НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
(КПІ ім. Ігоря Сікорського)

О.П. Кобушкін, Я.Д. Кривенко-Еметов

# Збірник задач з квантової механіки

Київ 2019

В підручнику 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

Неодмінною складовою любого курса з фізики та теоретичної фізики є розв'язання задач. Звичайно, курс квантової механіки не є виключенням. У даному збірнику приведені задачі, які напротязі довгого часу були опробувані 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 принципових питань нерелятивістької 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 запропонувани задачі підвищенного 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

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

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 $\mathcal{G}$:

$$\widehat{F}_1 \widehat{F}_2 g = \widehat{F}_1 (\widehat{F}_2 g).$$

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.** *Одиничним* 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 число[1]

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

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

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

називають *матричним елементом* оператора $\widehat{F}$ 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 $\langle F\rangle \equiv \langle\psi|\,\widehat{F}\,|\psi\rangle$ називають *середнім значенням* оператора $\widehat{F}$ по цій функції.

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

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

Оператори, для яких спряжений оператор співпадає із самим оператором

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

називають *ермітовими* або *самоспряженими*.

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

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

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*

$$\widehat{F}^\dagger = \widehat{F}^{-1}, \qquad \text{або} \qquad \widehat{F}^\dagger\widehat{F} = \widehat{F}\widehat{F}^\dagger = \widehat{I}.$$

[1] Тут і далі зірочка означає комплексне спряження.

## 1.1 Задачі

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

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

**1.3.** Для довільного оператора $\widehat{L}$ показати наступне:

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

**1.4.** Довести, що для операторів, які задовольняють умові $[\widehat{A}, \widehat{B}] = C$, де $C$ — число, виконується наступне співвідношення $[f(\widehat{A}), \widehat{B}] = Cf'(\widehat{A})$, де $f'(x) = \frac{df(x)}{dx}$.
Вказівка: Спочатку розглянути окремий випадок, коли $f(\widehat{A}) = \widehat{A}^n$.

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

**1.6.** Довести тотожність

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

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

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

**1.9.** Довести, що для двох ермітових операторів $\widehat{A}$ та $\widehat{B}$ комутатор є $i\widehat{F}$, де $\widehat{F}$ — 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 $\widehat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$;
2. оператор моменту імпульсу $\widehat{\mathbf{L}} = \mathbf{x} \times \widehat{\mathbf{p}}$;
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 $\widehat{T}_a$: $\widehat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}+\mathbf{a})$,

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 $\sigma$ — додатнє 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.** $(\widehat{A}+\widehat{B})(c_1\psi_1+c_2\psi_2) = c_1\widehat{A}\psi_1+c_1\widehat{B}\psi_1+c_2\widehat{A}\psi_2+c_1\widehat{B}\psi_2 = c_1(\widehat{A}+\widehat{B})\psi_1+c_2(\widehat{A}+\widehat{B})\psi_2$.

**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 $f(\widehat{A}) = \widehat{A}^n$:

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

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 результ попередньої задачі.

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

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

По індукції легко показати, що

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

Тоді

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

**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.**

1. $(\varphi,\widehat{\mathbf{p}}\psi)=\frac{\hbar}{i}\int\varphi(\mathbf{x})\nabla\psi(\mathbf{x})d^3x=\frac{\hbar}{i}\int\left[\nabla\big(\varphi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\big)-\psi(\mathbf{x})\nabla\varphi^*(\mathbf{x})\right]d^3x=$
   $=\left[\frac{\hbar}{i}\int\psi(\mathbf{x})\nabla\varphi^*(\mathbf{x})d^3x\right]^*=(\psi,\widehat{\mathbf{p}}\varphi)^*$.
2. Аналогічно задачі 1.
3. Використати результат задачі 1.

**1.12.** $\widehat{P}$ — ермітов, $\widehat{T}_{\mathbf{a}}$ — не ермітов.

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

**1.14.** Розкладаючи в ряд одержимо:

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

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

**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

$$\int |\left[\alpha(\widehat{p}-a)-i(\widehat{x}-b)\right]\Psi(x)|^2 dx \geq 0, \tag{1.1}$$

де $\alpha$, $a$ та $b$ довільні дійсні числа. Використовуючи наступні співвідношення

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

перепишемо ліву нерівності у вигляді

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

Для того, щоб ліва частина була невідємною, потрібно вимагати

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

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

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

Перепишемо це рівняння у вигляді

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

і проінтегруємо його:

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

Для того, щоб хвильова функція була нормованою, необхідно, щоб $\sigma$ було додатнім числом.

# Розділ 2

# Квантовий рух в одномірному просторі

**1.** В одномірному просторі *стаціонарне рівняння Шрьодінгера* є

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

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

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

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

де

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

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:

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

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

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

**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

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

де $\kappa$ параметр пружності. В класичній фізиці частинка під дією сили $F = -\kappa x$ виконує гармонічні коливання з частотою $\nu = \dfrac{\omega}{2\pi}$, де $\omega = \sqrt{\kappa/m}$ — кругова частота. Її енергія може приймати довільні додатні значення. В квантовому випадку енергія квантується[1]:

$$E_n = \hbar\omega(\tfrac{1}{2} + n), \qquad \text{де} \qquad n = 0, 1, 2, ... \tag{2.5}$$

Відповідні хвильові функції є

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

де

$$\xi = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} x \quad \text{і} \quad A_n = \sqrt[4]{\frac{\omega m}{\pi\hbar}} \left(2^n n!\right)^{-\frac{1}{2}},$$

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

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

Поліномі Ерміта мають важливу властивість

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

Звідси випливає, що

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

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

[1] Розв'язок рівняння Шрьодінгера для гармонічного осцілятора можна знайти у любому 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 $U_0 = \dfrac{\alpha}{2\epsilon}$, коли $\epsilon \to 0$.

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

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

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

- По визначеню $x = r - r_0$ і тому $-r_0 \leq x \leq \infty$. Проте, враховуючи те, що при $r \to 0$ 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 $z \to 0$ (знайти $\nu$), та $\psi \sim e^{-\frac{1}{2}z}$ при $z \to \infty$ .
- Шукати роз'вязок 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 $a_\mu$.

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

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

replacements

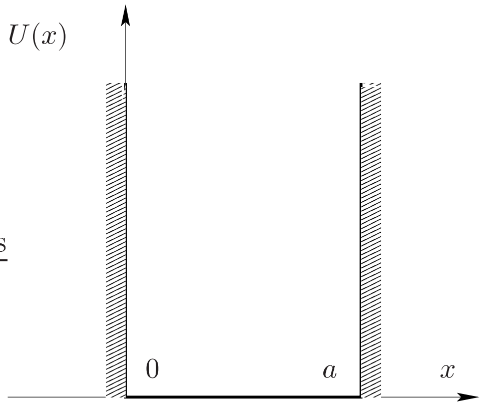


Рис. 2.1: Потенціальна яма безмежної глибини (до задачі 2.1)

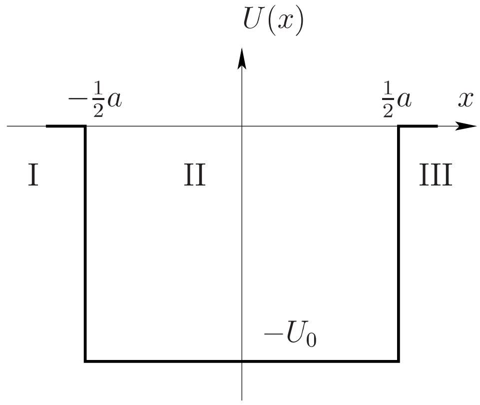


Рис. 2.2: Потенціальна яма обмеженої глибини (до задач 2.2, 2.3 та 2.8)

PSfrag replacements

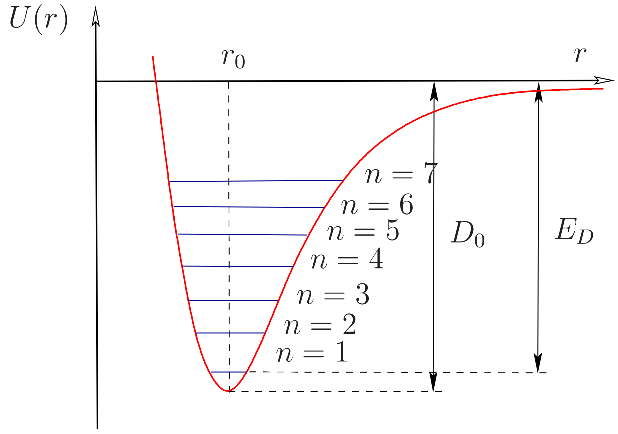


Рис. 2.3: Потенціал Морза (до задачі 2.5)

- 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 (a) та (b).
Вказівка: Коефіцієнти проникливості та відбивання визначаються як відношення $D = j'/j$, $R = j_в/j$, де $j$, $j'$ та $j_в$ 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.

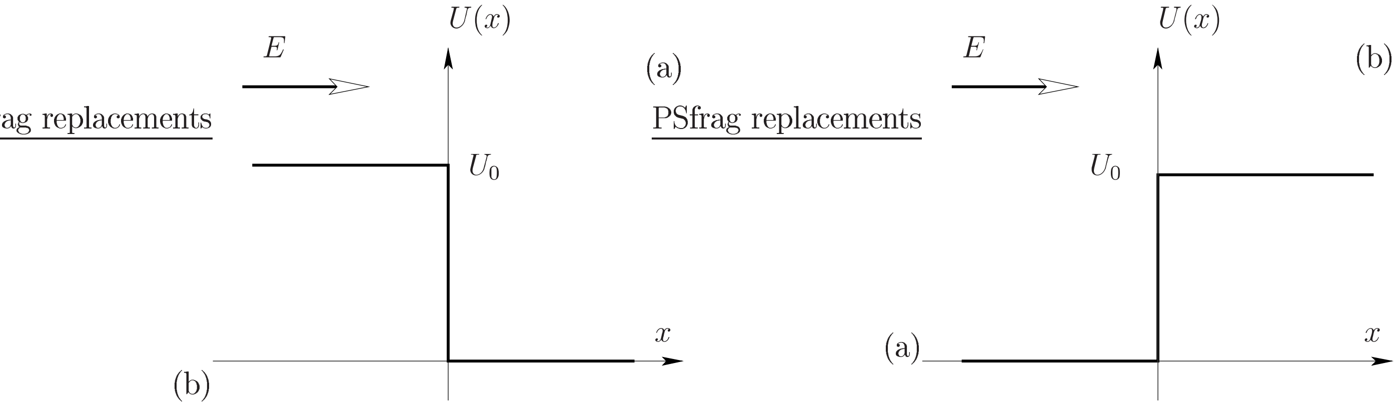


Рис. 2.4: До задачі 2.6

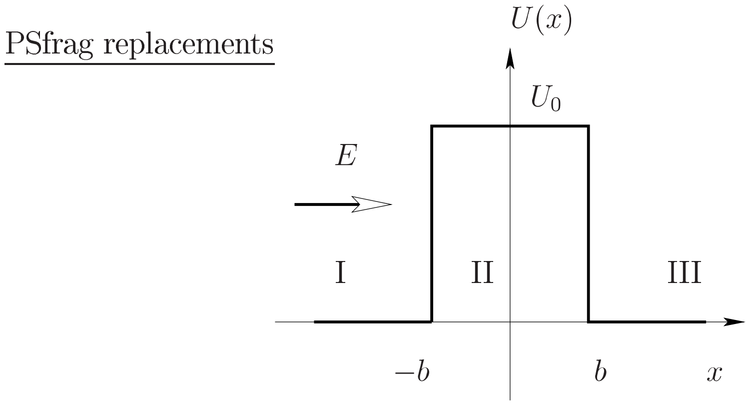


Рис. 2.5: До задачі 2.8. Тунельний ефект

**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

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

1. При яких умовах на параметри задачі $\kappa$ та $\alpha$ 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

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

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 $\rho$ (їх називають координатами Якобі, див. рис. 2.7)

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

**2.17.** Знайти рівні енергії системи двох частинок маси $M_1$ та $M_2$, які знаходяться в полі $\frac{\kappa}{2}(x_1^2 + x_2^2) + \alpha x_1 x_2$, де $|\alpha| < \kappa$.

## 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 $\varphi$ — 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 $k_n = \dfrac{n\pi}{a}$, де $n = 1, 2, 3, \ldots$; константу $A$ знаходиться з умови нормування:

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

**2.2.**[2] По умові задачі частинка утримається в ямі і тому її енергія від'ємна, $E < 0$, а хвильова функція має спадати до нуля, коли частинка знаходиться далеко від ями:

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

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

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

В області II загальний розв'язок є:

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

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

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

[2]Детальний 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)

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

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

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

Розв'яжемо його відносно $\kappa$:

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

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

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

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

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

Беручи до уваги (2.12–2.14) отримаємо:

*для випадку* (a) *хвильова функція є парною*

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

*для випадку* (b) *хвильова функція є непарною*

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

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

PSfrag replacements

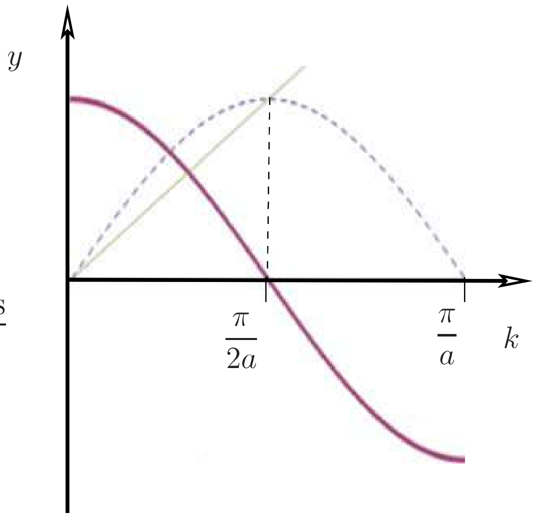


Рис. 2.6: До задачі 2.4. Функція $y = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}\cos(ka)$ зображена неперервною жирною лінією, $y = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}\sin(ka)$ пунктиром, а $y = k$ тонкою неперервною лінією

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

$$\begin{aligned} k &= \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}\cos(ka), \qquad \text{(a)} \\ k &= \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}\sin(ka). \qquad \text{(b)} \end{aligned} \tag{2.17}$$

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

$$\frac{\pi}{2a} > \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \tag{2.18}$$

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

**2.4.** Перш за все покажемо, що

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

Дійсно, інтегруючи функцію $\delta_\epsilon(x)$ з любою фунцією $f(x)$, 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 $\lim\limits_{\epsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)\delta_\epsilon(x) = f(0)$, що і є визначенням $\delta$-функції.

Легко бачити, що при $\epsilon \to 0$ 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 $x \to 0$.

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

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

В результаті одержимо рівняння для енергії

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

Розкладаючи праву та ліву частини рівняння (2.20) по степеням $\epsilon$ одержимо значення енергії:

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

**2.5.** Після заміни

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

рівняння Шрьодінгера (2.1) приймає вигляд:

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

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

Знайдемо поведінку хвильової функції у граничних випадках:

- При $z \to 0$ 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

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

- При $z \to \infty$ одержимо

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

Тому розв'язок рівняння будемо шукати у вигляді

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

де $w(z)$ поліном степені $n$:

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

Підставляючи (2.22) у рівняння (2.21) одержимо

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

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

$$a_{\mu+1} = \frac{\mu - \frac{1}{2}\lambda + \frac{1}{2} + \nu}{(\mu+1)(\mu+2\nu+1)} a_\mu, \qquad \mu \le n-1, \tag{2.23}$$

та умову обривання ряду

$$\nu = \tfrac{1}{2}\lambda - \tfrac{1}{2} - n. \tag{2.24}$$

Останнє визначає енергетичний спектр:

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

Обмеження зверху на $n$ виникає з умови, що $\nu$ 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

$$z = \operatorname{th} \alpha x, \qquad -1 \le z \le 1,$$

рівняння Шрьодінгера приймає вигляд:

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

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

Знайдемо поведінку хвильової функції при $z \to \pm 1$. 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 $z \to \pm 1$, 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

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

або

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

Прирівнюючи до нуля коефіцієнти при однакових степенях $z$ одержимо:

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

З першого з цих рівнянь одержимо енергетичний спектр

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

Верхнє обмеження на $n$ виникає із умови, що $\nu$ 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 напівпощині 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 Шрьодінгера:

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

де $k = \sqrt{\dfrac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$ та $k' = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$. 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

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

Розраховуючи відповідні потоки одержимо:

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

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:

$$\begin{aligned}
\psi_{\mathrm{I}}(x) &= A_1 e^{ik_0x} + B_1 e^{-ik_0x},\\
\psi_{\mathrm{II}}(x) &= A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx},\\
\psi_{\mathrm{III}}(x) &= A_3 e^{ik_0x} + B_3 e^{-ik_0x},
\end{aligned}$$

де $k_0 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $k = \dfrac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}$. 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):

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
&A_1 e^{-ik_0a} + B_1 e^{ik_0a} = A_2 e^{-ika} + B_2 e^{ika},\\
&k_0\left(A_1 e^{-ik_0a} - B_1 e^{ik_0a}\right) = k\left(A_2 e^{-ika} - B_2 e^{ika}\right),\\
&A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika} = A_3 e^{ik_0a},\\
&k\left(A_2 e^{ika} - B_2 e^{-ika}\right) = k_0 A_3 e^{ik_0a}.
\end{aligned}$$

Звідси випливає

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

В результаті отримаємо:

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

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

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

**2.10.** $D = \dfrac{2\hbar^2 E}{2\hbar^2 E + \alpha^2 m}$, $R = \dfrac{a^2 m}{2\hbar^2 E + \alpha^2 m}$.

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

**2.12.** $\dfrac{\hbar}{m\omega}\left(n + \dfrac{1}{2}\right)$.

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

$$X = \frac{m_1}{m_1 + m_2}x_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2}x_2, \qquad x = x_1 - x_2. \tag{2.26}$$

Відповідні канонічно спряжені до них імпульси є

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

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

В нових змінних рівнянні Шрьодінгера (2.1) є

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\kappa}{2}x^2\right)\psi(X, x) = E\psi(X, x), \\ &\text{де} \quad M = m_1 + m_2, \text{та} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \end{aligned} \tag{2.28}$$

Рівняння (2.28) дозволяє розділення змінних:

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

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

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

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

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

$$
\left\langle x^2 \right\rangle_n = A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} =
$$

$$
= \frac{\hbar}{\mu\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right).
$$

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

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

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

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

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

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

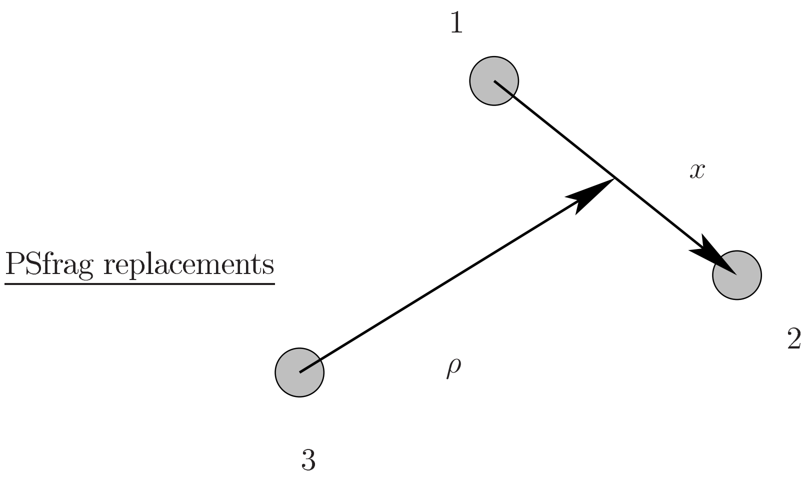


Рис. 2.7: До задачі 2.15. Координати Якобі

де

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

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

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

Тоді після розділення координат одержимо:

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

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

**2.16.** Запишемо гамільтоніан:

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

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

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

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 $\Delta\xi = -\sqrt{\dfrac{\omega m}{\hbar}}\dfrac{\mathcal{E}Q}{\kappa}$,

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

**2.17.** Зробимо заміни змінних

$$\begin{aligned} y_1 &= \sqrt{\tfrac{M_1}{M_1+M_2}}\, x_1, \qquad & y_2 &= \sqrt{\tfrac{M_2}{M_1+M_2}}\, x_2, \\ \widehat{q}_1 &= \sqrt{\tfrac{M_1+M_2}{M_1}}\, \widehat{p}_1, \qquad & \widehat{q}_2 &= \sqrt{\tfrac{M_1+M_2}{M_2}}\, \widehat{p}_2 \end{aligned}$$

після чого гамільтоніан системи буде:

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{q}_1^2 + \widehat{q}_2^2}{2(M_1+M_2)} + \frac{(M_1+M_2)\kappa}{2}\left(\frac{y_1^2}{M_1^2} + \frac{y_2^2}{M_2^2}\right) + \frac{\alpha(M_1+M_2)}{\sqrt{M_1M_2}}y_1y_2.$$

Тепер зробимо перетворення, поворот на кут $\varphi$ в «площині» (1,2),

$$\begin{aligned} \widehat{q}_1 &= \cos\varphi\, \widehat{Q}_1 + \sin\varphi\, \widehat{Q}_2, \qquad & \widehat{q}_2 &= -\sin\varphi\, \widehat{Q}_1 + \cos\varphi\, \widehat{Q}_2, \\ y_1 &= \cos\varphi\, Y_1 + \sin\varphi\, Y_2, \qquad & y_2 &= -\sin\varphi\, Y_1 + \cos\varphi\, Y_2, \end{aligned} \tag{2.31}$$

в результаті чого одержимо наступний гамільтоніан:

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{q}_1^2 + \widehat{q}_2^2}{2(M_1+M_2)} + \frac{\kappa_1}{2}Y_1^2 + \frac{\kappa_2}{2}Y_2^2 + \alpha' Y_1 Y_2$$

де

$$\begin{aligned} \kappa_{1,2} &= \frac{M_1+M_2}{2}\left\{\frac{\kappa\left[M_1+M_2 \mp (M_1-M_2)\cos 2\varphi\right]}{2M_1M_2} \mp \frac{\alpha}{\sqrt{M_1M_2}}\sin 2\varphi\right\}, \\ \alpha' &= (M_1+M_2)\left[\frac{\kappa}{2}\frac{M_2-M_1}{M_1M_2}\sin 2\varphi + \frac{\alpha}{\sqrt{M_1M_2}}\cos 2\varphi\right]. \end{aligned}$$

Слід сказати, що це перетворення канонічне, тобто воно не змінює комутаційні співвідношення між операторами імпульсів та координат.

Кут $\varphi$ визначимо з умови, що $\alpha' = 0$,

$$\mathrm{tg}2\varphi = \frac{2\alpha\sqrt{M_1 M_2}}{\kappa(M_1 - M_2)},$$

і підставивши його в вираз для $\kappa_{1,2}$ одержимо:

$$\kappa_{1,2} = \frac{M_1 + M_2}{4M_1 M_2}\left[\kappa(M_1 + M_2) \mp \sqrt{\kappa^2(M_1 - M_2)^2 + 4\alpha^2 M_1 M_2}\right]$$

В результаті маємо наступний енергетичний спектр:

$$E_{n_1 n_2} = \omega_1\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) + \omega_2\left(n_2 + \frac{1}{2}\right),$$

де

$$\omega_{1,2} = \left\{\frac{1}{2M_1 M_2}\left[\kappa(M_1 + M_2) \mp \sqrt{\kappa^2(M_1 - M_2)^2 + 4\alpha^2 M_1 M_2}\right]\right\}^{1/2}.$$

# 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-Бріллюена (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]):

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

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 $x_1$ випливають[1]:

- *правило квантування Бора-Зоммерфельда*

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

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

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

eplacements

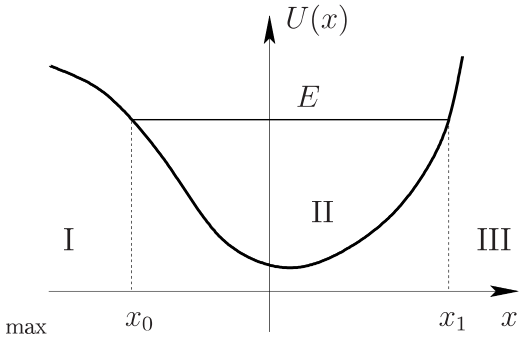


Рис. 3.1: Класично допустимою областю руху частинки при фінітному русі є $x_0 \le x \le x_1$

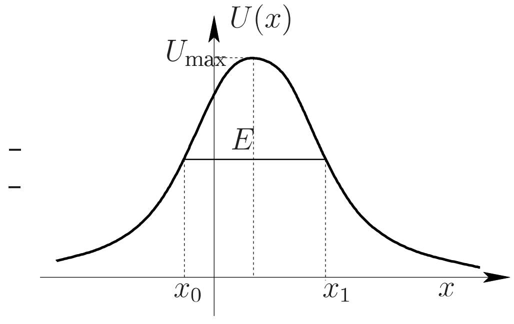


Рис. 3.2: Класично допустимі області руху частинки при інфінітному русі лежать зліва від точки $x_0$ та справа від точки $x_1$

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

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

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

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

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

## 3.1 Задачі

**3.1.** Використовуючи правило квантування Бора-Зоммерфельда знайти енергетичні рівні для частинки, яка знаходиться у полі одномірного 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 обчислені інтеграла зробити заміну $z = e^{-\alpha x}$.

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

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

Порівняти з точним розв'язком.
<u>Вказівка:</u> При обчислені інтеграла в умові Бора-Зоммерфельда зробити дві заміни: $z = \mathrm{th}(\alpha x)$ і далі тригонометричну заміну.

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

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

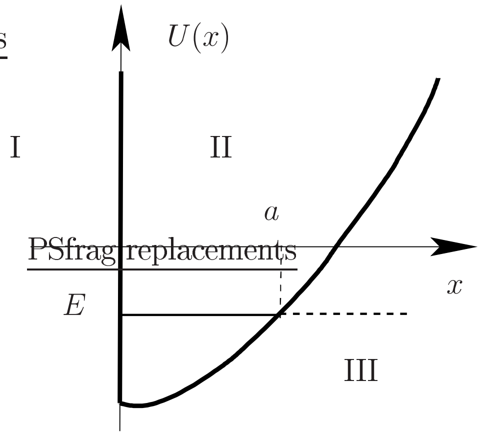


Рис. 3.3: До задачі 3.4

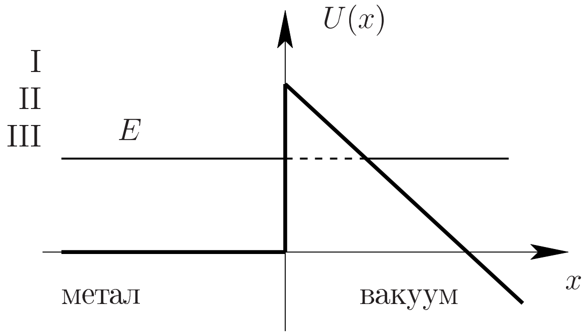


Рис. 3.4: Холодна емісія електронів

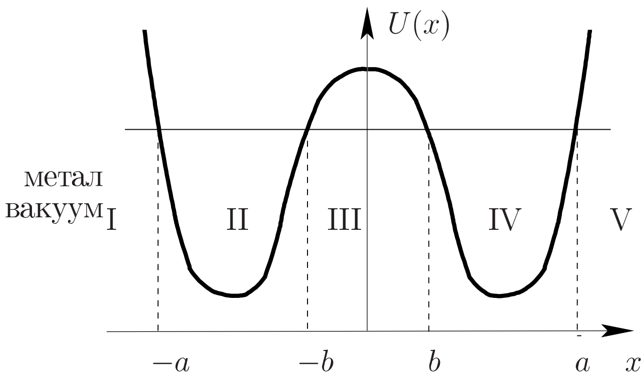


Рис. 3.5: До задачі 3.9

диться в полі

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

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

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

**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

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

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 наближеня 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)

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

Інтеграл береться тригонометричною підстановкою. В результаті одержимо енергетичний спектр

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

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

$$\xi_{\mathrm{I}}(\rho_n) = \hbar^{-1}\int\limits_{x_0}^{x} \widetilde{p}(y)dy = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\left\{\alpha_1(\rho_n) - \tfrac{1}{2}\mathrm{sh}[2\alpha_1(\rho_n)]\right\},$$

$$\xi_{\mathrm{II}}(\rho_n) = \hbar^{-1}\int\limits_{x_0}^{x} p(y)dy = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\left\{-\alpha_2(\rho_n) + \tfrac{1}{2}\sin[2\alpha_2(\rho_n)]\right\},$$

$$\xi_{\mathrm{III}}(\rho_n) = -\hbar^{-1}\int\limits_{x_1}^{x} \widetilde{p}(y)dy = \xi_{\mathrm{I}}(\rho_n),$$

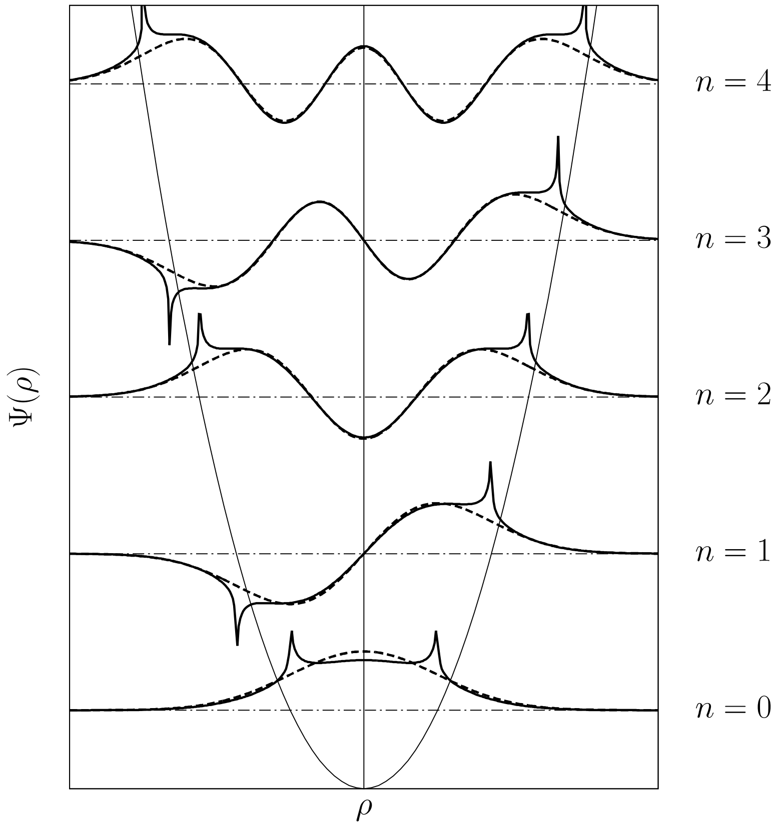


Рис. 3.6: Хвильові функції гармонічного осцилятора у квазікласичному наближенні (неперервні лініниї), пунктирні лінії — точні розв'язки

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

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

Константа $N$ визначається з умови нормування

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

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

На рис. 3.6 проведено порівняння хвильових функцій розрахуваних 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

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

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

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

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 енергї:

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

або

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

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

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

Обмеження на $n$ виникає з умови, що єнергія 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 обчислені інтеграла в умові Бора-Зоммерфельда зробимо заміну $z = \mathrm{th}(\alpha x)$. Тоді інтеграл стане

$$I = \frac{2\sqrt{2m(E+U_0)}}{\alpha}\int\limits_0^{z_0}\frac{dz}{1-z^2}\sqrt{1-\frac{U_0}{E+U_0}z^2},$$

де

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

Далі з допомогою тригонометричної заміни

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

інтеграл зводиться до

$$I = \frac{2(E+U_0)}{\alpha}\sqrt{2mU_0}\int\limits_0^{\pi/2} \frac{d\varphi\cos^2\varphi}{-E+(E+U_0)\cos^2\varphi}.$$

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

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

Таким чином умова Бора-Зоммерфельда дає:

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

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:

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

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

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

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

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

$$\sin\left[\hbar^{-1}\int\limits_0^a \sqrt{2m[E-U(y)]}\,dy + \frac{\pi}{4}\right] = 0.$$

Звідси одержуємо правило квантування

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

**3.5.** Використовуючи результат попередньої задачі пишемо

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

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 $\delta U$ та $\delta E_n$ 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 $x \to -\infty$,

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

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

$$\psi_{\mathrm{I}} = \frac{A}{2\sqrt{\widetilde{p}(x)}} \exp\left[\hbar^{-1}\int_{-a}^x \widetilde{p}(y)dy\right],$$
$$\psi_{\mathrm{II}} = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\hbar^{-1}\int_{-a}^x p(y)dy + \frac{\pi}{4}\right],$$

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

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

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

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)

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

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

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

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

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

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

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

Співставляючи (3.9) та (3.11) знайдемо фазу $\phi_2$:

$$\phi_2 = \pm\mathrm{arctg}\left(\tfrac{1}{2}R^2\right). \tag{3.12}$$

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 $\Delta E_\pm$, а в виразі для фази (3.12) проведемо заміну $E$ на $E_0$. В результаті отримаємо:

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

$$\omega = \frac{2\pi}{T}, \qquad T = 2\int\limits_{-a}^{-b} \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}\left[E^0 - U(x)\right]}}.$$

# Розділ 4

# Теорія представлень

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

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

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

Обернене перетворення (від імпульсного до координатного представлення) задається

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

## 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 представлені.

**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 представлені.

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

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

Показати, що у імпульсному представлені 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 $U(\mathbf{x}) = \dfrac{\kappa}{2}\mathbf{x}^2$,

(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

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

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

**4.7.** Знайти дію операторів інверсії $\widehat{P}$ та зсуву $\widehat{T}_{\mathbf{a}}$ (див. задачу 1.14) на хвильову функцію в імпульсному представлені.

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

**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 ($\pi$-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 $\pi$-мезона. Знайти потенціал Юкави у імпульсному представлені.

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

## 4.2 Відповіді та розв'язки задач

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

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

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

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

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

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

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

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 представлені стає інтегральним оператором.

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

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

Отже оператор осциляторного 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 представлені: $i\lambda\hbar\frac{d}{dp}$.

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

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

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

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

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 $\psi(\rho)\Big|_{x=0} = 0$. Це дає умову квантування енергії

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

де $\rho_n$ — значення аргументу при якому функція Ейрі дорівнює нулю.

Порівняємо результати точного розрахунку з розрахунком у ВКБ наближенні:

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

**4.7.** $\widehat{P}\Phi(\mathbf{p}) = \Phi(-\mathbf{p})$, $\widehat{T}_{\mathbf{a}}\Phi(\mathbf{p}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}\Phi(\mathbf{p})$.

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

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

а оператором координати є матриця

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

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

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

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

$$\sum_{n''}\langle n'|\,\widehat{p}\,|n''\rangle\,\langle n''|\,\widehat{x}\,|n\rangle - \sum_{n''}\langle n'|\,\widehat{x}\,|n''\rangle\,\langle n''|\,\widehat{p}\,|n\rangle = -i\hbar\delta_{n'n}. \tag{4.7}$$

Виходячи із структури співвідношення (4.7) зауважимо, що

1. матричні елемент матриці $\langle n'|\,\widehat{p}\,|n\rangle$ чисто уявні,

2. матриця для оператора імпульсу містить ненульові елемени 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 $\langle n'|\,\widehat{p}\,|n\rangle$ повинна мати наступну структуру

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

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

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

**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

$$V(\mathbf{p},\mathbf{q}) = V(\mathbf{Q}) = \frac{g^2_{\pi NN}}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3xr^{-1}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{x} - kr\right) =$$

$$= -\frac{g^2_{\pi NN}}{2\pi^2\hbar(\hbar^2k^2+Q^2)}, \quad \text{де} \quad \mathbf{Q} = \mathbf{p}-\mathbf{q}.$$

**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 представлені:

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

# 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 $\widehat{S}(t) = \exp\left(-i\frac{\widehat{H}t}{\hbar}\right)$:

$$\Psi_{\text{Ш}}(\mathbf{x}, t) = \widehat{S}(t)\Psi_{\text{Ш}}(\mathbf{x}, 0),$$

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

$$\frac{d\widehat{F}_{\text{Ш}}}{dt} = \frac{\partial \widehat{F}_{\text{Ш}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}, \widehat{F}_{\text{Ш}}\right].$$

**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 $t = 0$:

$$\Psi_{\Gamma}(\mathbf{x}) = \Psi_{\text{Ш}}(\mathbf{x}, 0) = \widehat{S}^{-1}(t)\Psi_{\text{Ш}}(\mathbf{x}, t).$$

Рівняння руху:

$$\frac{d\widehat{F}_{\Gamma}}{dt} = \frac{\partial \widehat{F}_{\Gamma}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}, \widehat{F}_{\Gamma}\right].$$

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

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

Рівняння руху мають вигляд

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

де $\widehat{H}_{\text{вз}} = \widehat{U}(t)\widehat{H}_1\widehat{U}^{-1}(t)$ — оператор взаємодії у представлені 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 квановї частинки, що рухається у полі

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

(2) гармонічного осцілятора $U(\mathbf{x}) = \dfrac{\kappa}{2}\mathbf{x}^2$.

**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

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

Розглянути випадок, коли $N = 2$. Показати, що такий квантовий стан змінюється періодично та знайти період осціляцій 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 $\Psi(x, t = 0) = \sqrt{\dfrac{30}{a^5}}x(a - x)$, 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 представлені взаємодії, якщо $\widehat{H}_0 = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta$, а

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

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

## 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:

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

Тому використовуючи результат задачі 1.6 маємо:

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

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

$$\big[\widehat{H},\widehat{\mathbf{x}}_{\text{Ш}}\big] = \frac{\hbar\widehat{\mathbf{p}}_{\text{Ш}}}{im}, \qquad \Big[\widehat{H},\big[\widehat{H},\widehat{\mathbf{x}}_{\text{Ш}}\big]\Big] = 0, \qquad \big[\widehat{H},\widehat{\mathbf{p}}_{\text{Ш}}\big] = 0,$$

одержимо

$$\widehat{\mathbf{p}}_{\text{Г}}(t) = \widehat{\mathbf{p}}_{\text{Ш}}, \qquad \widehat{\mathbf{x}}_{\text{Г}}(t) = \widehat{\mathbf{x}}_{\text{Ш}} + \frac{\widehat{\mathbf{p}}_{\text{Ш}}}{m}t,$$

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

(1) Відмінними від нуля будуть наступні комутатори:

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

Тоді $\widehat{\mathbf{x}}_{\text{Г}}(t) = \widehat{\mathbf{x}}_{\text{Ш}} + \dfrac{\widehat{\mathbf{p}}_{\text{Ш}}}{m}t + \dfrac{\mathbf{F}t^2}{2m}$, $\widehat{\mathbf{p}}_{\text{Г}}(t) = \widehat{\mathbf{p}}_{\text{Ш}} + \mathbf{F}t$. Аналогія з рівноприскоренним рухом частинки в класичній механіці очевидна.

(2) Знайдемо комутатори:

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

Тоді $\widehat{\mathbf{x}}_\Gamma(t) = \widehat{\mathbf{x}}_\text{Ш} \cos\omega t + \dfrac{\widehat{\mathbf{p}}_\text{Ш}}{m\omega}\sin\omega t, \qquad \widehat{\mathbf{p}}_\Gamma(t) = \widehat{\mathbf{p}}_\text{Ш}\cos\omega t - \widehat{\mathbf{x}}_\text{Ш} m\omega \sin\omega t.$

**5.4.** Нулю.

**5.5.** $\Psi(\mathbf{x},t) = \sum_{i=1}^{N} c_i e^{-i\frac{E_i t}{\hbar}}\psi_i(\mathbf{x})$,
$T = \dfrac{\hbar}{2\pi|\Delta E|}$, де $\Delta E = E_1 - E_2$.

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

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

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

$$c_n = \int_0^a dx \Psi(x,0)\psi_n(x) = 2\frac{\sqrt{15}}{a^3}\int_0^a dx x(a-x)\sin\frac{\pi n x}{a} =$$
$$= \begin{cases} 0, & n \text{ парне},\\ \dfrac{8\sqrt{15}}{(\pi n)^3}, & n \text{ непарне}. \end{cases}$$

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

**5.7.** Використовуючи результат задачі 1.6 маємо:

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

Знайдемо необхідні комутатори:
(1) $\dfrac{i}{\hbar}t\,[\widehat{H}_0,\widehat{H}_1] = -t\dfrac{\mathbf{F}\cdot\widehat{\mathbf{p}}_\text{Ш}}{m}, \quad \left(\dfrac{i}{\hbar}t\right)^2\left[\widehat{H}_0,[\widehat{H}_0,\widehat{H}_1]\right] = 0$. Тоді

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

(2) $\dfrac{i}{\hbar}t\,[\widehat{H}_0,\widehat{H}_1] = \dfrac{\kappa}{2}\left(2\mathbf{x}_\text{Ш}\cdot\widehat{\mathbf{p}}_\text{Ш} - 3\dfrac{i\hbar t}{m}\right), \quad \left(\dfrac{i}{\hbar}t\right)^2\left[\widehat{H}_0,[\widehat{H}_0,\widehat{H}_1]\right] = \kappa\dfrac{\widehat{\mathbf{p}}^2_\text{Ш}}{m^2}t^2,$
$\left(\dfrac{i}{\hbar}t\right)^3\left[\widehat{H}_0,\left[\widehat{H}_0,[\widehat{H}_0,\widehat{H}_1]\right]\right] = 0.$ Тоді

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

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

# Розділ 6

# Теорія кутового моменту. Спін частинки

**1.** Компоненти оператора моменту кількості руху $\widehat{J}_1$, $\widehat{J}_2$ та $\widehat{J}_3$ задоволняють наступним комутаційним співвідношенням

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

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

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

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

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

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

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

**4.** У випадку $j = \frac{1}{2}$ оператор моменту кількості руху, зокрема, представляє спін електрона. Оператор спіна електрона $\widehat{\mathrm{s}}$ записується через матриці розмірності $2 \times 2$:

$$\widehat{\mathrm{s}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}, \qquad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z),$$
$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Матриці $\sigma_x$, $\sigma_y$ та $\sigma_z$ 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) $\langle\widehat{J}_x\rangle$, $\langle\widehat{J}_y\rangle$;

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

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

**6.2.** Знайти власні функції та власні значення операторів $\widehat{s}_x$ та $\widehat{s}_y$.

**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 $\sigma_z$? Чому дорівнюють оператори $\sigma_\pm^2$?

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

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

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

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

PSfrag replacements

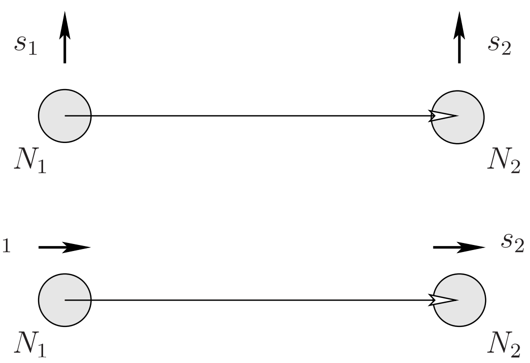


Рис. 6.1: До задачі 6.11

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

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

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

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

(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 $\Psi_1$, $\Psi_2$, $\Psi_3$ та $\Psi_4$.

**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, $\boldsymbol{\ell}_1^2$ та $\boldsymbol{\ell}_2^2$. 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 взаємодіїї між двома нуклонами) не є центральним, зокрема він включає тензорний потенціал

$$V_{\mathrm{T}} = \widehat{S}_{12}(\mathbf{r})v_{\mathrm{T}}(r),$$

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) перпендікулярні та (2) паралельні до $\mathbf{r}$ (рис. 6.1) і знайти чому дорівнює середнє значення тензорного оператора в залежностіть 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 випливає 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:

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

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

**6.2.** Для оператора $\widehat{s}_x$ власні значення дорівнюють $\dfrac{\hbar}{2}$ та $-\dfrac{\hbar}{2}$, 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 $\dfrac{\hbar}{2}$ та $-\dfrac{\hbar}{2}$, 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 $C = \dfrac{1}{\sqrt{3}}$. Тоді:
$\langle\widehat{s}_x\rangle = \dfrac{2\sqrt{2}}{3}, \quad \langle\widehat{s}_y\rangle = 0, \quad \langle\widehat{s}_z\rangle = -\dfrac{1}{3}.$

**6.6.** За означенням

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

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

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

**6.7.**
(1) Показується прямим обчисленням скалярних добутків $\langle\Psi_i|\Psi_j\rangle$.
(2) Запишемо оператор $\widehat{\mathbf{S}}^2$ через підвищуючі та понижаючючі оператори Паулі для першого та другого електронів $\sigma_\pm(1)$ і $\sigma_\pm(2)$ (див. задачу 6.4):

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

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:

$$\widehat{\mathbf{S}}^2\Psi_{1,2,3} = 2\hbar^2\Psi_{1,2,3}, \qquad \widehat{\mathbf{S}}^2\Psi_4 = 0,$$
$$\widehat{S}_z\Psi_1 = \hbar\Psi_1, \qquad \widehat{S}_z\Psi_2 = -\hbar\Psi_1, \qquad \widehat{S}_z\Psi_{3,4} = 0.$$

**6.8.** Користуючись (6.1) одержимо:

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

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

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

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 $(r, \theta, \varphi)$. Гамільтоніан частинки, яка знаходиться в центральному полі $U(r)$, комутує як з компонентами оператора *орбітального моменту* $\widehat{\mathbf{L}}$, так і з оператором квадрата орбітального моменту $\widehat{\mathbf{L}}^2$. 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 $\ell$ і $m$ називають *орбітальним* та *магнітним* квантовими числами. В рівнянні Шрьодінгера радіальна, $r$, і кутові, $\theta$ та $\varphi$, 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 $\ell$, а по магніному квантовому числу $m$, як це випливає з симетрії гамільтоніана, відбувається виродження.

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

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

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 $\widehat{\mathbf{L}}^2$ та $\widehat{L}_z$:

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$
$$\widehat{L}_z Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$

причому $\ell = 0, 1, 2, ..., m = -\ell, (-\ell+1), ..., (\ell-1), \ell$. 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

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

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

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

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

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

## 7.1 Задачі

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

**7.2.** Знайти рівні енергії та відповідні хвильові функції тривімірного осцилятора. Задачу розв'язати в декартових та сферичних координатах. Чому дорівнє парність станів. Знайти ступень виродженності окремого енергетичного рівня.

**7.3.** Розглянути класифікацію станів по квантовим числам $n, \ell$ та парності $P$ найнижчих п'яти енергетичних рівнів для частнки, яка знаходиться в тривимірній осціляторній 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 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$. 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 руху 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 $r \to 0$ рівняння (7.1) стає

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

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 задавольняє початковій умові $R_\ell(0) = 0$ і тому

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

**7.2.**

*Декартові кординати.* Розділяючи змінні в стаціонарному рівнянні Шрьодінгера

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

одержимо три незалежних одномірних осцилятора, які мають енергії

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

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

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

$$E_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right),$$
$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = AH_{n_x}(\rho_x)H_{n_y}(\rho_y)H_{n_z}(\rho_z)e^{-\frac{1}{2}(\rho_x^2+\rho_y^2+\rho_z^2)},$$
$$A = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{\pi\omega m}}\right)^{3/2}\left(2^n n_x! n_y! n_z!\right)^{-1/2}, \qquad \rho_x = \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}}x, \qquad \text{і т.д.}$$

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

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

*Сферичні координати.* Радіальна частина хвильової функції задовольняє рівнянню

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

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

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

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

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

PSfrag replacements

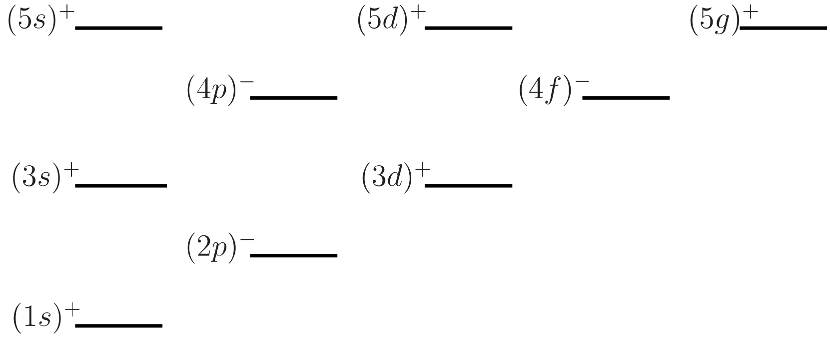


Рис. 7.1: Квантові стани $(n\ell)^P$ тривимірного гармонічного осцілятора

Прирівнюючи до нуля коефіцієнти при різних степенях $\rho$ одержимо наступні рівняння:

$$a_1 = 0, \tag{7.6}$$

$$a_{\nu+2} = \frac{2(\nu+\ell)+3-\varepsilon}{(\nu+2)(\nu+2\ell+3)} a_\nu, \qquad \nu \le N-2, \tag{7.7}$$

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

$$a_N\left[2(N+\ell)+3-\varepsilon\right] = 0. \tag{7.9}$$

З (7.6) та (7.7) випливає, що відмінні від нуля лише $a_\nu$ з парним $\nu$ 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

$$E_{n\ell} = \hbar\omega\left(2n_r + \ell + \tfrac{3}{2}\right), \qquad n_r = 0, 1, 2, ... \tag{7.10}$$

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

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

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 $r^2$,

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

і підставимо в формулу (7.10) $\widetilde{\ell}$ замість $\ell$, 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

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

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

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

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 вийнятку випадку, коли $\ell = 0$. Підставляючи $j_0(z) = \dfrac{\sin z}{z}$ в (7.13) отримаємо:

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

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

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

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

**7.9.** Використовуючи (7.2) одержимо:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 $\varphi_{\text{я}}(\mathbf{r}) = \dfrac{e}{r}$, а при $r \gg a_0$ потенціал експоненціально спадає.

**7.11.** (1) Координата та імпульс центра мас:

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

відносні координата та імпульс:

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

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

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

та рівняння для енергії зв'язку

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

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

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

(3) Враховуючи результат задачі 3.9 середньоквадатичний радіус мюонія в основному стані є $\sqrt{\langle r^2\rangle_{1S}^{\mu}} = \sqrt{3}a_0^{\mu}$, де $a_0^{\mu} = \dfrac{\hbar^2}{e^2\mu}$ — боровський радіус мюонія, $\mu = \dfrac{m_\mu m_e}{m_\mu + m_e}$ — 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 наближенного 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):

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

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 Шрьодінгере для повного гамільтоніана:

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

Розв'язок шукається шляхом розкладу хвильової функції та енергії по степеням $\lambda$:

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

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

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

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

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

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

В другому порядку поправка до енергії є

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

**3.** Умовою застосування теорії збурень є необхідність виконання нерівностей

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

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:

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

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

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

при цьому хвильові функції є

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

де

$$\cos\varphi = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}, \qquad \sin\varphi = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}},$$
$$x = \frac{H_{nn} - H_{mm} + \sqrt{(H_{mm} - H_{nn})^2 + 4|H_{nm}|^2}}{2H_{nm}}.$$

## 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 застосувння теорії збурень.

**8.2.** На одномірний гармонічний осцилятор діє збурення $H_1 = V \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$. Знайти умову застосувння 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 $\alpha x^3$ та $\beta x^4$. З'ясувати умови застосувння теорії збурень.

**8.4.** Валентний електрон у атомі літія знаходиться у потенціалі, який екранований двома електронами з першої повністю заповненої оболонки. Цей потенціал можно 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 представлені незбурений гамільтоніан є

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

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

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

**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 функкії 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

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

Випадок, коли $n = n'$ треба розглядати, як граничний перехід $n' \to n$ у виразі (8.8). В результаті $\langle n|x|n\rangle = \dfrac{a}{2}$ 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:

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

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

З умови застосувння 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 $\dfrac{|n^2-n'^2|^3}{nn'}$ симетричний відносно заміни $n' \leftrightarrow n$, тому достатнь 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

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

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

[1] В цьому легко переконатись взявши похідну по $dn'$ і впевнившись у тому, що вона завжди додатня.

нерівність:

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

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

**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

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

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:

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

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

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

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

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

Поправка до хвильової функції першого порядку буде:

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

Для нашого випадку умови (8.5) записуються як

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

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

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 застосувння 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 любих $\alpha$ та $\beta$ 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

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

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

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

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

Розкладаючи в ряд по $\sigma$ енергію $E_{n\ell}$ одержимо:

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

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

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

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

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

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

$$\psi_{n_1 b_2}^{(0)} \equiv |n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle,$$

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

1. Використовуючи результат задачі 2.11 маємо

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

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:

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

Запишемо поправка до хвильової функції першого порядку

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

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 $\Omega$ та $\omega$ в ряд по $\alpha$ до другого порядку, $\Omega \approx \omega_0\left(1 + \dfrac{\alpha}{2\kappa} - \dfrac{\alpha^2}{8\kappa^2}\right)$, $\omega \approx \omega_0\left(1 - \dfrac{\alpha}{2\kappa} - \dfrac{\alpha^2}{8\kappa^2}\right)$, 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

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

Розкладаючи $\Omega$ та $\omega$ в ряд до першого порядку по $\alpha$ 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 збурени для близьких рівнів. Користуючись формулою (8.6) знайдемо енергію з урахуванням доданків першого порядку по $\alpha$:

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

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

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

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

# 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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## 9.1 Задачі

**9.1.** Гамільтоніан квантової системи має вигляд

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

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 $\alpha$ — варіаційний параметр.

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

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

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

В якості пробної функції обрати:

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

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

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 $\alpha$ 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,

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

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 Шрьодінгера, розглядаючи при цьому змінну $x_1$ як параметр:

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

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

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

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 роз'вязок дає

$$E_{Nn}=\hbar\Omega\left(N+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad \text{де} \quad \Omega=\sqrt{\frac{\kappa^2-\alpha^2}{\kappa M_1}}.$$

Цей вираз випливає з результата задачі 2.17, якщо в ньому зробити розклад по малому параметру $M_2/M_1$.

**9.2.** Знайдемо коефіцієнт нормування

$$N=\sqrt{\frac{a^3}{\pi}}.$$

При цьому середні кінетична та потенціальноа енергії будуть:

$$\begin{aligned}\langle T\rangle &= -\frac{\hbar^2N^2}{2m}\int d^3re^{-ar}\Delta e^{-ar}=\frac{(\hbar a)^2}{2m},\\ \langle U\rangle &= \frac{\kappa N^2}{2}\int d^3rr^2e^{-2ar}=\frac{3\kappa}{2a^2}.\end{aligned} \tag{9.2}$$

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 $\psi(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$ 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

$$E_{\text{осн}} \approx \frac{3}{4}\left(\frac{3}{4}\frac{\hbar^4\lambda}{m^2}\right)^{1/3}.$$

(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 неперевності в цій точці, бо потенціал робить нескінчено великий стрибок.

(1) Знайдемо квадрат коефіцієнта нормування та середнє значення гамільтоніана

$$\begin{aligned}
&N^2 = \left(\int_0^\infty dx x^2 e^{-2\alpha x}\right)^{-1} = 4\alpha^3,\\
&E(\alpha) = \langle\widehat{H}\rangle = \langle\widehat{T}\rangle + \langle U\rangle,\\
&\langle\widehat{T}\rangle = -\frac{\hbar^2 N^2}{2m}\int_0^\infty dx x e^{-\alpha x}\frac{d^2}{dx^2}x e^{-\alpha x} = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2m},\\
&\langle U\rangle = \lambda N^2\int_0^\infty dx x^3 e^{-2\alpha x} = \frac{3\lambda}{2\alpha}.
\end{aligned}$$

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

$$N^2 = \frac{4(2\alpha)^{3/2}}{\sqrt{\pi}}, \qquad E(\alpha) = \frac{3\hbar^2\alpha}{2m} + \frac{2\lambda}{\sqrt{2\pi\alpha}}, \qquad \alpha = \sqrt[3]{\frac{2\lambda^2 m^2}{9\pi\hbar^4}}.$$

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 $\alpha$ не є незалежними, бо на пробну функцію потрібно накласти умову нормування. Врахуємо це за допомогою множника Лагранжа, тобто в якості варіаційної функції будемо використовувати

$$E(A_0, A_1, \alpha) = \lambda N(A_0, A_1, \alpha) + \langle \widehat{H} \rangle$$

де $\lambda$ множник Лагранжа, а

$$\begin{aligned}
&N(A_0, A_1, \alpha) = \int d^3r\psi^2(r) = 4\pi \frac{2}{(2\alpha)^3}\left(A_0^2 + 3\frac{A_0A_1}{\alpha} + 3\frac{A_1^2}{\alpha^2}\right),\\
&\langle \widehat{H} \rangle = \langle \widehat{T} \rangle + \langle V \rangle,\\
&\langle \widehat{T} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\int d^3r\psi(r)\Delta\psi(r) = 4\pi\frac{2}{(2\alpha)^3}\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(A_0^2\alpha^2 + A_0A_1\alpha + A_1^2\right),\\
&\langle V \rangle = -4\pi\frac{1}{(2\alpha)^3}e^2\left(2A_0^2\alpha + 4A_0A_1 + 3\frac{A_1^2}{\alpha}\right)
\end{aligned}$$

вважаючи далі параметри $A_0$, $A_1$ і $\alpha$ незалежними.

Запишемо умови екстремуму варіаційної функції $E(A_0, A_1, \alpha)$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(A_0, A_1, \alpha)}{\partial A_0} \quad &\sim \quad 2A_0\alpha\left(-2e^2m\alpha + 2m\lambda + \alpha^2\hbar^2\right) + \\
&+ \quad A_1\left(-4e^2m\alpha + 6m\lambda + \alpha^2\hbar^2\right) = 0, \qquad (9.3)\\
\frac{\partial E(A_0, A_1, \alpha)}{\partial A_1} \quad &\sim \quad A_0\alpha\left(-4e^2m\alpha + 6m\lambda + \alpha^2\hbar^2\right) + \\
&+ \quad 2A_1\left(-3e^2m\alpha + 6m\lambda + \alpha^2\hbar^2\right) = 0, \qquad (9.4)\\
\frac{\partial E(A_0, A_1, \alpha)}{\partial \alpha} \quad &\sim \quad \frac{e^2\left(A_0^2\alpha^2 + 3A_1A_0\alpha + 3A_1^2\right)}{\alpha^4} - \\
-\frac{\hbar^2\left(A_0^2\alpha^2 + 2A_1A_0\alpha + 3A_1^2\right)}{4m^4} &- \frac{3\lambda\left(A_0^2\alpha^2 + 4A_1A_0\alpha + 5A_1^2\right)}{2\alpha^5} = 0. \qquad (9.5)
\end{aligned}$$

Умова сумісності рівнянь (9.3) та (9.4) дає рівняння на $\lambda$

$$\begin{vmatrix} 2\alpha\left(-4e^2m\alpha + 6m\lambda + \alpha^2\hbar^2\right) & \left(-4e^2m\alpha + 6m\lambda + \alpha^2\hbar^2\right) \\ \alpha\left(-4e^2m\alpha + 6m\lambda + \alpha^2\hbar^2\right) & 2\left(-3e^2m\alpha + 6m\lambda + \alpha^2\hbar^2\right) \end{vmatrix} = 0, \qquad (9.6)$$

звідки

$$\lambda = \frac{\alpha(6e^2m - 5\alpha\hbar^2 \pm 2\sqrt{3e^4m^2 - 6e^2m\alpha\hbar^2 + 4m\alpha^2\hbar^4})}{6m}. \qquad (9.7)$$

Підставляючи цей вираз в рівняння (9.3) або (9.4) знайдемо зв'язок між параметрами $A_0$ та $A_1$:

$$A_1 = -\frac{2\alpha\left(-\hbar^2\alpha \pm \sqrt{3e^4m^2 - 6e^2m\alpha\hbar^2 + 4\alpha^2\hbar^4}\right)}{3\left(-e^2m + 2\alpha\hbar^2 \pm \sqrt{3e^4m^2 - 6e^2m\alpha\hbar^2 + 4\alpha^2\hbar^4}\right)}A_0. \qquad (9.8)$$

Підставляючи (9.7) та (9.8) в (9.5) приходимо до рівняння, яке визначає параметр $\alpha$:

$$\begin{aligned}
&-9e^6m^3 + 36e^4m^2\alpha\hbar^2 - 51e^2m\alpha^2\hbar^4 + 28\alpha^3\hbar^6 = \\
&= \pm\sqrt{3e^4m^2 - 6e^2m\alpha\hbar^2 + 4\alpha^2\hbar^4}\left(3e^4m^2 - 12e^2m\alpha\hbar^2 + 13\alpha^2\hbar^4\right).
\end{aligned} \qquad (9.9)$$

Підводячи до квадрата праву та ліву частини цього рівняння отримаємо

$$\left(e^2m - 2\alpha\hbar^2\right)\left(e^2m - \alpha\hbar^2\right)^5 = 0,$$

тобто

$$\alpha_1 = \frac{e^2m}{\hbar^2} = \frac{1}{a_0}, \qquad \alpha_2 = \frac{1}{2a_0},$$

де $a_0$ — радіус Бора. Підставляючи ці значення в (9.9) одержимо, що $\alpha_1$ відповідає випадку, коли перед коренем обирається знак «+», а $\alpha_2$ — 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

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + q\varphi - \widehat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\mathbf{B}\right]\Psi(\mathbf{x},t), \tag{10.1}$$

де $\varphi$ та $\mathbf{A}$ — скалярний та векторний потенціали електромагнітного поля, $q$ — заряд частинки, а $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ — оператор спінового магнітного моменту частинки. Останній пов'язаний з оператором спіна $\widehat{\mathbf{s}}$ співвідношенням

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = 2\mu\widehat{\mathbf{s}}.$$

Коефіцієнт $\mu$, який називають величиною спінового магнітного моменту, є значенням проекції магнітного моменту $\mu_z$, 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 $2\times 2$:

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

Для електрона останній член гамільнотіана в правій частині рівняння (10.1) є

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\mathbf{B} = -\mu_{\text{Б}}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}.$$

де $\mu_{\text{Б}} = \dfrac{e\hbar}{2M_e c}$ — магнетон Бора, $e$ — елементарний електричний заряд.

**2.** Хвильова функція представляє собою дворядну матрицю-стовпчик (спінор)

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{x},t) \\ \Psi_2(\mathbf{x},t) \end{pmatrix}.$$

Умова нормування:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \int d^3x\Psi^\dagger(\mathbf{x},t)\Psi(\mathbf{x},t) = \int d^3x\left[|\Psi_1(\mathbf{x},t)|^2 + |\Psi_2(\mathbf{x},t)|^2\right].$$

## 10.1 Задачі

**10.1.** Отримати рівняння неперервності для частинки без спіна (такою може бути, наприклад заряджений $\pi$-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 результата.

**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

$$\begin{aligned} &B_1 = B_\perp \cos\omega t, \qquad B_2 = B_\perp \sin\omega t, \\ &B_3 = B, \qquad B = \text{const}. \end{aligned}$$

Знайти закон зміни ймовірності різних значень проекції спіна нейтрона $s_3$ з часом при умові, що в початковий момент часу $t = 0$ проекція спіна $s_z(t=0) = \dfrac{1}{2}$. Розглянути випадок, коли $B_\perp \ll B_3$.
<u>Вказівки:</u>

- 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 $\phi_1$ та $\phi_2$.

- 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 спийнятливість 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, $\widehat{\boldsymbol{\mu}} = 0$ і замість рівняння (10.1) маємо

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2M}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + q\varphi\right]\Psi(\mathbf{x},t), \tag{10.2}$$

причому $\Psi(\mathbf{x},t)$ буде просто комплексною функцією. Домножимо це рівняння зліва на $\Psi^*(\mathbf{x},t)$. В результаті після нескладних перетворень одержимо

$$\begin{aligned} i\hbar\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} =& \frac{1}{2M}\left\{-\hbar^2\left[\nabla\big(\Psi^*\nabla\Psi\big)-(\nabla\Psi^*)\nabla\Psi\right]+\right.\\ &+\frac{i\hbar q}{c}\big(|\Psi|^2\mathrm{div}\mathbf{A}+2\mathbf{A}\cdot\Psi^*\nabla\Psi\big)+\\ &\left.+\left(\frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2+q\varphi\right)|\Psi|^2\right\}. \end{aligned} \tag{10.3}$$

Візьмемо рівняння комплексно спряжене до (10.2) і домножимо його справа на $\Psi(\mathbf{x},t)$:

$$\begin{aligned} -i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi =& \frac{1}{2M}\left\{-\hbar^2\left[\nabla\big((\nabla\Psi^*)\Psi\big)-(\nabla\Psi^*)\nabla\Psi\right]-\right.\\ &-\frac{i\hbar q}{c}\big(|\Psi|^2\mathrm{div}\mathbf{A}+2\mathbf{A}\cdot\nabla(\Psi^*)\Psi\big)+\\ &\left.+\left(\frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2+q\varphi\right)|\Psi|^2\right\}. \end{aligned} \tag{10.4}$$

Від рівняння (10.3) віднімимо рівняння (10.4), в результаті чого прийдемо до наступної рівності:

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t}=\mathrm{div}\left[\frac{\hbar}{2iM}\big((\nabla\Psi^*)\Psi-\Psi^*\nabla\Psi\big)+\frac{\hbar q}{mc}\mathbf{A}|\Psi|^2\right].$$

Отже струмом ймовірності э вектор

$$\mathbf{j}=\frac{\hbar}{2iM}\big((\nabla\Psi^*(\mathbf{x},t))\Psi(\mathbf{x},t)-\Psi^*(\mathbf{x},t)\nabla\Psi(\mathbf{x},t)\big)+\frac{\hbar q}{mc}\mathbf{A}|\Psi(\mathbf{x},t)|^2.$$

**10.2.** Оператор прискорення визначається як

$$\widehat{\mathbf{a}}=\frac{d\widehat{\mathbf{v}}}{dt}=\frac{\partial\widehat{\mathbf{v}}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H},\widehat{\mathbf{v}}\right],$$

де оператор швидкості є

$$\widehat{\mathbf{v}}=\frac{1}{M}\left(\widehat{\mathbf{p}}-\frac{q}{c}\mathbf{A}\right).$$

Беручи до уваги те, що оператор імпульсу не залежить від часу, одержимо

$$\frac{\partial\widehat{\mathbf{v}}}{\partial t}=-\frac{q}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t},$$

$$\left[\widehat{H},\widehat{\mathbf{v}}\right]=\frac{M}{2}\left[\widehat{\mathbf{v}}^2,\widehat{\mathbf{v}}\right]+\frac{q}{M}\left[\varphi,\widehat{\mathbf{p}}\right]=\frac{M}{2}\left[\widehat{\mathbf{v}}^2,\widehat{\mathbf{v}}\right]+i\hbar(\nabla\varphi),$$

$$\widehat{\mathbf{a}}=-\frac{q}{c}\left(\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\varphi\right)+\frac{i}{2\hbar M}\left[\widehat{\mathbf{v}}^2,\widehat{\mathbf{v}}\right].$$

Нагадаємо, що для частинки у зовнішньому магнітному полі різні компоненти оператора швидкості не комутують,

$$[\widehat{v}_i,\widehat{v}_j]=\frac{iq\hbar}{M^2c}\sum_k\varepsilon_{ijk}B_k,$$

тому

$$\left[\widehat{\mathbf{v}}^2, \widehat{\mathbf{v}}\right] = -\frac{iq\hbar}{M^2c}\left(\widehat{\mathbf{v}} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \widehat{\mathbf{v}}\right).$$

в результаті чого отримаємо

$$\widehat{\mathbf{a}} = \frac{q}{M}\boldsymbol{\mathcal{E}} + \frac{q}{2Mc}\left(\widehat{\mathbf{v}} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \widehat{\mathbf{v}}\right),$$

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

$$\frac{d\,\widehat{s}_1}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}, \widehat{s}_i\right] = \frac{i}{2}\left[\widehat{H}, \sigma_i\right] = \frac{i\mu_Б}{2}\left[\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \sigma_i\right].$$

Беручи до уваги комутаційне співвідношення між компонентами матриць Паулі одержимо

$$\frac{d\,\widehat{\mathbf{s}}}{dt} = \mu_Б \mathbf{B} \times \boldsymbol{\sigma}.$$

**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

$$\widehat{\mathbf{a}} = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{v}}\right] = -\frac{\mu_n}{M_n}\left[\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \nabla\right] = \frac{\mu_n}{M_n}\nabla(\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}).$$

**10.5.** Розпишемо рівняння (10.2) по компонентам спінора $\Psi_1(t)$ і $\Psi_2(t)$:

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{d\Psi_1(t)}{dt} = -\mu_n B_\perp e^{-i\omega t}\Psi_2(t) - \mu_n B\Psi_1(t), \\ i\hbar\dfrac{d\Psi_2(t)}{dt} = -\mu_n B_\perp e^{i\omega t}\Psi_1(t) + \mu_n B\Psi_2(t). \end{cases} \tag{10.5}$$

Зробимо заміну

$$\Psi_1(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}}\phi_1(t), \qquad \Psi_2(t) = e^{i\frac{\omega t}{2}}\phi_2(t),$$

в результаті чого система (10.5) перейде в

$$\begin{cases} i\dot{\phi}_1 = -\gamma_1\phi_1 - \gamma_2\phi_2, \\ i\dot{\phi}_2 = \gamma_1\phi_2 - \gamma_2\phi_1, \end{cases} \tag{10.6}$$

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 коефійієнти $C_n$

$$\begin{cases} (\gamma_1 - \Omega)C_1 = -\gamma_2 C_3, \\ (\gamma_1 + \Omega)C_2 = -\gamma_2 C_4, \\ (\gamma_1 + \Omega)C_3 = \gamma_2 C_1, \\ (\gamma_1 - \Omega)C_4 = \gamma_2 C_2. \end{cases} \tag{10.8}$$

З перших двох рівнянь знайдемо зв'язок між коефіцієнтами

$$\begin{aligned} C_3 &= \frac{\Omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_1, \\ C_4 &= \frac{\Omega + \gamma_1}{\gamma_2} C_2. \end{aligned}$$

Підсавивши ці співвідношення у два останніх рівняння одержимо одне й те саме рівняння (одне з чотирьох рівнянь в (10.8) є залежним), яке визначає частоту $\Omega$:

$$\Omega = \sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}.$$

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 коефійієнти $C_1$ та $C_2$

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = 1, \\ \dfrac{\Omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_1 - \dfrac{\Omega + \gamma_1}{\gamma_2} C_2 = 0, \end{cases}$$

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

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(t) \\ \Psi_2(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2\Omega} \begin{pmatrix} \left[(\Omega + \gamma_1) e^{i\Omega t} + (\Omega - \gamma_1) e^{-i\Omega t}\right] e^{-\frac{i\omega t}{2}} \\ 2i\gamma_2 \sin \Omega t e^{\frac{i\omega t}{2}} \end{pmatrix}.$$

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:

$$w_\uparrow = |\Psi_1(t)|^2 = \frac{1}{2\Omega^2}\left(2\gamma_1^2 + \gamma_2^2 + \gamma_2^2\cos^2\Omega t\right),$$
$$w_\downarrow = |\Psi_2(t)|^2 = \frac{\gamma_2^2\sin^2\Omega t}{2\Omega^2}.$$

Якщо $B_\perp \ll B$, $\gamma_2 \ll \gamma_1 \sim \Omega$, тому $w_\uparrow \approx 1$ і $w_\downarrow \ll 1$. Проте, коли $B \approx -\dfrac{\hbar\omega}{2\mu_n}$, то наступає резонансне зростання ймовірності $w_\downarrow$.

# Розділ 11

# Нестаціонарна теорія збурень

**1.** Нестаціонарна теорія збурень застосовується для опису квантових переходів. Допускається, що гамільтоніан системи можна записати у вигляді

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_1(\mathbf{x}, t),$$

де $\widehat{H}_0$ не залежить від часу, а збуреня $\widehat{H}_1(\mathbf{x}, t)$ залежить від часу явним чином.

**2.** Розв'язок нестаціонарного 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

$$\widehat{H}_0 \psi_n(\mathbf{x}) = E_n \psi_n(\mathbf{x}).$$

**3.** Якщо до моменту часу $t = 0$ система знаходилась у квантовому стані $m$, то ймовірність її переходу за час $\tau$ у стан $n$ визначається як

$$w_{m\to n}(\tau) = |c_n(\tau)|^2 . \tag{11.1}$$

**4.** Коефіцієнти $c_n(\tau)$ разраховуються по теорії збурень, тобто коефіцієнт розкладається в ряд по степені взаємодії

$$c_n(\tau) = c_n^{(0)}(\tau) + c_n^{(1)}(\tau) + c_n^{(2)}(\tau) + ...$$

і далі послідовно розраховуються окремі доданки цього ряду (докладно див. [7]):

$$\begin{aligned}
&c_n^{(0)}(\tau) = \delta_{nm}, \\
&c_n^{(k)}(\tau) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^k \sum_{r_1, r_2 \ldots r_{k-1}} \int_0^{\tau} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{k-1}} dt_{k-1} \times \\
&\times \exp\left[i\left(\omega_{nr_1} t_1 + \omega_{r_1 r_2} t_2 + \cdots + \omega_{r_{k-1} m} t_{k-1}\right)\right] \times \\
&\times W_{nr_1}(t_1) W_{r_1 r_2}(t_2) \cdots W_{r_{k-1} m}(t_{k-1}), \qquad \text{при} \qquad k \geq 1.
\end{aligned}$$

Тут введено такі позначення:

$$\omega_{r_i r_j} = \frac{E_{r_i} - E_{r_j}}{\hbar}, \qquad W_{r_i r_j}(t) = \int \psi^*_{r_i}(\mathbf{x}) \widehat{H}_1(\mathbf{x}, t) \psi_{r_j}(\mathbf{x}) d^3 r. \tag{11.2}$$

В першому порядку теорії збурень

$$c_n^{(1)}(\tau) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\tau dt e^{i\omega_{nm} t} W_{nm}(t). \tag{11.3}$$

## 11.1 Задачі

**11.1.** На частинку, яка знаходиться у безмежно глибокій потенціальній ямі завширшки $a$ $(0 < x < a)$, діє збурення $\widehat{H}_1(x, t) = V(x)F(t)$, де

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{при} \quad b < x < a - b, \qquad 0 < b < a, \\ 0, & \text{у інших випадках.} \end{cases}$$

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) $F(t) = \exp\left(-\dfrac{t^2}{\tau^2}\right)$,

(2) $F(t) = \exp\left(-\dfrac{|t|}{\tau}\right)$,

(3) $F(t) = \left[1 + \left(\dfrac{t}{\tau}\right)^2\right]^{-1}$.

**11.2.** Лінійний гармонічний оцилятор 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 $\psi_1$ та $\psi_2$, які відповідають енергії $E_1 = \hbar\omega_1$ та $E_2 = \hbar\omega_2$. При $t < 0$ система знаходиться у стані $\psi_1$. В момент часу $t = 0$ вмикається збурення $\widehat{H}_1$ надалі незалжне від часу. В першому порядку теорії збурень знайти:

(1) хвильову функцію системи $\Psi(t)$ в момент часу $t > 0$,

(2) ймовірність переходу $w_{1\to 2}(t)$.

## 11.2 Відповіді та розв'язки задач

**11.1.** Скористаємось формулою (11.2) і одержимо

$$W_{nn'}(t) = F(t)I_{nn'},$$
$$I_{nn'} = \frac{2V_0}{a}\int_b^{a-b} dx \sin\frac{\pi n' x}{a}\sin\frac{\pi n x}{a} =$$
$$= \frac{2V_0}{\pi}\times\begin{cases} 0, & \text{якщо } n+n' \text{ непарне,}\\ \dfrac{1}{n-n'}\sin\dfrac{\pi(n-n')b}{a} - \dfrac{1}{n+n'}\sin\dfrac{\pi(n+n')b}{a}, & \text{якщо } n+n' \text{ парне.}\end{cases}$$

Тоді $w_{n\to n'} = |c_{n'}|^2$, де $c_{n'}$ визначається формулою (11.3)

$$c_{n'} = \frac{I_{nn'}}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt F(t) e^{i\omega_{nn'}t} = \frac{\tau I_{nn'}}{\hbar}\mathcal{F}_{nn'},$$
$$\omega_{nn'} = \frac{\hbar\pi^2(n'^2-n^2)}{2ma^2},$$

$$\mathcal{F}_{nn'} = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{\pi}}{i}\exp\left(-\dfrac{\omega_{nn'}^2\tau^2}{4}\right), & (1)\\ -\dfrac{2}{i\hbar(1+\tau^2\omega_{nn'}^2)}, & (2)\\ \dfrac{\pi}{\hbar}e^{-\omega_{nn'}\tau}. & (3)\end{cases} \qquad (11.4)$$

**11.2.** (1) Враховуючи те, що збурення є $H_1(x,t) = Q\mathcal{E}_0 x F(t)$, маємо (див. задачу 2.11):

$$W_{nn'}(t) = Q\mathcal{E}_0 F(t)\langle n|x|n'\rangle = Q\mathcal{E}_0 F(t)\sqrt{\frac{\hbar}{2n\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}\right) \equiv$$
$$\equiv I_+\delta_{n',n-1} + I_-\delta_{n',n+1}.$$

Звідси одержуємо правило відбору $\Delta n = \pm 1$.

(2) Відповідно до (11.1) та (11.3)

$$w_{n\to n\pm1} = (\hbar^{-1}I_{pm}\mathcal{F}_{n,n\pm1})^2,$$

де $\mathcal{F}_{n,n\pm1}$ визничається 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 нестаціонарної теорії збурень:

$$c_1^{(1)}(t) = \frac{W_{12}}{i\hbar}\int_0^t dt' e^{i\omega_{12}t'} = \frac{W_{12}}{i\hbar\omega_{12}}\left(1 - e^{i\omega_{12}t}\right),$$
$$c_2^{(1)}(t) = \frac{W_{21}}{i\hbar}\int_0^t dt' e^{i\omega_{21}t'} = \frac{W_{12}}{i\hbar\omega_{12}}\left(e^{-i\omega_{12}t-1}\right) = -c_1^{(1)}(t),$$

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:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \left[1 + c_1^{(1)}(t)\right] e^{-i\omega_1 t} \psi_1(\mathbf{x}) + c_1^{(2)}(t)\, e^{-i\omega_2 t} \psi_2(\mathbf{x}) =$$
$$= \left[e^{-i\omega_1 t} + \frac{W_{12}}{\hbar\omega_{12}} \left(e^{-i\omega_1 t} - e^{-i\omega_2 t}\right)\right] \psi_1(\mathbf{x}) + \frac{W_{12}}{\hbar\omega_{12}} \left(e^{-i\omega_2 t} - e^{-i\omega_1 t}\right) \psi_2(\mathbf{x}).$$

(2) $w_{1\to 2}(t) = \left|c_1^{(2)}(t)\right|^2 = 2\left(\dfrac{|W_{12}|}{\hbar\omega_{12}}\right)^2 [1 - \cos(\omega_1 - \omega_2)\, t]$.

# Розділ 12

# Багаточастинкові системи. Принцип тотожності. Формалізм представлення чисел заповнення

**1.** В силу принципа 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 тотожніх частинок часто застосовують формалізм представлення чисел заповнення. Його також називають *методом вторинного квантування.* З цією метою вводять поняття операторів народження та знищення, $\widehat{a}_n^\dagger$ та $\widehat{a}_n$, частинки у квантовому стані $n$. За ознакою оператори народження та знищення задовольняють таким комутаційним співвідношенням:

$$\left.\begin{aligned} &\left[\widehat{a}_{n'}, \widehat{a}_n^\dagger\right] \equiv \widehat{a}_{n'}\widehat{a}_n^\dagger - \widehat{a}_n^\dagger\widehat{a}_{n'} = \delta_{n'n}, \\ &\left[\widehat{a}_{n'}, \widehat{a}_n\right] = \left[\widehat{a}_{n'}^\dagger, \widehat{a}_n^\dagger\right] = 0, \end{aligned}\right\} \quad \text{для бозонів,}$$

$$\left.\begin{aligned} &\left\{\widehat{a}_{n'}, \widehat{a}_n^\dagger\right\} \equiv \widehat{a}_{n'}\widehat{a}_n^\dagger + \widehat{a}_n^\dagger\widehat{a}_{n'} = \delta_{n'n}, \\ &\left\{\widehat{a}_{n'}, \widehat{a}_n\right\} = \left\{\widehat{a}_{n'}^\dagger, \widehat{a}_n^\dagger\right\} = 0, \end{aligned}\right\} \quad \text{для ферміонів.}$$

**3.** Оператори народження та знищення діють на вектор $|N_n\rangle$ стану, який включає $N_n$ тотожніх частинок, що знаходяться у квантовому стані $n$:

$$\widehat{a}_n |N_n\rangle = \sqrt{N_n}\, |N_n - 1\rangle\,, \qquad \widehat{a}_n^\dagger |N_n\rangle = \sqrt{N_n + 1}\, |N_n + 1\rangle\,,$$

причому $\langle N_n | N_n\rangle = 1$. Дія оператора знищення на вакуум дає ноль, $\widehat{a}_n |0\rangle = 0$.

Багаточастинковий стан визначається як результат послідовної дії оперотора народження на вакуум:

$$|N_n\rangle = \sqrt{\frac{1}{N_n!}}\left(\widehat{a}_n^\dagger\right)^{N_n} |0\rangle\,,$$

де множник $\sqrt{\dfrac{1}{N_n!}}$ введено для нормування, $\langle N_{n'} | N_n\rangle = \delta_{n'n}$.

**4.** Оператор $\widehat{a}_n\widehat{a}_n^\dagger$ представляє оператор числа частинок, які знаходяться у квантовому стані $n$:

$$\widehat{a}_n\widehat{a}_n^\dagger \left|N_n\right\rangle = N_n \left|N_n\right\rangle .$$

Гамільтоніан системи невзаємодіючих між собою тотожніх частинок є

$$\widehat{H} = \sum_n \widehat{a}_n\widehat{a}_n^\dagger E_n,$$

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 функції;
(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 $\rho^0$-мезон не розпадається по каналу $\rho^0 \to \pi^0 + \pi^0$, але розпадається по каналу $\rho^0 \to \pi^+ + \pi^-$. Спін $\pi$-мезонів дорівнює 0, а спін $\rho$-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

$$\widehat{\widehat{a}} = A\widehat{a} + B\widehat{a}^\dagger, \qquad \widehat{\widehat{a}}^\dagger = A\widehat{a}^\dagger + B\widehat{a},$$

де $A$ та $B$ довільні дійсні числа. При яких значеннях коефіцієнтів $A$ та $B$ перехід від операторів народження та знищення $\widehat{a}^\dagger$ та $\widehat{a}$ до нових операторів $\widehat{\widehat{a}}^\dagger$ та $\widehat{\widehat{a}}$ буде канонічним, тобто збережуться комутаційні співвідношення? Розглянути обидва випадки, бозе та фермі операторів.

**12.6.** Для бозе операторів народження та знищення $\widehat{\widehat{a}}^\dagger$ та $\widehat{\widehat{a}}$ (див. результати попередньої задачі) побудувати вакуумний стан $\widehat{\widehat{0}}$. 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:

$$\chi_{\text{сим}}(m_1, m_2) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left( \chi_{m_1}^{(1)} \chi_{m_2}^{(2)} + \chi_{m_2}^{(1)} \chi_{m_1}^{(2)} \right),$$
$$\chi_{\text{a.c.}}(m_1, m_2) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left( \chi_{m_1}^{(1)} \chi_{m_2}^{(2)} - \chi_{m_2}^{(1)} \chi_{m_1}^{(2)} \right).$$

У випадку, коли $m_1 = m_2 = m$ симетричними хвильовими функціями будуть $\chi_m^{(1)} \chi_m^{(2)}$. Симетричних функції буде $(2s+1)(s+1)$, а антисиметричних $s(2s+1)$.

(2) $(2s+1)^2$ станів, хвильові функції $\chi_{m_1}^{(1)} \chi_{m_2}^{(2)}$.

(3) Один антисиметричний стан

$$\chi_0^{\text{сим}}(\uparrow, \downarrow) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left( \chi_\uparrow^{(1)} \chi_\downarrow^{(2)} - \chi_\downarrow^{(1)} \chi_\uparrow^{(2)} \right),$$

який відповідає $S = 0$, та три симетричних стани

$$\chi_1^{\text{a.c.}}(\uparrow, \uparrow) = \chi_\uparrow^{(1)} \chi_\uparrow^{(2)}, \qquad \chi_1^{\text{a.c.}}(\downarrow, \downarrow) = \chi_\downarrow^{(1)} \chi_\downarrow^{(2)},$$
$$\chi_1^{\text{a.c.}}(\uparrow, \downarrow) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left( \chi_\uparrow^{(1)} \chi_\downarrow^{(2)} + \chi_\downarrow^{(1)} \chi_\uparrow^{(2)} \right),$$

яким відповідає $S = 1$.

**12.2.** Якщо спін $S = 0$, то двонуклонна система може існувати у трьох зарядових станах, $pp$, $pn$ та $nn$. Якщо спін $S = 1$, то система може існувати лише у одному зарядовому стані $pn$, який називають дейтроном.

**12.3.** В зв'язку з законом збереження моменту кількості руху повний момент двох $\pi$-мезонів в системі спокою $\rho^0$-мезона має дорівнювати $j = 1$. Так як спін $\pi$-мезона дорівнює нулю, то $j$ складається лише з орбітального моменту, $j = \ell = 1$ і тому хвильова функція двох $\pi$-мезонів виявляється антисиметричною при їх перестановці. З іншого боку, хвильова функція двох $\pi^0$-мезонів повинна бути симетрично і тому розпад $\rho^0 \to \pi^0 + \pi^0$ 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.** $\langle n| x^2 |n\rangle = \dfrac{\hbar}{2m\omega} \langle n| \left(\widehat{a}^\dagger + \widehat{a}\right)^2 |n\rangle = \dfrac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right)$,

$\langle n| x^4 |n\rangle = \left(\dfrac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle n| \left(\widehat{a}^\dagger + \widehat{a}\right)^4 |n\rangle = 3 \left(\dfrac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (2n^2 + 2n + 1)$.

**12.5.** Спочатку розглянемо випадок бозонів. Запишемо умову канонічності перетворення

$$\begin{aligned}
\left[\widehat{\widetilde{a}}, \widehat{\widetilde{a}}^\dagger\right] &= \left[A\widehat{a} + B\widehat{a}^\dagger, A\widehat{a}^\dagger + B\widehat{a}\right] = \\
&= A^2 \left[\widehat{\widetilde{a}}, \widehat{\widetilde{a}}^\dagger\right] + AB \left[\widehat{\widetilde{a}}, \widehat{\widetilde{a}}\right] + AB \left[\widehat{\widetilde{a}}^\dagger, \widehat{\widetilde{a}}^\dagger\right] + B^2 \left[\widehat{\widetilde{a}}^\dagger, \widehat{\widetilde{a}}\right] = \\
&= A^2 - B^2 = 1.
\end{aligned}$$

Звідси випливає, що $A = \mathrm{ch}\alpha$, $B = \mathrm{sh}\alpha$, де параметр $\alpha$ довільний.

У випадку ферміонів маємо дві умови канонічності $\left\{\widehat{\widehat{a}}, \widehat{\widehat{a}}^{\dagger}\right\} = 1$ та $\left\{\widehat{\widehat{a}}, \widehat{\widehat{a}}\right\} = 0$. 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 $\left|\widetilde{0}\right\rangle$ по цим станам $\left|\widetilde{0}\right\rangle = \sum\limits_{n=0}^{\infty} C_n \,|n\rangle$, де на коефіцієнти $C_n$ потрібно наложити умову нормування $\sum\limits_{n=0}^{\infty} C_n^2 = 1$. Для того, щоб $\left|\widetilde{0}\right\rangle$ був вакуумним станом для нових бозонів потрібно вимагати $\widehat{\widehat{a}}\left|\widetilde{0}\right\rangle = 0$, звідки випливає

$$\left(A\widehat{a} + B\widehat{a}^{\dagger}\right)\left|\widetilde{0}\right\rangle = A\sum_{n=1}^{\infty} C_n\sqrt{n}\,|n-1\rangle + B\sum_{n=0}^{\infty} C_n\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle = 0.$$

Зробимо заміни $n - 1 \to n$ (в першій сумі) і $n + 1 \to n$ (в другій сумі)

$$AC_1\,|0\rangle + \sum_{n=1}^{\infty}\left(A\sqrt{n+1}C_{n+1} + B\sqrt{n}C_{n-1}\right)|n\rangle = 0.$$

Звідси одержимо

$$C_1 = 0, \qquad \text{та} \qquad C_{n+1} = -\frac{B}{A}\sqrt{\frac{n}{n+1}}C_{n-1}$$

або

$$C_1 = 0,$$
$$C_n = \begin{cases} \left(-\dfrac{B}{A}\right)^k \sqrt{\dfrac{(2k-1)!!}{2^k k!}}C_0, & \text{при} \quad n = 2k, \\ 0, & \text{при} \quad n = 2k+1. \end{cases}$$

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 $C_0 = \sqrt{\dfrac{1}{A}}$.

Фізичний зміст коефіцієнтів $C_n$ полягає у тому, що вони представляють амплітуду ймовірності знайти у новому вакуумі старих бозонів. Тому відповідна ймовірность $w_n = C_n^2$.

# Розділ 13

# Квантова теорія розсіяння

**1.** Процеси розсіяння частинок на інших частинках розділяють на пружні та непружні. У випадку пружного розсіяння частинки не змінюють свого склада, а лише обмінюються енергією та імпульсом,

$$m_1 + m_2 \to m_1 + m_2.$$

При непружному розсіянні частинки змінюють свій склад, або народжуються нові частинки,

$$m_1 + m_2 \to \mu_1 + \mu_2,$$
$$m_1 + m_2 \to \mu_1 + \mu_2 + ... + \mu_n.$$

**2.** Розсіяння відбувається внаслідок взаємодії $U(\mathbf{r})$ між частинками, які стикаються; $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ — відстань між частинками. У квантовій механіці, як і в класичній механіці, задача про пружне розсіяння двох частинок зводится до розгляду руху однієї частинки з зведеною масою $\mu$ у полі $U(\mathbf{r})$.

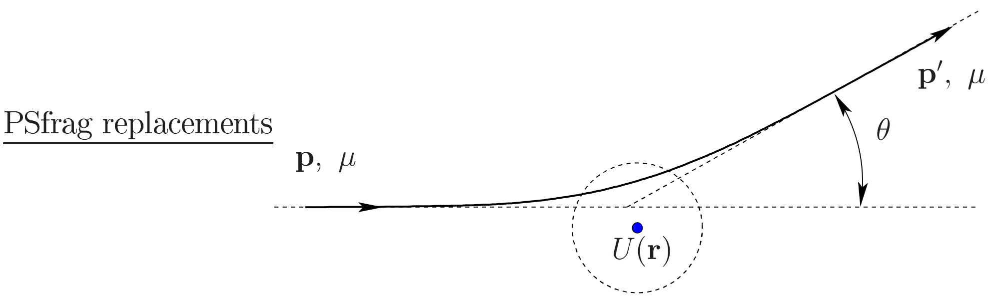


Рис. 13.1: Розсіяння частинки з зведеною масою $\mu$ на потенціалі

**3.** Диференційний переріз процесу розсіяння $m_1 + m_2 \to m_3 + m_4$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu p'}{\mu' p} \left|A(E,\theta)\right|^2,$$

де $A(E,\theta)$ — амплітуда розсіяння, $E$ — повна енергія двох частинок у системі їх центра мас, $\theta$ — кут розсіяння, $\mu = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ та $\mu' = \dfrac{m_3 m_4}{m_3 + m_4}$ — зведені 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 розраховуться на основі борновського ряду:

$$\begin{aligned} A(E,\theta) = &-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}\right]U(\mathbf{r})+ \\ &+\left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2\int d^3r d^3r' e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}U(\mathbf{r})\frac{\exp\left(\frac{i}{\hbar}p\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\right)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}U(\mathbf{r}')e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}'} + ..., \end{aligned} \tag{13.1}$$

де $\mathbf{p}$ та $\mathbf{p}'$ — імпульси частинки у початковому та кінцевому станах. Перший член такого ряда називають *борновсъким наближенням.*

**5.** У випадку розсіяння на центральному потенціалі хвильову функцію можна розкласти по поліномам Лежандра (вважається, що вісь $z$ направлено вздовж хвильового вектора $\mathbf{k} = \mathbf{p}/hbar$)

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\Phi_{kl}(r)P_\ell(\cos\theta),$$

де функція $\Phi_{kl}(r)$ задовольняє рівняння

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}U(r) + k^2\right]\Phi_{kl}(r) = 0.$$

У разі, коли $r\to\infty$ 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 $\ell$. 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 екрановоному кулоновському полі ядра

$$|\boldsymbol{\mathcal{E}}| = \frac{Ze}{r}e^{-r/r_0}. \tag{13.2}$$

Розглянути випадок, коли параметр екранування $r_0 \to \infty$ і знайти амплітуду розсіяння та диференційний переріз процесу.

**13.2.** У борновському наближенні розрахувати амплітуду розсіяння та диференційний переріз розсіяння на потенціалі сферичної сходинки

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{при} \quad r < r_0, \\ 0 & \text{при} \quad r > r_0. \end{cases}$$

Як залежить диференційний 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 диференційний переріз розсіяння електрона на атомі водню в основному стані.
Вказівка: Розглянути амплітуду розсіяння на атомі, як суму амплітуд розсіяння на ядрі та електроні $A(E,\theta) = A^{(я)}(E,\theta) + A^{(е)}(E,\theta)$.

## 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:

$$\begin{aligned} A^{(Б)}(k,\theta) &= -\lim_{r_0\to\infty} \frac{\mu QZe}{2\pi\hbar} \int d^3r r^{-1} \exp\left[-\left(\frac{r}{r_0} - \frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}\right)\right] = \\ &= -\lim_{r_0\to\infty} \frac{2\mu QZe}{\hbar^2\left(\frac{1}{r_0^2} - \frac{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|^2}{\hbar^2}\right)} = \\ &= \frac{QZe\mu}{2(\hbar k)^2 \sin^2\frac{1}{2}\theta}, \quad \text{де} \quad p = \hbar k. \end{aligned} \tag{13.3}$$

Диференційний переріз

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A^{(Б)}(k,\theta)|^2 = \left[\frac{QZe\mu}{2(\hbar k)^2 \sin^2\frac{1}{2}\theta}\right]^2$$

дає формулу Резерфорда.

**13.2.** Скористаємось формулою (13.1) для розсіяння на центральному потенціалі:

$$\begin{aligned} A^{(Б)}(E,\theta) &= -\frac{\mu U_0}{\hbar^2 q}\int_0^{r_0} dr r \sin qr = \frac{\mu U_0}{\hbar^2 q}\frac{\partial}{\partial q}\int_0^{r_0} dr \cos qr = \\ &= \frac{2\mu U_0}{\hbar^2 q^3}\left[r_0 q \cos(r_0 q) - \sin(r_0 q)\right], \end{aligned}$$

де $q = \sqrt{\frac{8\mu E}{\hbar^2}} \sin\frac{\theta}{2}$. Диференційний переріз буде:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu U_0}{\hbar^2 q^3}\right)^2 \left[r_0 q \cos(r_0 q) - \sin(r_0 q)\right]^2.$$

При $r_0 q \ll 1$ покладаємо

$$\cos(r_0 q) \approx 1 - \frac{1}{2}(r_0 q)^2 \quad \text{і} \qquad \sin(r_0 q) \approx r_0 q - \frac{1}{6}(r_0 q)^3.$$

Тоді отримаємо

$$A^{(\text{Б})}(E,\theta) = \frac{2\mu U_0}{3\hbar^3} r_0^3,$$

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

$$A^{(\text{Б})} \approx -\frac{r_0 U_0}{4E} \frac{\cos(r_0 q)}{\sin^2\frac{\theta}{2}},$$

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

$$R_{k0}(r) = \begin{cases} \phi_1(r,k) & \text{при} \quad r < r_0, \\ \phi_2(r,k) & \text{при} \quad r > r_0, \end{cases}$$

де

$$\phi_1(r,k) = N_1 \sin\kappa r, \qquad \phi_2(r,k) = N_2 \sin[kr + \delta_0(k)],$$
$$\kappa = \sqrt{\frac{2\mu(E+U_0)}{\hbar^2}}, \qquad k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}.$$

З умов зшивки у точці $r = r_0$ випливає

$$\frac{1}{\phi_1(r,k)} \left.\frac{\partial\phi_1(r,k)}{\partial r}\right|_{r=r_0} = \frac{1}{\phi_2(r,k)} \left.\frac{\partial\phi_2(r,k)}{\partial r}\right|_{r=r_0},$$

звідки одержимо фазовий зсув:

$$\delta_0(k) = -kr_0 + \operatorname{arctg}\left[\frac{\kappa}{k}\operatorname{ctg}(kr_0)\right].$$

**13.4.** Амплітуда розсіяння $A^{(\text{я})}(E,\theta)$ задається остінннім виразом в (13.3) в якому $Q = -e$, а $Z = 1$. В свою чергу, амплідуду 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 $A^{(\text{e})}(E,\theta)$ буде

$$A^{(\text{e})}(E,\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U_{\text{еф}}(r) =$$
$$= -\frac{\mu e^2}{2\pi\hbar^2} \int d^3r d^3\rho \frac{|\psi_{1s}(\rho)|^2}{|\mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}|} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad \mathbf{q} = \frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar}.$$

Виконуючи заміну $\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}$ одержимо:

$$A^{(\text{e})}(E,\theta) = A^{(\text{я})}(E,\theta) F\left(q^2\right), \qquad q^2 = 4k^2 \sin^2\frac{\theta}{2},$$

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 приходимо до наступного виразу для диференційного перерізу:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4a_0^2 \frac{\left[8 + \left(\frac{qa_0}{\hbar}\right)^2\right]^2}{\left[4 + \left(\frac{qa_0}{\hbar}\right)^2\right]^4}.$$

# Розділ 14

# Релятивістська квантова механіка

**1.** Коваріантні та контрваріантні 4-вектори $a_\mu$ та $a^\mu$ пов'язані між собою співвідношенням[1]:

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu,$$

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

$$\begin{aligned} \widehat{p}_\mu &= i\hbar \left( \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t},\ \frac{\partial}{\partial x^1},\ \frac{\partial}{\partial x^2},\ \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \\ \widehat{p}^\mu &= i\hbar \left( \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t},\ \frac{\partial}{\partial x_1},\ \frac{\partial}{\partial x_2},\ \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu}. \end{aligned}$$

**2.** Рівняння Клейна-Гордона-Фока описує частинку з спіном 0.

**2.1** Коваріантна форма рівняння Клейна-Гордона-Фока

$$\left[ \widehat{p}_\mu \widehat{p}^\mu - (mc)^2 \right] \psi(x) = 0.$$

**2.2** Рівняння неперервності

$$\frac{\partial j^\mu(x)}{\partial x^\mu} = 0, \qquad \text{де} \qquad j^\mu(x) = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[ \psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_\mu} - \psi(x) \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x_\mu} \right].$$

[1] Тут і далі опускається знак суми по індексу, який повторюється.

**2.3** Існує два типа плоско-хвильових розв'язків рівняння Клейна-Гордона-Фока

$$\psi_{\mathbf{p}}^{(+)} = A\exp\left[+\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{x}\cdot\mathbf{p} - Et\right)\right], \qquad \psi_{\mathbf{p}}^{(-)} = A\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{x}\cdot\mathbf{p} - Et\right)\right],$$

де $E = \sqrt{m^2c^4 + c^2\mathbf{p}^2}$. 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 (спінор Діріка)

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix},$$

а $\not{p} \equiv \gamma^\mu \widehat{p}_\mu$. В останньому виразі $\gamma^\mu$ — матриці $4\times 4$ (матриці Дірака), які задовольняють такій властивості

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}.$$

В усіх задачах використовується наступний вибір матриць Дірака[2]

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Зручно записати матриці Дірака та спінор Дірака у блочному вигляді через матриці $2\times 2$ та звичайні 2-мірні спінори

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \qquad \gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix},$$

де $\mathbf{1}$ — одинична матриця $2\times 2$ та $\boldsymbol{\sigma}$ — матриці Паулі.

[2] Існують різні вибори матриць Дірака, які задовольняють вказаному атикомутаційному співвідношенню. Звичайно, фізичні результати не залежать від конкретного вибору цих матриць.

**3.2** Можна записати рівняння Дірака у вигляді часового рівняння Шрьодінгера

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial t} = \widehat{H}\psi(x).$$

Тут $\psi(x)$ — спінор Дірака (див. розд. 14.3.1), а

$$\widehat{H} = i\hbar c\,\boldsymbol{\alpha}\nabla + \beta mc^2, \tag{14.1}$$

де $\beta = \gamma^0$, $\boldsymbol{\alpha}= \beta\boldsymbol{\gamma}$ (їх також називають матрицями Дірака), або в блочному вигляді

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}.$$

Звичайно, ця форма запису рівняння Дірака не є коваріантною.

**3.3** Рівняння неперервності

$$\frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} = 0, \qquad j^\mu = c(c\rho, \mathbf{j}) = c\psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^\mu\psi(x) \equiv \overline{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x),$$

де $\overline{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0 = (\psi_1^*,\ \psi_2^*,\ -\psi_3^*,\ -\psi_4^*)$ — спінор спряжений по Діраку.

**3.4** Існує два незалежних плоско-хвильових розв'язків рівняння Дірака

$$\psi_{\mathbf{p}}^{(+)}(x) = A\begin{pmatrix} \chi \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\chi}{mc^2+E} \end{pmatrix} e^{+\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}-Et)}, \quad \psi_{\mathbf{p}}^{(-)}(x) = A\begin{pmatrix} \chi \\ -\dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\chi}{mc^2-E} \end{pmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}-Et)},$$

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 залежать від часу і має свій знак.

**14.2.** Розглянути рівняння Клейна-Гордона-Фока для частинки з зарядом $e$ у зовнішньому електромагнітному полі. З цією метою у рівнянні для вільної частинки зробити заміну

$$\widehat{p}_\mu \to \widehat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu. \tag{14.2}$$

Як зміниться рівняння при заміні хвильової функції на комплексно спряжену $\psi(x) \to \psi_c(x) = \psi^*(x)$? Дати фізичну інтерпретацію одержаного результату.

**14.3.** З урахуванням релятивістських ефектів знайти енергетичной спектр воднеподібного атома, в якому електрон замінено на $\pi^-$-мезон (частинка без спіну та з зарядом $-e$). Вважати ядро безмежно важким; знехтувати внеском ядерної взаємодії між ядром та $\pi$-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 $\widehat{\mathbf{p}}$,
(2) орбітальний момент $\widehat{\boldsymbol{\ell}}$,
(3) квадрат орбітального моменту $\widehat{\boldsymbol{\ell}}^2$,
(4) спін $\widehat{\mathbf{s}}$ (5) квадрата спіна $\widehat{\mathbf{s}}^2$,
(6) повний момент $\widehat{\mathbf{j}} = \widehat{\boldsymbol{\ell}} + \widehat{\mathbf{s}}$,
(7) проекція спіна на напрям руху частинки (спіральність) $\Lambda = \dfrac{\widehat{\mathbf{p}}\cdot\widehat{\mathbf{s}}}{|\mathbf{p}|}$?
Примітка: У блочному вигляді оператор спіна є

$$\widehat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}, \qquad \text{де} \qquad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}.$$

**14.5.** Імпульс частинки у зовнішньому електромагнітному полі є $\widehat{\boldsymbol{\pi}} = \frac{\hbar}{i}\nabla - e\mathbf{A}$. Показати, що для частинки Дірака виконується рівність

$$\frac{d\widehat{\boldsymbol{\pi}}}{dt} = e\left(\boldsymbol{\mathcal{E}} + c^{-1}\mathbf{B}\right),$$

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 утримається самоузгодженим потеніалом, 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 $r \to \infty$, 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. Розразунок 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.** $Q = \pm\dfrac{1}{mc^2}\int d^3p E_{\mathbf{p}}\,|A(\mathbf{p})|^2$, де $E_{\mathbf{p}} = \sqrt{m^2c^4 + c^4\mathbf{p}^2}$; знаки $+$ та $-$ відповідають, відповідно, додатньо- та відємно-частотним розв'язкам.

**14.2.** Запишемо рівняння Клейна-Гордона-Фока у зовнішньому електромагнітному полі:

$$\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu}-\frac{e}{c}A_\mu\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu}-\frac{e}{c}A^\mu\right)-(mc)^2\right]\psi(x)=0. \tag{14.3}$$

Комплексно спряжене рівнянням визначає хвильову функцію $\psi^*(x)$:

$$\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu}+\frac{e}{c}A_\mu\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu}+\frac{e}{c}A^\mu\right)-(mc)^2\right]\psi^*(x)=0. \tag{14.4}$$

Звідси видно, що така заміна відповідає зміні заряда частинки на протилежний і може бути інтерпретованя як перехід від частинки до античастинки.

**14.3.** Враховуючи результат задачі 14.2 $\pi^-$-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 $A_\mu=\left(\dfrac{eZ}{r},\mathbf{0}\right)$ а $\Psi(\mathbf{r},t)=e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\psi(\mathbf{r})$. Після нескладних перетворень одержимо

$$\left(\frac{E^2}{mc^2}-mc^2\right)\psi(\mathbf{r})=\frac{1}{m}\left(\hbar^2\Delta-\frac{e^4Z^2}{c^2r^2}-\frac{2Ee^2Z}{c^2r}\right)\psi(\mathbf{r}). \tag{14.5}$$

Розділяючи радіальну та кутові змінні, $\psi(\mathbf{r})=Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\phi_\ell(r)$, рівняння (14.5) перепишемо у вигляді:

$$\widetilde{E}\phi_\ell(r)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}+\frac{\hbar^2\widetilde{\ell}(\widetilde{\ell}+1)}{2mr^2}-\frac{e^2\widetilde{Z}}{r}\right)\phi_\ell(r), \tag{14.6}$$

де

$$\widetilde{E}=\frac{E^2-m^2c^4}{2mc^2},\qquad \widetilde{\ell}=-\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}+\widetilde{\ell}(\widetilde{\ell}+1)-(\alpha Z)^2},$$
$$\widetilde{Z}=\frac{ZE}{mc^2},\qquad \alpha=\frac{e^2}{\hbar c}.$$

Формально рівняння (14.6) співпадає з рівнянням для звичайного атома водню, звідки випливає

$$\widetilde{E}_{n_r\ell}=-\frac{e^4\widetilde{Z}^2m}{2\hbar^2\widetilde{n}^2},\qquad \widetilde{n}=n_2+\ell+1,\quad n_r=0,\ 1,\ 2,\ ...,$$

що дає рівняння на $E_{n_r\ell}$, розв'язуючи яке одержимо

$$E_{n_r\ell}=\frac{mc^2}{\sqrt{1+\dfrac{(\alpha Z)^2}{\widetilde{n}^2}}}.$$

**14.4.** Викорстаємо явний вигляд оператора Гамільтона (14.1). Тоді:

(1) $[\widehat{H},\widehat{p}_i]=c\boldsymbol{\alpha}\cdot[\widehat{\mathbf{p}},\widehat{p}_i]=0$;

(2) $[\widehat{H},\widehat{\ell}_i]=c\alpha_j[\widehat{p}_j,\widehat{\ell}_i]=\dfrac{\hbar c}{i}(\widehat{\boldsymbol{\alpha}}\times\widehat{\mathbf{p}})_i\neq 0$;

(3) $[\widehat{H},\widehat{\boldsymbol{\ell}}^2]=[\widehat{H},\widehat{\ell}_i]\widehat{\ell}_i+\widehat{\ell}_i[\widehat{H},\widehat{\ell}_i]=\dfrac{\hbar c}{i}\left[(\boldsymbol{\alpha}\times\widehat{\mathbf{p}})\cdot\widehat{\boldsymbol{\ell}}+\widehat{\boldsymbol{\ell}}\cdot(\boldsymbol{\alpha}\times\widehat{\mathbf{p}})\right]\neq 0;$

(4) $\left[\widehat{H},\Sigma_i\right]=c\widehat{\mathbf{p}}\cdot[\boldsymbol{\alpha},\Sigma_i]$. 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, $\left[\widehat{H},\Sigma_i\right]=2i\,(\boldsymbol{\alpha}\times\widehat{\mathbf{p}})_i\neq 0$.

(5) Враховуючи блочну форму оператора $\boldsymbol{\Sigma}$ легко показати, що $\widehat{\mathbf{s}}^2=\dfrac{3}{4}\hbar^2$, тобто є просто числом, яке, звичайно, комутує з любим оператором.

(6) Використовуючи результати 2. та 4. маємо: $\left[\widehat{H},\widehat{\mathbf{j}}\right]=\left[\widehat{H},\widehat{\mathbf{s}}\right]+\left[\widehat{H},\widehat{\boldsymbol{\ell}}\right]=0$.

(7) В зв'язку з тим, що оператор імпульсу комутує з гамільтоніаном, маємо $\left[\widehat{H},\Lambda\right]=p^{-1}\mathbf{p}\cdot\left[\widehat{H},\boldsymbol{\Sigma}\right]=2icp^{-1}\mathbf{p}\cdot(\boldsymbol{\alpha}\times\mathbf{p})=0$.

**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

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{x},t)}{\partial t}=\widehat{H}\Psi(\mathbf{x},t),\quad \text{де}\quad \widehat{H}=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\boldsymbol{\pi}}+\beta mc^2+e\varphi.$$

В свою чергу, похідна по часу від узагальненого імпульса буде:

$$\begin{aligned}\frac{d\widehat{\boldsymbol{\pi}}}{dt}&=\frac{\partial\widehat{\boldsymbol{\pi}}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\left[\widehat{H},\widehat{\boldsymbol{\pi}}\right]=-\frac{e}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+\frac{ic}{\hbar}\left[\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\boldsymbol{\pi}},\widehat{\boldsymbol{\pi}}\right]+\frac{ic}{\hbar}\left[\varphi,\widehat{\mathbf{p}}\right]=\\&=-e\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\varphi\right)+\frac{ic}{\hbar}\left[\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\boldsymbol{\pi}},\widehat{\boldsymbol{\pi}}\right].\end{aligned}$$

Знайшовши комутатор $[\widehat{\pi}_j,\widehat{\pi}_i]=\dfrac{\hbar}{ic}\epsilon_{ijk}B_k$ одержимо

$$\frac{d\widehat{\boldsymbol{\pi}}}{dt}=e\left(-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}-\nabla\varphi+\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{B}\right)=e\left(\boldsymbol{\mathcal{E}}+\frac{1}{c}\widehat{\mathbf{v}}\times\mathbf{B}\right),$$

де $\widehat{\mathbf{v}}=c\boldsymbol{\alpha}$ — оператор миттєвої швидкості (див. розд.12.2.2 [7]).

**14.6.** Рівняння для стаціонарниого стану $\Psi(r,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(r)$ квазінезалежного кварка буде

$$\left[\gamma_0E-\frac{\hbar c}{i}\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\nabla}-\frac{1+\gamma_0}{2c}V(r)\right]\psi(r)=0. \tag{14.7}$$

Розкладемо хвильову функцію по верхніх та нижніх компонентах

$$\psi\left(r\right)=\begin{pmatrix}\phi(r)\\ \chi(r)\end{pmatrix},$$

в результаті чого рівняння для квазінезалежного кварка (14.7) зведеться до системи двох рівнянь

$$\begin{cases}\left[E-V\left(r\right)\right]\phi\left(r\right)=\dfrac{\hbar c}{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla}\chi\left(r\right),\\ E\chi\left(r\right)=\dfrac{\hbar c}{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla}\phi\left(r\right).\end{cases}$$

З другого рівняння одержимо $\chi(r) = \frac{\hbar c}{i}\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla}}{E}\phi(r)$, 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 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla})^2 = \Delta$).

(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 $\rho \to \infty$, є функція Ейрі першого роду

$$\varphi(\rho) = \mathrm{Ai}(\rho).$$

Тепер потрібно задовольнити умові $\varphi|_{r=0} = 0$. Вона зводиться до умови $\rho|_{r=0} = a_n$, де $n = 1, 2, 3, ...$, а $a_n$ - положення $n$-го нуля функції Ейрі (див. Додаток А). З другого боку, ця умова приводить до квантування енергії кварка

$$E_{n-1} = V_0 - \frac{a_n\lambda}{\beta_n}, \qquad \text{де} \qquad \beta_n = \sqrt[3]{\frac{E_{n-1}\lambda}{(\hbar c)^2}}.$$

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

$$\phi(r) = \left(\frac{2\Omega}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\Omega r^2}, \qquad \text{де} \qquad \Omega = \frac{\sqrt{E_0\lambda}}{2},$$

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. Локтєва / О. С. Давидов. — К.: «Академпереодіка», 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

$$\begin{aligned} \mathrm{Ai}\,(x) &= \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \cos\left(\frac{z^3}{3}+xz\right)dz, \\ \mathrm{Bi}\,(x) &= \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty \left[\exp\left(-\frac{z^3}{3}+xz\right)+\sin\left(\frac{z^3}{3}+xz\right)\right]dz \end{aligned} \tag{A.1}$$

представляють два часткових розв'язки диференціального рівняння

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}-x\right)f\,(x)=0. \tag{A.2}$$

При $x\to+\infty$ асимптотична поведінка функцій Ейрі наступна:

$$\begin{aligned} \mathrm{Ai}\,(x) &\approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}}\frac{1}{2\sqrt[4]{x}}\exp\left(-\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right) & \text{при} \quad x\to+\infty, \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}}\frac{1}{2\sqrt[4]{-x}}\sin\left(\frac{2}{3}\left|x\right|^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right) & \text{при} \quad x\to-\infty, \end{cases} \\ \mathrm{Bi}\,(x) &\approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}}\frac{1}{2\sqrt[4]{x}}\exp\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right), & \text{при} \quad x\to+\infty, \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}}\frac{1}{2\sqrt[4]{-x}}\cos\left(\frac{2}{3}\left|x\right|^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right) & \text{при} \quad x\to-\infty. \end{cases} \end{aligned} \tag{A.3}$$

Функції Ейрі мають нулі при від'ємних значеннях аргумента, $\mathrm{Ai}\,(a_n)=0$ та $\mathrm{Bi}\,(b_n)=0$. Наведемо положення трьох перших нулів функцій Ейрі:

$$\begin{array}{ll} a_1 = \text{-2,3381} & b_1 = \text{-1,1737} \\ a_2 = \text{-4,0879} & b_2 = \text{-3,2711} \\ a_3 = \text{-5,5205} & b_3 = \text{-4,8307} \end{array}$$

Інші властивості функцій Ейрі можна знайти в довіднику [15].

## A.2 Поліноми та приєднані поліноми Лежандра

Приєднані поліноми Лежандра визначаються як

$$P_\ell^m(\cos\theta) = \frac{\sin^m\theta}{2^\ell \ell!}\frac{d^{m+\ell}}{(d\cos\theta)^{m+\ell}}\left(\cos^2\theta - 1\right)^\ell, \tag{A.4}$$

де $m = 0, 1, 2, 3, ..., \ell$ . Вони задовольняють диференціальне рівняння

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\sin\theta}\left(\sin\theta\frac{dP_\ell^m}{d\theta}\right) + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]P_\ell^m = 0. \tag{A.5}$$

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

$$\begin{array}{ll} P_0(u) = 1; & P_1(u) = u; \\ P_2(u) = \frac{1}{2}\left(3u^2 - 1\right); & P_3(u) = \frac{1}{2}\left(5u^3 - 3u\right). \end{array} \tag{A.6}$$

Приєднані поліноми Лежандра задовольняють наступній умові ортогональності

$$\int_{-1}^{1} du P_{\ell'}^m(u)\, P_\ell^m(u) = \delta_{\ell'\ell}\frac{2(\ell+m)!}{(2\ell+1)(\ell-m)!}, \tag{A.7}$$

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

$$\begin{aligned} uP_\ell^m(u) &= \frac{1}{(2\ell+1)}\left[(\ell-m+1)\,P_{\ell+1}^m(u) + (\ell+m)\,P_{\ell-1}^m(u)\right], \\ \sqrt{1-u^2}P_\ell^{m-1}(u) &= \frac{1}{(2\ell+1)}\left[P_{\ell+1}^m(u) - P_{\ell-1}^m(u)\right]. \end{aligned} \tag{A.8}$$

Для повноти викладення варто відмітити теорему додавання. Нехай два напрями задані векторами

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_1 &= (\sin\theta_1\cos\phi_1, \sin\theta_1\sin\phi_1, \cos\theta_1), \\ \mathbf{n}_2 &= (\sin\theta_2\cos\phi_2, \sin\theta_2\sin\phi_2, \cos\theta_2) \end{aligned} \tag{A.9}$$

і $\alpha$ - кут між ними, тоді має місце співвідношення

$$P_\ell(\cos\alpha) = P_\ell(u_1)\,P_\ell(u_2) + 2\sum_{m=1}^{l}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}P_\ell^m(u_1)\,P_\ell^m(u_2)\cos m(\phi_1-\phi_2). \tag{A.10}$$

В деяких задачах зручно використовувати розклад $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$ по поліномам Лежандра

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \begin{cases} \frac{1}{r'}\sum\limits_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r}{r'}\right)^\ell P_\ell(\cos\theta) & \text{при} \quad r < r', \\ \frac{1}{r}\sum\limits_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r'}{r}\right)^\ell P_\ell(\cos\theta) & \text{при} \quad r > r'. \end{cases} \tag{A.11}$$

де $\theta$ - кут між векторами $\mathbf{r}$ та $\mathbf{r}'$.

## A.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

$$x^2 F''(x) + xF'(x) + \left(x^2 - v^2\right) F(x) = 0. \tag{A.13}$$

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 $\Gamma(z)$ — $\Gamma$-функція, яка визначається згідно формулі (A.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

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &= x^\ell \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\sin x}{x}, \\ y_\ell(x) &= -x^\ell \left(-\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l \frac{\cos x}{x}. \end{aligned} \tag{A.16}$$

Асимптотична поведінка:

- при $x \to 0$: $j_\ell(x) \approx \dfrac{x^\ell}{(2n+1)!!}$, $\quad y_\ell(x) \approx -\dfrac{x^{-(\ell+1)}}{(2n-1)!!}$;
- при $x \to 0$: $j_\ell(x) \approx \dfrac{\sin\left(x - \frac{\pi}{2}\ell\right)}{x}$, $\quad y_\ell(x) \approx -\dfrac{\cos\left(x - \frac{\pi}{2}l\right)}{x}$.

Рекурентні формули:

$$
\begin{aligned}
f_\ell\left(x\right) &= \frac{x}{2\ell+1}\left[f_{\ell+1}\left(x\right)+f_{\ell-1}\left(x\right)\right], \\
f'_\ell\left(x\right) &= f_{\ell+1}\left(x\right)+\frac{\ell}{x}f_\ell\left(x\right),
\end{aligned}
\tag{A.17}
$$

де $f_\ell$ — одна з сферичних функцій Беселя.

## A.4 Деякі інтеграли, які зводяться до Γ-функції

В багатьох задачах ми зустрічаємось з інтегралами типу $\int\limits_0^\infty dx x^n e^{-ax}$ та $\int\limits_0^\infty dx x^n e^{-ax^2}$. За допомогою очевидних замін вони зводяться до Γ-функції від цілого та напівцілого аргумента.

Γ-функція визначається як такий інтеграл

$$
\Gamma(z) = \int\limits_0^\infty dx x^{z-1}e^{-x}
\tag{A.18}
$$

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].