде:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}, t) &= \left[1 + c_1^{(1)}(t) \right] e^{-i\omega_1 t} \psi_1(\mathbf{x}) + c_1^{(2)}(t) e^{-i\omega_2 t} \psi_2(\mathbf{x}) = \\ &= \left[e^{-i\omega_1 t} + \frac{W_{12}}{\hbar\omega_{12}} (e^{-i\omega_2 t} - e^{-i\omega_1 t}) \right] \psi_1(\mathbf{x}) + \frac{W_{12}}{\hbar\omega_{12}} (e^{-i\omega_1 t} - e^{-i\omega_2 t}) \psi_2(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

$$(2) w_{1 \rightarrow 2}(t) = \left| c_1^{(2)}(t) \right|^2 = 2 \left(\frac{|W_{12}|}{\hbar\omega_{12}} \right)^2 [1 - \cos(\omega_1 - \omega_2)t].$$

Розділ 12

Багаточастинкові системи. Принцип тотожності. Формалізм представлення чисел заповнення

1. В силу принципу тотожності частинок хвильова функція системи частинок одного сорту повинна бути симетричною або антисиметричною при перестановці частинок. Причому, хвильова функція симетрична при перестановці частинок із цілим спіном (*бозони*) і антисиметрична при перестановці частинок із напівцілим спіном (*ферміони*).

2. Для опису системи тотожних частинок часто застосовують формалізм представлення чисел заповнення. Його також називають *методом вторинного квантування*. З цією метою вводять поняття операторів народження та знищення, \hat{a}_n^\dagger та \hat{a}_n , частинки у квантовому стані n . За ознакою оператори народження та знищення задовольняють таким комутаційним співвідношенням:

$$\left. \begin{aligned} [\hat{a}_{n'}, \hat{a}_n^\dagger] &\equiv \hat{a}_{n'} \hat{a}_n^\dagger - \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'} = \delta_{n'n}, \\ [\hat{a}_{n'}, \hat{a}_n] &= [\hat{a}_{n'}^\dagger, \hat{a}_n^\dagger] = 0, \end{aligned} \right\} \text{ для бозонів,}$$
$$\left. \begin{aligned} \{\hat{a}_{n'}, \hat{a}_n^\dagger\} &\equiv \hat{a}_{n'} \hat{a}_n^\dagger + \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'} = \delta_{n'n}, \\ \{\hat{a}_{n'}, \hat{a}_n\} &= \{\hat{a}_{n'}^\dagger, \hat{a}_n^\dagger\} = 0, \end{aligned} \right\} \text{ для ферміонів.}$$

3. Оператори народження та знищення діють на вектор $|N_n\rangle$ стану, який включає N_n тотожних частинок, що знаходяться у квантовому стані n :

$$\hat{a}_n |N_n\rangle = \sqrt{N_n} |N_n - 1\rangle, \quad \hat{a}_n^\dagger |N_n\rangle = \sqrt{N_n + 1} |N_n + 1\rangle,$$

причому $\langle N_n | N_n \rangle = 1$. Дія оператора знищення на вакуум дає ноль, $\hat{a}_n |0\rangle = 0$.

Багаточастинковий стан визначається як результат послідовної дії оператора народження на вакуум:

$$|N_n\rangle = \sqrt{\frac{1}{N_n!}} (\hat{a}_n^\dagger)^{N_n} |0\rangle,$$

де множник $\sqrt{\frac{1}{N_n!}}$ введено для нормування, $\langle N_{n'} | N_n \rangle = \delta_{n'n}$.

4. Оператор $\hat{a}_n \hat{a}_n^\dagger$ представляє оператор числа частинок, які знаходяться у квантовому стані n :

$$\hat{a}_n \hat{a}_n^\dagger |N_n\rangle = N_n |N_n\rangle.$$

Гамільтоніан системи невзаємодіючих між собою тотожних частинок є

$$\hat{H} = \sum_n \hat{a}_n \hat{a}_n^\dagger E_n,$$

де E_n — енергія частинки у квантовому стані n .

12.1 Задачі

12.1. Для системи двох частинок із спіном s :

- (1) побудувати симетричні та антисиметричні спінові функції;
- (2) знайти скільки існує симетричних та антисиметричних хвильових функцій;
- (3) розглянути випадок частинок із спіном $s = \frac{1}{2}$ та виписати явно відповідні хвильові функції, знайти чому дорівнює повний спін S для кожної з них?

12.2. В ядерній фізиці часто розглядають протон та нейтрон, як два зарядових стани однієї частинки, яку називають нуклон. При цьому діє узагальнений принцип Паулі, який вимагає антисиметрії хвильової функції відносно перестановки будь-яких двох нуклонів. Виходячи з узагальненого принципу Паулі встановити яке значення повного моменту кількості руху I має двонуклонна система, яка знаходиться у стані з відносним орбітальним моментом $L = 0$ (S -стан), в залежності від нуклонного складу системи.

12.3. Пояснити з точки зору симетрії хвильової функції продуктів розпаду чому ρ^0 -мезон не розпадається по каналу $\rho^0 \rightarrow \pi^0 + \pi^0$, але розпадається по каналу $\rho^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$. Спін π -мезонів дорівнює 0, а спін ρ -мезону дорівнює 1. Скрізь верхній індекс означає електричний заряд частинки.

12.4. Використовуючи формалізм чисел заповнення розрахувати середні значення x^2 та x^4 для гармонічного осцилятора.

12.5. Розглянути перетворення операторів народження та знищення

$$\hat{\tilde{a}} = A\hat{a} + B\hat{a}^\dagger, \quad \hat{\tilde{a}}^\dagger = A\hat{a}^\dagger + B\hat{a},$$

де A та B довільні дійсні числа. При яких значеннях коефіцієнтів A та B перехід від операторів народження та знищення \hat{a}^\dagger та \hat{a} до нових операторів $\hat{\tilde{a}}^\dagger$ та $\hat{\tilde{a}}$ буде канонічним, тобто збережуться комутаційні співвідношення? Розглянути обидва випадки, бозе та фермі операторів.

12.6. Для бозе операторів народження та знищення $\hat{\tilde{a}}^\dagger$ та $\hat{\tilde{a}}$ (див. результати попередньої задачі) побудувати вакуумний стан $|\hat{\tilde{0}}\rangle$. Знайти розподіл бозонів у новому вакуумному стані.

12.2 Відповіді та розв'язки задач

12.1. (1) Якщо $m_1 \neq m_2$ то симетрична та антисиметрична хвильові функції будуть:

$$\chi_{\text{сим}}(m_1, m_2) = \sqrt{\frac{1}{2}} (\chi_{m_1}^{(1)} \chi_{m_2}^{(2)} + \chi_{m_2}^{(1)} \chi_{m_1}^{(2)}),$$

$$\chi_{\text{а.с.}}(m_1, m_2) = \sqrt{\frac{1}{2}} (\chi_{m_1}^{(1)} \chi_{m_2}^{(2)} - \chi_{m_2}^{(1)} \chi_{m_1}^{(2)}).$$

У випадку, коли $m_1 = m_2 = m$ симетричними хвильовими функціями будуть $\chi_m^{(1)} \chi_m^{(2)}$. Симетричних функції буде $(s+1)$, а антисиметричних $s(2s+1)$.

(2) $(2s+1)^2$ станів, хвильові функції $\chi_{m_1}^{(1)} \chi_{m_2}^{(2)}$.

(3) Один антисиметричний стан

$$\chi_0^{\text{сим}}(\uparrow, \downarrow) = \sqrt{\frac{1}{2}} (\chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)} - \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)}),$$

який відповідає $S = 0$, та три симетричних стани

$$\chi_1^{\text{а.с.}}(\uparrow, \uparrow) = \chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)}, \quad \chi_1^{\text{а.с.}}(\downarrow, \downarrow) = \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)},$$

$$\chi_1^{\text{а.с.}}(\uparrow, \downarrow) = \sqrt{\frac{1}{2}} (\chi_{\uparrow}^{(1)} \chi_{\downarrow}^{(2)} + \chi_{\downarrow}^{(1)} \chi_{\uparrow}^{(2)}),$$

яким відповідає $S = 1$.

12.2. Якщо спін $S = 1$, то двонуклонна система може існувати у трьох зарядових станах, pp , pn та nn . Якщо спін $S = 0$, то система може існувати лише у одному зарядовому стані pn .

12.3. В зв'язку з законом збереження моменту кількості руху повний момент двох π -мезонів в системі спокою ρ^0 -мезона має дорівнювати $j = 1$. Так як спін π -мезона дорівнює нулю, то j складається лише з орбітального моменту, $j = \ell = 1$ і тому хвильова функція двох π -мезонів виявляється антисиметричною при їх перестановці. З іншого боку, хвильова функція двох π^0 -мезонів повинна бути симетричною і тому розпад $\rho^0 \rightarrow \pi^0 + \pi^0$ заборонений законом збереження моменту кількості руху та принципом тотожності.

В разі розпаду на $\pi^+ + \pi^-$ частинки не тотожні, на них не потрібно накладати умову симетрії і розпад не заборонений.

12.4. $\langle n | x^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} (n + \frac{1}{2}),$

$$\langle n | x^4 | n \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4 | n \rangle = 3 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (2n^2 + 2n + 1).$$

12.5. Спочатку розглянемо випадок бозонів. Запишемо умову канонічності перетворення

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= [A\hat{a} + B\hat{a}^\dagger, A\hat{a}^\dagger + B\hat{a}] = \\ &= A^2 [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + AB [\hat{a}, \hat{a}] + AB [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] + B^2 [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = \\ &= A^2 - B^2 = 1. \end{aligned}$$

Звідси випливає, що $A = \text{ch}\alpha$, $B = \text{sh}\alpha$, де параметр α довільний.

У випадку ферміонів маємо дві умови канонічності $\{\widehat{a}, \widehat{a}^\dagger\} = 1$ та $\{\widehat{a}, \widehat{a}\} = 0$. З першої умови витікає $A^2 + B^2 = 1$, а з другої $AB = 0$. Таким чином маємо лише тривіальні розв'язки $A = \pm 1$ та $B = 0$, або $A = 0$ та $B = \pm 1$.

12.6. Скористуємось умовою повноти станів $|n\rangle$ і розложимо новий вакуум $|\widetilde{0}\rangle$ по цим станам $|\widetilde{0}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle$, де на коефіцієнти C_n потрібно наложити умову нормування $\sum_{n=0}^{\infty} C_n^2 = 1$. Для того, щоб $|\widetilde{0}\rangle$ був вакуумним станом для нових бозонів потрібно вимагати $\widehat{a}|\widetilde{0}\rangle = 0$, звідки випливає

$$(A\widehat{a} + B\widehat{a}^\dagger)|\widetilde{0}\rangle = A \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{n} |n-1\rangle + B \sum_{n=0}^{\infty} C_n \sqrt{n+1} |n+1\rangle = 0.$$

Зробимо заміни $n-1 \rightarrow n$ (в першій сумі) і $n=1 \rightarrow n$ (в другій сумі)

$$AC_1 |0\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} (A\sqrt{n+1}C_{n+1} + B\sqrt{n}C_{n-1}) |n\rangle = 0.$$

Звідси одержимо

$$C_1 = 0, \quad \text{та} \quad C_{n+1} = -\frac{B}{A} \sqrt{\frac{n}{n+1}} C_{n-1}$$

або

$$C_1 = 0, \\ C_n = \begin{cases} \left(-\frac{B}{A}\right)^k \sqrt{\frac{(2k-1)!!}{2^k k!}} C_0, & \text{при } n = 2k, \\ 0, & \text{при } n = 2k+1. \end{cases}$$

Коефіцієнт C_0 визначається з умови нормування

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n^2 = C_0^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{2^k k!} \left(\frac{B}{A}\right)^{2k} = \frac{C_0^2}{\sqrt{1 - (B/A)^2}} = AC_0^2 = 1,$$

тобто $C_0 = \sqrt{\frac{1}{A}}$.

Фізичний зміст коефіцієнтів C_n полягає у тому, що вони представляють амплітуду ймовірності знайти у новому вакуумі старих бозонів. Тому відповідна ймовірність $w_n = C_n^2$.

Розділ 13

Квантова теорія розсіяння

1. При зіткненні двох частинок з масами m_1 та m_2 виникають процеси двох типів, пружного та непружного розсіяння. У випадку пружного розсіяння частинки не змінюють свого складу, а лише обмінюються енергією та імпульсом,

$$m_1 + m_2 \rightarrow m_1 + m_2.$$

При непружному розсіянні частинки змінюють свій склад, або народжуються нові частинки,

$$\begin{aligned} m_1 + m_2 &\rightarrow \mu_1 + \mu_2, \\ m_1 + m_2 &\rightarrow \mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n. \end{aligned}$$

Звичайно, розсіяння відбувається внаслідок взаємодії між частинками, які стикаються, $U(\mathbf{r})$, де $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ — відстань між частинками.

2. Вважається, що у квантовій механіці, як і в класичній механіці, задача про пружне розсіяння двох частинок зводиться до розгляду руху однієї частинки з приведеною масою μ у полі $U(\mathbf{r})$.

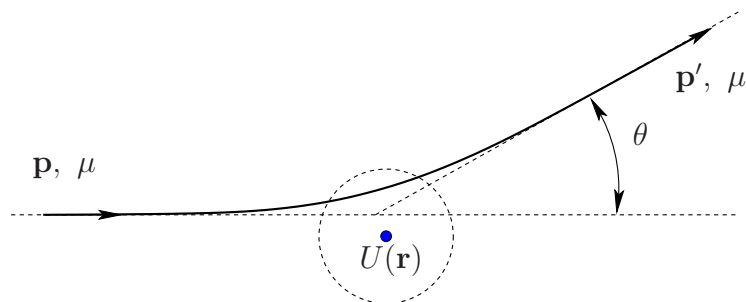


Рис. 13.1: Розсіяння частинки з приведеною масою μ на потенціалі

3. Диференціальний переріз процесу розсіяння $m_1 + m_2 \rightarrow m_3 + m_4$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu p'}{\mu' p} |A(E, \theta)|^2,$$

де $A(E, \theta)$ — амплітуда розсіяння, E — повна енергія двох частинок у системі їх центра мас, θ — кут розсіяння, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ та $\mu' = \frac{m_3 m_4}{m_3 + m_4}$ — приведені маси і p та p' — відносні імпульси початкового та кінцевого станів.

У випадку пружного розсіяння ця формула зводиться до

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A(E, \theta)|^2.$$

4. Амплітуди пружного розсіяння розраховуються на основі Борновський ряда:

$$\begin{aligned} A(E, \theta) = & -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}\right] U(\mathbf{r}) + \\ & + \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int d^3r d^3r' e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar}p|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}'} + \dots, \end{aligned} \quad (13.1)$$

де \mathbf{p} та \mathbf{p}' — імпульси частинки у початковому та кінцевому станах. Перший член такого ряду називають *борновським наближенням*.

5. У випадку розсіяння на центральному потенціалі хвильову функцію можна розкласти по поліномам Лежандра (вважається, що вісь z направлено вздовж \mathbf{k})

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \Phi_{k\ell}(r) P_{\ell}(\cos\theta),$$

де функція $\Phi_{k\ell}(r)$ задовольняє рівнянню

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} U(r) + k^2 \right] \Phi_{k\ell}(r) = 0.$$

У разі, коли $r \rightarrow \infty$ хвильова функція є (див. [7])

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left[i^{\ell} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}\ell\right) + \frac{i}{2}(1 - S_{\ell})e^{ikr} \right] P_{\ell}(\cos\theta),$$

де $S_{\ell}(k)$ називають матрицею розсіяння в стані з орбітальним моментом ℓ . В свою чергу, $S_{\ell}(k)$ може бути записана через фазовий зсув

$$S_{\ell}(k) = e^{2i\delta_{\ell}(k)}$$

і амплітуда розсіяння буде:

$$A(E, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}(k)} \sin\delta_{\ell}(k) P_{\ell}(\cos\theta).$$

13.1 Задачі

13.1. У борновському наближенні розглянути розсіяння частинки з зарядом Q на екранованому кулоновському полі ядра

$$|\mathcal{E}| = \frac{Ze}{r} e^{-r/r_0}. \quad (13.2)$$

Розглянути випадок, коли параметр екранування $r_0 \rightarrow \infty$ і знайти амплітуду розсіяння та диференціальний переріз процесу.

13.2. У борновському наближенні розрахувати амплітуду розсіяння та диференціальний переріз розсіяння на потенціалі сферичної сходинки

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } r < r_0, \\ 0 & \text{при } r > r_0. \end{cases}$$

Як залежить диференціальний переріз від кута розсіяння при $qr_0 \ll \hbar$ та $qr_0 \gg \hbar$? Тут $q = |\mathbf{q}|$, де $\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$.

13.3. Для потенціала сферичної сходинки (задача 13.2) знайти фазовий зсув для парціальної s -хвилі.

13.4. Знайти диференціальний переріз розсіяння електрона на атомі водню в основному стані.

Вказівка: Розглянути амплітуду розсіяння на атомі, як суму амплітуд розсіяння на ядрі та електроні $A(E, \theta) = A^{(a)}(E, \theta) + A^{(e)}(E, \theta)$.

13.2 Відповіді та розв'язки задач

13.1. Підставляючи в перший член ряду (13.1)

$$U(r) = \frac{QZe}{r} e^{-r/r_0}$$

одержимо амплітуду розсіяння в борновському наближенні:

$$\begin{aligned} A^{(B)}(k, \theta) &= - \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \frac{\mu QZe}{2\pi\hbar} \int d^3r r^{-1} \exp \left[- \left(\frac{r}{r_0} - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r} \right) \right] = \\ &= - \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \frac{2\mu QZe}{\hbar^2 \left(\frac{1}{r_0^2} - \frac{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}{\hbar^2} \right)} = \\ &= \frac{QZe\mu}{2(\hbar k)^2 \sin^2 \frac{1}{2}\theta}, \quad \text{де } p = \hbar k. \end{aligned} \quad (13.3)$$

Диференціальний переріз

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A^{(B)}(k, \theta)|^2 = \left[\frac{QZe\mu}{2(\hbar k)^2 \sin^2 \frac{1}{2}\theta} \right]^2$$

дає формулу Резерфорда.

13.2. Скористаємось формулою (13.1) для розсіяння на центральному потенціалі:

$$\begin{aligned} A^{(B)}(E, \theta) &= -\frac{\mu U_0}{\hbar^2 q} \int_0^{r_0} dr r \sin qr = \frac{\mu U_0}{\hbar^2 q} \frac{\partial}{\partial q} \int_0^{r_0} dr \cos qr = \\ &= \frac{2\mu U_0}{\hbar^2 q^3} [r_0 q \cos(r_0 q) - \sin(r_0 q)], \end{aligned}$$

де $q = \sqrt{\frac{8\mu E}{\hbar^2}} \sin \frac{\theta}{2}$. Диференційний переріз буде:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu U_0}{\hbar^2 q^3} \right)^2 [r_0 q \cos(r_0 q) - \sin(r_0 q)]^2.$$

При $r_0 q \ll 1$ покладемо

$$\cos(r_0 q) \approx 1 - \frac{1}{2}(r_0 q)^2 \quad \text{і} \quad \sin(r_0 q) \approx r_0 q - \frac{1}{6}(r_0 q)^3.$$

Тоді отримаємо

$$A^{(B)}(E, \theta) = \frac{2\mu U_0}{3\hbar^3} r_0^3,$$

тобто амплітуда розсіяння не залежить від кута розсіяння. Це означає, що розсіяння при низьких енергіях відбувається у парціальній s -хвилі.

При $r_0 q \gg 1$ другим доданком у виразі для амплітуди розсіяння можна знехтувати і одержимо

$$A^{(B)} \approx -\frac{r_0 U_0 \cos(r_0 q)}{4E \sin^2 \frac{\theta}{2}},$$

тобто амплітуда починає швидко осцілювати.

13.3. Розглянемо рівняння (13.2) для парціальної s -хвилі, поклавши в ньому $\Phi_{k0}(r) = \frac{1}{r} R_{k0}(r)$:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} U(k) + k^2 \right] R_{k0}(r) = 0.$$

Його розв'язок для потенціалу сферичної сходинки є

$$R_{k0}(r) = \begin{cases} \phi_1(r, k) & \text{при } r < r_0, \\ \phi_2(r, k) & \text{при } r > r_0, \end{cases}$$

де

$$\begin{aligned} \phi_1(r, k) &= N_1 \sin \kappa r, & \phi_2(r, k) &= N_2 \sin[kr + \delta_0(k)], \\ \kappa &= \sqrt{\frac{2\mu(E + U_0)}{\hbar^2}}, & k &= \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}. \end{aligned}$$

З умов зшивки у точці $r = r_0$ випливає

$$\frac{1}{\phi_1(r, k)} \frac{\partial \phi_1(r, k)}{\partial r} \Big|_{r=r_0} = \frac{1}{\phi_2(r, k)} \frac{\partial \phi_2(r, k)}{\partial r} \Big|_{r=r_0},$$

звідки одержимо фазовий зсув:

$$\delta_0(k) = -kr_0 + \operatorname{arctg} \left[\frac{\kappa}{k} \operatorname{ctg}(kr_0) \right].$$

13.4. Амплітуда розсіяння $A^{(s)}(E, \theta)$ задається остінним виразом в (13.3) в якому $Q = -e$, а $Z = 1$. В свою чергу, амплітуду розсіяння на електроні розглянемо як розсіяння на ефективному потенціалі $U_{\text{еф}}(r)$, який створює електрон атома. Останній є усередненим кулоновським потенціалом взаємодії між двома електронами

$$U_{\text{еф}}(r) = e^2 \int d^3\rho \frac{|\psi_{1s}(\rho)|^2}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|},$$

де \mathbf{r} та $\boldsymbol{\rho}$, відповідно, координати електрона, який розсіюється, та атомного електрона. Тоді в борновському наближенні амплітуда $A^{(e)}(E, \theta)$ буде

$$\begin{aligned} A^{(e)}(E, \theta) &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U_{\text{еф}}(r) = \\ &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r d^3\rho \frac{|\psi_{1s}(\rho)|^2}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad \mathbf{q} = \frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar}. \end{aligned}$$

Виконуючи заміну $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}$ одержимо:

$$A^{(e)}(E, \theta) = A^{(s)}(E, \theta) F(q^2), \quad q^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

де

$$F(q^2) = \int d^3\rho \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}\right) |\psi(\rho)|^2$$

— форм-фактор атома. Після інтегрування одержимо:

$$F(q^2) = \frac{16}{(4 + q^2 a_0^2)^2},$$

де a_0 — радіус Бора.

В результаті одержимо:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4a_0^2 \frac{\left[8 + \left(\frac{qa_0}{\hbar}\right)^2\right]^2}{\left[4 + \left(\frac{qa_0}{\hbar}\right)^2\right]^4}.$$

Розділ 14

Релятивістська квантова механіка

1. Коваріантні та контрваріантні 4-вектори a_μ та a^μ пов'язані між собою співвідношенням¹:

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu,$$

де $g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu}$ — метричний тензор простору Мінковського

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

4-вектори координати

$$\begin{aligned} x_\mu &= (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, -x^1, -x^2, -x^3) \equiv (ct, -\mathbf{x}), \\ x^\mu &= (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x^1, x^2, x^3) \equiv (ct, \mathbf{x}) \end{aligned}$$

та оператор 4-імпульса

$$\begin{aligned} \hat{p}_\mu &= i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \\ \hat{p}^\mu &= i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu}. \end{aligned}$$

2. Рівняння Клейна-Гордона-Фока описує частинку з спіном 0.

2.1 Коваріантна форма рівняння Клейна-Гордона-Фока

$$[\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu - (mc)^2] \psi(x) = 0.$$

2.2 Рівняння неперервності

$$\frac{\partial j^\mu(x)}{\partial x^\mu} = 0, \quad \text{де} \quad j^\mu(x) = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_\mu} - \psi(x) \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x_\mu} \right].$$

¹Тут і далі опускається знак суми по індексу, який повторюється.

2.3 Існує два типа плоско-хвильових розв'язків рівняння Клейна-Гордона-Фока

$$\psi_{\mathbf{p}}^{(+)} = A \exp \left[+\frac{i}{\hbar} (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} - Et) \right], \quad \psi_{\mathbf{p}}^{(-)} = A \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} - Et) \right],$$

де $E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}$. Їх називають додатньо- та відємно-частотними розв'язками.

3. Рівняння Дірака описує частинку з спіном $\frac{1}{2}$.

3.1 Коваріантна форма рівняння Дірака

$$(\not{p} - mc) \psi(x) = 0,$$

де $\psi(x)$ — чотиримірна матриця-стовпчик (спіно́р Дірака)

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix},$$

а $\not{p} \equiv \gamma^\mu \hat{p}_\mu$. В останньому виразі γ^μ — матриці 4×4 (матриці Дірака), які задовольняють такій властивості

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}.$$

В усіх задачах використовується наступний вибір матриць Дірака²

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & \gamma^1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \gamma^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \gamma^3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Зручно записати матриці Дірака та спіно́р Дірака у блочному вигляді через матриці 2×2 та звичайні 2-мірні спіно́ри

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad \gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix},$$

де $\mathbf{1}$ — одинична матриця 2×2 та $\boldsymbol{\sigma}$ — матриці Паулі.

²Існують різні вибори матриць Дірака, які задовольняють вказаному антикомутаційному співвідношенню. Звичайно, фізичні результати не залежать від конкретного вибору цих матриць.

3.2 Можна записати рівняння Дірака у вигляді часового рівняння Шрьодінгера

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

Тут $\psi(x)$ — спіно́р Дірака (див. розд. 14.3.1), а

$$\hat{H} = i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \nabla + \beta mc^2, \quad (14.1)$$

де $\beta = \gamma^0$, $\boldsymbol{\alpha} = \beta \boldsymbol{\gamma}$ (їх також називають матрицями Дірака), або в блочному вигляді

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}.$$

Звичайно, ця форма запису рівняння Дірака не є коваріантною.

3.3 Рівняння неперервності

$$\frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} = 0, \quad j^\mu = c(\rho, \mathbf{j}) = c\psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^\mu\psi(x) \equiv \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x),$$

де $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0 = (\psi_1^*, \psi_2^*, -\psi_3^*, -\psi_4^*)$ — спіно́р спряжений по Діраку.

3.4 Існує два типа плоско-хвильових розв'язків рівняння Дірака

$$\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}(x) = A \left(\frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\chi}{mc^2 + E} \right) e^{+\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} - Et)}, \quad \psi_{\mathbf{p}}^{(-)}(x) = A \left(-\frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\chi}{mc^2 - E} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{p} - Et)},$$

де $E = \sqrt{m^2c^4 + c^2\mathbf{p}^2}$. Як і у випадку рівняння Клейна-Гордона-Фока їх називають додатньо- та відємно-частотними розв'язками.

14.1 Задачі

14.1. Розглянути пакети розв'язків рівняння Клейна-Гордона-Фока кожного типу:

$$\Psi^{(\pm)}(x) = \int d^3p A(\mathbf{p}) \psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}(x).$$

Для кожного з пакетів знайти величину $Q = \int d^3x j_0(x)$ та показати, що вона не залежить від часу і має свій знак.

14.2. Розглянути рівняння Клейна-Гордона-Фока для частинки у зовнішньому електромагнітному полі. З цією метою у рівнянні для вільної частинки зробити заміну

$$\hat{p}_\mu \rightarrow \hat{p}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu. \quad (14.2)$$

Як зміниться рівняння при заміні хвильової функції на комплексно спряжену $\psi(x) \rightarrow \psi_c(x) = \psi^*(x)$? Дати фізичну інтерпретацію одержаного результату. **Вказівка:** Розглянути стаціонарний стан $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\mathbf{r})$ та порівняти одержане рівняння з нерелятивістським рівнянням для воднеподібного атома.

14.3. З урахуванням релятивістських ефектів знайти енергетичний спектр воднеподібного атома, в якому електрон замінено на π^- -мезон (частинка без спіну та з зарядом $-e$). Вважати ядро безмежно важким; знехтувати внеском ядерної взаємодії між ядром та π -мезоном.

Вказівка: Розглянути стаціонарний стан $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\mathbf{r})$ та порівняти одержане рівняння з нерелятивістським рівнянням для воднеподібного атома.

14.4. Які з наведених нижче операторів комутують з гамільтоніаном діраковської частинки

(1) імпульс $\hat{\mathbf{p}}$,

(2) орбітальний момент $\hat{\ell}$,

(3) квадрат орбітального моменту $\hat{\ell}^2$,

(4) спін $\hat{\mathbf{s}}$ (5) квадрата спіна $\hat{\mathbf{s}}^2$,

(6) повний момент $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\ell} + \hat{\mathbf{s}}$,

(7) проекція спіна на напрям руху частинки (спіральність) $\Lambda = \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{s}}}{|\mathbf{p}|}$?

Примітка: У блочному вигляді оператор спіна є

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2} \Sigma, \quad \text{де} \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}.$$

14.5. Імпульс частинки у зовнішньому електромагнітному полі є $\hat{\boldsymbol{\pi}} = \frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A}$. Показати, що для частинки Дірака виконується рівність

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{\pi}}}{dt} = e(\boldsymbol{\mathcal{E}} + c^{-1}\mathbf{B}),$$

що є операторним аналогом сили Лоренца.

14.6. В кварковій моделі протон розглядається як зв'язаний стан трьох кварків. При цьому вважається, що кожен з кварків утримується самоузгодженим потенціалом, який створюють інші кварки (модель квазінезалежних кварків). Обираючи таку структуру самоузгодженого потенціалу

$$U(r) = \frac{1 + \gamma_0}{2} V(r),$$

де $V(r)$ прямує до безмежності, коли $r \rightarrow \infty$, розглянути рівняння для квазінезалежного кварка

$$\left[i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{1 + \gamma_0}{2} V(r) \right] \psi(r, t) = 0$$

та знайти енергетичний спектр для кварка. Розраунок зробити для двох типів потенціалів: (1) $V(r) = V_0 + \lambda r$ та (2) $V(r) = V_0 + \kappa r^2$.

Вказівка: Розглянути стаціонарний стан $\Psi(r, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(r)$ та розкласти хвильову функцію по «верхніх» та «нижніх» спінорах та одержати рівняння для верхньої компоненти $\varphi(r)$.

14.2 Відповіді та розв'язки задач

14.1. $Q = \pm \frac{1}{mc^2} \int d^3p E_{\mathbf{p}} |A(\mathbf{p})|^2$, де $E_{\mathbf{p}} = \sqrt{m^2 c^4 + c^4 \mathbf{p}^2}$; знаки $+$ та $-$ відповідають, відповідно, додатньо- та відємно-частотним розв'язкам.

14.2. Запишемо рівняння Клейна-Гордона-Фока у зовнішньому електромагнітному полі:

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} - \frac{e}{c} A_\mu \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} - \frac{e}{c} A^\mu \right) - (mc)^2 \right] \psi(x) = 0. \quad (14.3)$$

Комплексно спряжене рівнянням визначає хвильову функцію $\psi^*(x)$:

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{e}{c} A_\mu \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{e}{c} A^\mu \right) - (mc)^2 \right] \psi^*(x) = 0. \quad (14.4)$$

Звідси видно, що така заміна відповідає зміні заряду частинки на протилежний і може бути інтерпретована як перехід від частинки до античастинки.

14.3. Враховуючи результат задачі 14.3 π^- -мезон в воднеподібному атомі описується рівнянням

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{e}{c} A_\mu \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{e}{c} A^\mu \right) - (mc)^2 \right] \psi(x) = 0,$$

де $A_\mu = \left(\frac{eZ}{r}, \mathbf{0} \right)$ а $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\mathbf{r})$. Після нескладних перетворень одержимо

$$\left(\frac{E^2}{mc^2} - mc^2 \right) \psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{m} \left(\Delta - \frac{e^4 Z^2}{c^2 r^2} - \frac{2Ee^2 Z}{c^2 r} \right) \psi(\mathbf{r}). \quad (14.5)$$

Розділяючи радіальну та кутові, $\psi(\mathbf{r}) = Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \phi_\ell(r)$, змінні рівняння (14.5) перепишемо у вигляді:

$$\tilde{E} \phi_\ell(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 \tilde{\ell}(\tilde{\ell} + 1)}{2mr^2} - \frac{e^2 \tilde{Z}}{r} \right) \phi_\ell(r), \quad (14.6)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \frac{E^2 - m^2 c^4}{2mc^2}, & \tilde{\ell} &= -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \tilde{\ell}(\tilde{\ell} + 1) - (\alpha Z)^2}, \\ \tilde{Z} &= \frac{ZE}{mc^2}, & \alpha &= \frac{e^2}{\hbar c}. \end{aligned}$$

Формально рівняння (14.6) співпадає з рівнянням для звичайного атома водню, звідки випливає

$$\tilde{E}_{n_r, \ell} = -\frac{e^4 \tilde{Z}^2 m}{2\hbar^2 \tilde{n}^2}, \quad \tilde{n} = n_2 + \ell + 1, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots,$$

що дає рівняння на $E_{n_r, \ell}$, розв'язуючи яке одержимо

$$E_{n_r, \ell} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(\alpha Z)^2}{\tilde{n}^2}}}.$$

14.4. Викорстаємо явний вигляд оператора Гамільтона (14.1). Тоді:

- (1) $[\hat{H}, \hat{p}_i] = c\alpha \cdot [\hat{\mathbf{p}}, \hat{p}_i] = 0;$
- (2) $[\hat{H}, \hat{\ell}_i] = c\alpha_j [\hat{p}_j, \hat{\ell}_i] = \frac{\hbar c}{i} (\hat{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}})_i \neq 0;$

$$(3) [\hat{H}, \hat{\ell}^2] = [\hat{H}, \hat{\ell}_i] \hat{\ell}_i + \hat{\ell}_i [\hat{H}, \hat{\ell}_i] = \frac{\hbar c}{i} [(\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}} + \hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot (\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}})] \neq 0;$$

(4) $[\hat{H}, \Sigma_i] = c\hat{\mathbf{p}} \cdot [\boldsymbol{\alpha}, \Sigma_i]$. Використовуючи блочну форму операторів $\boldsymbol{\Sigma}$ та $\boldsymbol{\alpha}$ одержимо:

$$[\alpha_j, \Sigma_i] = \begin{pmatrix} 0 & [\sigma_j, \sigma_i] \\ [\sigma_j, \sigma_i] & 0 \end{pmatrix} = 2i\epsilon_{jik}\alpha_k \neq 0;$$

Отже, $[\hat{H}, \Sigma_i] = 2i(\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}})_i \neq 0$.

(5) Враховуючи блочну форму оператора $\boldsymbol{\Sigma}$ легко показати, що $\hat{\mathbf{s}}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$, тобто ϵ просто числом, яке, звичайно, комутує з любым оператором.

$$(6) \text{ Використовуючи результати 2. та 4. маємо: } [\hat{H}, \hat{\mathbf{j}}] = [\hat{H}, \hat{\mathbf{s}}] + [\hat{H}, \hat{\boldsymbol{\ell}}] = 0.$$

$$(7) \text{ В зв'язку з тим, що оператор імпульсу комутує з гамільтоніаном, маємо } [\hat{H}, \Lambda] = p^{-1}\mathbf{p} \cdot [\hat{H}, \boldsymbol{\Sigma}] = 2icp^{-1}\mathbf{p} \cdot (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) = 0.$$

14.5. Для того, щоб одержати рівняння для діраковської частинки з зарядом e у зовнішньому електромагнітному полі зробимо заміну (14.2) в рівнянні Дірака. В результаті прийдемо до рівняння

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{x}, t), \quad \text{де} \quad \hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}} + \beta mc^2 + e\varphi.$$

В свою чергу, похідна по часу від узагальненого імпульса буде:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\boldsymbol{\pi}}}{dt} &= \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\pi}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\boldsymbol{\pi}}] = -\frac{e}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{ic}{\hbar} [\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}}, \hat{\boldsymbol{\pi}}] + \frac{ic}{\hbar} [\varphi, \hat{\mathbf{p}}] = \\ &= -e \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla \varphi \right) + \frac{ic}{\hbar} [\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}}, \hat{\boldsymbol{\pi}}]. \end{aligned}$$

Знайшовши комутатор $[\hat{\pi}_j, \hat{\pi}_i] = \frac{\hbar}{ic} \epsilon_{ijk} B_k$ одержимо

$$\frac{d\hat{\boldsymbol{\pi}}}{dt} = e \left(-\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{B} \right) = e \left(\boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{c} \hat{\mathbf{v}} \times \mathbf{B} \right),$$

де $\hat{\mathbf{v}} = c\boldsymbol{\alpha}$ — оператор миттєвої швидкості (див. розд.12.2.2 [7]).

14.6. Рівняння для стаціонарного стану $\Psi(r, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(r)$ квазінезалежного кварка буде

$$\left[\gamma_0 E - \frac{\hbar c}{i} \vec{\gamma} \cdot \nabla - \frac{1 + \gamma_0}{2c} V(r) \right] \psi(r) = 0. \quad (14.7)$$

Розкладемо хвильову функцію по верхніх та нижніх компонентах

$$\psi(r) = \begin{pmatrix} \phi(r) \\ \chi(r) \end{pmatrix},$$

в результаті чого рівняння для квазінезалежного кварка (14.7) зведеться до системи двох рівнянь

$$\begin{cases} [E - V(r)] \phi(r) = \frac{\hbar c}{i} \vec{\sigma} \cdot \nabla \chi(r), \\ E \chi(r) = \frac{\hbar c}{i} \vec{\sigma} \cdot \nabla \phi(r). \end{cases}$$

З другого рівняння одержимо $\chi(r) = \frac{\hbar c}{i} \frac{\vec{\sigma} \cdot \nabla}{E} \phi(r)$, підставимо цей вираз у перше рівняння і отримаємо рівняння на функцію $\phi(r)$

$$(\hbar c)^2 \Delta \phi(r) + E[E - V(r)] \phi(r) = 0$$

(тут було використано тотожністю $(\vec{\sigma} \cdot \nabla)^2 = \Delta$).

(1) Розглянемо лінійно зростаючий потенціал. Зробивши заміну $\phi(r) = \frac{1}{r} \varphi(r)$ перейдемо до радіальної функції $\varphi(r)$. Для неї рівняння буде

$$(\hbar c)^2 \varphi''(r) + E(E - V_0 - \lambda r) \varphi(r) = 0$$

з граничними умовами $\varphi(0) = 0$ та $\varphi(\infty) = 0$. З допомогою заміни $\rho = \beta \left(r - \frac{E - V_0}{\lambda}\right)$, де $\beta = \sqrt[3]{\frac{E\lambda}{(\hbar c)^2}}$ це рівняння зведеться до

$$\varphi''(\rho) = \rho \varphi(\rho).$$

Його розв'язок, який спадає при $\rho \rightarrow \infty$, є функція Ейрі першого роду

$$\varphi(\rho) = \text{Ai}(\rho).$$

Тепер потрібно задовольнити умові $\varphi|_{r=0} = 0$. Вона зводиться до умови $\rho|_{r=0} = a_n$, де $n = 1, 2, 3, \dots$, а a_n - положення n -го нуля функції Ейрі (див. Додаток А). З другого боку, ця умова приводить до квантування енергії кварка

$$E_{n-1} = V_0 - \frac{a_n \lambda}{\beta_n}, \quad \text{де} \quad \beta_n = \sqrt[3]{\frac{E_{n-1} \lambda}{(\hbar c)^2}}.$$

Це рівняння може бути розв'язано чисельними методами.

Маса протона виражається як

$$m_p c^2 = 3E_0.$$

Перший радіальний збуджений стан протону (має назву резонанс Ропера) відповідає випадку, коли один з кварків знаходиться у першому збудженому стані. Маса резонансу Ропера визначається з формули

$$m^* c^2 = 2E_0 + E_1$$

(2) Розглянемо осциляторний потенціал. В цьому випадку найнижчий стан відповідає хвильовій функції

$$\phi(r) = \left(\frac{2\Omega}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\Omega r^2}, \quad \text{де} \quad \Omega = \frac{\sqrt{E_0 \lambda}}{2},$$

а енергія $E_0 = V_0 + \frac{6\Omega}{E_0}$. Це рівняння знову може бути розв'язано лише чисельними методами.

Список літератури

1. Блохинцев Д. И., Основы квантовой механики : учеб. / Д. И. Блохинцев. — М.: «Наука», 1963. 664 с.
2. Вакарчук І. О., Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. — Львів, вид. Львівського університету, 2004. 615 с.
3. Давидов О. С., Квантова механіка : підручник / переклад Л. С. Брижик, О. В. Гомонай, М. І. Григорчука під редакцією В. М. Локтева / О. С. Давидов. — К.: «Академперіодіка», 2012. — 707 с.
4. Ландау Л. Д. Теоретическая физика. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: «Наука», 1988 — Т.2 — Квантовая механика. — 509 с.
5. Левич В. Г., Курс теоретической физики : учеб. / В. Г. Левич, Ю. А. Вдовин и В. А. Мямлин. — М.: «Наука», 1971 — Т. II. 936 с.
6. Ферми Энрико, Квантовая механика : учеб. / перевод Н.В.Мицкевича / Энрико Ферми — М.: «Мир», 1965. 367 с.
7. Кобушкін О. П., Квантова механіка : навч. посіб. / О. П. Кобушкін. — Електронний архів наукових та освітніх матеріалів КПІ ім. Ігоря Сікорського [Електронний ресурс]. — Режим доступу: <http://ela.kpi.ua/handle/123456789/18348>
8. Галицкий В. М., Задачи по квантовой механике : учеб. / В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков и В. И. Коган. — М.: «Наука», 1981. 648 с.
9. Гречко Л. Г., Сборник задач по теоретической физике : сборник задач / науч. редактор А. А. Сенкевич / Л. Г. Гречко, В. И. Сугаков, О. Ф. Томасевич, А. М. Федорченко — М.: «Высшая школа», 1972. 335 с.
10. Гречко Л. Г., Збірник задач із теоретичної фізики. Квантова механіка : збірник задач / Л. Г. Гречко, С. М. Єжов, В. О. Сугаков. — Київ : Вид. поліграф. центр «Київський ун-т» — 2013. — 215 с.
11. Флюгге З., Задачи по квантовой механике : сборник задач / перевод Б. А. Лысого под редакцией А. А. Соколова / З. Флюгге. Т.1 — М.: «Мир», 1974. 340 с.
12. Флюгге З., Задачи по квантовой механике : сборник задач / перевод Б. А. Лысого под редакцией А. А. Соколова / З. Флюгге. Т.2 — М.: «Мир», 1974. 316 с.
13. Елютин П. Е., Квантовая механика с задачами : учеб. / П. Е. Елютин и В. Д. Кривченков. — М.: «Физматлит», 2001. 300 с.
14. Бьёркен Дж. Д., Релятивистская квантовая теория. Релятивистская квантовая механика : / перевод Б. О. Кербикова под редакцией В. Б. Берестецкого / Т.1, Дж. Д. Бьёркен и С. Д. Дрелл. Т. 1 — М. «Наука», 1978. 295 с.
15. Бейтмен Г., Высшие трансцендентные функции : монография / перевод Н. Я. Виленкина / Г. Бейтмен и А. Эрдейи. Т. 1 — М.: «Наука», 1973. 294 с.
16. Бейтмен Г., Высшие трансцендентные функции : монография / перевод Н. Я. Виленкина / Г. Бейтмен и А. Эрдейи / Т. 2 — М.: «Наука», 1973. 295 с.
17. Градштейн И. С., Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений : справочник / И. С. Градштейн и И. М. Рыжик. — изд. 4-е, переработанное при участии Ю. В. Геронимуса и М. Ю. Цейтлина — М. ФМ, 1963. 1108 с.

Додаток А

Важливі математичні формули

А.1 Функції Ейрі

Функції Ейрі

$$\begin{aligned} \text{Ai}(x) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{z^3}{3} + xz\right) dz, \\ \text{Bi}(x) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{z^3}{3} + xz\right) + \sin\left(\frac{z^3}{3} + xz\right) \right] dz \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

представляють два часткових розв'язки диференціального рівняння

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - x\right) f(x) = 0. \quad (\text{A.2})$$

При $x \rightarrow +\infty$ асимптотична поведінка функцій Ейрі наступна:

$$\begin{aligned} \text{Ai}(x) &\approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{2\sqrt[4]{x}} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) & \text{при } x \rightarrow +\infty, \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{2\sqrt[4]{-x}} \sin\left(\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) & \text{при } x \rightarrow -\infty, \end{cases} \\ \text{Bi}(x) &\approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{2\sqrt[4]{x}} \exp\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right), & \text{при } x \rightarrow +\infty, \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{2\sqrt[4]{-x}} \cos\left(\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) & \text{при } x \rightarrow -\infty. \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Функції Ейрі мають нулі при від'ємних значеннях аргумента, $\text{Ai}(a_n) = 0$ та $\text{Bi}(b_n) = 0$. Наведемо положення трьох перших нулів функцій Ейрі:

$$\begin{aligned} a_1 &= -2,3381 & b_1 &= -1,1737 \\ a_2 &= -4,0879 & b_2 &= -3,2711 \\ a_3 &= -5,5205 & b_3 &= -4,8307 \end{aligned}$$

Інші властивості функцій Ейрі можна знайти в довіднику [15].

А.2 Поліноми та приєднані поліноми Лежандра

Приєднані поліноми Лежандра визначаються як

$$P_\ell^m(\cos\theta) = \frac{\sin^m\theta}{2^\ell\ell!} \frac{d^{m+\ell}}{(d\cos\theta)^{m+\ell}} (\cos^2\theta - 1)^\ell, \quad (\text{A.4})$$

де $m = 0, 1, 2, 3, \dots, \ell$. Вони задовольняють диференціальне рівняння

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\sin\theta} \left(\sin\theta \frac{dP_\ell^m}{d\theta} \right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] P_\ell^m = 0. \quad (\text{A.5})$$

В тому випадку, коли $m = 0$, приєднані поліноми Лежандра називають просто поліномами Лежандра та позначають $P_\ell(\cos\theta)$. Поклавши в (A.4) $m = 0$ одержимо явний вигляд найнижчих поліномів Лежандра

$$\begin{aligned} P_0(u) &= 1; & P_1(u) &= u; \\ P_2(u) &= \frac{1}{2}(3u^2 - 1); & P_3(u) &= \frac{1}{2}(5u^3 - 3u). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Приєднані поліноми Лежандра задовольняють наступній умові ортогональності

$$\int_{-1}^1 du P_\ell^m(u) P_\ell^m(u) = \delta_{\ell\ell'} \frac{2(\ell+m)!}{(2\ell+1)(\ell-m)!}, \quad (\text{A.7})$$

де введено позначення $u = \cos\theta$.

Серед важливих властивостей приєднаних поліномів Лежандра, які часто використовуються в квантовій механіці, відмітимо рекурентні формули для приєднаних поліномів Лежандра

$$\begin{aligned} uP_\ell^m(u) &= \frac{1}{(2\ell+1)} [(\ell-m+1)P_{\ell+1}^m(u) + (\ell+m)P_{\ell-1}^m(u)], \\ \sqrt{1-u^2}P_\ell^{m-1}(u) &= \frac{1}{(2\ell+1)} [P_{\ell+1}^m(u) - P_{\ell-1}^m(u)]. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Для повноти викладення варто відмітити теорему додавання. Нехай два напрями задані векторами

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_1 &= (\sin\theta_1 \cos\phi_1, \sin\theta_1 \sin\phi_1, \cos\theta_1), \\ \mathbf{n}_2 &= (\sin\theta_2 \cos\phi_2, \sin\theta_2 \sin\phi_2, \cos\theta_2) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

і α - кут між ними, тоді має місце співвідношення

$$P_\ell(\cos\alpha) = P_\ell(u_1)P_\ell(u_2) + 2 \sum_{m=1}^{\ell} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_\ell^m(u_1)P_\ell^m(u_2) \cos m(\phi_1 - \phi_2). \quad (\text{A.10})$$

В деяких задачах зручно використовувати розклад $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$ по поліномам Лежандра

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \begin{cases} \frac{1}{r'} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r}{r'}\right)^l P_l(\cos\theta) & \text{при } r < r', \\ \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r}\right)^l P_l(\cos\theta) & \text{при } r > r'. \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

де θ - кут між векторами \mathbf{r} та \mathbf{r}' .

А.3 Сферичні функції Бесселя

Сферичні функції Бесселя першого і другого роду виражаються через звичайні функції Бесселя напівцілого порядку

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(x), \\ y_\ell(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{\ell+\frac{1}{2}}(x). \end{aligned} \tag{A.12}$$

В свою чергу, $J_\ell(x)$ і $Y_\ell(x)$ — функції Бесселя першого та другого роду. Вони являються частковими розв'язками рівняння Бесселя

$$x^2 F''(x) + xF'(x) + (x^2 - \nu^2) F(x) = 0. \tag{A.13}$$

Функції Бесселя першого роду можна записати як такий ряд

$$J_\nu(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\nu}}{m! \Gamma(m + \nu + 1)}, \tag{A.14}$$

де $\Gamma(z)$ — Γ -функція, яка визначається згідно формулі (А.18). Функції Бесселя другого роду (їх також називають функціями Неймана) записуються як лінійна комбінація

$$Y_\nu(x) = \frac{J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)}{\sin(\nu\pi)}.$$

Існують також функції Бесселя третього роду, $H_\nu^{(1)}(x)$ та $H_\nu^{(2)}(x)$, які також є розв'язками рівняння Бесселя. Їх ще називають першою та другою функціями Ганкеля. Вони таким чином виражаються через функції Бесселя першого роду

$$\begin{aligned} H_\nu^{(1)}(x) &= \frac{J_{-\nu}(x) - J_\nu(x) e^{-i\nu\pi}}{i \sin(\nu\pi)}, \\ H_\nu^{(2)}(x) &= \frac{J_\nu(x) e^{i\nu\pi} - J_{-\nu}(x)}{i \sin(\nu\pi)}. \end{aligned} \tag{A.15}$$

Формули Релея дозволяють розрахувати сферичні функції Бесселя у явному вигляді

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &= x^\ell \left(-\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\sin x}{x}, \\ y_\ell(x) &= -x^\ell \left(-\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\cos x}{x}. \end{aligned} \tag{A.16}$$

Асимптотична поведінка:

- при $x \rightarrow 0$: $j_\ell(x) \approx \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!}$, $y_\ell(x) \approx -\frac{x^{-(\ell+1)}}{(2\ell-1)!!}$;
- при $x \rightarrow 0$: $j_\ell(x) \approx \frac{\sin(x - \frac{\pi}{2}\ell)}{x}$, $y_\ell(x) \approx -\frac{\cos(x - \frac{\pi}{2}\ell)}{x}$.

Рекурентні формули:

$$\begin{aligned}f_{\ell}(x) &= \frac{x}{2\ell+1} [f_{\ell+1}(x) + f_{\ell-1}(x)], \\f'_{\ell}(x) &= f_{\ell+1}(x) + \frac{\ell}{x} f_{\ell}(x),\end{aligned}\tag{A.17}$$

де f_{ℓ} — одна з сферичних функцій Беселя.

А.4 Деякі інтеграли, які зводяться до Γ -функції

В багатьох задачах ми зустрічаємось з інтегралами типу $\int_0^{\infty} dx x^n e^{-ax}$ та $\int_0^{\infty} dx x^n e^{-ax^2}$. За допомогою очевидних заміни вони зводяться до Γ -функції від цілого та напівцілого аргумента.

Γ -функція визначається як такий інтеграл

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dx x^{z-1} e^{-x}\tag{A.18}$$

Як випливає з її означення, Γ -функція має важливу властивість

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z),\tag{A.19}$$

причому $\Gamma(1) = 1$ та $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$. Тому

$$\begin{aligned}\Gamma(n) &= (n-1)!, \\ \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) &= \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi}.\end{aligned}\tag{A.20}$$

Докладніше про властивості спеціальних функцій див. [15,16].