НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ (КПІ)

О.П. Кобушкін, Я.Д. Кривенко-Еметов

ЗБІРНИК ЗАДАЧ З КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Київ – 2014

Зміст

1 Лінійні оператори **3**

2 Квантовий рух в одномірному просторі **8**

3 Рух в центральному полі **17**

4 Метод квазікласичного наближення **23**

5 Теорія представлень **28**

6 Теорія кутового моменту. Спін частинки **32**

7 Квантові рівняння руху **36**

8 Наближені методи розв'язку рівняння Шрьодінгера. Стаціонарна теорія збурень **39**

9 Наближені методи розв'язку рівняння Шрьодінгера. Адіабатичне наближення та варіаційний метод Рітца **43**

10 Частинка у зовнішньому електромагнітному полі **45**

11 Нестаціонарна теорія збурень **48**

12 Багаточастинкові системи. Принцип тотожності. Формалізм представлення чисел заповнень **51**

13 Квантова теорія розсіяння **56**

14 Релятивістська квантова механіка **59**

1 Лінійні оператори

1. *Оператором* називається дія, 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 називають послідовну дію операторів

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

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 Тейлора

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

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

8. *Скалярним добутком* двох хвильових функцій $\varphi(\mathbf{x})$ та $\psi(\mathbf{x})$ називається число[1]

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

Надалі для скалярного добутку будуть виражатися через "бра" та "кет" вектори

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

9. Скалярний добуток

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

називається *матричним елементом* оператора $\widehat{F}$ між функціями $\psi(\mathbf{x})$ та $\varphi(\mathbf{x})$. У випадку, коли ці функції співпадають, $(\psi,\widehat{F}\psi)$, матричний елемент 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*.

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

1.2 Показати, що власні значення ермітового оператора є дійсними числами.

1.3 $\widehat{A}$ та $\widehat{B}$ два ермітових оператора.

   (a) Показати, що $\widehat{A}+\widehat{B}$ теж ермітов оператор.

   (b) Чи будуть ермітовими оператори $\widehat{A}\widehat{B}$ та $\widehat{A}\widehat{B}+\widehat{B}\widehat{A}$?

1.4 Для довільного оператора $\widehat{L}$ показати наступне:

   (a) $(\widehat{L}^\dagger)^\dagger = \widehat{L}$;

   (b) оператори $\widehat{L}^\dagger\widehat{L}$ та $\widehat{L}\widehat{L}^\dagger$ ермітові;

   (c) оператори $\widehat{L}^\dagger + \widehat{L}$ та $i(\widehat{L}-\widehat{L}^\dagger)$ ермітові.

   (d) $[\widehat{A},\widehat{A}^n] = 0$.

   (e) $\widehat{A}^{-1}\widehat{B}^2\widehat{A} = \left(\widehat{A}^{-1}\widehat{B}\widehat{A}\right)^2$.

   (f) $\widehat{A}^{-1}\widehat{B}^n\widehat{A} = \left(\widehat{A}^{-1}\widehat{B}\widehat{A}\right)^n$.

   (g) $\widehat{A}^{-1}f\left(\widehat{B}\right)\widehat{A} = f\left(\widehat{A}^{-1}\widehat{B}\widehat{A}\right)$.

1.5 Довести, що для операторів, які задовольняють умові $[\widehat{A},\widehat{B}] = C$, де C — любе число, виконується наступне співвідношення $[f(\widehat{A}),\widehat{B}] = f'(\widehat{A})$.

1.6 Довести, що $e^{\xi\widehat{A}}\widehat{B}e^{-\xi\widehat{A}} = \widehat{B} + C\xi$, якщо $[\widehat{B},\widehat{A}] = C$, де C — число, а ξ — довільний параметер.

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 $U = \exp\left(i\widehat{A}\right)$ унітарний.

1.9 Знайти оператор спряжений до $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$. Які з цих операторів ермітові?

1.10 Довести, що оператор $\widehat{a}\,' = \frac{i}{\sqrt{2}}\widehat{p} + \widehat{x}$ спряжений до $\widehat{a} = -\frac{i}{\sqrt{2}}\widehat{p} + \widehat{x}$. Тут $\widehat{p}$ та $\widehat{x}$ — оператори імпульсу та координати в одномірному просторі.

1.11 Довести, що наступні оператор ермітові

   (a) оператор імпульсу $\widehat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$;

   (b) оператор моменту імпульсу $\widehat{\mathbf{L}} = \mathbf{x}\times\widehat{\mathbf{p}}$;

   (c) $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

1.12 Розглянути оператори

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

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

Показати, що ці оператори є ермітовими.

1.13 Знайти власні функції та власні значення оператора інверсії.

1.14 Квантова частинка знаходиться у постійному магнітному полі. Чи може частинка мати одночасно певні значення енергії та парності?

1.15 Знайти у явному вигляді дію наступних операторів на хвильову функцію

(a) $\exp(i\pi\widehat{P})$, де $\widehat{P}$ оператор інвесії;

(b) $\widehat{T}_a = \exp\left(a\frac{d}{dx}\right)$.

1.16 Довести тотожність

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

1.17 Для стану, що описується хвильовою функцією

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

де p_0, x_0 та a — дійсні параметри, знайти середні значення та флюктуації координати та імпульсу.
Примітка: Середнє значення оператора визначається як $\langle\widehat{L}\rangle \equiv \langle\psi|\widehat{L}|\psi\rangle$, де хвильова функція нормована на одиницю, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Флюктуація є $\overline{(\Delta L)^2} = \langle\widehat{L}^2\rangle - \langle\widehat{L}\rangle^2$.

1.18 Для двох ермітових операторів $\widehat{A}$ та $\widehat{B}$ комутатор є iF, де $\widehat{F}$ — ермітовий оператор. Довести, що для флюктуацій фізичних величин A та B виконується нерівність

$$\overline{(\Delta A)^2}\,\overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4}\left\langle\widehat{F}\right\rangle^2 .$$

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

1.4 Тотожності (a)–(f) доводяться елементарно. Для встановлення тотожністі (g) потрібно розкласти в ряд $f(\widehat{A})$ по степенях $\widehat{A}$ і застосувати тотожність (f).

1.5 Доводиться прямою підстановкою.

1.6 Вказівка: Спочатку розглянути окремий випдок, коли $f(\widehat{L}) = \widehat{L}^n$.

1.7 Вказівка: Скористатися результатом попередньої задачі.

1.9 $(-1)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}$. Ермітовими є оператори з парним n.

14 Може.

1.15 (a) $-\psi(\mathbf{x})$.
(b) $\psi(x+a)$.

1.16 Вказівка: Розглянути n-ту похідну $\dfrac{d^n}{dt^n} e^{t\widehat{A}} \widehat{B} e^{-t\widehat{A}}|_{t=1}$.

1.17 $\langle \widehat{p} \, \rangle = p_0$, $\langle x \rangle = x_0$, $\overline{(\Delta p)^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2}$, $\overline{(\Delta x)^2} = \frac{1}{2} a^2$.

2 Квантовий рух в одномірному просторі

1. Одноміре *стаціонарне рівняння Шрьодінгера*
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+U(x)\psi(x)=E\psi(x),$$
де m та E — маса та енергія частинки, $\psi(x)$ — її хвильова функція.

2. Від потенціала $U(x)$ необов'язково вимагати неперервності, він в деяких точках може змінюватись стрибком. Якщо в точці розриву $x=x_0$ потенціал змінюється на кінцеву величину, то від хвильової функції вимагається виконання двох умов — неперервності хвильової функції та її першої похідної:
$$\lim_{\epsilon\to 0}\psi(x_0-\epsilon)=\lim_{\epsilon\to 0}\psi(x_0+\epsilon),$$
$$\lim_{\epsilon\to 0}\psi'(x_0-\epsilon)=\lim_{\epsilon\to 0}\psi'(x_0+\epsilon).$$
Якщо в точці розриву потенціал зростає на безмежну величину, то від хвильової функції вимагається тільки неперервність хвильової функції в точці розриву:
$$\lim_{\epsilon\to 0}\psi(x_0-\epsilon)=\lim_{\epsilon\to 0}\psi(x_0+\epsilon).$$

3. Розглядаючи невеликі відхилення x від положення рівноваги потенціал можна розкласти в ряд по степенях x. Враховуючи, що в точці рівноваги $U'(x)_{|x=0}=0$, потенціал зводиться до потенціалу гармонічного осцилятора $U(x)\approx\frac{1}{2}\kappa x^2\psi(x)$, де κ визначається із закона Гука $F=-\kappa x$ (параметр пружності). В класичній фізиці частинка під дією сили $F=-\kappa x$ виконує гармонічні коливання з частотою $\omega=\sqrt{\kappa/m}$.

Роз'вязок 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
$$E_n=\hbar\omega(\tfrac{1}{2}+n),\qquad \text{де,}\qquad n=0,1,2,...,$$
$$\psi_n(x)=A_nH_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2},\qquad \text{де}\quad \xi=\sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}}x,\quad \text{і}\quad A_n=\left(\sqrt{\frac{\pi\hbar}{\omega m}}2^n n!\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

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

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

ЗАДАЧІ

2.1 Частинка знаходиться в потенціальній ямі безмежної глибини (Рис. 1). Знайти її спектр енергій та відповідні хвильові функції.

2.2 Частинка знаходиться в потенціальній ямі обмеженої глибини (Рис. 2). Знайти кількість рівнів дискретного спектру енергій в залежності від наступного параметра $B = \hbar^{-2} m a^2 U_0$.

2.3 Частинка знаходиться в потенціалі $U(x) = a\delta(x)$, причому $a < 0$. Знайти дискретний енергетичний спектр та відповідні хвильові функції. Чому відповідає параметер B з Задачі 2.2?

2.4 При описі властивостей двоатомних молекул часто використовують потенціал Морза (Рис. 3)

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

де $x = r - r_0$ — відхилення від положення рівноваги r_0, D_0 — потенціал в точці рівноваги, а α — параметр моделі. (a) Знайти дискретний спектр молекули та відповідні хвильові функції. (b) Знайти умови на параметри моделі D_0 та α, при яких система не має зв'язаного стану.

2.5 Знайти дискретний енергетичний спектр та відповідні хвильові функції для частинки, яка знаходиться у полі

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

2.6 Розрахувати коефіцієнти проходження D та відбиття R частинки, яка рухається у полі зображеному на Рис 4 (a) та (b).

2.7 Розрахувати коефіцієнти проходження D та відбиття R частинки, яка рухається у полі зображеному на Рис. 2. При якій умові $D = 1$ (це явище називають резонансом)?

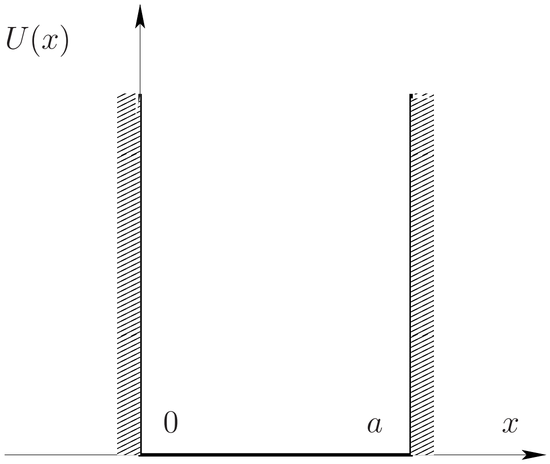

Рис. 1: До Задачі 2.1. Потенціальна яма безмежної глибини.

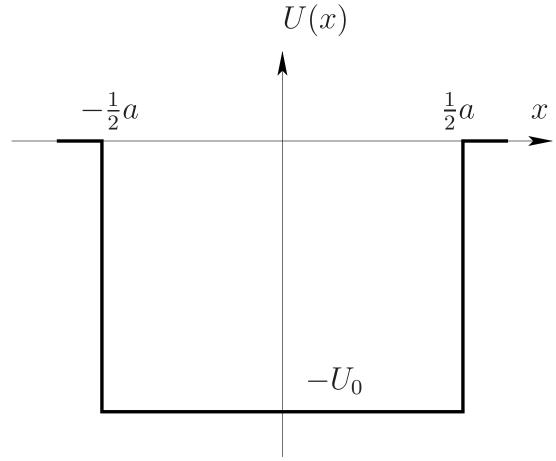

Рис. 2: До Задач 2.2 та 2.7. Потенціальна яма обмеженої глибини.

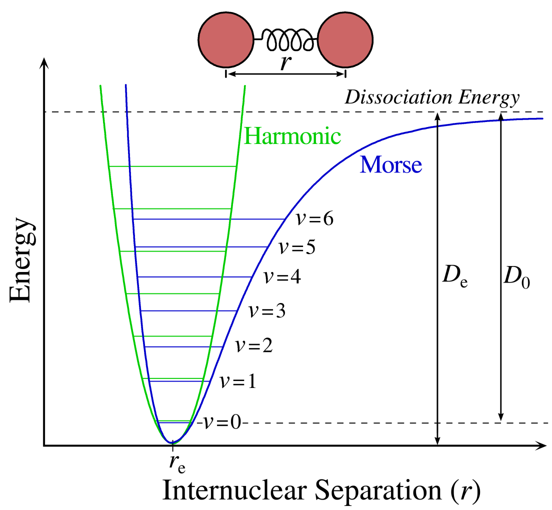

Рис. 3: До Задачі 2.4. Потенціал Морза.

2.8 Знайти коефіцієнт проходження частинки, яка рухається у полі зображеному на Рис. 5 з енергією $E < U_0$.

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

2.10 Знайти коефіцієнт проходження частинки, яка рухається у полі

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

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.

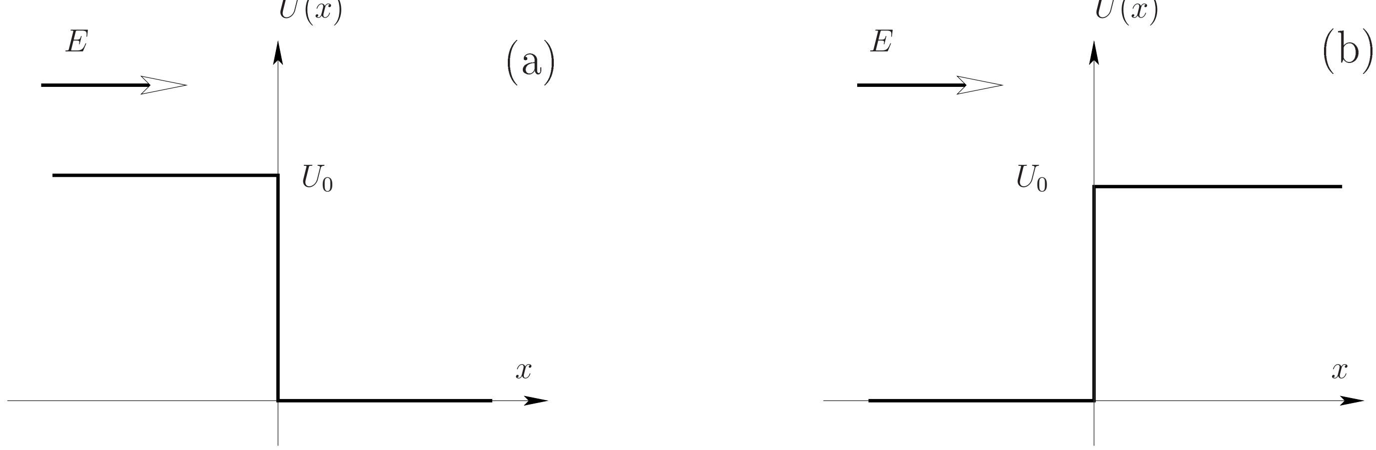

Рис. 4: До Задачі 2.6.

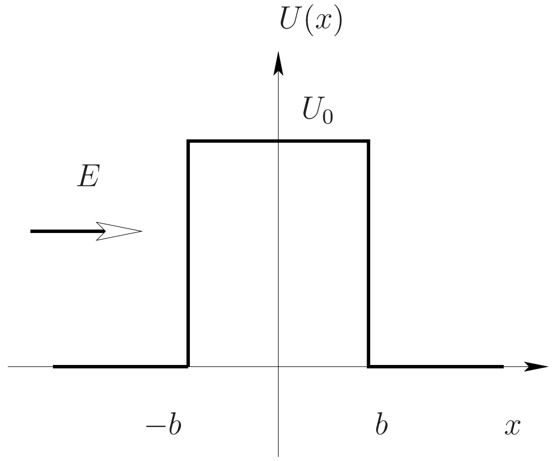

Рис. 5: До Задачі 2.9. Тунельний ефект.

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, координати яких x_1 та x_2, є

$$U(x_1, x_2) = \tfrac{1}{2}\kappa(x_1 - x_2)^2.$$

Знайти енергетичний спектр системи та відповідні хвильові функції.

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

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

(a) При яких умовах на параметри задачі κ та α систему можна розглядати як частинку, яка має обмежений розмір (вважити $\kappa > 0$)? (b) Знайти енергетичний спектр та відповідні хвильові функції. (c) Знайти середньо-квадратичний розмір частинки та область локалізації центра мас складової частинки.

2.15 Знайти енергетичний спектр системи двох частинок з різними масами, які знаходяться у полі з попередньої задачі:

$$U(x_1, x_2) = \tfrac{1}{2}\kappa(x_1^2 + x_2^2) + \alpha x_1 x_2.$$

2.16 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.

2.17 Знайти зсув енергетичних рівнів та хвильових функцій стаціонарних станів заряженної квантові частинки, яка знаходиться у осцилятора при накладанні на неї однорідного електричного поля, яке направлено вздовж коливань осцилятора.

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

2.1 $E = \frac{\hbar^2 n^2}{2m}$, $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$.

2.2 Вказівка: Окремо розглянути розв'язки для парної та непарної хвильових функцій.
Відповідь: Для парних функцій

$$(N-1)\pi < \sqrt{\frac{mU_0a^2}{2\hbar^2}} \leq N\pi.$$

Для непарних функцій

$$(N - \frac{1}{2})\pi < \sqrt{\frac{mU_0a^2}{2\hbar^2}} \leq (N + \frac{1}{2})\pi.$$

Звідси випливає, що при парних розв'язках завжди є хоча б один рівень, а при непарних — рівні існують при умові $2mU_0a^2 \geq (\pi\hbar)^2$.

2.3 Вказівка: Розглядати потенціал як яму попередньої задачі, в якої $a = \epsilon$ та $U_0 = \frac{a}{2\epsilon}$, і розглянути граничний перехід $\epsilon \to 0$.
Відповідь:
Існує тільки один рівень, $E = -\frac{ma^2}{2\hbar^2}$, $\psi(x) = \sqrt{\kappa}e^{-\kappa|x|}$, де $\kappa = \frac{am^2}{\hbar^2}$. $B \to 0$.

2.4 Вказівки:

- В рівнянні Шрьодінгера перейти до нової змінної $z = \sqrt{\frac{8mD_0}{\hbar^2\alpha^2}}e^{-\alpha x}$.
- Показати, що: $\psi \sim z^{\lambda}$ при $z \to 0$, де $\lambda = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2}}$, та $\psi \sim e^{-\frac{1}{2}z}$ при $z \to \infty$.
- Шукати роз'вязок у вигляді $\psi(z) = Nz^{\lambda}e^{-\frac{1}{2}z}w(z)$. Записати рівняння для $w(z)$.
- Шукати розв'язок одержаного рівняння у вигляді полінома

$$w(z) = \sum_{n=0}^{\nu} a_n z^n$$

  та знайти рекурентне співвідношення для коефіцієнтів a_n.

Відповідь:
(a) $E_n = -\left(\lambda_0 - \frac{1}{2} - \nu\right)^2$, де $\lambda_0 = \sqrt{\frac{2mD_0}{\hbar^2\alpha^2}}$, ν — ціле невідємне число, яке задовольняє умові $\nu \le \lambda_0 - \frac{1}{2}$; рекурентне співвідношення:

$$a_{n+1} = \frac{\lambda_0 - \lambda - \frac{1}{2} - n}{(n+1)(n+2\lambda-1)}a_n.$$

Функція $w(z)$ з точністю до довільного множника зводиться до узагальненого полінома Лаґерра $L_{\nu}^{(a)}(z)$:

$$\psi_{\nu}(z) = N_n z^{\lambda_0-\nu-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}z}L_{\nu}^{(2\lambda_0-2\nu-1)}(z).$$

(b) Зв'язані стани існують при умові $\sqrt{\frac{2mD_0}{\hbar^2\alpha^2}} \ge \frac{1}{2}$.

2.5 Вказівки:

- В рівнянні Шрьодінгера перейти до нової змінної $z = \mathrm{th}\alpha x$, $-1 \le z \le 1$.
- Показати, що при $z \to \pm 1$ хвильова функція $\psi(z) \sim (1 \mp z)^{\sigma}$. Знайти σ.
- Шукати розв'язок у вигляді $\psi(z) = \left(1 - z^2\right)^2 w(z)$.
- Показати, що $w(z)$ представляє собою поліном степені ν: $w(z) = \sum_{n=0}^{\nu} a_n z^n$. Знайти рекурентне співвідношення для коефіцієнтів a_n.

Відповідь:

$$E_{\nu} = -\frac{\alpha^2\hbar^2}{8m}\left(1 - 2\nu + \sqrt{1+4\lambda_0}\right)^2,$$

де ν — ціле невідємне число, яке задовольняє нерівності $\nu \le \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1+4\lambda_0}$, $\lambda_0 = \frac{2mU_0}{\alpha^2\hbar^2}$.

При парному (непароному) ν усі непарні (парні) коефіцієнти $a_n = 0$, а парні (непарні) визначаються з рекурентного співвідношення

$$a_{n+2} = \frac{\lambda_0 - \lambda_n - \sqrt{\lambda_n}}{(n+2)(n+1)} a_n, \qquad \lambda_n = -\frac{2mE_n}{\alpha^2 \hbar^2}.$$

2.6 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 яка пройшла та відбитої хвилі.

Відповідь: В обох випадках $D = 4\frac{\sqrt{E(E-U_0)}}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}\right)^2}$, $R = \left(\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-U_0}}\right)^2$.

2.7 $D = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0}\right)^2 \sin^2(2bk)\right]^{-1}$ та $R = 1 - D$, де $k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $k = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}}$. Явище резонансу відбувається при умові $2kb = n\pi$.

2.8 $D = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_0}{\kappa} + \frac{\kappa}{k_0}\right)^2 \mathrm{sh}^2(2b\kappa)\right]^{-1}$ та $R = 1 - D$, де $k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $\kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$.

2.9 $D = \frac{\hbar^2 E}{\hbar^2 E + 2a^2 m}$, $R = \frac{2a^2 m}{\hbar^2 E + 2a^2 m}$.

2.10 Вказівки:

- В рівнянні Шрьодінгера перейти до нової змінної $z = \mathrm{th}\alpha x$, $-1 \le z \le 1$.
- Показати, що при $z \to \pm 1$ хвильова функція $\psi(z) \sim (1 \mp z)^\sigma$. Знайти σ.
- Шукати розв'язок у вигляді $\psi(z) = \left(1 - z^2\right)^2 w(z)$.
- Показати, що $w(z)$ представляє собою гіпергеометричну функцію.

Відповідь:

$$D = \frac{\mathrm{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha}}{\mathrm{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha} + \cos^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{1 - \frac{8mU_0}{\hbar^2 \alpha^2}}\right)} \qquad \text{при} \qquad \frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} < 1,$$

$$D = \frac{\mathrm{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha}}{\mathrm{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha} + \mathrm{ch}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mU_0}{\hbar^2 \alpha^2} - 1}\right)} \qquad \text{при} \qquad \frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} > 1.$$

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

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

2.13 Вказівка: Перейти в рівнянні Шрьодінгера до нових змінних: координати центра мас X та відносної координати x між частинками $X = \frac{M}{M+m}x_1 + \frac{m}{M+m}x_2, \qquad x = x_1 - x_2$.

Відповідь:

$$E_{pn} = T_p + E_n,$$

$$\text{де} \qquad T_p = \frac{p^2}{2(M+m)}, \qquad E_{0n} = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right),$$

$$\Psi_{pn}(X, x) = \Phi_p(X)\phi_n(x),$$

$$\text{де} \qquad \Phi_p(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i\frac{pX}{\hbar}}, \qquad \phi_n(x) = A_n H_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}.$$

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

Таким чином систему можна розглядати як частинку, яка має масу $\mathcal{M} = M + m + E_n/c^2$ та імпульс p. При цьому середньоквадратичний розмір частинки 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 (a) Система буде мати обмежений розмір при $\kappa > \alpha$. При цьому треба також покласти, що $\kappa > -\alpha$, бо інакше центр масс зв'язаного стану буде локалізований на безмежності.

(b)

$$E_{Nn} = \hbar\Omega\left(N + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

де $N, n = 0, 1, 2, ...$, а $\Omega = \sqrt{\frac{(\kappa+\alpha)}{m}}$, $\omega = \sqrt{\frac{(\kappa-\alpha)}{m}}$,

$$\psi_{Nn}(X, x) = A_N A_n H_N(\rho)H_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}(\rho^2+\xi^2)}.$$

де A_N, A_n, ρ та ξ визначені в п. 3 передмови до цього розділу.

(c) $\left\langle x_n^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right)$, центр мас локалізований в околі центра координат з радіусом $\left\langle X_N^2 \right\rangle^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega}\left(N + \frac{1}{2}\right)}$.

2.15 Вказівка:

- Перейти до нових змінних $x_1' = \sqrt{\frac{m_1}{m_2}}x_1$, $x_2' = x_2$.
- Зробити поворот у "площині" (x_1', x_2'):

$$x_1'' = \cos\phi x_1' + \sin\phi x_2',$$
$$x_2'' = -\sin\phi x_1' + \cos\phi x_2'$$

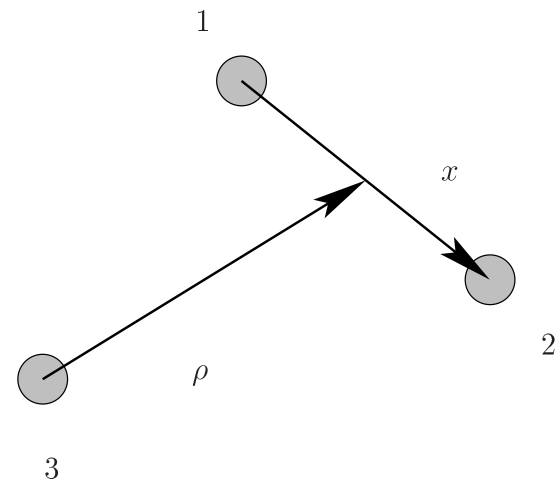

Рис. 6: До Задачі 2.15. Координати Якобі.

і підібрати так кут ϕ, щоб у рівнянні Шрьодінгера розділилися змінні x_1'' та x_2''.

Відповідь:
$E_{n_1,2} = \hbar\omega_1\left(n_1+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_2\left(n_2+\frac{1}{2}\right)$, де
$\omega_i = \sqrt{\frac{\kappa_i}{m_2}}, \quad \kappa_i = \frac{\kappa}{2}\left(1-\frac{m_1}{m_2}\right) \pm \frac{\kappa}{2}\sqrt{\left(1-\frac{m_1}{m_2}\right)^2+\frac{4m_1\alpha^2}{m_2\kappa^2}}.$

2.16 Вказівка: Ввести нові змінні — координату центра мас X та дві відносні координати x і ρ (їх називають координатами Якобі, див. Рис. 6)

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

Відповідь:

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

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

2.17 $\Delta E_n = -\frac{Q^2\mathcal{E}^2}{2\kappa}$, де Q — заряд частинки, а $\mathcal{E}$ — напруженість поля.

3 Рух в центральному полі

1. Виходячи із симетрії задачі при описі руху в центральному полі зручно замість декартових координат (x, y, z) використовувати сферичні координати (r, θ, φ).

2. Гамільтоніан частинки, яка знаходиться в центральному полі $U(r)$, комутує з компонентами оператора *орбітального моменту* $\widehat{\mathbf{L}}$. Гамільтоніан, звичайно, комутує також з оператором квадрата орбітального моменту $\widehat{\mathbf{L}}^2$. Тому можна говорити про стани $\psi_{\ell m}(\theta, \varphi, r)$ (ℓ і m називають орбітальним та магнітрим квантовими числами), які відповідають певним значенням енергії, квадрату орбітального моменту та z-проеції орбітального моменту. При цьому радіальна, r, і кутові, θ та φ, змінні розділяються: $\psi_{\ell m}(\theta, \varphi, r) = Y_{\ell m}(\theta, \varphi) r^{-1} R_\ell(r)$. Множник r^{-1} винесено з радіальної хвильової функції для зручності.

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

4. Радіальна хвильова функція $R_\ell(r)$ задовольняє рівнянню, яке має вигляд одномірного рівняння Шрьодінгера на півосі $r \in (0, \infty)$ з потенціалом, який включає обертальну енергію

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

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

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

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

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

$P_\ell^m(\cos\theta)$:

<u>при $m \geq 0$</u>

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

<u>при $m < 0$</u>

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

Сферичні функції нормовані умовою

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

6. Хвильова функція атому водню є

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = N Y_{\ell m}(\theta,\varphi) e^{-\rho/2} \rho^\ell L_{n-\ell-1}^{2l+1}(\rho),$$

де $\rho = \frac{2r}{a_0}$, a_0 — радіус Бора,

$$N = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n(n+1)!}}$$

та

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \left(\begin{array}{c} n+a \\ n-k \end{array} \right) \frac{x^k}{k!}$$

— узагальнені поліноми Лаґерра. Явні вирази для узагальнених поліномів Лаґерра

$$\begin{aligned}
L_0^a(x) &= 1, \\
L_1^a(x) &= a+1-x, \\
L_2^a(x) &= \frac{(a+1)(a+2)}{2} - (a+2)x + \frac{1}{2}x^2, \\
L_3^a(x) &= \frac{(a+1)(a+2)(a+3)}{6} - \frac{(a+2)(a+3)}{2}x + \frac{a+3}{2}x^2 - \frac{1}{6}x^3.
\end{aligned}$$

ЗАДАЧІ

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

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

3.3 Розглянути класифікацію станів по квантовим числам n, l та парності найнижчих чотирьох енергетичних рівнів для частнки, яка знаходиться в тривимірній осціляторній ямі.

3.4 Знайти енергетичний спектр для частинки, яка знаходиться у потенціалі $U(r) = \frac{A}{r^2} + \frac{\kappa}{2}r^2$.

3.5 Знайти енергетичний спектр та відповідні хвильові функції для частинки, яка знаходиться в сферичній ямі радіуса R із безмежно 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 $\ell = 0$.

3.6 Тривімірний гармонічний осцилятор знаходиться у зовнішньому постійному електричному полі напругою $\mathbf{E}$. Зайти енергетичний спектр осцилятора.

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

3.8 Визначити середню відстань електрона у атомі водню в основному стані та в стані $2S$.

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

3.10 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 $r \gg a_0$, де a_0 — радіус Бора.

3.11 Дві частинки з різними масами взаємодіють між собою. Їх потенціал залежить від відстані між частинками $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. (a) Розділити рух центра мас та відносний руху частинок. (b) Показати що перехід до нових змінних є канонічним перетворенням. (в) Розглянути енергетичний спектр мюонія (зв'язаний стан μ^+ та електрона). Чому дорівнює середньоквадратичний радіус мюонія в основному стані (вважити, що $\frac{m_\mu}{m_e} \approx 206,75$).

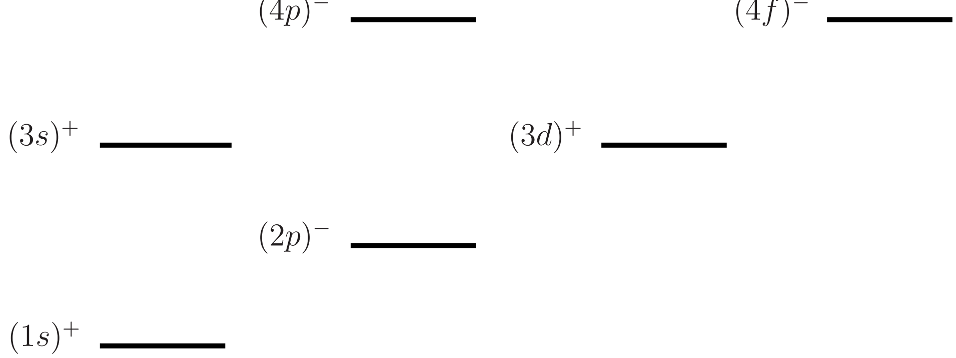

Рис. 7: Квантові стани $(n\ell)^P$ тривимірного гармонічного осцілятора.

ВІДПОВІДІ ТА РОЗВ'ЯЗКИ ЗАДАЧ

3.1 $R_\ell(r) \sim r^{\ell+1}$.

3.2 Декартові кординати. Розділяючи змінні в стаціонарному рівнянні Шрьодінгера

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

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

Таким чином

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

При фіксованих n та n_x числа n_y і n_z приймають $n-n_x+1$ значення. Тому кратність виродження рівня дорівнює

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

Сферичні координати. В безрозмірних координатах $\rho=\sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}}r$ рівняння для радіальної частини хвильової функціїї буде

$$-R''(\rho)+\left[\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}+\rho^2-\varepsilon\right]R(\rho)=0, \qquad \varepsilon=\frac{2E}{\hbar\omega}.$$

При цьому $R \sim \rho^{\ell+1}$ — при $\rho \ll 1$ і $R \sim e^{-\frac{1}{2}\rho^2}$ — при $\rho \gg 1$. Тому розв'язок будемо шукати у вигляді

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

Підставляючи цей вираз а рівняння одержимо

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

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

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

Прирівнюючи до нуля коефіцієнти при різних степенях ρ одержимо: $a_1 = 0$, рекурентні співвідношення для коефіцієнтів

$$a_{\nu+2} = \frac{2(\nu+\ell)+3-\varepsilon}{(\nu+\ell+3)(\nu+\ell+2) - \ell(\ell+1)} a_\nu.$$

та спектр енергій

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2}\right), \qquad \text{де} \qquad n = N + \ell.$$

З рекурентного рівняння та умови $a_1 = 0$ випливає, що в розв'язок входять лише парні степені ρ, а усі коефіцієнти виражаються через a_0. Останній фіксується умовою нормування.

В зв'язку з тим, що N може бути лише парним випливає, що в один вироджений енергетичний рівень входять стани з однаковим значенням парності.

3.3 Рівні зображені на Рис. 7.

3.4 <u>Вказівка:</u> Скористатися розвязком для осциляторного потенціала у сферичних координатах.
$E_{n\ell} = \hbar\omega \left[n + 1 + \frac{1}{2}\sqrt{(2\ell+1)^2 + \frac{8mA}{\hbar^2}}\right]$, де $n = 0, 1, 2, 3, ...$

3.5
$$R_{n\ell}(r) = \begin{cases} \mathrm{const}\, j_\ell(k_{n\ell} r) & \text{при} \quad r < R, \\ 0 & \text{при} \quad r \geq R, \end{cases}$$

де $j_\ell(z)$ сферичні функції Бесселя, а $k_{n\ell}$ визначається з умови $j_\ell(k_{n\ell}R) = 0$. При цьому $E_{n\ell} = \frac{(\hbar k_{n\ell})^2}{2m}$. У випадку, коли $\ell = 0$, $j_0(z) = \frac{\sin z}{z}$ і енергетичний спектр можна записати явно $E_{n\ell} = \frac{(\hbar n\pi)^2}{2R^2 m}$.

3.6 $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right) - \frac{q_0^2}{2\kappa}\mathbf{E}^2$, де $n = 0, 1, 2, 3, \ldots.$

3.7 $\langle U\rangle = -\frac{q_0}{a_0}$.

3.8 $\langle r\rangle = \frac{3}{2}a_0$.

3.9 $\left\langle r^2\right\rangle_{1S}^{1/2} = \sqrt{3}a_0$, $\left\langle r^2\right\rangle_{2S}^{1/2} = \sqrt{42}a_0$, $\left\langle r^2\right\rangle_{2P}^{1/2} = \sqrt{30}a_0$.

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

$$U_{\text{я}}(\mathbf{r}) = \frac{q_0}{r},$$

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

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

де $\rho(\mathbf{r})$ — густина електричного заряда електронної “хмари”

$$\rho(\mathbf{r}) = -q_0 \left|\psi_{1S}(\mathbf{r})\right|^2, \qquad \psi_{1S}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}.$$

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

$$\begin{aligned} U_{\text{e}}(\mathbf{r}) &= -\frac{q_0}{\pi a_0^3} \sum_{\ell=0}^{\infty} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta P_\ell(\cos\theta) \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \left(\frac{r'}{r}\right)^\ell e^{-2r'/a_0} + \int_r^\infty dr' r' \left(\frac{r}{r'}\right)^\ell e^{-2r'/a_0} \right\} = \\ &= -\frac{4q_0}{a_0^3} \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 e^{-2r'/a_0} + \int_r^\infty dr' r' e^{-2r'/a_0} \right\} = \\ &= \frac{e^{-2r/a_0}(a_0 + r)}{a_0 + r}. \end{aligned}$$

При $r \ll a_0$ цей потенціал переходить у потенціал ядра $U_{\text{я}}(\mathbf{r}) = \dfrac{q_0}{r}$.

3.11 $\langle r^2\rangle^{1/2} = \frac{m_\mu}{m_e} a_0$, де a_0 — радіус Бора для звичайного атома водню.

4 Метод квазікласичного наближення

1. *Квазікласичним наближенням* називають розклад розклад рівняння Шрьодінгера та його розв'язку по степеням $\hbar$. Цей метод розв'язання рівняння Шрьодінгера також називають *методом Венцеля-Крамерса-Бріллюена (ВКБ)*.

2. В нульовому порядку ВКБ розклад рівняння Шрьодінгера зводиться до класичного рівняння Гамільтона-Якобі. В наступному порядку хвльова функція одномірного стаціонарного рівняння Шрьодінгера є

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

де x_0 — деяка довільна точка, а $p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}$.

3. *Умовою допустимості* квазікласичного розкладу є $|p| \gg \sqrt[3]{\hbar m \left|\frac{dU(x)}{dx}\right|}$.

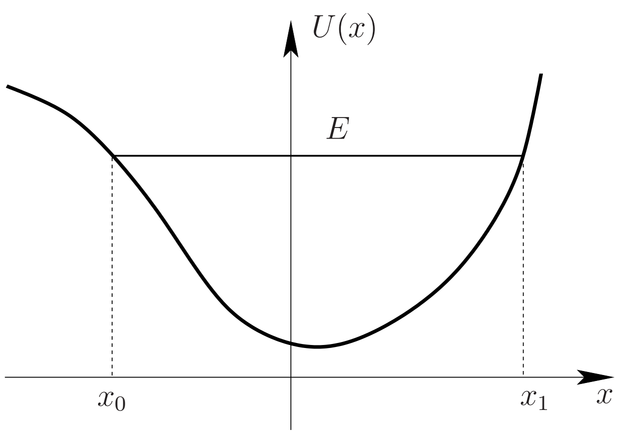

Рис. 8: Класично допустима область руху частинки при фінітному русі.

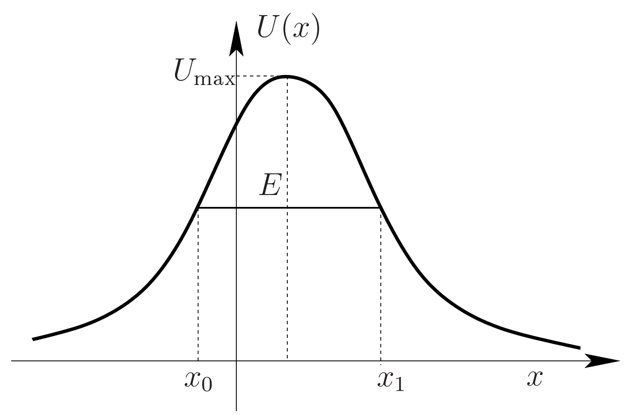

Рис. 9: Класично допустима області руху частинки при інфінітному русі лежать зліва від точки x_0 та справа від точки x_1.

4. У випадку фінітного руху частинки (див. Рис. 8) повинно виконуватись правило квантування Бора-Зоммерфельда

$$\int_{x_0}^{x_1} dx' p(x') = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right),$$

де n — ціле число.

5. У випадку інфінітного руху (див. Рис. 9) метод ВКБ дає можливість розрахувати коефіцієнт проходження потенціального барьеру

$$D \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_0}^{x_1} dx' \sqrt{2m\left[U(x') - E\right]}\right\}.$$

ЗАДАЧІ

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

4.2 одномірного гармонічного осцилятора,

4.3 для потенціала Морзе $U(x) = U_0\left[e^{-2x/a} - e^{-x/a}\right]$,

4.4 $U(x) = -\frac{U_0}{\mathrm{ch}^2 \alpha x}$.

Порявняти з точними розв'язками та зясувати умови застосування метода квазікласичного наближення.

4.5 Як зміниться умова квантування Бора-Зоммерфельда для потенціала (Рис. 10)

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

4.6 Методом квазікласичного наближення знайти рівні енергії частинки, яка знаходиться у полі

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

де $\lambda > 0$.

4.7 Виходячи з наближення ВКБ одержати вираз для зсуву енергетичних рівнів частинки при зміні потенціалу на величину $\delta U(x)$.
Примітка: Знехтувати зсувом точок повороту.

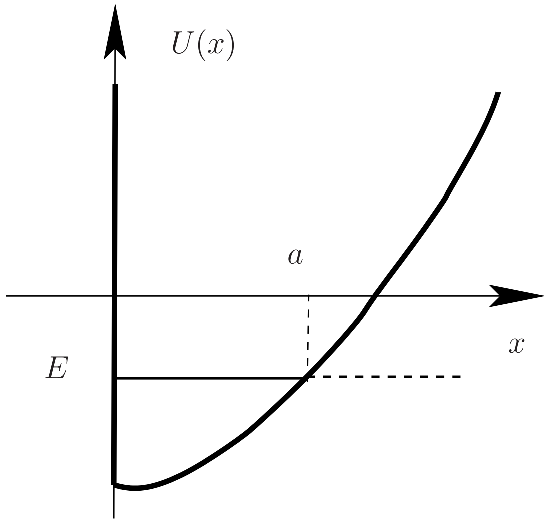

Рис. 10: До Задачі 2.

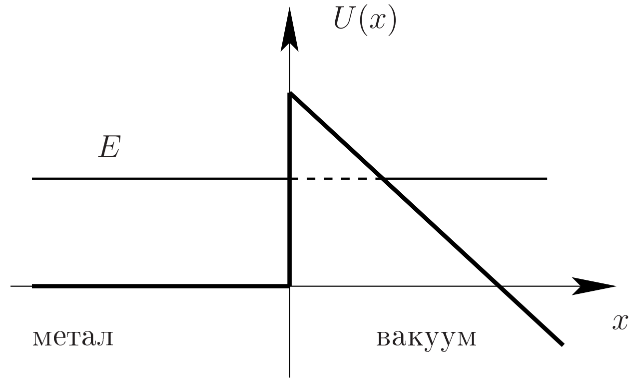

Рис. 11: Холодна емісія електронів.

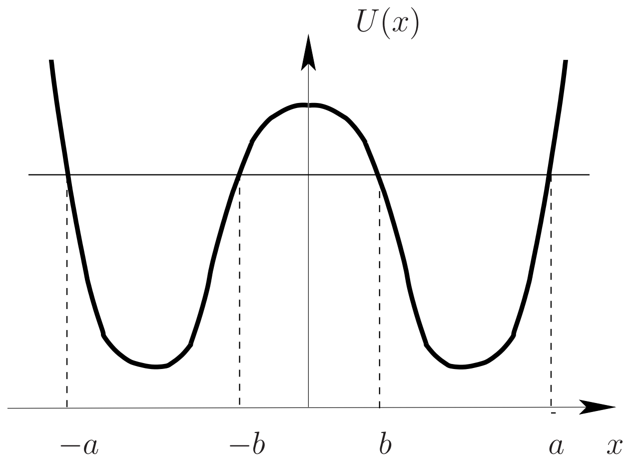

Рис. 12: До Задачі 7.

4.8 На основі методу квазікласичного розкладу знайти коефіцієнт проходження D через параболічний потенціальний барьер

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

Чи виконується умова квазікласичного розкладу у випадку, коли $E \to 0$?

4.9 При накладанні на металевий провідник зовнішнього сильного електричного поля відбувається явище холодної емісії електронів з металу. Пояснюється це явище тунелюванням електронів через барьер, який зображений на Рис. 11

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{при} \quad x < 0, \\ W(1 - \mathcal{E}x), & \text{при} \quad x > 0, \end{cases}$$

де W — робота виходу електрона із зразка. Розрахувати залежність коефіцієнту проходження барьєру від величини електричного поля $\mathcal{E}$.

4.10 Поле $U(x)$ являє собою дві однакові ями, які розділені бар'єром (Рис. 12). 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.

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

4.1 (a) $E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$;

(b) Вказівки: При обчислені інтеграла зробити заміну $z = e^{-\alpha x}$.

Відповідь:

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

(i) При обчислені інтеграла зробити заміну $\mathrm{th}(\alpha x) = \sqrt{\frac{E}{U_0} + 1}\sin t$.

(ii) Використати табличний інтеграл

$$\int \frac{dt}{a^2 + d^2\cos^2 t} = \frac{1}{a\sqrt{a^2+b^2}}\mathrm{arcth}\frac{a\,\mathrm{th}t}{\sqrt{a^2+b^2}}.$$

Відповідь:

$$E_n = -\frac{\alpha^2\hbar^2}{8m}\left[1 - 2n + \frac{\sqrt{8mU_0}}{\alpha\hbar}\right]^2, \qquad n \leq \frac{\sqrt{2mU_0}}{\alpha\hbar} + \frac{1}{2}.$$

4.2 $\oint p(x)\,dx = \pi\left(n + \frac{3}{4}\right)$.

4.3 $E_n^{\text{ВКБ}} \equiv \varepsilon_n^{\text{ВКБ}}\sqrt[3]{\frac{(\hbar\lambda)^2}{2m}} = \frac{1}{2}\sqrt[3]{\frac{9\pi^2(\hbar\lambda)^2}{m}\left(n + \frac{3}{4}\right)^2}$.

4.4 $E_n = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{8m}\left(-1 + 2n + \sqrt{\frac{8mV_0}{(\alpha\hbar)^2}}\right)^2$.

4.5 $\frac{1}{\hbar}\int_0^{x_0} dx\sqrt{2m[E_n - U(x)]} = \pi\left(n + \frac{3}{4}\right)$.

4.6 $E_n = \frac{1}{2m}\left[3\pi\lambda\hbar m\left(n + \frac{3}{4}\right)\right]^{2/3}$.

4.7 $\delta E_n = \tau^{-1}\int_a^b \delta U(x)v^{-1}(x)dx$, де $v(x) = \sqrt{\frac{2}{m}\left[E_n^0 - U_0(x)\right]}$, $\tau = \int_a^b v^{-1}(x)dx$.

4.8 $D = \exp\left[\frac{\pi a}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{U_0}}(U_0 - E)\right]$. При $E \to 0$ умова квазікласичного наближення не виконується.

4.9 $D = D_0 \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m}\,(W - \mathcal{E})^{3/2}}{3\hbar q_0 E}\right]$.

4.10 $\Delta E^{\pm} = \mp\frac{\hbar\omega}{2\pi}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{b}\sqrt{2m(U(x) - E)dx}\right]$,
де $\omega = \frac{2\pi}{T}$, $T = 2\int_{-a}^{-b}\frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}\left[E^0 - U(x)\right]}}$.

5 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

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

Обернене перетворення (від імпульсного до координатного представлення) задається

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

ЗАДАЧІ

5.1 Рух потоку вільних частинок у квантовій механіці описується плоскою хвилею

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

Знайти плоску хвилю у імпульсному представлені.

5.2 Нормувати хвильову функцію

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

і знайти її у імпульсному представлені.

5.3 Дія лінійного оператора $\widehat{L}$ на хвильову функцію у координатному представлені є

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

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

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

5.5 Записати в імпульсному представлен одномірне стаціонарне рівняння Шрьодінгера для частинки

(a) в осціляторному потенціалії $U(x) = \frac{\kappa}{2}x^2$,

(b) в лінійно зростаючому потенціалі $U(x) = ax$.

5.6 Використовуючи результат (b) попередньої задачі знайти точний розв'язок (енергетичний спектр та хвильові функції) для частинки, яка знаходиться у потенціалі

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

Порівняти з результатом квазікласичного наближення (Задача 4.3) для трьох нижніх рівнів.

5.7 Знайти дію операторів інверсії $\widehat{P}$ та зсуву $\widehat{T}_{\mathbf{a}}$ (див. Задачу 1.9) на хвильову функцію в імпульсному представлені.

5.8 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 (мезонів). В результаті це приводить до такого потенціалу взаємодії між складовими ядра (потенціал Юкави)

$$U(r) = -g^2\frac{e^{-kr}}{r}.$$

де r — відстань між нуклонами, g — константа взаємодії та k — константа пропорційна масі мезона. Знайти потенціал Юкави у імпульсному представлені.

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

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

5.1 $\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{q})$.

5.2 $N = \left(\frac{1}{a\pi}\right)^{3/4}$, $\Phi(\mathbf{q}) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{3/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_0 - \mathbf{q})\mathbf{x}_0 - \frac{a}{2\hbar^2}(\mathbf{p}_0 - \mathbf{q})^2\right]$.

5.3 $g(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \int d^3x d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{x}} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'\mathbf{x}'}$.

5.4 <u>Вказівка.</u> Використати, що ядро перетворення для гамільтоніана є $G(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\widehat{H}$.

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

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

5.5 (a) $\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\kappa\hbar}{2}\frac{d^2}{dp^2}\right)\Phi(p) = E\Phi(p),$

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

5.6 Розв'язок рівняння 5(b) знаходиться легко:

$$\frac{d\Phi}{\Phi} = \frac{i}{\lambda\hbar}\left(E - \frac{p^2 dp}{2m}\right),$$

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

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

$$\Psi(x) = N\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[p\left(x - \frac{E}{\lambda}\right) + \frac{p^3}{6\lambda m}\right]\right\},$$

або

$$\Psi(\rho) = N\int_{-\infty}^{\infty} dz \exp\left\{\left[\left(\rho z + \frac{z^3}{3}\right)\right]\right\} \sim \mathrm{Ai}(\rho),$$

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

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

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

Порівняємо результати точного розрахунку з розрахунком у ВКБ наближенні:

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

5.7 $\widehat{P}\Phi(\mathbf{p}) = \Phi(-\mathbf{p})$, $\widehat{T}_{\mathbf{a}}\Phi(\mathbf{p}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pa}}\Phi(\mathbf{p})$.

5.8 Використовуючи, що в нашому випадку ядро перетворення (див. Задачу 5.4) є $G(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')U(r)$, одержимо

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

$$= -\frac{2\hbar g^2}{(2\pi\hbar)^2(\hbar^2k^2 + Q^2)},$$

де $\mathbf{Q} = \mathbf{p} - \mathbf{q}$.

5.9 Хвильова функція основного стану атома водню є (див. передмову для Заняття 3)

$$\psi_{100}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\, e^{-\rho/2}, \qquad \rho = \frac{2r}{a_0}.$$

Імпульсний розподіл визначається як

$$dw(\mathbf{p}) = \left|\phi_{100}(\mathbf{p})\right|^2 d^3p,$$

де $\phi_{100}(\mathbf{p}) = \frac{\sqrt{\frac{1}{\pi}\left(\frac{a_0}{\hbar}\right)^3}}{1+\left(\frac{a_0}{\hbar}p\right)^2}$ — хвильова функція у імпульсному представлені.

Тема 6. Теорія кутового моменту. Спін частинки

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 ϵ_{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 $\widehat{J}_3$:

$$\widehat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle, \qquad \widehat{J}_3 |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle.$$

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

$$-j \le m \le j.$$

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

$$\langle j(m+1)|\widehat{J}_1|jm\rangle = \langle jm)|\widehat{J}_1|j(m+1)\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)},$$

$$\langle j(m+1)|\widehat{J}_2|jm\rangle = -\langle jm)|\widehat{J}_1|j(m+1)\rangle = -i\frac{\hbar}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)},$$

$$\langle jm|\widehat{J}_3|jm\rangle = \hbar m.$$

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

4. У випадку $j = \frac{1}{2}$ оператор моменту кількості руху (зокрема він представляє спін електрона) записується через матриці розмірності 2×2:

$$\widehat{\mathbf{J}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}, \qquad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3),$$
$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Матриці σ_1, σ_2 та σ_3 називають матрицями Паулі.

5. Важлива властивість матриць Паулі:

$$\sigma_1\sigma_j = \delta_{ij} + i\sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk}\sigma_k.$$

ЗАДАЧІ

6.1 Показати, що для станів з певним значення проекції момента $\hbar m$ на вісь z виконуються такі співвідношення для середніх значень операторів:

- $\langle \widehat{J}_1 \rangle = \langle \widehat{J}_2 \rangle = 0$,
- $\langle \widehat{J}_1\widehat{J}_2 \rangle = -\langle \widehat{J}_2\widehat{J}_1 \rangle = \dfrac{i\hbar^2}{2}m$,
- $\langle \widehat{J}_1^2 \rangle = \langle \widehat{J}_2^2 \rangle$.

6.2 Знайти середні значення $\langle jm|\widehat{J}_1^2|jm\rangle$, $\langle jm|\widehat{J}_2^2|jm\rangle$.

6.3 Знайти власні функції та власні значення операторів $\widehat{s}_1$ та $\widehat{s}_2$.

6.4 Знайти явний вигляд операторів $|\boldsymbol{\sigma}|$, $|\sigma_3|$, $\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\sigma})$.

6.5 Для оператора спіна знайти явний вигляд підвищуючого та понижаючого операторів $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_1 \pm i\sigma_2)$. Як вони діють на власну функцію оператора σ_3? Чому дорівнюють оператори $\sigma_\pm^2$?

6.6 Знайти середні значення операторів проекції спіна електрона на вісі x, y та z по хвильовій функції

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

6.7 Спростити вираз $\widehat{F} = \exp(i\mathbf{a}\boldsymbol{\sigma})$, де $\mathbf{a}$ звичайний вектор.

6.8 Оператор повного спіна двох електронів задається оператором $\widehat{\mathbf{S}} = \widehat{\mathbf{s}_1} + \widehat{\mathbf{s}_2}$, де $\widehat{\mathbf{s}_1}$ та $\widehat{\mathbf{s}_2}$ — оператори спіна першого та другого електрона. Цей оператор діє на хвильову функцію $\Psi = \chi_1\chi_2$, де χ_1 та χ_2 — спінові хвильові функції першого та другого електрона. Показати, що хвильові функції

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2,\\ \Psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right],\\ \Psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right].\end{aligned}$$

є власними функціями операторів $\widehat{\mathbf{S}}^2$ та $\widehat{S}_z$. Чому дорівнюють власні значення цих операторів?

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

6.10 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 $i \neq k$.

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

6.2 $\langle jm|\widehat{J}_1^2|jm\rangle = \langle jm|\widehat{J}_2^2|jm\rangle = \dfrac{\hbar^2}{2}l(l+1)$.

6.3 Для оператора $\widehat{s}_1$ власні значення дорівнюють $\frac{\hbar}{2}$ та $-\frac{\hbar}{2}$, які відповідають власним функціям $\chi_+ = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$ та $\chi_+ = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$. Для оператора $\widehat{s}_2$ власні значення теж дорівнюють $\frac{\hbar}{2}$ та $-\frac{\hbar}{2}$, які відповідають власним функціям $\chi_+ = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-i\\1\end{pmatrix}$ та $\chi_+ = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\1\end{pmatrix}$.

6.4 $|\boldsymbol{\sigma}| = \sqrt{3}$, $|\sigma_3| = 1$, $\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\sigma}) = 6i$.

6.5 $\sigma_+ = \begin{pmatrix}0 & 1\\0 & 0\end{pmatrix}$, $\sigma_- = \begin{pmatrix}0 & 0\\1 & 0\end{pmatrix}$;

$$\sigma_+\chi_+ = 0,\ \sigma_+\chi_- = \chi+,\ \sigma_-\chi_+ = \chi_+,\ \sigma_-\chi_- = 0;\ \sigma_\pm^2 = 0.$$

6.6 $\langle\widehat{s}_1\rangle = \frac{2\sqrt{2}}{3}$, $\langle\widehat{s}_2\rangle = 0$, $\langle\widehat{s}_3\rangle = -\frac{1}{3}$.

6.7 $\cos|\mathbf{a}| + i\dfrac{\mathbf{a}\boldsymbol{\sigma}}{|\mathbf{a}|}\sin|\mathbf{a}|$.

6.8 $\widehat{\mathbf{S}}^2\Psi_{1,2} = 2\hbar^2\Psi_{1,2}$, $\widehat{\mathbf{S}}^2\Psi_3 = 0$, $\widehat{S}_3\Psi_1 = \hbar\Psi_1$, $\widehat{S}_3\Psi_{2,3} = 0$.

6.9

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

$$j_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}.$$

6.10 $\widehat{J}_k$, при $i = k$; $\cos\alpha \widehat{J}_k + \sin\alpha \sum_n \epsilon_{nik}\widehat{J}_n$, при $i \neq k$.

7 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. **Представленні 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 $\widehat{H}_1$ — її 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.

ЗАДАЧІ

7.1 Показати, що для добутку двох операторів виконується звичайне правило диференціювання
$$\frac{d\widehat{F}_1\widehat{F}_2}{dt} = \frac{d\widehat{F}_1}{dt}\widehat{F}_2 + \widehat{F}_1\frac{d\widehat{F}_2}{dt}.$$

7.2 Чи виконуються правила комутації для операторів координати та імпульсу в представленнях Гайзенберга та взаємодії?

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

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

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

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

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

7.6 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.

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

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

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

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

7.2 В обох випадках виконується.

7.3 $\widehat{\mathbf{p}}_\text{Г}(t) = \widehat{\mathbf{p}}_\text{Ш}, \quad \widehat{\mathbf{x}}_\text{Г}(t) = \widehat{\mathbf{x}}_\text{Ш} + \dfrac{\widehat{\mathbf{p}}_\text{Ш}}{2m}t.$

7.4 <u>Вказівка:</u> Скористатися результатом задачі 1.16. (a) $\widehat{\mathbf{p}}_\text{Г}(t) = \widehat{\mathbf{p}}_\text{Ш} - \mathbf{F}t$, $\widehat{\mathbf{x}}_\text{Г}(t) = \widehat{\mathbf{x}}_\text{Ш} + \dfrac{\widehat{\mathbf{p}}_\text{Г}}{2m}t$;
(b) $\widehat{\mathbf{p}}_\text{Г}(t) = \widehat{\mathbf{p}}_\text{Ш}\cos\omega t - \widehat{\mathbf{x}}_\text{Ш}\sin\omega t, \qquad \widehat{\mathbf{x}}_\text{Г}(t) = \widehat{\mathbf{x}}_\text{Ш}\cos\omega t + \widehat{\mathbf{p}}_\text{Ш}\sin\omega t.$

7.5 Нулю.

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

7.7 $\Psi(\mathbf{x},t) = \dfrac{4\sqrt{15}}{\pi^3}\displaystyle\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(2k+1)^3}e^{-\frac{iE_{2k+1}t}{\hbar}}\sin\frac{\pi(2k+1)x}{a}$, де $E_k = \dfrac{(\pi\hbar k)^2}{2m}$.

7.8 <u>Вказівка:</u> Скористатися результатом задачі 1.16.
(a) $\widehat{H}_\text{вз}(t) = -\mathbf{F}(\widehat{\mathbf{x}}_\text{Ш} + \frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m}t)$,
(a) $\widehat{H}_\text{вз}(t) = \frac{\kappa}{2}\left(\widehat{\mathbf{x}}_\text{Ш} + \frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m}t\right)^2$.

8 Наближені методи розв'язку рівняння Шрьодінгера. Стаціонарна теорія збурень

1. Коли гамільтоніан можна записати у вигляді

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

і існує точний розв'язок незбуреного рівняння Шроьодінгера

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

тоді теорія збурень дозволяє знайти розв'язок повного равняння Шроьодінгера

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

у вигляді розкладу по параметру λ хвильової функції та енергії:

$$\left|\psi_n\right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \left|\Delta\psi_n^{(k)}\right\rangle, \qquad E_n = \sum_{k=0}^{\infty} E_n^{(k)},$$

де $\left|\Delta\psi_n^{(k)}\right\rangle \sim \lambda^k$ та $E_n^{(k)} \sim \lambda^k$.

2. У випадку, коли в нульовому проядку теорії збурень немає вироджених станів, поправки до енергетичних рівнів та хвильових функцій в першому порядку теорії збурень є

$$E_n^{(1)} = \lambda \left\langle n\right| \widehat{W} \left|n\right\rangle, \qquad \left|\Delta\psi_n^{(1)}\right\rangle = \lambda \sum_{n'\neq n} \frac{\left\langle n\right| \widehat{W} \left|n'\right\rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \left|\psi_{n'}^{(0)}\right\rangle.$$

В другому порядку теорії збурень

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

3. Критерій застосування теорії збурень

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

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.*

ЗАДАЧІ

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

8.2 На одномірний гармонічний осцилятор діє збурення $H_1 = Ve^{-\frac{x^2}{a^2}}$. Знайти умову застосувння теорії збурень та розрахувати поправки першого порядку до основного та першого збудженого рівнів.

8.3 Знайти рівні енергії лінійного ангармонічного осцилятора

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

розглядаючи ангармонічні члени αx^3 та βx^4 як збурення. Обмежитись поправкою першого порядку.

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

$$U(r) = -\frac{q_0^2}{r} - \frac{q_0^2 d}{r^2},$$

де d — параметр розмірності довжини. Розглядаючи другий член гамільтоніана як збурення знайти розщеплення рівнів атома літія з $n = 2$ у першому порядку теорії збурень. 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 в першому порядку теорії збурень поправки до основного та першого збудженого станів системи.

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

8.1 $E_n^{(1)} = -\frac{1}{2}Fa$. Умова застосувння теорії збурень

$$F|\langle n|x|n'\rangle| \ll \frac{\hbar^2\pi^2|n^2 - n'^2|}{2m},$$

де

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

8.2 Умова застосування теорії збурень $a \gg \sqrt{\dfrac{\hbar}{\omega m}}$.

$$E_0^{(1)} = V_0 a \sqrt{\frac{\omega m}{\omega m a^2 + \hbar}},\ E_1^{(1)} = V_0 a^3 \left(\frac{\omega m}{\omega m a^2 + \hbar}\right)^{3/2}.$$

8.3 $E_n^{(1)} = 3\beta\left(\dfrac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (2n^2 + 2n + 1)$.

8.4 $E_{2s}^{(1)} = -\dfrac{q_0^2 d}{4a_0^2}$, $E_{2p}^{(1)} = -\dfrac{q_0^2 d}{12a_0^2}$.

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 $E_{00}^{(1)} = 0$, $E_{10}^{(1)} = -E_{10}^{(1)} = \dfrac{\alpha\hbar}{2m\omega_0}$, де $\omega_0 = \sqrt{\dfrac{\kappa}{m}}$. Тут для енергії виконується те саме позначення E_{Nn}, як і у відвовіді до задачі 2.14.

9 Наближені методи розв'язку рівняння Шрьодінгера. Адіабатичне наближення та варіаційний метод Рітца

1. Адіабатичне наближення (наближення Бора-Оппенгемера) використовують у випадку, коли фізичну систему можна поділити на частинки, які рухаються швидко (легкі частинки) та повільні (важкі частинки). При цьому збуренням вважається кінетична енергія повільних частинок.

2. На першому етапі "заморожується" рух важких частинок, і розв'язується рівняння Шрьодінгера для легких частинок які рухаються у полі нерухомих важких частинок. В результаті знаходять хвильові функції та енергетичний спектр легких частинок, що 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 хвольову 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 витупає 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

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

при варіації параметрів $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$. Причому, вимагається від пробної функції $\psi(\alpha_1, \cdots, \alpha_n; \mathbf{x})$ її нормованість на одиицю:

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

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 $|\alpha| \ll \kappa$ та $M_1 \gg M_2$. Знайти рівні енергії та відповідні хвильові функції використовуючи адіабатичне наближення. Порівняти з точним результатом (задача 2.14).

9.2 На основі варіаційного метода Рітца оцінити енергію основного стану тривимірного гармонічного осцилятора використовуючи таку пробну функцію $\psi(r) = N\,(1 + ar)\,e^{-ar}$ і розглядаючи a як варіаційний параметр. Результат порівняти з точним результатом.

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

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

9.1 $E_{Nn} = \hbar\Omega\left(N + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, де $\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}$, $\Omega = \sqrt{\frac{\kappa}{M}\left(1 - \frac{m}{M}\right)}$.

9.2 $E_{\text{осн}} = \frac{9}{7}\sqrt{\frac{3}{2}}\hbar\omega.$

9.3 $E_{\text{осн}} = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{3\hbar^4\lambda}{4m^2}}.$

10 Частинка у зовнішньому електромагнітному полі

1. Властивості електрона, який знаходиться у зовнішньому електромагнітному полі, описуються рівнянням Паулі

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

де φ та $\mathbf{A}$ — скалярний та векторний потенціали електромагнітного поля, $\mu_{\text{Б}}$ — магнетон Бора, q — заряд електрона, а $\boldsymbol{\sigma}$ — матриці Паулі.

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

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

Умова нормування:

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

ЗАДАЧІ

10.1 Отримати рівняння неперервності для електрона, який 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

$$B_1 = B_\perp \cos\omega t, \qquad B_1 = B_\perp \sin\omega t, \qquad B_3 = \text{const}.$$

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

10.6 Знайти рівні енергії та хвильові функції для електрона у однорідному магнітному полі (рівні Ландау).

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

10.1

$$\frac{\partial\left|\Psi(\mathbf{x},t)\right|^2}{\partial t} = -\operatorname{div}\left\{\frac{\hbar}{2iM}\left[\Psi^\dagger(\mathbf{x},t)\nabla\Psi(\mathbf{x},t) - \nabla\Psi^\dagger(\mathbf{x},t)\Psi(\mathbf{x},t)\right] - \right.$$
$$\left. -\frac{\hbar}{2Mc}\mathbf{A}\left|\Psi(\mathbf{x},t)\right|^2\right\}$$

10.2 $\widehat{\mathbf{a}} = \frac{q}{M}\boldsymbol{\mathcal{E}} + \frac{q}{2Mc}\left(\widehat{\mathbf{v}} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \widehat{\mathbf{v}}\right)$, 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 $\frac{d\widehat{\mathbf{s}}}{dt} = \mu_{\text{Б}}\mathbf{B} \times \boldsymbol{\sigma}$.

10.4 $\widehat{\mathbf{a}} = -\frac{\mu_n}{M_n}\nabla(\mathbf{B}\boldsymbol{\sigma})$.

10.5 Вказівки:

- Зробити заміну для компонент спінора $\Psi_1 = e^{-\frac{i\omega t}{2}}\phi_1$ та $\Psi_2 = e^{\frac{i\omega t}{2}}\phi_2$. Одержати систему рівнянь на функції ϕ_1 та ϕ_2.
- Шукати розв'язок системи рівнянь у вигляді $\phi_1 = C_1 e^{i\Omega t} + C_1 e^{-i\Omega t}$ та $\phi_2 = C_3 e^{i\Omega t} + C_4 e^{-i\Omega t}$.

Відповідь:
Ймовірність того, що в момент часу t спін виявився перевернутим, дорівнює $w_\downarrow(t) = \frac{B_\perp^2 \sin^2\Omega t}{B_\perp^2 + \left(B_z + \frac{\hbar\omega}{2\mu_n}\right)^2}$. Якщо $B_\perp \ll B$ ймовірність мала. Проте, коли $B_3 \approx -\frac{\hbar\omega}{2\mu_n}$, то наступає резонансне зростання ймовірності.

10.6 Вказівки:

- Вибрати вектор-потенціал у вигляді $\mathbf{A} = (-Bx_2, 0, 0)$.
- Виходячи з того, що гамільтоніан комутує з операторами $\widehat{\mathbf{p}}_1$, $\widehat{\mathbf{p}}_3$ та σ_3, шукати розв'язок для власної хвильові функції у вигляді

$$\psi(\mathbf{x}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(p_1 x_1 + p_3 x_3\right)\right]\chi_\pm(x_2),$$

де p_1 і p_3 — довільні імпульси, а

$$\chi_+(x_2) = \begin{pmatrix} \phi_+(x_2) \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{та} \qquad \chi_-(x_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_-(x_2) \end{pmatrix}$$

(в залежності від напряму спіна).

Відповідь:

$E^\pm_{p_3 n} = 2\mu_\text{Б} B\left(n + \dfrac{1}{2} \pm \dfrac{1}{2}\right) + \dfrac{p_z^2}{2M}$, хвильові функції $\chi_\pm(x_2)$ визначаються з рівняння гармонічного осцилятора

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\chi''_\pm(x_2) + \left[\frac{q_0^2 B^2}{2Mc^2}(y + y_0)^2 + \mu_\text{Б} B\right]\chi_\pm(x_2) = E^\pm_{p_3 n}\chi_\pm(x_2).$$

11 Нестаціонарна теорія збурень

1. Нестаціонарна теорія збурень вживається 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 τ у стан n визначається як

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

4. Коефіцієнти $c_n(\tau)$ разраховуються у вигляді ряду теорії збурень

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

де

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

Тут введено такі позначення: $\omega_{r_i r_j} = \frac{E_{r_i} - E_{r_j}}{\hbar}$ та $W_{r_i r_j}(t) = \int \psi_{r_i}^*(\mathbf{x}) \widehat{H}_1(\mathbf{x}, t) \psi_{r_j}(\mathbf{x}) d^3 r$.

В першому порядку теорії збурень

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

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

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

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 (а) $F(t) = \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)$, (б) $\exp\left(-\frac{|t|}{\tau}\right)$, (в) $\left[1 + \left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right]^{-1}$.

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 та (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 моє два стаціонарних стан ψ_1 та ψ_2, які відповідають енергії $E_1 = \hbar\omega_1$ та $E_2 = \hbar\omega_2$. При $t < 0$ система знаходиться у стані ψ_1. В момент часу $t = 0$ вмикається збурення $\widehat{H}_1$ надалі незалжне від часу. В першому порядку теорії збурень знайти: (1) хвильову функцію системи $\Psi(t)$ в момент часу $t > 0$, (2) ймовірність переходу $w_{1\to 2}(t)$.

11.4 Очевидно, що $W_m = 1 - \sum_{n\neq m} W_{m\to n}$, де W_m — ймовірність залишитися системі у початковому стані, а $W_{m\to n}$ — ймовірність переходу. Використовуючи нестаціонарну теорію збурень показати це явно з точністю до членів третього порядку.

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

11.1 $w_{n\to n'} = (IW_{nn'})^2$, де $W_{nn'} = \dfrac{V_0}{\pi}\left[\dfrac{1}{n'-n}\sin\dfrac{(n'-n)b}{a} + \dfrac{1}{n'+n}\sin\dfrac{(n'+n)b}{a}\right]$ і $I = \sqrt{\pi}\tau\exp\left(-\frac{1}{4}\omega_{nn'}^2\tau^2\right)$, (а); $2\tau\left(1 + \omega_{nn'}^2\tau^2\right)^{-1}$, (б); $\pi\tau\exp\left(-|\omega_{nn'}|\tau\right)$, (в); тут $\omega_{nn'} = \dfrac{\hbar\pi^2(n'^2 - n^2)}{2ma^2}$.

11.2 <u>Вказівка:</u> Скористатися результатом задачі 2.11.
(1) $\Delta n = \pm 1$. (2) $w_{n\to n'} = (IW_{nn'})^2$, де $w_{n\to n'} = (IW_{nn'})^2$, де $W_{n,n+1} = W_{n-1,n} = \sqrt{\dfrac{\hbar n}{2m\omega}}$, а I див. в попередній задачі.

11.3 (1) $\Psi(t) = \left[e^{-i\omega_1 t} + \dfrac{W_{12}^*}{\hbar\omega_{12}}\left(e^{i\omega_2 t} - e^{-i\omega_1 t}\right)\psi_1 - \dfrac{W_{12}^*}{\hbar\omega_{12}}\left(e^{i\omega_1 t} - e^{-i\omega_2 t}\right)\psi_1\right]$;
(2) $w_{1\to 2}(t) = 2\left(\dfrac{|W_{12}|}{\hbar\omega_{12}}\right)^2 [1 - \cos(\omega_1 - \omega_2)\, t]$, де $W_{12} = \langle \widehat{H}_1 \rangle$.

12 Багаточастинкові системи. Принцип тотожності. Формалізм представлення чисел заповненн

1. В силу принципа тотожності частинок хвильова функція системи частинок одного сорта 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 з допомогою послідовної дії оперотора народження на вакуум:

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

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.

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, чому дорівнює повний спін S для кожної з них?

12.2 В ядерній фізиці часто розглядають протон та нейтрон, як два зарядових стани однієї частинки, яку називають нуклон. При цьому діє узагальнений принцип Паулі, який вимагає антисиметрії хвильової функції відносно перестановки будь-яких двох нуклонів. Виходячи з узагальненого принципу Паулі встановити яке значення повного моменту кількості руху I має двонуклонна система, яка знаходиться у стані з відносним орбітальним моментом $L = 0$ (S-стан), в залежності від нуклонного складу системи.

12.3 Пояснити з точки зору симетрії хвильової функції продуктів розпаду чому ρ^0-мезон не розпадається по каналу $\rho^0 \to \pi^0 + \pi^0$, але розпадається по каналу $\rho^0 \to \pi^+ + \pi^-$. Спін π-мезонів дорівнює 0, а спін ρ-мезону дорівнює 1. Скрізь верхній індекс означає електричний заряд частинки.

12.4 Використовуючи формалізм чисел заповнення розрахувати середні значення x^2 та x^4 для гармонічного осцилятора.

12.5 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.

12.1 (1) Якщо $m_1 \neq m_2$ то симетрична та антисиметрична хвильові функції будуть:

$$\chi_{\text{сим}}(m_1, m_2) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\chi^{(1)}_{m_1} \chi^{(2)}_{m_2} + \chi^{(1)}_{m_2} \chi^{(2)}_{m_1} \right),$$
$$\chi_{\text{а.с.}}(m_1, m_2) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\chi^{(1)}_{m_1} \chi^{(2)}_{m_2} - \chi^{(1)}_{m_2} \chi^{(2)}_{m_1} \right).$$

У випадку, коли $m_1 = m_2 = m$ симетричними хвильовими функціями будуть $\chi^{(1)}_m \chi^{(2)}_m$. Симетричних функції буде $(s+1)$, а антисиметричних $s(2s+1)$.
(2) $(2s+1)^2$ станів, хвильові функції $\chi^{(1)}_{m_1} \chi^{(2)}_{m_2}$.
(3) Один антисиметричний стан

$$\chi^{\text{сим}}_0(\uparrow, \downarrow) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\chi^{(1)}_{\uparrow} \chi^{(2)}_{\downarrow} - \chi^{(1)}_{\downarrow} \chi^{(2)}_{\uparrow} \right),$$

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

$$\chi^{\text{a.c.}}_1(\uparrow, \uparrow) = \chi^{(1)}_{\uparrow} \chi^{(2)}_{\uparrow}, \qquad \chi^{\text{a.c.}}_1(\downarrow, \downarrow) = \chi^{(1)}_{\downarrow} \chi^{(2)}_{\downarrow},$$
$$\chi^{\text{a.c.}}_1(\uparrow, \downarrow) = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\chi^{(1)}_{\uparrow} \chi^{(2)}_{\downarrow} + \chi^{(1)}_{\downarrow} \chi^{(2)}_{\uparrow} \right),$$

яким відповідає $S = 1$.

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

12.3 В зв'язку з законом збереження моменту кількості руху повний момент двох π-мезонів в системі спокою ρ^0-мезонів дорівнює $j = 1$. Так як спін π-мезона дорівнює нулю, то j складається лише з орбітального моменту, $j = l = 1$. Таким чином хвильова функція двох π-мезонів повинна бути антисиметричною при їх перестановці.

З другого боку, так як π-мезони є бозони, то хвильова функція двох π^0-мезонів має бути симетричною. Тому розпад $\rho^0 \to \pi^0 + \pi^0$ заборонений законом збереження моменту кількості руху.

У системі $\pi^+\pi^-$ частинки не тотожні і тому на них не потрібно накладати умову симетрії.

12.4 $\langle n| \, x^2 \, |n\rangle = \dfrac{\hbar}{2m\omega} \langle n| \left(\widehat{a}^\dagger + \widehat{a}\right)^2 |n\rangle = \dfrac{\hbar}{m\omega} \left(n + \tfrac{1}{2}\right),$

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

12.5 Спочатку розглянемо випадок бозонів. Запишемо умову канонічності перетворення

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

Звідси випливає, що $A=\mathrm{ch}\alpha$, $B=\mathrm{sh}\alpha$, де параметр α 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 $A=\pm1$ та $B=0$, або $A=0$ та $B=\pm1$.

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

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

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 $w_n = C_n^2$.

13 Квантова теорія розсіяння

1. Вважається, що розсіяння двох частинок, $m_1 + m_2 \to m_3 + m_4$, відбувається внаслідок взаємодії між частинками, які стикаються, $U(\mathbf{r})$, де $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Як і в класичній механіці, у квантовій механіці задача розсіяння двох частинок зводится до розгляду руху однієї частинки з приведеною масою μ у полі $U(\mathbf{r})$.

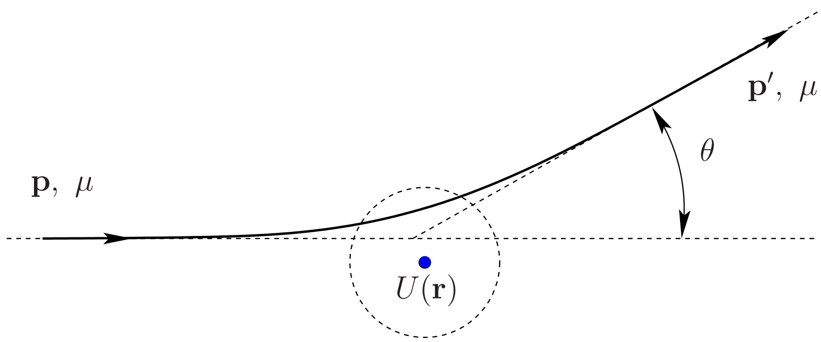

Рис. 13: Розсіяння частинки з приведеною масою μ на потенціалі.

2. 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, θ — кут розсіяння, $\mu = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ та $\mu' = \dfrac{m_3 m_4}{m_3 + m_4}$ — приведені маси і p та p' — відносні імпульси початкового та кінцевого станів.

У випадку пружного розсіяння ця формула зводиться до

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

3. Борновський ряд для амплітуди пружного розсіяння:

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

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

ЗАДАЧІ

13.1 У борновському наближенні розглянути розсіяння зарядженої частинки на екрановоному кулоновському полі ядра

$$E = \frac{Zq_0}{r} e^{-r/r_0}.$$

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 $\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$ — імпульс, який одержала частинка в результаті розсіяння.

13.3 Для потенціала сферичної сходинки (задача 13.2) знайти фазовий зсув для парціальної s-хвилі.

13.4 У знайти диференційний переріз розсіяння електрона на атомі водню в основному стані.

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

13.1 $A^{(\text{Б})} = -\dfrac{QZq_0\mu}{2(\hbar k)^2 \sin^2 \frac{1}{2}\theta}$, де Q — заряд частинки; $\dfrac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\dfrac{QZq_0\mu}{2(\hbar k)^2 \sin^2 \frac{1}{2}\theta}\right]^2$ — формула Резерфорда.

13.2 $A^{(\text{Б})}(E,\theta) = -\dfrac{2\mu\hbar U_0}{p^3}\left[\dfrac{r_0 q}{\hbar}\cos\dfrac{r_0 q}{\hbar} - \sin\dfrac{r_0 q}{\hbar}\right]$, де $q = \sqrt{8\mu E}\sin\frac{1}{2}\theta$;

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

При $qr_0 \ll \hbar$ амплітуда розсіяння стає сферично ізотропною і прямує до сталої величини: $A^{(\text{Б})}(E,\theta) \approx \dfrac{2\mu U_0}{3\hbar^2} r_0^3$. При $qr_0 \gg \hbar$ амплітуда починає швидко осцілювати: $A^{(\text{Б})}(E,\theta) \approx \dfrac{r_0 U_0 \cos\frac{r_0 q}{\hbar}}{4E\sin^2\frac{1}{2}\theta}$.

13.3 $\delta_0(k) = -kr_0 + \mathrm{arctg}\left[\frac{\kappa}{k}\mathrm{ctg}(kr_0)\right]$, де $k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$ та $\kappa = \sqrt{\frac{2\mu(E+U_0)}{\hbar^2}}$.

13.4 Вказівка 1: Розглянути амплітуду розсіяння на атомі, як суму амплітуд розсіяння на ядрі та електроні $A(E,\theta) = A^{(\text{я})}(E,\theta) + A^{(\text{e})}(E,\theta)$.
Вказівка 2: Показати, що $A^{(\text{e})}(E,\theta) = A^{(\text{я})}(E,\theta)F(q^2)$, де

$$F(q^2) = \int d^3\rho e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}} \left|\psi(\mathbf{r})\right|^2$$

— формфактор атома, а $\mathbf{q} = \hbar(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$. Для амплітуди $A^{(\text{я})}(E,\theta)$ скористатися результатом задачі 13.1.

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

14 Релятивістська квантова механіка

1. Коваріантні та контрваріантні 4-вектори a_μ та a^μ пов'язані між собою співвідношенням[2]:

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

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

$$x_\mu = (x_0,\ x_1,\ x_2,\ x_3) = (ct,\ -x^1,\ -x^2,\ -x^3) \equiv (ct, -\mathbf{x}),$$
$$x^\mu = (x^0,\ x^1,\ x^2,\ x^3) = (ct,\ x^1,\ x^2,\ x^3) \equiv (ct, \mathbf{x})$$

та оператор 4-імпульса

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

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

2.1 Коваріантна форма рівняння Клейна-Гордона-Фока

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

2.3 Рівняння неперервності

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

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

2.4 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 γ^μ — матриці 4×4 (матриці Дірака), які задовольняють такій властивості

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

В усіх задачах використовується наступний вибір матриць Дірака[3]

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

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

Зручно записати матриці Дірака та спінор Дірака у блочному вигляді через матриці 2×2 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 2×2 та $\boldsymbol{\sigma}$ — матриці Паулі.

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

3.2 Можна записати рівняння Дірака у вигляді часового рівняння Шрьодінгера

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

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

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

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 типа 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.

ЗАДАЧІ

13.1 Розглянути пакети розв'язків рівняння Клейна-Гордона-Фока кожного типу:

$$\Psi^\pm(x) = \int d^3pA(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{p}}^\pm(x).$$

Для кожного з пакетів знайти величину $Q = \int d^3xj_0(x)$ та показати, що вона не залежать від часу і має свій знак.

13.2 Розглянути рівняння Клейна-Гордона-Фока для частинки у зовнішньому електромагнітному полі. З цією метою у рівнянні для вільної частинки зробити заміну

$$\widehat{p}_\mu \to \widehat{p}_\mu - \frac{q_0}{c}A_\mu.$$

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

13.3 З урахуванням релятивістських ефектів знайти енергетичной спектр водне-подібного атома, в якому електрон замінено на π^--мезон (частинка без спіну та з зарядом $-q_0$). Вважати ядро безмежно важким; знехтувати внеском ядерної взаємодії між ядром та π-мезоном.

13.4 Які з наведених нижче операторів комутують з гамільтоніаном діраковської частинки (а) квадрата орбітального моменту $\widehat{\mathbf{l}}^2$, (б) проекції орбітального момента $\widehat{l}_3$, (в) квадрата спіна $\widehat{\mathbf{s}}^2$, (г) проекції спіна $\widehat{s}_3$, (д) квадрата повного момента $\widehat{\mathbf{j}}^2 = (\widehat{\mathbf{l}} + \widehat{\mathbf{s}})^2$, (е) проекції повного момента $\widehat{j}_3 = \widehat{l}_3 + \widehat{s}_3$, (ж) проекції спіна на напрям руху частинки (спіральність) $\widehat{\Lambda} = \dfrac{\mathbf{p} \cdot \widehat{\mathbf{s}}}{|\mathbf{p}|}$?

Примітка: У блочному вигляді оператор спіна є

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

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

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

що є операторним аналогом сили Лоренца.

13.6 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: $V(r) = V_0 + \lambda r$ та $V(r) = V_0 + \kappa r^2$.

ВІДПОВІДІ ТА ВКАЗІВКИ ДО РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

13.1 $Q = \pm\frac{1}{mc^2}\int d^3p E_p^2\, |A(\mathbf{p})|^2$, де знак + відповідає додатньо, а знак - — відємно частотним розв'язкам.

13.2 Така заміна відповідає зміні заряда частинки на протилежний і може бути інтерпретованя як перехід від частинки до античастинки.

13.3 Вказівка 1: Розглянути стаціонарний стан $\Psi(r,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\psi(r)}$ та показати, що рівняння Клейна-Гордона-Фока зводиться до

$$\left[\frac{E^2}{2mc^2} - mc^2\right]\psi(r) = \frac{1}{2m}\left[p_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} - \frac{q_0^4 Z^2}{c^2 r^2} - \frac{2Eq_0^2 Z}{c^2 r}\right]\psi(r),$$

де p_r — оператор радіального імпульса.

Вказівка 2: Порівняти одержане рівняння з нерелятивістським рівнянням для воднеподібного атома.

Відповідь: $E_{n_r l} = mc^2\sqrt{1 - \dfrac{(Z\alpha)^2}{\left(n_r + \widetilde{l} + 1\right)^2 + (Z\alpha)^2}}$, $\alpha = \dfrac{q_0^2}{\hbar c}$ — стала токної структури, $\widetilde{l} = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}$, l — орбітальне та n_r радіальне квантови числа.

13.4 (а) ні, (б) ні, (в) ні, (г) ні, (д) так, (е) так, (ж) так.

13.6 Вказівка: Розглянути стаціонарний стан $\Psi(r,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\psi(r)}$. Розкласти хвильову функцію по верхніх та нижніх спінорах та одержати рівняння для верхньої компоненти $\varphi(r)$.

Відповідь:

- Лінійно-зростаючий потенціал.
  $\varphi(r) = \rho^{-1}\mathrm{Ai}(\rho)$, де $\rho = \left(\dfrac{E\lambda}{(\hbar c)^2}\right)^{1/3}$, $E_{n-1} = V_0 - a_n\lambda\left(\dfrac{(\hbar c)^2}{E_{n-1}\lambda}\right)^{1/3}$. Останне рівняння може бути розв'язано чисельними методами.
- Осциляторний потенціал. Розвязок для основного стану:
  $\varphi(r) = r^{-1}\left(\dfrac{2\Omega}{\pi}\right)^{3/2} e^{-\Omega r^2}$, де $\Omega = \dfrac{E_0\lambda}{2}$, $E_0 = V_0 + \dfrac{6\Omega}{E_0}$.
  Знову, останне рівняння може бути розв'язано чисельними методами.