

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка
Кафедра теоретичної фізики та методики викладання фізики

Бойчук В.І., Гольський В.Б., Шаклеїна І.О.

ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Навчальний посібник

Дрогобич 2011

Бойчук В.І., Гольський В.Б., Шаклеїна І.О. Основи квантової механіки: Навчальний посібник. – Дрогобич: ДДПУ, 2011. – 148 с.

Посібник укладено відповідно до програми навчальної дисципліни **«Теоретична фізика. Квантова механіка»** для підготовки фахівців ОКР «Бакалавр» галузі знань «0402. Фізико-математичні науки» напрямів підготовки «6.040203. Фізика», «6.040203. Фізика. Спеціалізація: Інформатика», затвердженої вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

Бібліографія ____ назв.

Рекомендовано до друку вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка як навчальний посібник для студентів інституту фізики, математики та інформатики, (протокол № ____ від _____ року).

Рецензенти:

Ткач Микола Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича.

ЗМІСТ

Вступ	5
Розділ I. Передумови виникнення квантової механіки.....	8
§ 1. Гіпотеза Планка	8
§ 2. Фотоефект. Гіпотеза Айнштейна	9
§ 3. Ефект Комптона.....	10
§ 4. Постулати Бора	11
§ 5. Гіпотеза де Бройля.....	14
Приклади розв'язування задач.....	15
Задачі для самостійного опрацювання.....	19
Розділ 2. Постулати квантової механіки	22
§ 1. Стан системи у класичній фізиці	22
§ 2. Рівняння Шредінгера для частинки	23
§ 3. Стан квантовомеханічної системи	28
§ 4. Співвідношення невизначеностей Гайзенберга	30
§ 5. Принцип суперпозиції станів	33
§ 6. Нормування хвильової функції вільної частинки.....	33
§ 7. Середні значення фізичних величин (динамічних змінних)	36
§ 8. Оператори квантової механіки. Властивості операторів	40
§ 9. Власні функції та власні значення операторів фізичних величин.....	42
§ 10. Властивості власних функцій оператора	44
§ 11. Умови точного вимірювання двох фізичних величин	48
§ 12. Невизначеність двох фізичних величин (принцип невизначеності Гайзенберга)	49
§ 13. Теорія представлень (зображень)	51
§ 14. Енергетичне та імпульсне представлення	56
§ 15. Рівняння Шредінгера квантово-механічної системи	59
§ 16. Стаціонарні стани.....	62
§ 17. Зміна оператора фізичної величини з часом	63

§ 18. Закони збереження квантово-механічної системи.....	65
§ 19. Вектор стану. Позначення Дірака	70
§ 20. Унітарні перетворення. Унітарні оператори	72
Приклади розв’язування задач	74
Задачі для самостійного опрацювання.....	79
Розділ 3. Найпростіші задачі квантової механіки	86
§ 1. Частинка в нескінченно глибокій потенціальній ямі	86
§ 2. Лінійний гармонічний осцилятор	90
§ 3. Проходження частинки в полі потенціального бар’єру.....	96
§4. Обертальний момент імпульсу (момент кількості руху) квантово-механічної системи	104
§ 5. Загальні властивості повного моменту імпульсу системи	110
§ 6. Спін частинки	113
§ 7. Матриці Паулі	117
§ 8. Рух частинки в центрально-симетричному полі	119
§ 9. Теорія атома водню	123
Приклади розв’язування задач	129
Задачі для самостійного опрацювання.....	136
Література	144

Вступ

Квантова механіка, яка є одним із найважливіших розділів теоретичної фізики, була створена в 20-х роках минулого століття. Основною задачею цієї науки є вивчення поведінки мікрочастинок (електронів, протонів і т.д.) в атомі, молекулі, твердому тілі, електромагнітних полях тощо.

В історії розвитку будь-якого розділу теоретичної фізики існує декілька етапів. Спочатку необхідно накопичити експериментальні факти, які б не пояснювались існуючими теоріями. Наступний етап – відкриття окремих напівемпіричних законів і створення попередніх гіпотез і теорій. На останньому етапі створюються загальні теорії, які дозволяють з єдиної точки зору зрозуміти сукупність багатьох явищ.

У XIX столітті була створена Максвелом і розвинута Лоренцом досить струнка теорія, яка пояснювала велике число явищ мікросвіту: випромінювання і розповсюдження світла у вакуумі, дисперсія світла в середовищах, рух електронів в електричному та магнітному полях і т.д. Проте з часом почали виникати експериментальні факти, які не можна було пояснити, виходячи з класичних уявлень.

Тому для побудови теорії рівноважного електромагнітного випромінювання, фотоефекта, ефекту Комптона необхідно було ввести гіпотезу про те, що світло поряд з хвильовими характеризується також і корпускулярними властивостями. Теорія квантів Планка-Айнштейна була використана при побудові Бором першої квантової теорії атома.

Наступним кроком у розвитку нової квантової теорії була гіпотеза де Бройля про те, що елементарні частинки поряд з корпускулярними повинні мати і хвильові властивості. Досліди Девісона і Джермера, Томсона, Тартаковського, в яких була виявлена дифракція електронів при їх відбиванні і проходженні через кристал і тонку металічну фольгу, підтвердили існування хвильових властивостей у будь-яких частинок малої маси.

Першим узагальнюючим результатом детального аналізу всіх попередніх теорій та експериментальних даних, що підтверджували як квантову природу світла, так і хвильові властивості електронів, стало рівняння Шредінгера. Воно дозволило

отримати нові закони руху електронів та інших атомних частинок. Після відкриття вторинного квантування рівнянь Максвела-Лоренца було отримано досить послідовну теорію випромінювання, в якій враховано квантову природу світла. З появою рівняння Шредінгера багато ефектів, які стосуються руху електронів в середині атома, були теоретично обґрунтовані.

Виявилось, однак, що теорія Шредінгера може описати не всі властивості атомів. З її допомогою не можна було, зокрема, правильно пояснити взаємодію атома з магнітним полем (аномальний ефект Зеємана), побудувати теорію складних атомів. В основному це зумовлено тією обставиною, що в теорії Шредінгера не враховувались релятивістські та спінові властивості електрона.

Наступним кроком у розвитку квантової теорії стала релятивістська теорія Дірака. Рівняння Дірака дозволило описувати як релятивістські, так і спінові ефекти електронів. Вони виявились мало суттєвими для атомів з одним електроном і надзвичайно важливими при вивченні будови атомів з декількома електронами. Лише після того, як були враховані спінові властивості електронів, виникла можливість пояснити правило заповнення електронних оболонок в атомі і дати періодичному закону Менделєєва строге обґрунтування.

Крім атома, квантова механіка знайшла застосування при дослідженні простих молекул, при побудові теорії твердого тіла і навіть при поясненні багатьох явищ в атомному ядрі.

Сьогодні продовжується накопичення величезного експериментального матеріалу і поступово створюється загальніша теорія елементарних частинок. Однією з характерних особливостей першого етапу теорії елементарних частинок, яка називається квантовою теорією поля, є опис взаємної перетворюваності елементарних частинок. Зокрема, в теорії Дірака було передбачено можливе перетворення гама-квантів в пару електрон-позитрон і навпаки, що пізніше було експериментально встановлено.

Отже, в класичній теорії між світлом і електронами біло дві різниці. По-перше, світло – хвилі, а електрони – частинки, а, по-друге, світло може виникати чи поглинатись, а число електронів залишається сталим. У квантовій механіці зникла перша різниця між світлом і електронами (корпускулярно-хвильовий дуалізм).

Однак в ній, як і в теорії Лоренца, число електронів не змінюється. Лише після появи квантової теорії поля, яка описує взаємну перетворюваність елементарних частинок, фактично відсутня і друга різниця.

Розділ I. Передумови виникнення квантової механіки

§ 1. Гіпотеза Планка

До появи квантової теорії важливою проблемою фізиків була проблема пояснення особливостей рівноважного електромагнітного випромінювання. Воно виникає всередині порожнини, що охоплена стінками, які нагріті до деякої сталої температури.

Знайдемо спектральну густину рівноважного випромінювання ρ_ω , яка пов'язана з густиною електромагнітної енергії

$$U = \frac{1}{8\pi}(E^2 + H^2), \quad (1.1)$$

де $\vec{E}$ і $\vec{H}$ – напруженості електричного і магнітного поля хвилі, рівнянням

$$U = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega. \quad (1.2)$$

Оскільки спектральна густина не повинна залежати від матеріалу стінок (це характеристика поля) і визначається лише їх температурою, то при визначенні ρ_ω можна вибрати найпростішу модель стінок, апроксимувавши її сукупністю гармонічних осциляторів.

Щоб побудувати теорію, що узгоджується з експериментом М.Планк (1900 р.) висунув нову гіпотезу, що змінила ряд фундаментальних уявлень класичної фізики. Згідно з гіпотезою Планка, **енергія мікроскопічних об'єктів (атомів, молекул) може приймати не будь-які, а лише певні (дискретні) значення**. Зокрема, для осцилятора енергія повинна бути кратною до деякої мінімальної енергії $\hbar\omega$, де ω – частота коливань осцилятора, а $\hbar$ – деяка стала величина:

$$E_n = n\hbar\omega, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.3)$$

На основі формули (3) Планк отримав такий вираз для спектральної густини рівноважного випромінювання:

$$\rho_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 [\exp(\hbar\omega/kT) - 1]}, \quad (1.4)$$

де k – стала Боцмана. З цієї формули легко отримується, що

$$U = \frac{\pi^2 k^4}{15c^3 \hbar^3} T^4 = aT^4 \quad (1.5)$$

– закон Стефана-Больцмана, відкритий емпірично раніше, а також закон зміщення Віна:

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T} \quad (1.6)$$

– довжина хвилі, що відповідає максимуму випромінювання. На основі проведених експериментів всі сталі величини (k, a, b) були відомі, тому було встановлено, що введена Планком стала

$$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

§ 2. Фотоефект. Гіпотеза Айнштейна

У кінці XIX ст. Г. Герцом біло відкрито фотоелектричний ефект. Суть фотоефекта полягає в тому, що іскра між двома зарядженими кульками виникає при меншій напрузі між ними, якщо освітити катод світлом досить високої частоти. Відомо, що енергія електромагнітної хвилі пропорційна квадрату її амплітуди, тобто інтенсивності світла. На основі вимірювань було встановлено, що швидкість фотоелектронів залежить не від інтенсивності світла, а від частоти хвилі. Причому фотоелектрони починають вилітати тоді, коли частота світла стає більшою за деяке граничне значення («червона межа» фотоефекту), яке є характеристикою металу.

У 1905 р. А. Айнштейн запропонував теорію, яка дала можливість пояснити явище фотоефекту. Після Планка він зробив другий великий крок на шляху розвитку теорії квантів. Айнштейн висунув гіпотезу, згідно з якою питання про дискретність енергії осциляторів тісно пов'язана з тим фактом, що власне **електромагнітне випромінювання складається з окремих корпускул – фотонів, які мають енергію $\hbar\omega$, тобто енергія фотона**

$$E = \hbar\omega. \quad (2.1)$$

Для імпульсу фотона тоді отримуємо рівняння:

$$\vec{p} = \vec{e} \frac{\hbar\omega}{c} = \vec{e} \frac{h}{\lambda} = \hbar \vec{k}, \quad (2.2)$$

де $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{e}$ – хвильовий вектор, $\vec{e}$ – одиничний вектор, що задає напрямок імпульсу.

Фотоефект пояснюється законом збереження енергії, коли кінетична енергія

електрона, що вилітає з металу дорівнює різниці енергії поглинутого фотона та роботи виходу електрона з металу:

$$\frac{m_0 V^2}{2} = \hbar \omega - A. \quad (2.3)$$

Зрозуміло, що коли $\hbar \omega < A$, то електрони не можуть вийти з металу, а червона межа фотоефекту – це частота

$$\omega_{ep} = \frac{A}{\hbar}. \quad (2.4)$$

Фотоелектричний ефект спостерігається, якщо частота світла

$$\omega > \omega_{ep}. \quad (2.5)$$

Переконливим аргументом на користь правильності гіпотези Айнштейна став ефект Комптона.

§ 3. Ефект Комптона

Експериментально встановлений в 1923 році, ефект Комптона виявлений при дослідженні розсіювання X-променів вільними електронами. Було отримано, що **довжина хвилі розсіяних X-променів є більшою, ніж довжина хвилі падаючих**. Цей експериментальний результат суперечив класичній теорії розсіювання світла вільними електронами.

Для пояснення зазначеного ефекту потрібно врахувати не лише закон збереження енергії, але й закон збереження імпульсу. Виходимо з того, що електромагнітна хвиля – це сукупність фотонів. Розглянемо процес розсіювання окремого фотона на електроні.

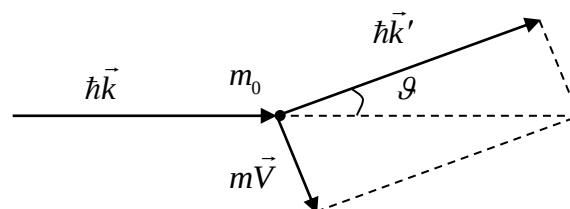


Рис. 1.

Нехай на нерухомий електрон з масою m_0 падає фотон (рис. 1.) Запишемо умови, що енергія та імпульс системи двох частинок (фотона та електрона) до і після розсіювання однакові:

$$\hbar \omega + m_0 c^2 = \hbar \omega' + m c^2, \quad (3.1)$$

$$\hbar \vec{k} = m\vec{V} + \hbar \vec{k}',$$

де $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$, $\vec{V}$ – швидкість електрона після розсіювання, $\hbar k = \frac{\hbar \omega}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$,

$\hbar k' = \frac{\hbar \omega'}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda'}$ – імпульс фотона до і після розсіювання. З рівняння (3.1) можна

визначити різницю між довжинами хвиль розсіяного і падаючого фотона

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\lambda_0 \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right), \quad (3.2)$$

де $\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{m_0 c} = \frac{h}{m_0 c} = 2,4 \cdot 10^{-12}$ м – комптонівська довжина хвилі електрона.

Отже, з точки зору квантових уявлень довжина хвилі розсіяного світла λ' повинна бути більшою за початкову λ , а частота меншою – $\omega' < \omega$. Різниця буде більш суттєвою, чим більший кут розсіювання ϑ .

§ 4. Постулати Бора

Теорія Н. Бора є першою теорією атома, що ґрунтується на квантових уявленнях. В її основі закладено планетарну модель атома Резерфорда. У рамках теорії Бора отримано непогані результати для водневоподібного атома, в якому навколо ядра рухається один електрон (атом водню Н, іонізований атом гелію He^+ , двічі іонізований атомі літію Li^{++} і т.д.)

Розглянемо електрон, який рухається навколо ядра з зарядом Ze . Тоді потенціальна енергія електрона дорівнює:

$$U = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (4.1)$$

де r – відстань між електроном і ядром.

З класичної механіки відомо, що в центральносиметричному полі виконується закон збереження енергії і моменту імпульсу $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, тому частинка рухається в площині, яка перпендикулярна до вектора $\vec{L}$. Виберемо систему координат так, щоб вісь OZ збігалась з вектором $\vec{L}$, а початок системи знаходився в точці перебування ядра. Тоді повна енергія електрона, що рухається в площині XOY , може бути записана через полярні координати ($x = r \cos(\varphi)$, $y = r \sin(\varphi)$) у вигляді:

$$E = T + U = \frac{m_0}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - \frac{Ze^2}{r} = \text{const}, \quad (4.2)$$

а момент імпульсу представиться формулою:

$$L = m_0 r^2 \dot{\varphi} = \text{const}, \quad (4.3)$$

де $\dot{r} = \frac{dr}{dt}$, $\dot{\varphi} = \frac{d\varphi}{dt} = \omega$.

З рівняння (4.2) видно, r і φ можна вважати узагальненими координатами, а $\dot{r}$ і $\dot{\varphi}$ – узагальненими швидкостями, тому справедливі рівняння руху Лагранжа:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = 0, \quad (4.4)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = 0, \quad (4.5)$$

де $\mathcal{L} = T - U$ – функція Лагранжа.

Розглянемо випадок колових орбіт. Тоді $r = \text{const}$ і тому $\dot{r} = 0$. Отже, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = 0$. З рівняння (4.5) видно, що тоді

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = 0. \quad (4.6)$$

Якщо врахувати формули для T і U , то можна отримати, що

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = m_0 r \dot{\varphi}^2 - \frac{Ze^2}{r^2} \quad (4.7)$$

або, після врахування умови (4.6),

$$\dot{\varphi}^2 r^3 = \frac{Ze^2}{m_0}. \quad (4.8)$$

Формула (4.8) є математичним записом третього закону Кеплера.

З формули (4.2) і (4.3) для колових орбіт отримується просте співвідношення для енергії:

$$E = -\frac{L^2}{2m_0 r^2}, \quad (4.9)$$

а з умов (4.3) і (4.8) – для радіуса колової орбіти

$$r = \frac{L^2}{Ze^2 m_0}. \quad (4.10)$$

Тоді енергія електрона може представитись формулою

$$E = -\frac{Z^2 e^4 m_0}{2L^2}. \quad (4.11)$$

Для пояснення спектрів поглинання і випромінювання атомами світла Н.Бор в 1923 році запропонував два постулати. Згідно з першим постулатом, **кожний атом має дискретні стаціонарні стани, знаходячись в яких електрон не випромінює, хоч і рухається з прискоренням. Ці стаціонарні стани можна визначити шляхом квантування моменту імпульсу:**

$$L = \hbar n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.12)$$

Крім того, **при переході електрона з одного стаціонарного стану з енергією E_n в інший з енергією E_m атом випромінює ($E_n > E_m$) або поглинає ($E_n < E_m$) енергію $\hbar\omega$, що визначається з умови:**

$$\hbar\omega = E_n - E_m. \quad (4.13)$$

Отже, Бор розширив число фізичних величин, які квантуються, на момент імпульсу. Згідно з (4.10) та (4.11) квантуються як радіус орбіти, так і енергія електрона в атомі:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{Ze^2 m_0} n^2, \quad E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_0}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.14)$$

Для атома водню радіус найменшої орбіти

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_0} \equiv a_B \approx 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

– радіус Боа. Формула для енергії дала можливість визначити сталу Ридберга у формулі Бальмера

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{m_0 Z^2 e^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \equiv RZ^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (4.15)$$

Тоді $R = \frac{m_0 e^4}{2\hbar^3} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$. Виявилось, що обчислене значення R з великою точністю збігається з експериментально встановленим. Це стало тріумфом теорії Бора.

Теорія Бора з її напівкласичним підходом дозволяла обчислити не лише частоти спектральних ліній, але не їх інтенсивності. Для знаходження інтенсивностей необхідно було використовувати класичну електродинаміку на основі так званого **принципу відповідності**, згідно з яким **результати попередньої теорії, що знайшли експериментальне підтвердження, повинні отримуватись в**

граничному випадку з наступної теорії. Це є важливим критерієм правильності теорії.

Пізніше умови квантування (4.12) були узагальнені для випадку квантових систем з декількома ступенями вільності (у випадку колової орбіти маємо одну ступінь вільності):

$$\oint p_i dq_i = 2\pi\hbar n_i, \quad n_i = 1, 2, 3, \dots, \quad i = 1, 2, 3, \dots, s, \quad (4.16)$$

s – число ступенів вільності, q_i, p_i – канонічно спряжені координати та імпульсу. Ці умови (правило квантування Бора-Зомерфельда) використали при дослідженні еліптичних орбіт, багатоелектронних атомів і т.д. Однак у випадку складних атомів результати теорії не були задовільними, тому теорія Бора стала лише перехідним етапом від класичної теорії до квантової механіки.

§ 5. Гіпотеза де Бройля

Як було зазначено вище, світло, крім хвильових, має також корпускулярні властивості. Умови, які задають зв'язок між хвильовими характеристиками (частота ω і довжина хвилі λ) та корпускулярними (енергія E та імпульс $\vec{p}$), встановлені Айнштайном для кванта світла – частинки з нульовою масою спокою:

$$E = \hbar\omega = h\nu, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{h}{\lambda} \vec{e}. \quad (5.1)$$

Луї де Бройль (1924 р.) узагальнив ці умови на частинку з відмінною від нуля масою спокою. Іншими словами, де Бройль припустив, що дуалізм хвиля-частинка повинен бути характерним не лише світлу, але й електронам та іншим частинкам. Згідно з ідеєю де Бройля, потік вільних електронів, що має енергію E та імпульс $\vec{p}$ ($E = mc^2$, $\vec{p} = m\vec{V}$, $m = \frac{m_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$), характеризується властивостями хвилі з

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \quad (\lambda = \frac{h}{p}), \quad (5.2)$$

тобто хвилі $\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot \exp\{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})\}$.

Видно, що рівняння (5.2) аналогічні рівнянням (5.1). Співвідношення Айнштайна мають універсальний характер і є однаково застосовними як для аналізу

корпускулярних властивостей електромагнітної хвилі, так і для аналізу хвильових властивостей електронів, що рухаються.

Вперше хвильові властивості електронів спостерігались у дослідах з дифракції електронів Девісона і Джермера (1927 р.). Довжина хвилі де Бройля для електронних пучків має порядок 10^{-10} м, тому в якості дифракційної ґратки виступав кристал, стала ґратки якого співмірна з довжиною дебройлівської хвилі λ . Узагальнюючи методику, що розроблена Дебаєм-Шерером для Х-променів на випадок електронних хвиль, Тартаковський і Томсон (1928 р.) пропустили через полікристалічну плівку не Х-промені, а пучок електронів. Вони отримали так звані електронोगрами. Штерн і Естернман спостерігали дифракцію атомів гелію і молекул водню при відбиванні від кристалів LiF . Все це переконує в тому, що хвильові властивості, в принципі, повинні проявлятися в усіх частинок.

Приклади розв'язування задач:

Задача 1. Знайти довжину хвилі де Бройля для електрона, кінетична енергія якого дорівнює а) 10 кеВ; б) 1 МеВ.

Дано:	Розв'язання:
$E_{k1} = 10 \text{ кеВ}$	Довжина хвилі де Бройля для будь-якої частинки визначається за формулою:
$E_{k2} = 1 \text{ МеВ}$	
$\lambda_{b1} - ?$	$\lambda_b = \frac{h}{p}.$ Імпульс частинки $p = mv$. Кінетична енергія частинки $E_k = \frac{mv^2}{2}$.
$\lambda_{b2} - ?$	

Знаходимо зв'язок між імпульсом p та її кінетичною енергією E_k :

$$v^2 = \frac{2E_k}{m} \text{ і } p = m\sqrt{\frac{2E_k}{m}} = \sqrt{2mE_k}.$$

Якщо кінетична енергія E_k частинки більша від її енергії спокою E_0 , тобто $E_k > E_0$, то зв'язок імпульсу і кінетичної енергії визначається релятивістською формулою

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E_k(E_k + 2E_0)}.$$

Енергія спокою електрона $E_0 = m_0c^2$, а тому

$$E_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} (3 \cdot 10^8)^2 = 81 \cdot 10^{-15} \text{ Дж.}$$

За умовою задачі кінетична енергія електрона дорівнює $10 \text{ кеВ} = 1,6 \cdot 10^{-15} \text{ Дж}$. У цьому випадку $E_k < E_0$ і $p = \sqrt{2mE_k}$. Тоді

$$\lambda_b = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}.$$

Проводимо обчислення

$$\lambda_{b1} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-15}}} = 1,2 \cdot 10^{-12} \text{ м.}$$

Якщо кінетична енергія електрона дорівнює $1 \text{ МеВ} = 1,6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж}$, то $E_k > E_0$.

Тобто $p = \frac{1}{c} \sqrt{E_k(E_k + 2E_0)}$, а довжина хвилі де Бройля знаходиться наступним чином:

$$\lambda_b = \frac{h}{p} = \frac{h \cdot c}{\sqrt{E_k(E_k + 2E_0)}}.$$

Отже,

$$\lambda_{b2} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{\sqrt{1,6 \cdot 10^{-13} (1,6 \cdot 10^{-13} + 2 \cdot 81 \cdot 10^{-15})}} = 9,2 \cdot 10^{-13} \text{ м.}$$

Задача 2. Виходячи із співвідношення невизначеностей Гайзенберга для координати та імпульсу (див. розділ 2, § 4), оцінити розміри ядра атома, якщо мінімальна енергія нуклона в ядрі 8 МеВ.

Дано:	Розв'язання:
$E = 8 \text{ МеВ}$	Співвідношення невизначеностей для координат та імпульсу запишемо у вигляді:
$r - ?$	
	$\Delta x \Delta p \geq \hbar.$

Зв'язок імпульсу та енергії нуклона в ядрі: $\Delta p = \sqrt{2mE}$.

Вважаючи, що Δx становить половину радіуса ядра атома, тобто $\Delta x = \frac{r}{2}$, маємо

$$\frac{r}{2} \sqrt{2mE} \geq \hbar.$$

Отже, радіус ядра

$$r = \frac{\hbar \sqrt{2}}{\sqrt{mE}},$$

де m – маса спокою протона m_p , або нейтрона m_n , оскільки їхні маси практично однакові: $m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27}$ кг і $m_n = 1,6749 \cdot 10^{-27}$ кг.

Обчислимо радіус атома:

$$r = \frac{\sqrt{2} \cdot 1,05459 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{1,67 \cdot 10^{-27} \cdot 8 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 3,2 \cdot 10^{-15} \text{ м.}$$

Задача 3. Визначити квантове число n збудженого стану атома водню, коли відомо, що при переході в основний стан атом випромінює:

а) фотон з довжиною хвилі $\lambda = 97,25$ нм;

б) два фотона з $\lambda_1 = 656,3$ нм і $\lambda_2 = 121,6$ нм.

Дано:	Розв'язання:
$\lambda = 97,25$ нм	а) Згідно з формулою Бальмера:
$\lambda_1 = 656,3$ нм	$\omega = RZ^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$
$\lambda_2 = 121,6$ нм	де $R = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^3} = 2,08 \cdot 10^{16}$ – стала Ридберга для водню в системі
$n_1 - ?$	СІ, $Z = 1$ – заряд ядра, $m = 1$ – основний стан атома водню.
$n_2 - ?$	

Врахувавши, що $\omega = 2\pi c / \lambda$, отримаємо формулу для обчислення n :

$$n = \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{2\pi c}{R\lambda}}}.$$

Проводимо обчислення:

$$n = \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8}{2,08 \cdot 10^{16} \cdot 97,25 \cdot 10^{-9}}}} = 4.$$

б) Для двох фотонів, з урахуванням закону збереження енергії, формула Бальмера і вираз для n приймуть вигляд:

$$\omega_1 + \omega_2 = RZ^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right); \quad n = \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{2\pi c}{R} \left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2} \right)}}.$$

Таким чином:

$$n = \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8}{2,08 \cdot 10^{16}} \cdot \left(\frac{1}{656,3 \cdot 10^{-9}} + \frac{1}{121,6 \cdot 10^{-9}} \right)}} = 3.$$

Задача 4. Знайти для атомів легкого і важкого водню різницю енергій зв'язку електронів в основних станах.

Дано:
$m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$
$m_n = 1,6749 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$
$\Delta E - ?$

Розв'язання:

Енергія зв'язку в основних станах у системі СІ:

$$E = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu e^4}{2\hbar^2};$$

де $\mu = \frac{Mt}{M+t}$ – зведена маса, M – маса ядра, t – маса електрона. Маса ядра водню дорівнює масі протона, дейтерію – сумі мас протона і нейтрона.

Одержимо:

$$\Delta E = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{m_p + m_n}{m_p + m_n + m_e} - \frac{m_p}{m_p + m_e} \right);$$

Проводимо обчислення:

$$\Delta E = \frac{(1,6 \cdot 10^{-19})^4}{(4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12})^2} \frac{9,1 \cdot 10^{-31}}{2 \cdot (1,05 \cdot 10^{-34})^2} \left(\frac{1,672 \cdot 10^{-27} + 1,675 \cdot 10^{-27}}{1,672 \cdot 10^{-27} + 1,675 \cdot 10^{-27} + 9,1 \cdot 10^{-31}} - \frac{1,672 \cdot 10^{-27}}{1,672 \cdot 10^{-27} + 9,1 \cdot 10^{-31}} \right) = 5,9 \cdot 10^{-22} \text{ Дж.}$$

Задача 5. Використовуючи правила квантування, знайти рівні енергії одномірного гармонічного осцилятора з частотою ω .

Розв'язування:

Оскільки $x = A \cdot \cos(\omega t)$ і $p = -m_0 \omega A \cdot \sin(\omega t)$, то енергію осцилятора виразимо через власну частоту ω та амплітуду коливань A :

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2 x^2}{2} = \frac{m_0 \omega^2 A^2}{2}.$$

За допомогою правила квантування визначаємо дозвалені значення амплітуди:

$$\oint p dq = m_0 A \omega \int \sqrt{1 - \frac{x^2}{A^2}} dx = m_0 A^2 \omega \pi = nh.$$

Звідси $A_n = \sqrt{\frac{2\hbar n}{m_0 \omega}}$, де $n=0, 1, 2, \dots$.

Підставимо знайдене значення амплітуди у вираз для енергії. Отримаємо:

$$E_n = n\hbar\omega.$$

Задачі для самостійного опрацювання:

1. Покажіть, що енергетичні рівні атома водню можуть бути описані виразом

$$E_n = -\frac{hRc^2}{n^2}, \text{ де } R - \text{ стала Ридберга.}$$

2. Знайдіть значення сталої Ридберга для однократно іонізованого атома гелію.
3. Оцінити час, за який електрон, що рухається навколо протона в атомі водню по орбіті з радіусом $0,53 \cdot 10^{-10}$ м, упав би на ядро, якщо б він втрачав енергію на випромінювання відповідно до формули класичної електродинаміки

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{\vec{r}}^2,$$

де $\ddot{\vec{r}}^2$ – вектор прискорення електрона.

4. Частинка масою m_0 рухається по коловій орбіті в центральносиметричному потенціальному полі. Потенціальна енергія частинки $U = \frac{1}{2}kr^2$ (де r – радіус орбіти). Користуючись правилом квантування, визначити рівні енергії частинки.
5. Обчислити для зв'язаної системи позитрон + електрон: а) радіуси стаціонарних орбіт позитрона; б) позитронний потенціал іонізації; в) довжину хвилі резонансної лінії.
6. Ядра гелію прискорюються різницею потенціалів 10^6 В. Визначити довжину хвилі де Бройля.
7. Електрон прискорюється різницею потенціалів $1,00 \pm 0,01$ кВ. Яка невизначеність положення електрона вздовж траєкторії його руху?
8. Оцінити енергію основного стану гармонічного осцилятора, використовуючи співвідношення невизначеності та принцип мінімуму енергії.
9. Квант світла з енергією 15 еВ вириває електрон, який знаходиться в основному стані атома водню. Знайти швидкість руху вирваного електрона.
10. Електрон знаходиться в області з лінійними розмірами порядку 0,1 нм. Яка невизначеність імпульсу електрона? Якій енергії відповідає такий імпульс?
11. Оцінити невизначеність швидкості електрона в атомі водню, вважаючи, що його діаметр $d = 10^{-10}$ м. Порівняйте знайдене значення невизначеності швидкості зі швидкістю електрона на першій борівській орбіті.

12. Виходячи зі співвідношення невизначеностей, показати, що електрони не можуть знаходитися усередині атомних ядер.
13. Використовуючи співвідношення де Бройля, знайти радіус першої борівської орбіти атома водню з умови мінімуму повної енергії.
14. Визначити радіус орбіти і швидкість електрона в основному стані двічі іонізованого атома літію.
15. Визначити кількість обертів, що здійснює електрон за 1 с у стані з $n=3$ в атомі водню.
16. У дослідях по дифракції електронів з енергією 200 еВ на полікристалічній фользі виявилось, що діаметр дифракційного кільця першого порядку дорівнює 3 см. Відстань від фольги до екрана 15 см. Визначити міжплощинну відстань d для кристалічного зразка.
17. Яка відстань Δx між сусідніми максимумами густини електронів, якщо дифракційна картина є результатом проходження пучка електронів з кінетичною енергією $E_k=24$ еВ через діафрагму з двома щілинами, відстань між якими дорівнює $d = 30$ мкм? Екран віддалений від діафрагми на $l = 100$ см.
18. Показати, що довжина хвилі де Бройля укладається на довжині будь-якої борівської орбіти ціле число разів.
19. Мікрочастинка з масою спокою m_0 знаходиться в одновимірній потенціальній ямі шириною l з нескінченно високими стінками. Оцініть мінімально можливу енергію частинки, якщо $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$.
20. Прямолінійна траєкторія частинки в камері Вільсона є ланцюжком малих крапель води, розмір яких $d=1$ мкм. Чи можна, спостерігаючи слід електрона з кінетичною енергією 1 еВ, знайти відхилення в його русі від класичних законів?
21. Принцип невизначеності обмежує наші можливості у визначенні одночасно імпульсу і положення частинки. Але чому тоді класичні фізики не підозрюють про такі обмеження? Розрахувати мінімальну невизначеність швидкості м'яча масою 500 г, про який відомо, що він знаходиться в межах 10^{-6} м від біти. Яка мінімальна невизначеність положення кулі масою 5 кг, про яку відомо, що вона має швидкість між 350.00001 і 350.00000 м/с ?

22. Використовуючи принцип невизначеності, визначити енергію H_2^+ , енергію зв'язку і між'ядерну відстань.
23. Знайти відношення гравітаційної сили притягання, що діє між електроном і протоном, до кулонівської сили. Покажіть, що при розгляді атома водню гравітаційною силою можна знехтувати.
24. Визначити довжину хвилі людини, маса якої 60 кг і рухається зі швидкістю 5 км/год. Яку частоту повинен мати γ -промінь, щоб його довжина хвилі була такою ж? Виразити енергію променя в еВ.

Розділ 2. Постулати квантової механіки

§1. Стан системи у класичній фізиці

Стан фізичної системи задається деяким набором фізичних величин, які задають повну інформацію про систему. Тобто, знаючи цей набір, можна визначити всі її фізичні параметри. З часом стан системи може змінюватись. Зміна стану визначається відповідними рівняннями руху. Ґрунтуючись на цих рівняннях, можна встановити стан системи в будь-який момент часу, якщо він є відомим в якийсь момент.

Розглянемо, як задавався стан матеріальної точки в класичній механіці Ньютона. Згадаємо диференціальне рівняння руху матеріальної точки:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F}. \quad (1.1)$$

У випадку прямолінійного руху рівняння спрощується:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_x. \quad (1.2)$$

Рівняння (1.2) є диференціальним рівнянням другого порядку. Після інтегрування цього рівняння отримуємо, що функція координати буде залежати від часу і двох невідомих параметрів: $x = x(t, C_1, C_2)$. Для того, щоб визначити сталі C_1 і C_2 треба мати початкові умови:

$$x|_{t=0} = x_0, \quad v_x|_{t=0} = v_{x_0}.$$

Тоді отримуємо систему двох рівнянь:

$$\begin{cases} x(0, C_1, C_2) = x_0 \\ \dot{x}(0, C_1, C_2) = v_{x_0}, \end{cases}$$

з якої можна визначити C_1 і C_2 через x_0 та v_{x_0} , тому функція координати стає однозначною:

$$x = x(t, x_0, v_{x_0}).$$

Це рівняння називають рівнянням руху матеріальної точки. Координата x_0 і швидкість v_{x_0} задають стан точки в початковий момент часу. Знаючи закон руху, можна визначити стан точки в будь-який момент часу:

$$x = x(t, x_0, v_{x_0}), \quad \dot{x} = \dot{x}(t, x_0, v_{x_0}) = v_x.$$

Наведені міркування легко узагальнити на випадок руху матеріальної точки в тривимірному просторі. Стан матеріальної точки при її довільному русі в просторі задає сукупність двох векторних величин – радіус-вектора точки та її швидкості:

$$\vec{r} = \vec{r}(t), \quad \vec{v} = \vec{v}(t).$$

Аналогічно стан електромагнітного поля задається сукупністю інших двох величин – напруженостями електромагнітного та магнітного поля:

$$\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, t), \quad \vec{H} = \vec{H}(\vec{r}, t),$$

які є розв'язками рівнянь Максвелла.

§ 2 Рівняння Шредінгера для частинки.

Для визначення стану мікрочастинки (електрона, протона, атома і т. і.) варто знати диференціальне рівняння руху, як це було в класичній фізиці. Це завдання було виконано Е. Шредінгером (1926 р).

Відправною точкою для запису основного рівняння квантової механіки стали роботи де Бройля. Тому повернемося до основних ідей цих робіт. Крім згаданого вище постулату про хвильові властивості електрона, ним було показано, що довжина хвилі електрона $\lambda = \frac{h}{p}$ міститься ціле число разів вздовж колової орбіти атома водню довжиною $2\pi r$.

Дійсно, момент імпульсу електрона колової орбіти радіуса r дорівнює

$$L = mr^2\dot{\phi} = mr^2\omega = mrv, \quad (2.1)$$

де v – лінійна швидкість електрона. Якщо врахувати умову квантування Бора і гіпотезу де Бройля

$$L = \hbar n, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad \lambda = \frac{h}{p}, \quad (2.2)$$

то отримаємо

$$mrv = pr = \frac{h}{\lambda} r = \hbar n.$$

Отже,

$$\frac{2\pi r}{\lambda} = n. \quad (2.3)$$

Для частоти матеріальних хвиль (хвиль мікрочастинок) ω в електричному полі з потенціалом φ де Бройль записав співвідношення:

$$\hbar\omega = mc^2 + e\varphi, \quad (2.4)$$

де $m = \frac{m_0}{(1 - \frac{v^2}{c^2})^{\frac{1}{2}}}$, e – заряд частинки. Звідси залишилося зробити один крок до

встановлення хвильового рівняння для частинки в будь-якому силовому полі. Поряд з цим де Бройль висловив глибоке припущення, що нова механіка повинна відноситись до старої, класичної так, як хвильова оптика до геометричної оптики.

Розглянемо основні ідеї робіт Шредінгера, в яких були закладені основи хвильової (квантової) механіки. Дещо раніше (1925 р.) основи матричної квантової механіки були розроблені Гайзенбергом, Борном та Йорданом. Гамільтоном була встановлена аналогія між механікою та геометричною оптикою. Вона полягає в тому, що рух консервативної механічної системи (системи, для якої виконуються закони збереження енергії) відбувається за тим же законом, що й розповсюдження світлового променя в ізотропному прозорому середовищі.

Для встановлення цього результату можна виходити з варіаційного принципу Гамільтона, з якого отримуються всі рівняння руху механічної системи з s ступенями вільності:

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \dot{q}, t) dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (\sum_{i=1}^s p_i \dot{q}_i - \mathcal{H}) dt = 0, \quad (2.5)$$

де $S(q, p)$ – функція дії, $\mathcal{L}$ і $\mathcal{H}$ – функції Лагранжа і Гамільтона, q_i, p_i – узагальнена координата та імпульс, $\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}$.

Якщо $\mathcal{H}$ чи $\mathcal{L}$ явно від часу не залежать, то така система називається консервативною, бо виконується закон збереження енергії:

$$\mathcal{H} = T + U = \text{const}. \quad (2.6)$$

Тоді формула для варіації δS спрощується

$$\delta S = \delta S_0 = \delta \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^s p_i dq_i, \quad (2.7)$$

бо $\delta E = 0$. Функцію S_0 називають скороченою (редукованою) дією.

Нехай система складається з однієї частинки. Знайдемо функцію дії

$$S = \int_{t_1}^{t_2} [T - V(\vec{r})] dt = \int_{t_1}^{t_2} (mv^2 - E) dt = \int_{t_1}^{t_2} mv^2 dt - E(t_2 - t_1) = \int_1^2 (2m(E - V)^{1/2} ds - Et = S_0 - Et, \quad (2.8)$$

де 1 і 2 – точки на траєкторії, $t = t_2 - t_1$ – час руху матеріальної точки, $v = \frac{ds}{dt}$, s – довжина траєкторії руху (шлях).

Тоді формула для варіації скороченої дії буде мати вигляд

$$\delta S_0 = \delta \int_1^2 [2m(E - V)]^{1/2} dt = \delta \int_1^2 mv ds = 0. \quad (2.9)$$

Умова (2.8), яка визначає форму траєкторії між точками 1 і 2, називається принципом Монпертюї.

З геометричної оптики відомо, що розповсюдження променів світла описується принципом Ферма

$$\delta \int_1^2 \frac{ds}{u(\vec{r})} = \frac{1}{c} \delta \int_1^2 n ds = 0, \quad (2.10)$$

де $u(\vec{r})$ – фазова швидкість хвилі в точці $\vec{r}$, $n = \frac{c}{u}$ – показник заломлення, c – швидкість світла у вакуумі. З рівнянь (2.9) і (2.10) видно, що

$$u(\vec{r}) = \frac{A}{[2m(E - V(\vec{r}))]^{1/2}} = \frac{A}{mv}, \quad (2.11)$$

де A – постійна величина, що має розмірність енергії. Аналіз показує, що розглядаючи $S = const$ як поверхню постійної фази, можна отримати

$$u = \frac{E}{[2m(E - V)]^{1/2}}, \quad (2.12)$$

тому $A=E$. Отже, маємо повну аналогію класичної механіки і геометричної оптики: оптичні величини виражаються через механічні і навпаки.

Наступний крок, який необхідно зробити, полягає в тому, щоб від хвильової оптики перейти до квантової механіки. Розглядається монохроматична хвиля, яка описує частинку, – матеріальна хвиля чи хвильова функція. Згідно з Шредінгером, запишемо її у вигляді

$$\psi = \psi_0 \sin\left(\frac{2\pi S}{h} + const\right) = \psi_0 \sin\left(-\frac{2\pi Et}{h} + \frac{2\pi S_0}{h} + const\right), \quad (2.13)$$

де ψ_0 - амплітуда, $\frac{2\pi S}{h} + const$ - фаза хвилі, h - стала, що має розмірність дії. У рівнянні плоскої хвилі множник біля часової функції відомий, тому необхідно, щоб виконувалась умова

$$E = h\nu, \quad (2.14)$$

де ν - частота. Визначимо тепер довжину хвилі, що відповідає рівнянню (2.13). Для фазової швидкості ($u = \lambda\nu$) скористаємось формулою (2.12), а для енергії - (2.14). Одержимо, що

$$\lambda = \frac{h}{[2m(E - V)]^{1/2}} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}. \quad (2.15)$$

Якщо вважати, що h - стала Планка, то рівняння (2.15) перейде в рівняння де Бройля в нерелятивістському випадку.

Важливо зазначити, що при отриманні (2.15) ми використали умову

$$u = \frac{h\nu}{[2m(h\nu - V)]^{1/2}}, \quad (2.16)$$

яка задає залежність фазової швидкості від частоти - закон дисперсії для хвиль матерії. З формули (2.11) видно, що фазова швидкість не співпадає зі швидкістю частинки. Цього можна досягти, якщо скористатись такою хвилею, що є суперпозицією хвиль з близькими хвильовими векторами. В одномірному випадку потрібна хвиля задається рівнянням

$$\psi(x, t) = \int_{k-\frac{\Delta}{2}}^{k+\frac{\Delta}{2}} \psi_0(k') \sin(k'x - \omega t + \alpha) dk', \quad (2.17)$$

де $\Delta \ll k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

Хвиля $\psi(x, t)$, яку ще називають хвильовим пакетом, характеризується яскраво вираженим максимумом протяжністю $\frac{2\pi}{\Delta}$, який рухається в просторі зі швидкістю

$$v_{ep} = \frac{d\omega}{dk}. \quad (2.18)$$

В нашому випадку, якщо скористатись (2.15) і (2.16) та обчислити диференціал у знаменнику, одержимо:

$$v_{gp} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dv}{d(1/\lambda)} = \frac{h}{\sqrt{2m}} \frac{dv}{d(hv - V)^{1/2}} = \frac{h}{\sqrt{2m}} \frac{dv}{(h/2)(hv - V)^{1/2}} \frac{dv}{dv} = v. \quad (2.19)$$

Виходячи з того, що швидкість хвильового пакету збігається з швидкістю частинки, здавалось би ми можемо ототожнити частинки з хвильовим пакетом. Незважаючи на те, що така ідея виявилась хибною, бо хвильові пакети через дисперсію з часом швидко розпливаються (а частинки стійкі), вона дозволила Шредінгеру прийти до запису правильного хвильового рівняння для частинки.

Виходячи з адекватної хвильової оптики, будемо вважати, що хвильова функція частинки є розв'язком хвильового рівняння

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{v^2} \frac{d^2 \psi}{dt^2} = 0, \quad (2.20)$$

де ∇^2 – оператор Лапласа, а фазова швидкість визначається з рівняння (2.12). Тоді для хвилі (2.13) другий доданок в рівнянні (2.20) можна переписати у вигляді

$$-\frac{1}{v^2} \frac{d^2 \psi}{dt^2} = \frac{8\pi^2 m(E - V)}{h^2} \psi = \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \psi. \quad (2.21)$$

Підставивши (2.21) у рівняння (2.20), отримуємо нове рівняння для хвильової функції частинки

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi. \quad (2.22)$$

Це рівняння справедливе тоді, коли потенціальна енергія частинки не залежить явно від часу і частинка характеризується заданим значенням енергії. Рівняння (2.22) називають **стаціонарним рівнянням Шредінгера**.

При певних вимогах до функції ψ , що мають фізичний зміст, це рівняння має розв'язки лише при визначених значеннях E – власних значеннях рівняння (2.22). На основі цього рівняння Шредінгером було розв'язано ряд задач для визначення енергії станів атома водню, гармонічного осцилятора, ротатора тощо.

Наступний крок, який потрібно зробити, – це записати рівняння для випадку, коли $\frac{dV}{dt} \neq 0$. Для цього можна використати наступну умову

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{4\pi^2 E}{h^2} \psi, \quad (2.23)$$

яка отримується з (2.13). Рівняння (2.22) за умови (2.23) запишеться наступним чином

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}. \quad (2.24)$$

Знайдене рівняння не задовольнило Шредінгера, тому він записав періодичну функцію у комплексній формі:

$$\psi = e^{\pm i\omega t}\psi_0,$$

що дає

$$\dot{\psi} = \pm i\omega t\psi = \pm i\frac{E}{\hbar}\psi. \quad (2.25)$$

Виключивши енергію E з рівняння (2.22), одержимо

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = \pm i\hbar\dot{\psi}. \quad (2.26)$$

Шредінгер вибрав це рівняння в якості основного для станів, що не мають визначеної енергії E . Це дозволило йому розвинути теорію дисперсії. Рівняння (2.26) часто записують із знаком плюс у лівій частині. Воно дістало назву **загального (повного) рівняння Шредінгера** або, якщо коротко, **рівняння Шредінгера**.

§ 3. Стан квантовомеханічної системи

Для пояснення хвильових властивостей мікрочастинок необхідно вважати, що після проходження періодичної структури (кристалу) розподіл частинок в просторі пропорційний відносній інтенсивності хвилі у відповідних точках простору. Аналіз показує, що немає підстав вважати (як це зроблено в перших роботах Шредінгера), що частинки є суперпозицією хвиль, бо мікрочастинка веде себе як одне ціле. Хвильові властивості частинок не пов'язані також з колективними властивостями мікрочастинок, тому що дифракційна (інтерференційна) картина, як виявилось, не залежить від інтенсивності пучка частинок. Вона спостерігається навіть тоді, коли частинки падають на періодичну структуру практично одна за одною. Варто також зазначити, що хвильові властивості характерні і для електрона у водневоподібному атомі.

Кожна частинка (електрон), проходячи крізь кристалічну плівку і попадаючи на фотопластинку, стає причиною потемніння невеликої ділянки фотопластинки. Після того, як на фотопластинку попаде велика кількість електронів, розподіл світлих та темних ділянок на фотопластинці відповідає дифракційній картинці.

Враховуючи зазначене вище, М. Борн (1926 р.) запропонував статистичну інтерпретацію хвильової функції, яка стала одним з постулатів квантової механіки, що був підтверджений експериментально всіма дослідженнями, які проводились до цього часу. Нехай квантово-механічна система (електрон, протон, атоми, молекули) характеризується s -ступенями вільності. Тоді узагальнені координати, які однозначно задають розміщення системи в просторі, позначимо через $q_1, q_2, q_3, \dots, q_s$. Сукупність цих величин задає точку в абстрактному просторі, який називають конфігураційним простором. Згідно з першим постулатом квантової механіки, **стан квантово-механічної системи задається хвильовою функцією**

$$\psi = \psi(q, t), \quad (3.1)$$

яка є комплексною функцією узагальнених координат і часу. Знаючи хвильову функцію, можна визначити величину, яка пропорційна ймовірності того, що узагальнені координати системи знаходяться в області:

$$\begin{aligned} q_1 &: q_1^0, q_1^0 + dq_1, \\ q_2 &: q_2^0, q_2^0 + dq_2, \\ &\dots\dots\dots \\ q_s &: q_s^0, q_s^0 + dq_s. \end{aligned}$$

В момент часу t ця величина дорівнює:

$$dW(q_0, t) = \psi^*(q_0, t) \psi(q_0, t) dq, \quad (3.2)$$

де $dq = dq_1, dq_2, \dots, dq_s$ - елемент об'єму конфігураційного простору. Виходячи з основ теорії ймовірності, інтегрування виразу (3.2) по всьому конфігураційному простору, повинно вести до обмеженого значення інтегралу

$$\int \psi^*(q, t) \psi(q, t) dq = \int |\psi(q, t)|^2 dq = N. \quad (3.3)$$

Як буде показано нижче, хвильова функція є визначеною з точністю до комплексного множника. Іншими словами, дві функції, які відрізняються сталими множниками, описують один і той же стан.

Отже, якщо виконується умова (3.3), то можна вибрати нову хвильову функцію стану.

$$\psi'(q, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \psi(q, t), \quad (3.4)$$

для якої справедливе рівняння

$$\int |\psi'(q, t)|^2 dq = 1. \quad (3.5)$$

Рівняння (3.5) називають умовою нормування хвильової функції на одиницю. По суті, нормовані хвильові функції задають імовірність dW значень координат системи в інтервалі $q, q + dq$. Тоді величину

$$\rho(q, t) = \frac{dW(q, t)}{dq} = |\psi(q, t)|^2 \quad (3.6)$$

називають густиною ймовірності. У деяких випадках стан фізичної системи задається такими хвильовими функціями (наприклад, хвильові функції станів вільної частинки), що

$$\int |\psi(q, t)|^2 dq = \infty. \quad (3.7)$$

Тоді умова нормування хвильової функції має інший вигляд, ніж в (3.5). Це питання буде розглянуто пізніше.

§ 4. Співвідношення невизначеностей Гайзенберга

Суттєвий крок в інтерпретації квантової механіки був зроблений Гайзенбергом при формулюванні ним співвідношень невизначеностей, які певним чином прояснили статистичну сутність квантової механіки.

Згідно з Гайзенбергом прогрес в квантовій механіці був пов'язаний з відмовою від таких понять, як траєкторія електрона в атомі, частота його обертання. Виникає природне питання, в якій мірі в квантовій механіці можна використовувати такі поняття, як положення (координата) електрона, його швидкість (імпульс). Гайзенберг прийшов до висновку, що експерименти вносять деяку невизначеність в тих випадках, коли ми однозначно хочемо визначити пару канонічно спряжених механічних величин. Такими величинами є, наприклад, координата q і спряжений імпульс p .

Визначення координати електрона можна пов'язати з опроміненням його X - або γ - випромінюванням. З хвильової оптики відомо, що невизначеність положення освітленого об'єкта дорівнює довжині хвилі використаного випромінювання, тому $\Delta q \approx \lambda$. Отже, положення електрона можна визначити лише з таким ступенем точності. Однак при цьому квант випромінювання розсіюється на електроні (ефект

Комптона), що стає причиною стрибкоподібної зміни імпульса електрона. Гайзенберг вважає, що стрибкоподібна зміна імпульса електрона дорівнює невизначеності його значення: $\Delta p \approx mv$.

Отже, $\frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \approx \frac{h}{\Delta q}$, але $\frac{h\nu}{c} \approx mv \approx \Delta p$, тому

$$\Delta p \Delta q \approx h \text{ або } \Delta p \Delta q \geq h.$$

В декартовій системі координат зазначена нерівність має вигляд:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h, \Delta y \Delta p_y \geq h, \Delta z \Delta p_z \geq h. \quad (4.1)$$

Вирази (4.1) називають співвідношеннями невизначеностей для координати та імпульсу. В квантовій механіці задати q і p з більшою точністю, ніж це визначено нерівністю Гайзенберга, принципово не можна.

Розглянемо ще один аспект невизначеності фізичних величин. Зокрема, встановимо невизначеність енергії фізичної системи та часу її вимірювання. Зауважимо, що для вимірювання зміни частоти періодичного процесу необхідно мати певний проміжок часу. Теж саме можна сказати і про зміну енергії атома в досліді Штерна-Герлаха.

Нагадаємо коротко суть цього досліду. В однорідному магнітному полі сумарна сила, що діє на магнітний диполь $\vec{\mu}$, дорівнює нулю. В неоднорідному полі з напруженістю $\vec{H}(\vec{r})$ на диполь діє сила

$$F = \vec{\mu}(\nabla \vec{H}) = \mu_x \left(\frac{\partial H}{\partial x} \right) + \mu_y \left(\frac{\partial H}{\partial y} \right) + \mu_z \left(\frac{\partial H}{\partial z} \right).$$

Якщо поле $\vec{H}$ направити вздовж осі OZ, то диполь буде прецесіювати навколо поля, а середні значення $\mu_x = \mu_y = 0$, тому середня сила

$$\bar{F} = \mu_z \frac{\partial H}{\partial z} = \mu \cos(\vec{\mu}, \vec{H}) \frac{\partial H}{\partial z}. \quad (4.2)$$

Якщо $\cos(\vec{\mu}, \vec{H}) > 0$, то сила напрямлена вздовж поля, коли ж $\cos(\vec{\mu}, \vec{H}) < 0$ – в протилежному напрямку.

Під час досліду тонкий пучок атомів срібла пропускався у перпендикулярному до поля напрямку. Пучок розщеплювався на два, що доводило просторове квантування магнітного і орбітального моментів атома. Можна довести, що похибка

зміни енергії атома в цьому досліді тим більша, чим коротший проміжок часу, протягом якого на атом діє відхиляюча сила $\vec{F}$.

Аналіз показує, що потік частинок (атомів) буде відхилятися від осі руху на малий кут (α). Він визначається похибкою вимірювання енергії (ΔE), часом її вимірювання (Δt), а також імпульсом частинок (p) та шириною пучка (d) – розмірами діафрагми:

$$\alpha = \frac{\Delta E \Delta t}{pd} \quad (4.3)$$

Врахуємо тепер те, що атоми характеризуються хвильовими властивостями. Зрозуміло, що для фіксації ефекту необхідно, щоб кут відхилення α був більшим за дифракційний кут відхилення на щілині шириною d , тобто $\frac{\lambda}{d}$. Отримуємо нерівність

$$\frac{\Delta E \Delta t}{pd} \geq \frac{\lambda}{d}, \text{ де } \lambda = \frac{h}{p}. \quad (4.4)$$

З формули (4.4) видно, що

$$\Delta E \Delta t \geq h. \quad (4.5)$$

Це співвідношення називають співвідношення невизначеностей для енергії та часу.

Не дивлячись на формальну подібність (4.5) та (4.1) вони, по суті, досить різні, але обидва співвідношення мають фундаментальний характер. Зокрема, для квазістаціонарного стану, який існує середній час τ (збуджений стан атома, радіоактивне атомне ядро), ширина квазістаціонарного рівня енергії ΔE визначається з умови

$$\Delta E \approx \frac{h}{\tau}. \quad (4.6)$$

Варто ще раз зазначити, що умови (4.1), (4.5) отримані не строгими математичними перетвореннями, а на основі аналізу фізичних експериментів. Вони вказують на те, що добуток невизначеностей відповідних фізичних величин завжди залишається більшим за деяку величину порядку сталої Планка. Тому зазначені нерівності можна записати через сталу $\hbar = \frac{h}{2\pi}$:

$$\Delta p \Delta q \geq \hbar, \quad \Delta E \Delta t \geq \hbar. \quad (4.6)$$

Точний вираз для співвідношення невизначеностей фізичних величин буде отримано пізніше.

§ 5. Принцип суперпозиції станів

Наступним постулатом квантової механіки є принцип суперпозиції станів. Згідно з цим принципом, **коли система може перебувати в станах з хвильовими функціями $\psi_1, \psi_2, \dots$, то обов'язково в системі існує стан з хвильовою функцією**

$$\psi = \sum_k C_k \psi_k, \quad (5.1)$$

де C_k – комплексні числа. Якщо ці стани відрізняються незначно, тобто один стан неперервно переходить в інший, то рівняння (5.1) можна записати так:

$$\psi = \int C_F \psi_F dF. \quad (5.2)$$

Якщо частина станів змінюється в системі дискретно, а частина неперервно, то принцип суперпозиції станів записується як через суму, так і через інтеграл:

$$\psi = \sum_k C_k \psi_k + \int C_F \psi_F dF. \quad (5.3)$$

Другим положенням принципу суперпозиції є те, що **домноженням хвильової функції системи на відмінне від нуля число, ми не змінюємо стан системи.**

З принципу суперпозиції станів можна зробити деякі висновки:

1. Якщо функції ψ_1, ψ_2 є розв'язком деякого диференціального рівняння, то це рівняння повинно бути лінійним.
2. Принцип суперпозиції стверджує, що коефіцієнти C_k задають «вагу» станів ψ_k . Іншими словами, для конкретного k величина $C_k^* C_k = |C_k|^2 = W_k$ – це отримана на основі вимірювань ймовірність реалізації стану ψ_k , коли система перебуває у стані ψ . Якщо k змінюється неперервно, то $|C_k|^2 dk = dW_k$ – ймовірність реалізації станів з $[k, k + dk]$ в стані ψ .
3. Якщо хвильова функція дорівнює нулю в будь-якій точці конфігураційного простору, то це означає, що такого стану в системі не існує.

§ 6. Нормування хвильової функції вільної частинки

Хвильова функція для вільної частинки має вигляд (хвиля де Бройля):

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (6.1).$$

$\vec{p} = \hbar \vec{k}$, $\vec{k}$ – задає напрям руху частинки. Отже,

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i\left(\frac{\vec{p}}{\hbar} \vec{r} - \alpha t\right)}, \quad (6.2)$$

а енергія частинки дорівнює:

$$E = \hbar \nu = 2\pi \hbar \nu = \hbar \omega.$$

В цьому легко переконатись, якщо підставити хвильову функцію (6.1), (6.2) у рівняння Шредінгера (2.26), враховуючи, що $V(r) = 0$. Інтеграл від квадрату модуля функції (6.1) є розбіжним:

$$\int_V \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) dV = A^* e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \alpha t)} A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \alpha t)} = \int_V |A|^2 dV = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz = \infty. \quad (6.3)$$

Зупинимося детально, як нормувати хвильову функцію вільної частинки. Для цього спростимо задачу і розглянемо випадок, коли частинка має одну ступінь вільності:

$$\psi_k = B e^{i(kx - \alpha t)}, \quad (6.4)$$

тобто частинка рухається вздовж осі ОХ. Нехай вона рухається в обмеженому просторі у великій області $x \in \left[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right]$. Тоді умова (6.3) перейде в умову нормування хвильової функції на одиницю:

$$|B|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dx = 1 \quad (6.5)$$

Отже,

$$|B|^2 L = 1; \quad B = \sqrt{\frac{1}{L}}.$$

Нормована хвильова функція має вигляд:

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(kx - \alpha t)}. \quad (6.6)$$

Для того, щоб врахувати можливість руху частинки в просторі $x \in (-\infty, \infty)$, припустимо, що виконується умова:

$$\psi(x) = \psi(x + L). \quad (6.7)$$

З рівняння (6.7) отримаємо:

$$\frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(kx - \alpha t)} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(k(x+L) - \alpha t)} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(kx - \alpha t)} e^{ikL}$$

або

$$e^{ikL} = 1. \quad (6.8)$$

Згідно з формулою Ейлера $e^{\pm i\alpha} = \cos \alpha \pm i \sin \alpha$, тому умова (6.8) зведеться до наступної:

$$\cos kL + i \sin kL = 1 + i \cdot 0$$

Маємо систему рівнянь

$$\begin{cases} \cos kL = 1 \\ \sin kL = 0, \end{cases}$$

спільний розв'язок якої є наступним:

$$k = \frac{2\pi}{L} n. \quad (6.9)$$

Отже, якщо виконується умова (6.7), то в цьому випадку хвильовий вектор буде змінюватись стрибкоподібно, але зміна його буде маленька, оскільки L велика. Бачимо, що k змінюється квазідискретно (квазінеперервно).

Для частинки, яка має три ступені вільності, хвильову функцію можна записати так:

$$\psi_{\vec{k}} = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})e^{-i\omega t},$$

$$\text{де } \varphi_{\vec{k}}(r) = Ae^{i\vec{k}\vec{r}} = Ae^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = Ae^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = \frac{1}{A^{1/3}} e^{ik_x x} \frac{1}{A^{1/3}} e^{ik_y y} \frac{1}{A^{1/3}} e^{ik_z z}.$$

Враховуючи «рівноправність» всіх напрямків, маємо

$$A^{1/3} = B = \frac{1}{\sqrt{L}},$$

$$\text{тому } A = \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{1}{\sqrt{L}} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} = \frac{1}{\sqrt{V}}.$$

Хвильова функція частинки, яка рухається у просторі великого об'єму має вигляд:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad V = L^3. \quad (6.10)$$

Компоненти хвильового вектора задаються рівняннями:

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z.$$

Запишемо хвилю де Бройля через імпульс частинки:

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}}. \quad (6.11)$$

Зазначимо, що хвильова функція (6.11) описує вільну частинку з заданим значенням імпульсу $\vec{p}$. Функції (6.10), (6.11) утворюють повну систему функцій, тому хвильову функцію будь-якого стану можна розкласти по цій системі функцій (розклад Фур'є):

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} C_{\vec{p}} \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}). \quad (6.12)$$

Згідно з принципом суперпозиції станів $|C_{\vec{p}}|^2$ – задає ймовірність того, що в стані ψ частинка має імпульс $\vec{p}$.

§ 7. Середні значення фізичних величин (динамічних змінних)

Розглянемо випадок одновимірного руху частинки. Тоді ймовірність того, що координата x знаходиться в області $x, x + dx$ дорівнює:

$$|\psi(x, t)|^2 dx = dW(x). \quad (7.1)$$

Виходячи з основ теорії ймовірностей, маємо, що середнє значення координати x у випадку довільного руху частинки в просторі можна записати так:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x, t)|^2 dx = \bar{x}, \quad (7.2)$$

$$\int_V x |\psi(\vec{r})|^2 dV = \bar{x} = \langle x \rangle. \quad (7.3)$$

Аналогічно $\int_V \psi^*(\vec{r}) y \psi(\vec{r}) dy = \bar{y} = \langle y \rangle$, $\int_V \psi^*(\vec{r}) z \psi(\vec{r}) dz = \bar{z} = \langle z \rangle$.

Середнє значення потенціальної енергії представляється формулою:

$$\int \psi^*(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi(\vec{r}) dV = \bar{U}. \quad (7.4)$$

Знову розглянемо випадок, коли частинка має одну ступінь вільності $\psi = \psi(x)$. Необхідно визначити середнє значення імпульсу. Для цього розкладемо функцію $\psi(x)$ по плоских хвилях (хвилях де Бройля):

$$\psi(x) = \sum_{p_x} C_{p_x} \varphi_{p_x}(x) \quad (7.5)$$

де $\varphi_{p_x}(x) = e^{i \frac{p_x}{\hbar} x}$. Згідно з принципом суперпозиції $|C_{p_x}|^2 = W(p_x)$ задає ймовірність того, що частинка у стані ψ має імпульс p_x , тому

$$\langle p_x \rangle = \sum |C_{p_x}|^2 p_x. \quad (7.6)$$

Щоб записати (7.6) у такій же формі, як (7.2)-(7.4), необхідно провести ряд математичних перетворень. Доведемо ортогональність функцій $\varphi_{p'_x}$ і φ_{p_x} ($p'_x \neq p_x$).

Обчислимо

$$\begin{aligned} \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_{p'_x}^* \varphi_{p_x}(x) dx &= \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-ik'_x x} e^{ik_x x} dx = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} e^{i(k'_x - k_x)x} dx = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{e^{-i(k'_x - k_x)x} d(-i(k'_x - k_x)x)}{-i(k'_x - k_x)} = \\ &= \frac{1}{L} \frac{e^{-i(k'_x - k_x)x}}{-i(k'_x - k_x)} \Big|_{-L/2}^{L/2} = \frac{1}{L} \frac{e^{-i(k'_x - k_x)L/2} - e^{i(k'_x - k_x)L/2}}{-i(k'_x - k_x)} = \frac{1}{L} \frac{e^{-i\left(\frac{2\pi}{L}n' - \frac{2\pi}{L}n_x\right)\frac{L}{2}} - e^{i\left(\frac{2\pi}{L}n' - \frac{2\pi}{L}n_x\right)\frac{L}{2}}}{i(k'_x - k_x)} = 0, \end{aligned}$$

бо в чисельнику виразу косинуси скорочуються, а залишаються лише $\sin 2\pi(n'_x - n_x) = 0$.

Нами доведено, що хвилі де Бройля є нормованими, тому

$$\int_{-L/2}^{L/2} \varphi_{p'_x}^*(x) \varphi_{p_x}(x) dx = \begin{cases} 1, & k'_x = k_x \\ 0, & k'_x \neq k_x \end{cases} = \delta_{p'_x, p_x}. \quad (7.7)$$

Для того, щоб знайти C_p , домножимо рівняння (7.5) на $\varphi_{p'_x}^*$ та проінтегруємо по всій

області $x \in \left[-\frac{x}{2}, \frac{x}{2}\right]$:

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi(x) \varphi_{p'_x}^*(x) dx = \sum_{p_x} C_{p_x} \int \varphi_{p'_x}^*(x) \varphi_{p_x}(x) dx = \sum_{p_x} C_{p_x} \delta'_{p'_x, p_x} = C_{p'_x} \quad (7.8)$$

Отже,

$$C_{p'_x} = \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_{p'_x}^*(x) \psi(x) dx. \quad (7.9)$$

Тоді маємо, що

$$C_{p_x}^* C_{p_x} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{p_x}(x) \psi^*(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{p_x}^*(x') \psi(x') dx'. \quad (7.10)$$

Підставимо (7.10) у рівняння (7.2). Після ряду перетворень можна отримати, що

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx. \quad (7.11)$$

Аналогічно $\langle p_y \rangle$ ми можемо знайти, якщо хвильова функція буде залежати від y або від $\vec{r}$. Іншими словами, маємо, що

$$\langle p_y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(\vec{r}) dV, \quad (7.12)$$

$$\text{або } \langle p_z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\vec{r}) \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi(\vec{r}) dV. \quad (7.13)$$

Величини, які є в дужках під інтегралами називають операторами відповідних проекцій імпульса. Зокрема, $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ – оператор x -ої проекції імпульсу, $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ – оператор y -ої проекції імпульсу, $\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ – оператор z -ої проекції імпульсу.

Тоді формули (7.11)-(7.13) можна записати так:

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{p}_x \psi(\vec{r}) dV, \quad \langle p_y \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{p}_y \psi(\vec{r}) dV, \quad \langle p_z \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{p}_z \psi(\vec{r}) dV. \quad (7.14)$$

Отже, можна ввести оператор імпульсу

$$\hat{\vec{p}} = \vec{i}\hat{p}_x + \vec{j}\hat{p}_y + \vec{k}\hat{p}_z, \quad (7.15)$$

який буде мати вигляд:

$$\hat{\vec{p}} = \vec{i}\hat{p}_x + \vec{j}\hat{p}_y + \vec{k}\hat{p}_z = -i\hbar \left(\vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \vec{\nabla}. \quad (7.16)$$

Сформулюємо ще один постулат квантової механіки. **Кожній фізичній величині ставиться у відповідність оператор цієї величини. Знаючи його, можна визначити середнє значення цієї фізичної величини (динамічної змінної) за формулою:**

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau, \quad (7.17)$$

Отже, імпульсу ставимо у відповідність оператор

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}.$$

Згідно з постулатом у стані $\psi(\vec{r})$ середнє значення імпульсу дорівнює

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \psi^* (-i\hbar) \left(\vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi dV = \int \psi^* \hat{\vec{p}} \psi dV.$$

Відповідно до формул (7.2)-(7.4), оператор координати дорівнює самій координаті і оператор будь-якої функції від координати (наприклад потенціальної енергії) дорівнює самій функції від координати:

$$\hat{x} \equiv x, \quad \hat{\vec{r}} \equiv \vec{r}, \quad \hat{U}(\vec{r}) \equiv U(\vec{r}). \quad (7.18)$$

Кінетичній енергії частинки ставимо у відповідність оператор цієї фізичної величини. Отже,

$$E_k = T = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}.$$

Запишемо середнє значення кінетичної енергії:

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \int \psi^* \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla) (-i\hbar \nabla) \psi dV = \int \psi^* \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi dV = \int \psi^* \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi dV, \quad (7.19)$$

де $\nabla^2 \equiv \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа. Тому

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}. \quad (7.20)$$

Запишемо, згідно встановленого правила, оператор повної енергії частинки. Функція Гамільтона класичної частинки має вигляд:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + U.$$

Тоді повний оператор функції Гамільтона (гамільтоніан) представиться формулою:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U. \quad (7.21)$$

Аналогічну процедуру можна провести і для моменту імпульсу частинки. Тоді $\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}}$ – оператор моменту імпульсу частинки. Запишемо $\hat{\vec{L}}$ через його координати:

$$\hat{\vec{L}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} = \vec{i} (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) - \vec{j} (x\hat{p}_z - z\hat{p}_x) + \vec{k} (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x). \quad (7.22)$$

Маємо:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (7.23)$$

§ 8. Оператори квантової механіки. Властивості операторів

Познайомимося ближче з таким математичним поняттям, як оператор. Зрозуміло, що в результаті дії оператора $\hat{A}$ на деяку функцію f з класу функцій, на якому визначений оператор, ми отримаємо нову функцію g з цього ж класу:

$$\hat{A}f = g. \quad (8.1)$$

Наприклад, якщо $\hat{A} = \frac{d}{dx}$, $f = x^2$ – функція диференційована, то

$$\frac{d}{dx} x^2 = \frac{dx^2}{dx} = 2x.$$

Встановимо, як діє сума та добуток двох операторів. Для суми операторів $\hat{A}$ і $\hat{B}$ маємо рівняння:

$$(\hat{A} + \hat{B})f = \hat{A}f + \hat{B}f. \quad (8.2)$$

Результат дії добутку цих операторів залежить, взагалі кажучи, від порядку операторів

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}f &= \hat{A}(\hat{B}f) = \hat{A}f_1 = f_2, \\ \hat{B}\hat{A}f &= \hat{B}(\hat{A}f) = \hat{B}g_1 = g_2. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Можна підібрати два оператори ($\hat{C}$ і $\hat{D}$), які діють на будь-яку функцію f так, що виконується умова

$$\hat{C}\hat{D}f = \hat{D}\hat{C}f \quad (8.4)$$

Якщо виконується рівняння (8.4), то кажуть, що оператори $\hat{C}$ і $\hat{D}$ комутують між собою. Варто ввести оператор, який будемо називати комутатором двох операторів:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (8.5)$$

Якщо $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, то можна записати операторне рівняння $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \neq 0$. Ці умови означають, що оператори не комутують між собою. Коли ж $[\hat{A}, \hat{B}]f = 0$ ($[\hat{A}, \hat{B}] = 0$), то оператори комутують між собою. Зважаючи на те, що комутатори часто використовуються, розглянемо детальніше властивості комутаторів:

$$\text{А)} \quad [\hat{A}, c\hat{B}] = c[\hat{A}, \hat{B}], \text{ де } c \text{ – комплексне число;} \quad (8.6)$$

$$\text{Б)} \quad [\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]; \quad (8.7)$$

$$B) \quad [\hat{A}\hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]; \quad (8.8)$$

$$Г) \quad [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}. \quad (8.9)$$

Варто зазначити, що всі оператори фізичних величин є **лінійними** операторами. Оператор називається лінійним, якщо виконуються умови: а) $\hat{A}(cf) = c\hat{A}f$; б) $\hat{A}(f + g) = \hat{A}f + \hat{A}g$, де c – комплексне число. Ці дві умови можна замінити однією:

$$\hat{A}(c_1 f + c_2 g) = c_1 \hat{A}f + c_2 \hat{A}g. \quad (8.10)$$

Важливу роль у квантовій механіці відіграють **ермітові (самоспряжені)** оператори. Щоб встановити, чи оператор є ермітовим, треба знати, як для заданого оператора $\hat{A}$ знайти його ермітовоспряжений – $\hat{A}^+$.

Ермітово спряжений оператор знаходиться з наступного інтегрального рівняння:

$$\int \psi^* \hat{A}^* \varphi d\tau = \int \varphi \hat{A}^+ \psi^* d\tau \quad (8.11)$$

де $d\tau$ – елемент об'єму, $\hat{A}^*$ – оператор, комплексноспряжений до $\hat{A}$. У загальному випадку $\hat{A}^+ \neq \hat{A}$, але є такі оператори, для яких $\hat{A}^+ = \hat{A}$. Тоді $\hat{A}$ називається самоспряженим (ермітовим) оператором.

Доведемо, що оператори фізичних величин є самоспряженими. Згадаємо, що для середнього значення фізичної величини в стані ψ

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau. \quad (8.12)$$

Здійснимо операцію комплексного спряження правої та лівої частин рівняння (8.12).

Отримаємо

$$\langle A \rangle^* = \int \psi \hat{A}^* d\psi^* d\tau. \quad (8.13)$$

Середні значення фізичних величин, як і самі величини, є дійсними, тому

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle^*.$$

Отже, з рівнянь (8.12) і (8.13) отримаємо

$$\int \psi \hat{A}^* \psi^* d\tau = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau. \quad (8.14)$$

Згідно з означенням для ермітовоспряженого оператора (8.11)

$$\int \psi \hat{A}^* \psi^* d\tau = \int \psi^* \hat{A}^+ \psi d\tau. \quad (8.15)$$

Ліві частини рівнянь (8.14) і (8.15) однакові, тому $\hat{A}^+ = \hat{A}$ – оператор фізичної величини $\hat{A}$ є ермітовим.

§ 9. Власні функції та власні значення операторів фізичних величин

Повернемося ще раз до формули для середнього значення фізичної величини і до відповідного постулату квантової механіки

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau. \quad (9.1)$$

Формулу (9.1) потрібно інтерпретувати наступним чином: для квантово-механічної системи, взагалі кажучи, не можна визначити точно фізичну величину в деякому стані ψ , оскільки в результаті повторного вимірювання величини A ми отримаємо різні значення. Нехай $A_1, A_2, A_3, \dots$ – значення величин A , які зафіксував прилад при вимірюванні, а $n_1, n_2, n_3, \dots$ – число показів приладу відповідного значення: $A_1 - n_1, A_2 - n_2, A_3 - n_3, \dots$.

Якщо провести експеримент дуже велику кількість разів (система перед кожним експериментом знаходиться в стані ψ), то отримаємо середнє значення згідно формули:

$$\frac{n_1 A_1 + n_2 A_2 + \dots}{n_1 + n_2 + \dots} = \langle A \rangle. \quad (9.2)$$

Так потрібно знаходити $\langle A \rangle$ з експериментальних вимірювань. Квантова механіка дає відповідь, як теоретично знайти $\langle A \rangle$, якщо відома хвильова функція стану (див. формулу (9.1)).

Виникає питання: чи існують такі стани, в яких би при вимірюванні фізичної величини отримувалось одне і те ж значення?

$$A_1 = A_2 = A_3 = \dots \equiv A.$$

Для відповіді на поставлене питання введемо

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle, \quad (9.3)$$

назвавши цю величину середньо-квадратичним відхиленням A .

З означення (9.3) видно, що коли середньо-квадратичне відхилення фізичної величини A дорівнює нулю, то в цьому стані $A = \langle A \rangle$, тобто при вимірюванні

отримуємо одне і те ж значення. Проблема зводиться до знаходження хвильової функції тих станів, для яких $\langle (\Delta A)^2 \rangle = 0$. Розпишемо $\langle (\Delta A)^2 \rangle$ згідно з формулою (9.1):

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \int \psi^* (\Delta \hat{A})^2 \psi d\tau = \int \psi^* (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \psi d\tau. \quad (9.4)$$

Оператор $\hat{A}$ є ермітовим як оператор фізичної величини. Зрозуміло, що при відніманні від оператора числа, ми не змінимо цієї властивості. Отже,

$$\hat{A} - \langle A \rangle = (\hat{A} - \langle A \rangle)^+ \text{ або } \Delta \hat{A} = (\Delta \hat{A})^+. \quad (9.5)$$

Використаємо (9.5) у рівнянні (9.4):

$$\begin{aligned} \langle (\Delta A)^2 \rangle &= \int \psi^* (\hat{A} - \langle A \rangle) (\hat{A} - \langle A \rangle) \psi d\tau = \int \psi^* (\hat{A} - \langle A \rangle)^+ (\hat{A} - \langle A \rangle) \psi d\tau = \\ &= \int (\hat{A} - \langle A \rangle)^* \psi^* (\hat{A} - \langle A \rangle) \psi d\tau = \int [(\hat{A} - \langle A \rangle) \psi]^* [(A - \langle A \rangle) \psi] d\tau = \int |(\hat{A} - \langle A \rangle) \psi|^2 d\tau \geq 0. \end{aligned} \quad (9.6)$$

Як і варто було очікувати, середньоквадратичне відхилення не може бути від'ємним, бо підінтегральна функція не від'ємна ($|(\hat{A} - \langle A \rangle) \psi|^2 \geq 0$). Величина

$\langle (\Delta A)^2 \rangle = 0$ тоді, коли $|(\hat{A} - \langle A \rangle) \psi|^2 = 0$ або

$$(\hat{A} - \langle A \rangle) \psi = 0. \quad (9.7)$$

Отже, якщо ψ є розв'язком рівняння (9.7), то в такому стані при вимірюванні величини A одержуємо весь час одне і теж значення. Для простоти позначимо це значення такою ж буквою: $\langle A \rangle \equiv A$. Рівняння (9.7) можна записати як

$$\hat{A} \psi = A \psi. \quad (9.8)$$

Рівняння виду (9.8) у математиці отримало назву рівняння на власні функції і власні значення. **Сукупність власних значень оператора утворює спектр оператора.** Власні значення можуть змінюватись дискретно і неперервно. В першому випадку спектр є дискретним, а в другому – неперервним. Для дискретного спектру, коли власні значення $\hat{A}$ можуть дорівнювати $A_1, A_2, A_3, \dots, A_n, \dots$, рівняння (9.8) будемо записувати у вигляді:

$$\hat{A} \psi_n = A_n \psi_n, \quad (9.9)$$

де $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_n, \dots$ – власні функції $\hat{A}$. Якщо спектр оператора неперервний, то рівняння (9.8) буде наступним:

$$\hat{A} \psi_A = A \psi_A. \quad (9.10)$$

В обох рівняннях (9.9) і (9.10) зазначено, що кожному власному значенню оператора відповідає принаймні одна власна функція оператора. Якщо кожному власному значенню відповідає лише одна функція, то спектр оператора вважається не виродженим. В іншому випадку спектр вироджений. Тоді рівняння (9.9) можна записати так:

$$\hat{A}\psi_{n\alpha_n} = A_n\psi_{n\alpha_n}, \quad (9.11)$$

де α_n приймає різні значення для різних A_n .

Ще раз повернемося до формули (9.2), яка задає середнє значення фізичної величини на основі вимірювань. Чи мають величини $A_1, A_2, A_3, \dots, A_n, \dots$ якесь відношення до власних значень оператора $\hat{A}$? Відповідь на поставлене питання можна знайти в наступному постулаті квантової механіки: **при вимірюванні фізичної величини отримуємо лише такі її значення, які входять до множини власних значень оператора цієї фізичної величини.** Іншими словами – **за кожним виміром отримане значення величини буде одним із спектру оператора цієї величини.**

§ 10. Властивості власних функцій оператора

Перш ніж проаналізувати властивості власних функцій операторів фізичних величин, зазначимо, що власні значення таких операторів є дійсними. Цей результат є наслідком наведеного вище постулату, бо вони збігаються з результатами вимірювань (прилад вимірює дійсні величини). Дійсність власних значень можна вивести, використовуючи ермітовість операторів фізичних величин. . Отже , $A_n = A_n^*$ ($A = A^*$).

1. Покажемо тепер, що власні функції операторів з дискретним спектром можна нормувати на одиницю. Для кожної з власних функцій таких операторів завжди справедлива умова, що інтеграл нормування є обмеженим:

$$\int \psi_n^* \psi_n d\tau = N < +\infty. \quad (10.1)$$

Інтегрування ведеться по всій області визначення функцій ψ_n . Ми можемо перейти до інших власних функцій оператора, які будуть нормовані на одиницю. Перш за все покажемо, що функція:

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \psi_n \quad (10.2)$$

також буде власною функцією оператора. Дійсно, якщо ψ_n є розв'язком рівняння

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n, \quad (10.3)$$

то, виходячи з (10.2), справедливе рівняння

$$\hat{A}(\sqrt{N}\varphi_n) = A_n\sqrt{N}\varphi_n,$$

або

$$\sqrt{N}\hat{A}\varphi_n = \sqrt{N}A_n\varphi_n,$$

тому

$$\hat{A}\varphi_n = A_n\varphi_n. \quad (10.4)$$

Отже, φ_n є також власною функцією оператора $\hat{A}$. Запишемо тепер умову нормування для φ_n , використовуючи рівняння (10.2) та (10.1):

$$\int \varphi_n^* \varphi_n d\tau = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\sqrt{N}} \int \psi_n^* \psi_n d\tau = \frac{N}{\sqrt{N}\sqrt{N}} = 1. \quad (10.5)$$

Таку процедуру можна проробити з усіма власними функціями оператора, тому надалі будемо вважати, що всі власні функції є нормованими на одиницю.

2. Наступна властивість φ_n : власні функції, які відповідають різним власним значенням, ортогональні між собою. Нагадаємо, що функції f і g є ортогональними, якщо виконуються умови:

$$\int f^* g d\tau = \int f g^* d\tau = 0.$$

Отже, потрібно довести: $\int \varphi_n^* \varphi_m d\tau = 0$, якщо $n \neq m$. Для доведення розглянемо рівняння для власних функцій φ_n та φ_m оператора $\hat{A}$ з не виродженим спектром:

$$\hat{A}\varphi_n = A_n\varphi_n, \quad (10.6)$$

$$\hat{A}\varphi_m = A_m\varphi_m. \quad (10.7)$$

Запишемо рівняння комплексно спряжене до (10.6):

$$\hat{A}^* \varphi_n^* = A_n^* \varphi_n^*, \quad (6')$$

оскільки $A_n = A_n^*$. Домножимо рівняння (10.7) зліва на φ_n^* , а рівняння (10.6') – на φ_m .

Отримані після перемноження рівняння інтегруємо по всій області:

$$\int \varphi_n^* \hat{A} \varphi_m d\tau = A_m \int \varphi_n^* \varphi_m d\tau, \quad (10.8)$$

$$\int \varphi_m \hat{A}^* \varphi_n^* d\tau = A_n \int \varphi_m \varphi_n^* d\tau. \quad (10.9)$$

Оператор $\hat{A}$ є самоспряженим ($\hat{A} = \hat{A}^+$). Якщо це врахувати у лівій частині (10.8), то бачимо, що ліві частини (10.8) і (10.9) однакові:

$$\int \varphi_n^* \hat{A} \varphi_m d\tau = \int \varphi_n^* \hat{A}^+ \varphi_m d\tau = \int \varphi_m \hat{A} \varphi_n^* d\tau. \quad (10.11)$$

Віднімемо від рівняння (10.8) рівняння (10.11). Отримаємо

$$(A_n - A_m) \int \varphi_n^* \varphi_m d\tau = 0.$$

Нагадаємо, що для простоти було розглянуто випадок не виродженого спектру, тому коли $n \neq m$, то $A_n \neq A_m$. Отже, ми довели, що φ_n і φ_m є ортогональними між собою:

$$\int \varphi_n^* \varphi_m d\tau = 0, \quad n \neq m. \quad (10.12)$$

Умови (10.5) та (10.12) можна об'єднати одним рівнянням:

$$\int \varphi_n^* \varphi_m d\tau = \delta_{n,m}, \quad (10.13)$$

де $\delta_{n,m} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}$ – δ -символ Кронекера. Рівняння (10.13) будемо називати умовою

ортонормованості власних функцій оператора. Можна довести, що такою ж властивістю характеризуються і власні функції оператора з виродженим спектром. Тоді умову (10.13) потрібно переписати у вигляді:

$$\int \varphi_{n\alpha}^* \varphi_{m\beta} d\tau = \delta_{n,m} \delta_{\alpha,\beta}.$$

3. Третя властивість полягає в тому, що сукупність власних функцій оператора утворюють повну систему функцій. Це означає, що будь-яку функцію ψ можна розкласти по цій системі функцій φ_n ($n=1,2,3,\dots$):

$$\psi = \sum_n C_n \varphi_n. \quad (10.14)$$

З умови (10.14) однозначно визначаються коефіцієнти C_n . Дійсно, домножимо (10.14) на φ_m^* і проінтегруємо по всій області визначення. Отримаємо

$$\int \varphi_m^* \psi d\tau = \sum_n C_n \int \varphi_m^* \varphi_n d\tau = \sum_n C_n \delta_{m,n} = C_m.$$

Отже,

$$C_n = \int \varphi_n^* \psi d\tau, \quad n=1,2,3,\dots \quad (10.15)$$

4. Можна довести також, що для функцій $\varphi_n(x)$ справедлива наступна властивість:

$$\sum_n \varphi_n^*(x) \varphi_n(x') = \delta(x - x'), \quad (10.16)$$

де $\delta(x)$ – δ -функція Дірака.

Розглянемо тепер властивості власних функцій оператора з неперервним спектром:

$$\hat{A}\varphi_A = A\varphi_A. \quad (10.17)$$

В цьому випадку

$$\int \varphi_A^* \varphi_A d\tau = \infty.$$

Такі функції не можна нормувати на одиницю. Тому для цих функцій вибирають умову нормування в наступному вигляді:

$$\int \varphi_A^* \varphi_{A'} d\tau = \delta(A' - A). \quad (10.18)$$

Її називають умовою нормування на δ -функцію Дірака. Зауважимо, що (10.18) нагадує нам умову ортонормованості (10.13) для власних хвильових функцій операторів з дискретним спектром.

Функції φ_A при різних A утворюють повну систему функцій, тому будь-яку функцію ψ можна розкласти за цією системою функцій:

$$\psi = \int C_A \varphi_A dA. \quad (10.19)$$

Аналогічно можна знайти коефіцієнт C_A , домножуючи (10.19) на φ_A^* та інтегруючи отримане рівняння по всій області визначення:

$$\int \psi \varphi_A^* d\tau = \int dA C_A \left(\int \varphi_A^* \varphi_A d\tau \right) = \int dA C_A \delta(A' - A) = C_{A'}$$

Отже,

$$C_{A'} = \int \psi \varphi_{A'}^* d\tau. \quad (10.20)$$

Властивість, записана у вигляді (10.16) для дискретного спектру, тепер набуде наступного вигляду:

$$\int dA \varphi_A^*(x) \varphi_A(x') = \delta(x - x'). \quad (10.21)$$

§ 11. Умови точного вимірювання двох фізичних величин

Нагадаємо, що рівняння на власні значення і власні функції оператора фізичної величини дають можливість визначити хвильові функції тих станів, в яких відповідна фізична величина є однозначно визначеною. Нехай нас цікавлять дві фізичні величини A і B . Чи можна виміряти в певному стані точно ці величини A і B ? Зрозуміло, що для цього φ_n повинна бути власною функцією як оператора $\hat{A}$, так і оператора $\hat{B}$.

$$\hat{A}\varphi_n = A_n\varphi_n, \quad (11.1)$$

$$\hat{B}\varphi_n = B_n\varphi_n. \quad (11.2)$$

Чи можуть існувати в системі такі стани, в яких дві фізичні величини можна точно виміряти? Відповідь на ці питання дає наступна теорема.

Для того, щоб дві фізичні величини можна було точно виміряти, необхідно і достатньо аби оператори цих фізичних величин комутували між собою. Доведемо цю теорему.

Нехай умови (11.1) і (11.2) виконуються. Покажемо, що тоді $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Подіємо комутатором $[\hat{A}, \hat{B}]$ на будь-яку функцію φ . Скористаємось тим, що власні функції φ_n утворюють повну систему функцій, тому врахуємо, що $\varphi = \sum_n C_n \varphi_n$. Отже,

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}]\varphi &= [\hat{A}, \hat{B}] \sum_n C_n \varphi_n = \sum_n C_n [\hat{A}, \hat{B}] \varphi_n = \sum_n C_n (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \varphi_n = \\ &= \sum_n C_n (\hat{A}\hat{B}\varphi_n - \hat{B}\hat{A}\varphi_n) = \sum_n C_n (A_n B_n \varphi_n - B_n A_n \varphi_n) = \sum_n C_n (B_n A_n \varphi_n - A_n B_n \varphi_n) = \sum_n C_n 0 = 0. \end{aligned}$$

Дійсно, оператори $\hat{A}$ і $\hat{B}$ комутують між собою.

Доведемо тепер обернену теорему. При виконанні умови

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad (11.3)$$

оператори $\hat{A}$ і $\hat{B}$ мають спільні власні функції, тобто існують стани, в яких можна точно вимірювати ці дві фізичні величини. Повернемося до рівняння (11.1), враховуючи при цьому, що $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Доведемо, що φ_n буде не тільки власною функцією $\hat{A}$, а і власною функцією $\hat{B}$. Для цього подіємо на праву і ліву частину рівняння (11.1) оператором $\hat{B}$:

$$\hat{B}\hat{A}\varphi_n = A_n\hat{B}\varphi_n. \quad (11.4)$$

У лівій частині рівняння (11.4) використаємо умову (11.3):

$$\hat{A}(\hat{B}\varphi_n) = A_n(\hat{B}\varphi_n). \quad (11.5)$$

Якщо порівняти (11.5) і (11.1), то видно, що $\hat{B}\varphi_n$ є також власною функцією $\hat{A}$, тому $\hat{B}\varphi_n$ може співпадати з φ_n або відрізнятися лише на сталий коефіцієнт. Позначимо його через B_n :

$$\hat{B}\varphi_n = B_n\varphi_n. \quad (11.6)$$

Рівняння (11.6) можна трактувати як рівняння на власні значення та власні функції оператора $\hat{B}$. Ми довели, що φ_n є власною функцією оператора $\hat{B}$.

§ 12. Невизначеність двох фізичних величин (принцип невизначеності Гайзенберга)

Нехай маємо дві фізичні величини K, L такі, що їх оператори не комутують між собою:

$$[\hat{K}, \hat{L}] = i\hat{M}. \quad (12.1)$$

З наведеної вище теореми зрозуміло, що в цьому випадку не існує станів, в яких можна точно виміряти дві фізичні величини. А що можна сказати про результати вимірювань цих величин? З якою точністю можна виміряти їх? Для відповіді на ці питання розглянемо допоміжний функціонал:

$$J(\alpha) = \int \left| (\alpha \Delta \hat{K} + i \Delta \hat{L}) \psi \right|^2 d\tau \geq 0, \quad (12.2)$$

де α — дійсне число,

$$\begin{aligned} \Delta \hat{K} &= \hat{K} - \langle K \rangle, \\ \Delta \hat{L} &= \hat{L} - \langle L \rangle. \end{aligned} \quad (12.3)$$

Оператори $\hat{K}$ і $\hat{L}$ є ермітовими, як оператори фізичних величин і

$$\hat{K}^+ = \hat{K}, \quad \hat{L}^+ = \hat{L}, \quad (12.4)$$

тому оператори $\Delta \hat{K}$ і $\Delta \hat{L}$ також самоспряжені:

$$(\Delta \hat{K})^+ = \Delta \hat{K}, \quad (\Delta \hat{L})^+ = \Delta \hat{L}. \quad (12.5)$$

Деталізуємо підінтегральну функцію в рівнянні (12.2):

$$J(\alpha) = \int \left[(\alpha \Delta \hat{K} + i \Delta \hat{L}) \psi \right]^* \left[(\alpha \Delta \hat{K} + i \Delta \hat{L}) \psi \right] d\tau = \int \left[(\alpha \Delta \hat{K}^* - i \Delta \hat{L}^*) \psi^* \right] \left[(\alpha \Delta \hat{K} + i \Delta \hat{L}) \psi \right] d\tau. \quad (12.6)$$

Використаємо самоспряженість операторів $\Delta \hat{K}$ і $\Delta \hat{L}$. Тоді маємо, що

$$J(\alpha) = \int \psi^* (\alpha \Delta \hat{K} - i \Delta \hat{L}) (\alpha \Delta \hat{K} + i \Delta \hat{L}) \psi d\tau,$$

або після перетворень

$$\begin{aligned} J(\alpha) &= \int \psi^* \left(\alpha^2 (\Delta \hat{K})^2 + i \alpha \Delta \hat{K} \Delta \hat{L} - i \alpha \Delta \hat{L} \Delta \hat{K} + \Delta \hat{L}^2 \right) \psi d\tau = \\ &= \int \psi^* \left(\alpha^2 (\Delta \hat{K})^2 + i \alpha [\Delta \hat{K}, \Delta \hat{L}] + (\Delta \hat{L})^2 \right) \psi d\tau. \end{aligned} \quad (12.7)$$

Спростимо комутатор $[\Delta \hat{K}, \Delta \hat{L}]$:

$$[\Delta \hat{K}, \Delta \hat{L}] \psi = (\Delta \hat{K} \Delta \hat{L} - \Delta \hat{L} \Delta \hat{K}) \psi = ((K - \langle K \rangle)(L - \langle L \rangle) - (L - \langle L \rangle)(K - \langle K \rangle)) \psi = [\hat{K}, \hat{L}] \psi = i \hat{M} \psi.$$

Тоді (12.7) запишеться у вигляді:

$$J(\alpha) = \int \psi^* \left(\alpha^2 (\Delta K)^2 + i \alpha i \hat{M} + (\Delta \hat{L})^2 \right) \psi d\tau. \quad (12.8)$$

Якщо згадати формулу для середнього значення фізичної величини, то

$$J(\alpha) = \alpha^2 \langle (\Delta K)^2 \rangle - \alpha \langle M \rangle + \langle (\Delta L)^2 \rangle \geq 0, \quad (12.9)$$

де $\langle (\Delta K)^2 \rangle$ і $\langle (\Delta L)^2 \rangle$ – середньо-квадратичні відхилення величин K і L . Утворимо в правій частині (12.9) повний квадрат:

$$\begin{aligned} J(\alpha) &= \langle (\Delta K)^2 \rangle \left(\alpha^2 - \frac{\langle M \rangle}{\langle (\Delta K)^2 \rangle} \alpha + \frac{\langle M \rangle^2}{4 \langle (\Delta K)^2 \rangle^2} \right) - \frac{\langle M \rangle^2}{4 \langle (\Delta K)^2 \rangle} + \langle (\Delta L)^2 \rangle, \\ J(\alpha) &= \langle (\Delta K)^2 \rangle \left(\alpha - \frac{\langle M \rangle}{2 \langle (\Delta K)^2 \rangle} \right)^2 + \langle (\Delta L)^2 \rangle - \frac{\langle M \rangle^2}{4 \langle (\Delta K)^2 \rangle} \geq 0. \end{aligned} \quad (12.10)$$

Нерівність (12.10) справедлива для будь-якого α . Виберемо α таким, щоб перший доданок дорівнював нулю. Тоді нерівність (12.10) запишеться в компактній формі:

$$(\Delta L)^2 \geq \frac{\langle M \rangle^2}{4 \langle (\Delta K)^2 \rangle}.$$

Запишемо її по-іншому:

$$\langle (\Delta K)^2 \rangle \langle (\Delta L)^2 \rangle \geq \frac{\langle M \rangle^2}{4}. \quad (12.11)$$

Нерівність (12.11) є надзвичайно важливою характеристикою квантово-механічної системи. Її можна трактувати наступним чином: **чим точніше ми визначаємо фізичну величину L , тим менш точно можна виміряти фізичну величину K , і навпаки.**

Введемо нові позначення:

$$\Delta K = \sqrt{\langle (\Delta K)^2 \rangle}, \Delta L = \sqrt{\langle (\Delta L)^2 \rangle}$$

І назвемо їх статистичними флуктуаціями результатів вимірювання відносно середнього значення величин K і L відповідно. Тоді добуток флуктуацій величин K і L задовольняють умові:

$$\Delta K \cdot \Delta L \geq \frac{\langle M \rangle}{2}.$$

Розглянемо приклад. Нехай $\hat{K} = x$, $\hat{L} = \hat{p}_x$. Відомо, що $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$, тобто x і $\hat{p}_x$ не комутують. З умови (12.11) видно, що

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (12.12)$$

Аналогічно можна записати інші нерівності

$$\langle (\Delta y)^2 \rangle \langle (\Delta p_y)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (12.13)$$

$$\langle (\Delta z)^2 \rangle \langle (\Delta p_z)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad (12.14)$$

де $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ – флуктуація результатів вимірювання координат та проекцій імпульса. Умови (12.12)-(12.14) називають нерівностями Гайзенберга. Вони є математичним записом принципу Гайзенберга: **чим точніше ми визначаємо координату частинки, тим менш точно можемо визначити відповідну проекцію її імпульсу.** Інколи під принципом Гайзенберга розуміють твердження про те, що в квантовій механіці не існує поняття траєкторії частинки.

§ 13. Теорія представлень (зображень)

1. Хвильова функція стану у різних зображеннях

Розглянемо квантову частинку, стан якої задається хвильовою функцією $\psi(\vec{r}, t)$. Знаючи її, можна визначити ймовірність знаходження частинки в об'ємі dV біля точки простору з радіус-вектором $\vec{r}$ в момент часу t :

$$dW = |\psi(r, t)|^2 dV.$$

Іншими словами, знаючи $\psi(\vec{r}, t)$, можна визначити ймовірність певного значення координати частинки. Тому надалі будемо вважати, що хвильова функція $\psi(\vec{r}, t)$ записана в координатному представленні (зображенні). Якщо хвильова функція залежить від координат, то вважається, що вона записана в координатному представленні, якщо вона є функцією енергії, то в енергетичному представленні, якщо ψ залежить від A , то тоді хвильова функція записана в A -му представленні. Щоб перейти від хвильової функції в координатному зображенні до хвильової функції цього ж стану в A -тому зображенні, розглянемо рівняння на власні функції оператора $\hat{A}$. Нехай оператор має дискретний спектр:

$$\hat{A}\varphi_n(\vec{r}) = A_n\varphi_n(\vec{r}). \quad (13.1)$$

Використаємо умову повноти системи власних функцій оператора $\hat{A}$:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n C_n \varphi_n(\vec{r}) \equiv \sum_n \psi(A_n) \varphi_n(\vec{r}). \quad (13.2)$$

Доведемо, що

$$\psi^*(A_n)\psi(A_n) = W(A_n) \quad (13.3)$$

задає ймовірність того, що при вимірюванні величини A отримаємо значення A_n .

Отже, в даному випадку $\psi(A_n)$ – хвильова функція того ж стану, що і $\psi(\vec{r})$, але в A -му представленні.

Для того, щоб знайти $\psi(A_m)$, домножимо (13.2) на $\varphi_m^*(\vec{r})$. Отримаємо

$$\int \varphi_m^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) dV = \sum_n \psi(A_n) \int \varphi_m^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) dV. \quad (13.4)$$

Врахуємо, що

$$\int \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_m(\vec{r}) dV = \delta_{n,m}. \quad (13.5)$$

Підставимо (13.5) у (13.4):

$$\psi(A_m) = \int \varphi_m^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) dV. \quad (13.6)$$

Використовуючи (13.2) і (13.5), можна отримати, що середнє значення величини A дорівнює:

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(r) \hat{A} \psi(\vec{r}) dV = \sum_n A_n |\psi(A_n)|^2 = \sum_n W_n A_n. \quad (13.7)$$

Доведемо (13.7). Маємо, що

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(r) \hat{A} \psi(\vec{r}) dV = \sum_{n,m} \psi^*(A_n) \psi(A_m) \int \varphi_n^*(\vec{r}) \hat{A} \varphi_m(\vec{r}) dV. \quad (13.8)$$

Використаємо у рівнянні (13.8) умову

$$\hat{A} \varphi_n = A_n \varphi_n.$$

Отримаємо, що

$$\langle A \rangle = \sum_{n,m} \psi^*(A_n) \psi(A_m) \int \varphi_n^*(\vec{r}) A_m \varphi_m(\vec{r}) dV = \sum_{n,m} \psi^*(A_n) \psi(A_m) A_m \delta_{n,m} = \sum_n A_n \psi^*(A_n) \psi(A_n).$$

Здійснюючи аналогічні перетворення неважко отримати, що виконується умова нормування для $\psi(A_n)$:

$$\int \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) dV = \sum_n \psi^*(A_n) \psi(A_n) = 1.$$

Бачимо, що дійсно $\psi(A_n)$ є хвильовою функцією стану системи в A -тому зображенні.

Запишемо хвильову функцію стану в B -ому представленні за умови, що оператор $\hat{B}$ має неперервний спектр. Власні функції даного оператора знаходимо з рівняння

$$\hat{B} \varphi_B(\vec{r}) = B \varphi_B(\vec{r}). \quad (13.9)$$

Тоді з умови повноти функцій $\varphi_B(\vec{r})$ маємо

$$\psi(\vec{r}) = \int \psi(B) \varphi_B(\vec{r}) dB. \quad (13.10)$$

Як і у випадку оператора з дискретним спектром, $\psi(B)$ є хвильовою функцією стану в B -представленні. Аналогічно до попередніх перетворень можна одержати, що

$$\varphi(B) = \int \varphi_B^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) dV, \quad (13.11)$$

якщо скористатись умовою ортонормованості функцій $\varphi_B(\vec{r})$:

$$\int \varphi_{B'}^*(\vec{r}) \varphi_B(\vec{r}) dV = \delta(B' - B). \quad (13.11')$$

Тоді $dW = \psi^*(B_0) \psi(B_0) dB$ — це ймовірність того, що при вимірюванні фізичної величини B ми отримаємо значення в межах $B_0, B_0 + dB$. Для доведення даного висновку неважко показати, що

$$\langle B \rangle = \int B \psi^*(B) \psi(B) dB, \quad \int \psi^*(B') \psi(B) dB = \delta(B' - B), \quad (13.12)$$

тому $\psi(B)$ є хвильовою функцією стану в B -ому представленні.

2. Оператор фізичної величини у різних зображеннях

Ми встановили, як перейти від хвильової функції стану в координатному зображенні до хвильової функції цього ж стану в будь-якому (A -, B -) зображенні. Така ж задача виникає і для операторів фізичних величин, бо лише ті оператори діють на хвильові функції, які записані в тому ж зображенні.

Нехай оператор $\hat{F}(\vec{r})$ записаний в координатному зображенні діє на хвильову функцію стану α і в результаті такої дії отримуємо іншу хвильову функцію – стану β :

$$\hat{F}(\vec{r})\psi_{\alpha}(\vec{r}) = \psi_{\beta}(\vec{r}). \quad (13.13)$$

Необхідно записати оператор $\hat{F}$ в A -представленні. Запишемо ще раз рівняння на власні функції оператора $\hat{A}$:

$$\hat{A}\varphi_n(\vec{r}) = A_n\varphi_n(\vec{r}).$$

Рівняння можна перетворити, розклавши функції $\psi_{\alpha}(\vec{r})$ та $\psi_{\beta}(\vec{r})$ по повній системі $\varphi_n(\vec{r})$:

$$F(\vec{r})\sum_n \psi_{\alpha}(A_n)\varphi_n(\vec{r}) = \sum_n \psi_{\beta}(A_n)\varphi_n(\vec{r}). \quad (13.14)$$

Домножимо (13.14) на $\varphi_m^*(\vec{r})$ та проінтегруємо по всьому простору. Отримаємо

$$\sum_n \left(\int \varphi_m^*(\vec{r}) F(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) dV \right) \psi_{\alpha}(A_n) = \sum_n \psi_{\beta}(A_n) \int \varphi_m^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) dV = \sum_n \psi_{\beta}(A_n) \delta_{m,n} = \psi_{\beta}(A_m), \quad (13.15)$$

де $n=1,2,3,\dots$, $m=1,2,3,\dots$. Хвильові функції $\psi_{\alpha}(A_n)$ та $\psi_{\beta}(A_n)$ записані в A -представленні. Якщо їх вважати одностовпцевими матрицями, то рівняння (13.15) можна розглядати як рівність матриць:

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{11} & F_{11} & \dots \\ F_{11} & F_{11} & F_{11} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\alpha}(A_1) \\ \psi_{\alpha}(A_2) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{\beta}(A_1) \\ \psi_{\beta}(A_2) \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (13.15')$$

Величини

$$\int \varphi_m^*(\vec{r}) \hat{F}(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) dV = F_{mn} \quad (13.16)$$

називають матричними елементами. Отже, перехід від оператора $\hat{F}$ в координатному зображенні до оператора $\hat{F}$ в A -зображенні зводиться до знаходження матричних елементів оператора $\hat{F}(\vec{r})$ на власних хвильових функціях

оператора $\hat{A}$. Ще раз зауважимо, що дія оператора $\hat{F}$ в A -зображенні на хвильову функцію в цьому ж зображенні зводиться до рівняння

$$\sum_n F_{mn} \psi_\alpha(A_n) = \psi_\beta(A_m). \quad (13.15'')$$

Якщо оператор $\hat{F}(\vec{r})$ треба записати в B -представленні, коли спектр цього оператора неперервний

$$\hat{B} \varphi_\beta(\vec{r}) = B \varphi_\beta(\vec{r}), \quad (13.17)$$

то алгоритм переходу аналогічний:

$$\begin{aligned} \hat{F}(\vec{r}) \psi_\alpha(\vec{r}) &= \psi_\beta(\vec{r}), \\ \hat{F}(\vec{r}) \int \psi_\alpha(B) \varphi_B(\vec{r}) dB &= \int \psi_\beta(B) \varphi_B(\vec{r}) dB, \\ \int dB \left(\int \psi_{B'}^*(\vec{r}) \hat{F}(\vec{r}) \varphi_B(\vec{r}) dV \right) \psi_\alpha(B) &= \int dB \left(\int \psi_{B'}^*(\vec{r}) \varphi_B(\vec{r}) dV \right) \psi_\beta(B). \end{aligned} \quad (13.18)$$

Введемо у (13.18) позначення

$$\int \psi_{B'}^*(\vec{r}) \hat{F}(\vec{r}) \varphi_B(\vec{r}) dV = F_{B'B} \quad (13.19)$$

та використаємо умову нормування власних функцій оператора $\hat{B}$ на δ -функцію Дірака

$$\int \psi_{B'}^*(\vec{r}) \varphi_B(\vec{r}) dV = \delta(B' - B).$$

Величини $F_{B'B}$ – матричні елементи оператора $\hat{F}$ в B -представленні. Сукупність цих величин є оператором $\hat{F}$ в B -представленні. Правило дії цього оператора на хвильову функцію таке:

$$\int dB F_{B'B} \psi_\alpha(B) = \psi_\beta(B'). \quad (13.18')$$

Розглянемо тепер важливий приклад. Доведемо, що оператор у своєму власному зображенні є діагональною матрицею з власними значеннями цього оператора.

Нехай оператор $\hat{F}$ має дискретний спектр:

$$\hat{F} f_n(\vec{r}) = F_n f_n(\vec{r}), \quad (13.20)$$

де $f_n(\vec{r})$ – власні функції цього оператора. Згідно з наведеним вище, визначимо матричні елементи оператора $\hat{F}$ (див. рівняння (13.16)):

$$F_{mn} = \int f_m^*(\vec{r}) \hat{F}(\vec{r}) f_n(\vec{r}) dV. \quad (13.21)$$

Використаємо під інтегралом умову (13.20):

$$F_{mn} = \int f_m^*(\vec{r}) F_n(\vec{r}) f_n(\vec{r}) dV = F_n \int f_m^*(\vec{r}) f_n(\vec{r}) dV = F_n \delta_{m,n} \quad (13.22)$$

Отже, дійсно

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} & \dots \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} & \dots \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & F_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & F_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (13.23)$$

Дія такого оператора на функцію зводиться до простого множення. Запишемо рівняння типу (13.15''):

$$\begin{aligned} \sum_n F_{mn} \psi_\alpha(F_n) &= \psi_\beta(F_m), \\ \sum_n F_n \delta_{m,n} \psi_\alpha(F_n) &= \psi_\beta(F_m), \\ F_m \psi_\alpha(F_m) &= \psi_\beta(F_m). \end{aligned}$$

Досить часто виникають задачі про ймовірності певних значень енергії чи імпульсу квантово-механічної системи. Тому розглянемо детальніше енергетичне та імпульсне представлення.

§ 14. Енергетичне та імпульсне представлення

Згідно з алгоритмом задачі, для переходу до енергетичного представлення спочатку треба мати розв'язки рівняння на власні функції оператора енергії (гамільтоніана):

$$\hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n. \quad (14.1)$$

Вважаємо, що $\hat{H}$ має дискретний спектр. Для знаходження хвильової функції стану $\psi'_\alpha(\vec{r})$ в енергетичному зображенні запишемо розклад

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = \sum_n \psi_\alpha(E_n) \varphi_n(\vec{r}). \quad (14.2)$$

Згідно з наведеними математичними викладками, хвильова функція стану α в енергетичному зображенні має вигляд:

$$\psi_\alpha(E_n) = \int \varphi_n^*(\vec{r}) \psi_\alpha(\vec{r}) dV. \quad (14.3)$$

Ймовірність того, що при вимірюванні енергії частинки ми отримаємо значення E_1 дорівнює:

$$\psi_\alpha^*(E_1) \psi_\alpha(E_1) = W(E_1). \quad (14.4)$$

Середнє значення енергії частинки можна знайти двома шляхами:

$$1. \langle E \rangle = \int \psi_{\alpha}^*(\vec{r}) \hat{H} \psi_{\alpha}(\vec{r}) dV \quad (14.5)$$

або

$$2. \langle E \rangle = \sum_n E_n \psi^*(E_n) \psi(E_n). \quad (14.6)$$

Визначимо, який вигляд має будь-який оператор в енергетичному зображенні. Нехай оператор в координатному зображенні переводить функцію $\psi_{\alpha}(\vec{r})$ у функцію $\psi_{\beta}(\vec{r})$:

$$\hat{F}(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r}) = \psi_{\beta}(\vec{r}). \quad (14.7)$$

Тоді оператор $\hat{F}$ в енергетичному представленні визначається матричними елементами на власних функціях гамільтоніана системи:

$$F_{mn} = \int \varphi_m^*(\vec{r}) \hat{F}(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) dV. \quad (14.8)$$

Перейдемо до розгляду імпульсного представлення. Запишемо рівняння для власних функцій оператора імпульсу

$$\hat{\vec{p}} \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \vec{p} \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}), \quad (14.9)$$

де

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla. \quad (14.10)$$

Переконаємось ще раз, що хвиля де Бройля

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = c e^{i\vec{k}\vec{r}} = c e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}} \quad (14.11)$$

є власною функцією оператора імпульса:

$$-i\hbar \nabla c e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}} = -i\hbar c \frac{i}{\hbar} \vec{p} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}} = \vec{p} c e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}}.$$

Розглянемо випадок, коли частинка вільно рухається в усьому просторі $-\infty < x, y, z < +\infty$. Виходячи із того, що хвильові функції задають ймовірність перебування системи в просторі, вони повинні бути неперервними, однозначними і обмеженими функціями координат. Якщо частинка вільна і може знаходитись в будь-якій точці простору, то вона характеризується певним значенням імпульсу. У цьому випадку хвильова функція (14.11) задовольняє всі вимоги, що ставляться до хвильових функцій (неперервність, однозначність, обмеженість) при будь-яких значеннях імпульсу, тому

$$-\infty < p_x < \infty, \quad -\infty < p_y < \infty, \quad -\infty < p_z < \infty. \quad (14.12)$$

Отже, якщо для частинки $x \in (-\infty, +\infty)$, $y \in (-\infty, +\infty)$, $z \in (-\infty, +\infty)$, то оператор імпульсу характеризується неперервним спектром. Нагадаємо, що коли частинка знаходиться в скінченному об'ємі, то імпульс змінюється квазінеперервно.

Перш ніж записати нормовану хвильову функцію вільної частинки для руху частинки в усьому просторі, знайдемо коефіцієнт нормування хвильової функції при одновимірному русі

$$\varphi_{k_x}(x) = Ae^{ik_x x} \quad (14.13)$$

або

$$\varphi_{p_x}(x) = Be^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \quad (14.14)$$

Функції $\varphi_{k_x}(x)$ та $\varphi_{p_x}(x)$ повинні бути нормованими на δ -функцію Дірака:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{k_x}^*(x) \varphi_{k'_x}(x) dx = \delta(k_x - k'_x), \quad (14.15)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{p_x}^*(x) \varphi_{p'_x}(x) dx = \delta(p_x - p'_x). \quad (14.16)$$

Коефіцієнти A , B у формулах (14.13) (14.14) можна визначити, якщо пригадати інтегральне представлення δ -функцій Дірака. Зокрема,

$$\delta(k_x - k'_x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\pm i(k'_x - k_x)x} dx, \quad (14.17)$$

$$\delta(p_x - p'_x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\pm i(p_x - p'_x)u} du. \quad (14.18)$$

Підставимо (14.13) та (14.17) в рівняння (14.15). Тоді отримаємо

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(k'_x - k_x)x} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(k'_x - k_x)x} dx.$$

Звідки видно, що $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Якщо підставити рівняння (14.14) та (14.18) у рівняння (14.16), будемо мати:

$$|B|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x - p'_x)x} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(p_x - p'_x)u} du \quad (14.19)$$

Ліву частину рівняння можна перетворити, ввівши під інтеграл нову змінну $\frac{x}{\hbar} = u$.

Тоді

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x - p'_x)x} dx = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(p_x - p'_x)u} du .$$

Таким чином. Отримуємо, що $B = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, а нормовані хвильові функції для вільної частинки, що рухається вздовж осі OX , мають вигляд:

$$\varphi_{k_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_x x}, \quad (14.20)$$

$$\varphi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \quad (14.21)$$

Для довільного напрямку руху частинки функції (14.20) та (14.21) узагальнюються до наступного вигляду:

$$\varphi_k(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ik\vec{r}}, \quad (14.22)$$

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}}. \quad (14.23)$$

Функції (14.20)-(14.23) є основою для переходу від координатного представлення до імпульсного. Необхідно, залежно від умов задачі, використати їх, переписавши формули (14.11), (14.19) та (14.18) попереднього параграфа. Тобто, хвильова функція $\psi_\alpha(\vec{r})$ в імпульсному представленні має вигляд:

$$\psi_\alpha(\vec{p}) = \int \psi_p^*(\vec{r}) \psi_\alpha(\vec{r}) dV, \quad (14.24)$$

а оператор $\hat{F}(\vec{r})$ представиться матричним елементом

$$F_{\vec{p}', \vec{p}} = \int \varphi_{p'}^*(\vec{r}) \hat{F}(\vec{r}) \varphi_p(\vec{r}) dV, \quad (14.25)$$

який діє на хвильову функцію $\psi_\alpha(\vec{p})$ наступним чином:

$$\int F_{\vec{p}', \vec{p}} \psi_\alpha(\vec{p}) dp_x dp_y dp_z = \psi_\beta(\vec{p}'), \quad (14.26)$$

де функція $\varphi_{\vec{p}}(\vec{r})$ має вигляд (14.23).

§ 15. Рівняння Шредінгера квантово-механічної системи

Квантова механіка ґрунтується на системі постулатів, достовірність яких перевірена багатьма фізичними експериментами та технічними використаннями в різних галузях. Одним з основних рівнянь квантової механіки є рівняння Шредінгера. Ми вже його записували для мікрочастинки в потенціальному поля. У

цьому параграфі розглянемо узагальнення для будь-якої квантово-механічної системи, а також звернемо увагу на основні висновки, які отримуються з аналізу цього рівняння.

Отже, в квантовій механіці постулюється, що **хвильова функція стану квантово-механічної системи з s ступенями вільності задається узагальненими координатами $\{q_1, q_2, \dots, q_s\} \equiv q$ та часом t є розв'язком такого рівняння:**

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(q, t), \quad (15.1)$$

де $\hat{H}$ – **гамільтоніан системи**. Для однієї частинки гамільтоніан

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}, t) \quad (15.2)$$

або

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\vec{r}, t).$$

Якщо система складається з N взаємодіючих частинок, то

$$\psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t), \quad \hat{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_i} + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t). \quad (15.3)$$

Незважаючи на те, що рівняння (15.1) є рівнянням першого порядку за часом, воно має періодичні розв'язки, бо є комплексним. Тому це рівняння називають також хвильовим рівнянням Шредінгера. Рівняння (15.1) є диференціальним рівнянням, однозначний розв'язок якого можна визначити при відомому значенні функції ψ в заданий (початковий) момент часу. Отже, хвильове рівняння Шредінгера містить **принцип причинності – знаючи стан в початковий момент часу, можна визначити його в будь-який наступний**.

Доведемо тепер, що умова нормування хвильової функції не змінюється з часом. Домножимо рівняння (15.1) на функцію ψ^* . Запишемо також рівняння комплексно спряжене до (15.1) і домножимо на ψ :

$$i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi^* \hat{H} \psi, \quad -i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \psi \hat{H}^* \psi^*. \quad (15.4)$$

Віднімемо від першого рівняння друге

$$i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^*. \quad (15.5)$$

Ліву частину рівняння (15.5) можна записати в простішому вигляді:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = \psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^* . \quad (15.6)$$

Проінтегруємо ліву і праву частину по всій області визначення:

$$i\hbar \int \frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) d\tau = \int \psi^* \hat{H} \psi d\tau - \int \psi \hat{H}^* \psi^* d\tau , \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \psi d\tau = \int \psi^* \hat{H} \psi d\tau - \int \psi \hat{H}^* \psi^* d\tau . \quad (15.7)$$

Оператор енергії $\hat{H}$ є самоспряженим, тому інтеграли у правій частині є однаковими, отже

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \psi d\tau = 0 .$$

Дійсно, інтеграл, який задає умову нормування хвильової функції не залежить від часу:

$$\int \psi^* \psi d\tau = \text{const} . \quad (15.8)$$

З рівняння Шредінгера отримуємо також, що для квантово-механічної частинки справедливе рівняння неперервності, в яке входить густина ймовірності і потік ймовірності. Для цього повернемося до рівняння (15.6), вважаючи, що $\hat{H}$ задається рівнянням (15.2). Ймовірність того, що частинка перебуває в елементі об'єму $d\tau$ дорівнює:

$$dW = \psi^* \psi d\tau .$$

Тоді $\frac{dW}{d\tau} = \psi^* \dot{\psi}$ є густиною ймовірності. Рівняння (15.6) запишеться у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \left(\psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi - \psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi^* \right) = \\ &= -\frac{\hbar}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) = -\frac{\hbar}{2m} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) . \end{aligned} \quad (15.9)$$

Введемо величину

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) , \quad (15.10)$$

яку назвемо потоком ймовірності. Тоді рівняння (15.9) представиться в компактному вигляді:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 , \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0 . \quad (15.11)$$

Рівняння (15.11) називають рівнянням неперервності для квантово-механічної частинки. Воно еквівалентне рівнянню Шредінгера.

§ 16. Стаціонарні стани

Розглянемо квантово-механічну систему для якої гамільтоніан не залежить від часу

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0. \quad (16.1)$$

У цьому випадку в системі існують стаціонарні стани, тобто стани з заданим значенням енергії. Покажемо, що тепер рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(q,t) \quad (16.2)$$

можна звести до простішого рівняння, яке називають стаціонарним рівнянням Шредінгера. Перепишемо рівняння (16.2) в дещо іншому вигляді:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \psi(q,t) = 0. \quad (16.3)$$

Видно, що операторна частина рівняння (16.3) складається із суми доданків, одні з яких містять похідні по часу, а інші – похідні по координатах. Відомо, що коли операторна частина диференціального рівняння складається із суми похідних по незалежних змінних, то розв’язок такого рівняння буде мати вигляд добутку функцій від цих незалежних змінних. Доведемо це. Виберемо $\psi(q,t)$ у вигляді добутку двох функцій, одна з яких залежить від узагальнених координат, а інша – від часу. Покажемо, що це спростить задачу. Отже,

$$\psi(q,t) = \varphi(q)T(t). \quad (16.4)$$

Підставимо рівняння (16.4) у (16.3):

$$i\hbar \varphi(q) \frac{\partial T(t)}{\partial t} - T(t) \hat{H} \varphi(q) = 0, \quad (16.5)$$

поділимо рівняння (16.5) на добуток $\varphi(q)T(t)$

$$\frac{i\hbar \frac{dT(t)}{dt}}{T(t)} = \frac{\hat{H} \varphi(q)}{\varphi(q)}. \quad (16.6)$$

Отримали рівняння, в якому функція від змінної t дорівнює функції від незалежної змінної q . Таке рівняння може виконуватись лише тоді, коли ліва і права частина рівняння є сталою величиною:

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = E, \quad (16.7)$$

$$\frac{\hat{H}\varphi(q)}{\varphi(q)} = E. \quad (16.8)$$

Знайдемо розв'язок рівняння (16.7):

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t), \quad (16.9)$$

$$i\hbar \frac{dT(t)}{T(t)} = Edt, \quad \ln T(t) = \frac{1}{i\hbar} Et + \ln C, \quad T(t) = Ce^{\frac{1}{i\hbar} Et}.$$

Функція $\varphi(q)$ буде розв'язком рівняння

$$\hat{H}\varphi(q) = E\varphi(q), \quad (16.10)$$

яке називається **стаціонарним рівнянням Шредінгера**. Рівняння (16.10) – це рівняння на власні значення, власні функції оператора енергії $\hat{H}$. Розв'язавши його, ми можемо визначити енергію в системі. Хвильова функція $\psi(q, t)$, яка є розв'язком загального рівняння Шредінгера (16.2), буде мати вигляд:

$$\psi(q, t) = e^{\frac{1}{i\hbar} Et} \varphi(q). \quad (16.11)$$

Функція (16.11) є хвильовою функцією стаціонарного стану з енергією E . В найбільш загальному вигляді розв'язок рівняння (16.2) можна подати як лінійну комбінацію:

$$\psi(q, t) = \sum_n C_n e^{\frac{1}{i\hbar} E_n t} \varphi_n(q), \quad (16.12)$$

бо (16.10) є лінійним диференціальним рівнянням.

§ 17. Зміна оператора фізичної величини з часом

Нехай оператор фізичної величини залежить не лише від координати, але й від часу

$$\hat{A} = \hat{A}(q, t).$$

Запишемо середнє значення цієї величини в стані $\psi(q, t)$:

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(q, t) \hat{A}(q, t) \psi(q, t) dq. \quad (17.1)$$

Величина $\langle A \rangle$ залежить лише від часу, бо інтеграл (17.1) означений. Визначимо похідну від правої і лівої частин рівняння (17.1):

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dq. \quad (17.2)$$

З рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (17.3)$$

та комплексно спряженого рівняння

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \hat{H}^* \psi^* \quad (17.4)$$

визначимо похідні по часу: $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ і $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$. Тоді рівняння (17.2) перетвориться до такого

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A \rangle}{dt} &= \int \left[\left(-\frac{1}{i\hbar} (\hat{H}^* \psi^*) \right) \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \right) \right] dq, \\ \frac{d\langle A \rangle}{dt} &= \int \left[-\frac{1}{i\hbar} (\psi^* \hat{H}^* \hat{A} \psi) + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \frac{1}{i\hbar} \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi \right] dq. \end{aligned} \quad (17.5)$$

Оператор $\hat{H}$ є самоспряженим, тому

$$\hat{H}^+ = \hat{H}. \quad (17.6)$$

Отже,

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \right) \psi dq. \quad (17.7)$$

Введемо повну похідну оператора по часу згідно формули:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} \equiv \int \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt} \psi dq. \quad (17.8)$$

Тоді отримуємо формулу для повної похідної оператора фізичної величини по часу:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}]. \quad (17.9)$$

З формули (17.9) видно, що повна похідна по часу від оператора дорівнює нулю тоді, коли оператор комутує з гамільтоніаном і явно не залежить від часу. Тоді середнє значення $\langle A \rangle$ не залежить від часу – є інтегралом руху.

§ 18. Закони збереження квантово-механічної системи

В класичній фізиці інтегралом руху прийнято називати таку функцію координат та імпульсів, яка не залежить від часу при будь-яких початкових умовах. Знання інтегралів руху дозволяє сформулювати відповідні закони збереження. Розглянемо три основні закони збереження: закон збереження енергії, імпульсу та моменту імпульсу. Вони є наслідком симетрії простору і часу. Нагадаємо, що закон збереження енергії пов'язаний з однорідністю часу. **Однорідність часу означає, що властивості замкненої системи та системи, що знаходиться в постійному зовнішньому полі, не змінюються з часом.** Закон збереження імпульсу – наслідок однорідності простору, яке означає що **властивості замкненої системи не змінюються при її перенесенні в просторі.** Нарешті закон збереження моменту імпульсу існує через ізотропність простору. **Ізотропність простору означає, що властивість замкненої системи не змінюється при її повороті навколо осі, а також інваріантність властивостей системи, в центральносиметричному полі при повороті її відносно центра поля.**

Розглянемо зазначені властивості простору і часу детальніше. Через однорідність часу оператор гамільтона замкненої системи та системи в постійному зовнішньому полі не залежить явно від часу:

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0. \quad (18.1)$$

Запишемо формулу для середнього значення енергії системи в будь-якому стані $\psi(q, t)$:

$$\langle E \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dq. \quad (18.2)$$

Похідна по часу від середнього значення енергії дорівнює:

$$\frac{d \langle E \rangle}{dt} = \int \psi^* \frac{d \hat{H}}{dt} \psi dq, \quad (18.3)$$

де

$$\frac{d \hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{H}]. \quad (18.4)$$

Якщо врахувати умову (18.1), то видно, що $\frac{d \hat{H}}{dt} = 0$. Тому

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = 0. \quad (18.5)$$

А це означає, що $\langle E \rangle = \text{const}$. Для розглядуваних квантово-механічних систем середнє значення енергії є сталою величиною. Якщо ж в початковий момент часу система знаходиться в такому стані, що енергія була для неї визначена (в стаціонарному стані), то:

$$\langle E \rangle = E = \text{const}. \quad (18.6)$$

Формули (18.5) та (18.6) є математичним записом закону збереження енергії.

Перейдемо тепер до розгляду закону збереження імпульсу замкненої системи. Оскільки властивості кожної фізичної системи визначаються оператором гамільтона, то однорідність простору проявляється в тому, що гамільтоніан є інваріантним при паралельному зміщенні системи. Спростимо задачу, розглядаючи систему з однієї частинки, яка описується хвильовою функцією $\psi(\vec{r})$. При паралельному перенесенні частинки на вектор $(-\vec{a})$ хвильова функція стану $\psi(\vec{r})$ перетворюється в $\psi(\vec{r} + \vec{a})$. Можна довести, що

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}) = e^{\vec{a}\vec{\nabla}} \psi(\vec{r}), \quad (18.7)$$

де

$$\vec{a}\vec{\nabla} = a_x \frac{\partial}{\partial x} + a_y \frac{\partial}{\partial y} + a_z \frac{\partial}{\partial z} = a_x \frac{\partial}{\partial x},$$

а

$$\hat{T}_{\vec{a}} = e^{\vec{a}\vec{\nabla}} \quad (18.8)$$

– оператор паралельного перенесення на вектор $(-\vec{a})$ (оператор зміщення на $(-\vec{a})$).

Виходячи з однорідності простору, доведемо, що оператор паралельного перенесення буде комутувати з гамільтоніаном.

Подіємо оператором $\hat{T}_{\vec{a}}$

$$\hat{T}_{\vec{a}} \hat{H} \psi(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r} + \vec{a}) \psi(\vec{r} + \vec{a}) \quad (18.9)$$

Розглянемо дію $\hat{H} \hat{T}_{\vec{a}}$ на функцію $\psi(\vec{r})$

$$\hat{H} \hat{T}_{\vec{a}} \psi(\vec{r}) = \hat{H} \psi(\vec{r} + \vec{a}). \quad (18.10)$$

З однорідності простору маємо, що властивості системи при паралельному перенесенні не змінюють. Отже,

$$\hat{H}(\vec{r} + \vec{a}) = \hat{H}(\vec{r}).$$

Права частина рівняння (18.9) спроститься:

$$\hat{T}_a \hat{H} \psi(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r}) \psi(\vec{r} + \vec{a}). \quad (18.11)$$

Порівнюючи (18.10) і (18.11), отримуємо

$$\begin{aligned} \hat{H} \hat{T}_a \psi &= \hat{T}_a \hat{H} \psi, \\ (\hat{H} \hat{T}_a - \hat{T}_a \hat{H}) \psi &= 0 \rightarrow [\hat{H}, \hat{T}_a] = 0, \end{aligned}$$

що і необхідно було довести. З іншого боку оператор $\hat{T}_a$ виражається через оператор імпульсу:

$$\hat{T}_a = e^{\frac{i\vec{a}\vec{p}}{\hbar}}, \quad \text{де } \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla},$$

тому оператор імпульсу комутує з гамільтоніаном:

$$[\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = 0.$$

Крім того оператор імпульсу частинки явно від часу не залежить:

$$\frac{\partial \hat{\vec{p}}}{\partial t} = 0.$$

Отримуємо, що

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = \int \psi^* \frac{d\vec{p}}{dt} \psi dV = 0.$$

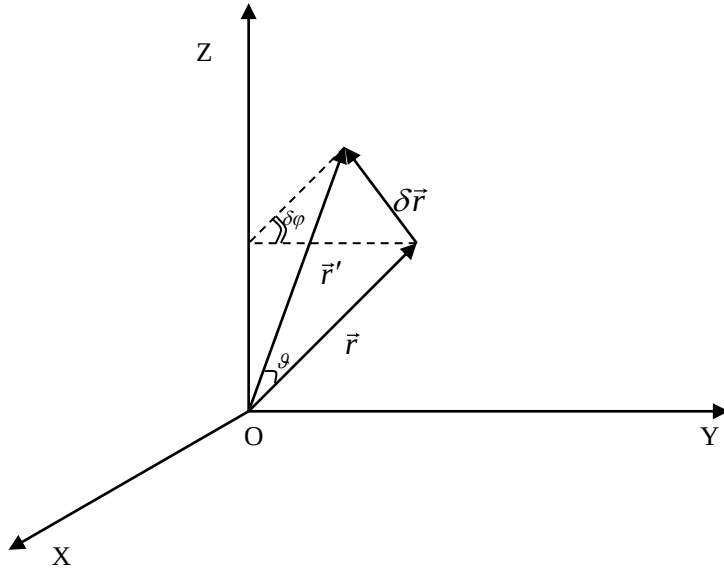
Отже, $\langle p \rangle = \text{const}$. Якщо $\psi(\vec{r})$ має вигляд хвилі де Бройля, то $\langle p \rangle = p = \text{const}$.

Якщо хвильова функція $\psi(\vec{r})$ описує стан системи частинок, то оператор $\hat{T}_a$ є оператором зміщення всієї системи як цілого. Тоді оператор $\hat{\vec{p}}$ – сумарний оператор імпульса всіх частинок системи:

$$\hat{\vec{p}} = \sum_i \hat{\vec{p}}_i.$$

Інваріантність гамільтоніана відносно просторових зміщень зведеться до закону збереження повного імпульса системи.

Ізотропність простору полягає в еквівалентності всіх напрямків простору, що проявляється в інваріантності властивостей замкнених фізичних систем відносно будь-яких поворотів та інваріантність властивостей систем, що знаходяться в



центральносиметричних полях, якщо поворот здійснюється відносно центра поля. При повороті частини на кут

$$\delta\vec{\varphi} = \delta\varphi\vec{k}$$

навколо осі OZ радіус-вектор $\vec{r}$ змінюється на величину

$$\delta r = r \sin \theta \delta\varphi,$$

або у векторній формі

$$\delta\vec{r} = -\vec{r} \times \delta\vec{\varphi}.$$

Відповідна зміна хвильової функції дорівнює

$$\psi(\vec{r} + \vec{r} \times \delta\vec{\varphi}) = e^{(\vec{r} \times \vec{\varphi}) \cdot \vec{\nabla}} \psi(\vec{r}).$$

Оператор повороту на кут $\delta\varphi$ дорівнює:

$$\hat{R}_{\delta\varphi} = e^{-(\delta\vec{\varphi} \times \vec{r}) \cdot \vec{\nabla}} = e^{-\delta\varphi(\vec{r} \times \vec{\nabla})} = e^{\frac{\delta\varphi}{i\hbar}(\vec{r} \times \vec{p})} = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta\varphi\hat{L}_z}.$$

Оператор $\hat{R}_{\delta\varphi}$ виражається через проекцію оператора моменту імпульсу на напрямок повороту:

$$\delta\vec{\varphi}\hat{L} = \delta\varphi\hat{L}_z$$

Зважаючи на те, що властивість системи не зміниться при повороті, то за аналогією з вище наведеними формулами:

$$\hat{R}_{\delta\varphi}\hat{H}(\vec{r})\psi(\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r} + \delta\vec{r})\psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r})\psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \hat{H}(\vec{r})\hat{R}_{\delta\varphi}\psi(\vec{r}).$$

Отже, $[\hat{R}_{\delta\varphi}, \hat{H}] = 0$, тому $[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$.

З вигляду оператора $\hat{L}_z$ видно, що $\frac{\partial \hat{L}_z}{\partial t} = 0$. Таким чином, як і для імпульсу,

маємо, що

$$\langle \hat{L}_z \rangle = \text{const}. \quad (18.12)$$

Отримали, що у вільному просторі і в будь-якому центральносиметричному полі, проекція моменту імпульсу частинки на будь-який напрямок є інтегралом руху.

Наведенні вище перетворення паралельного перенесення (трансляції) чи поворотів відносяться до неперервних перетворень, бо вони можуть відбуватись через багаторазове повторення безмежно малих трансляцій чи поворотів. Крім таких перетворень важливу роль у фізиці відіграють дискретні перетворення, при яких гамільтоніан системи не змінюється. До них відноситься перетворення просторової інверсії.

Просторовою інверсією називається одночасна зміна знаку всіх трьох просторових координат частинки

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}. \quad (18.13)$$

При такому перетворенні права система координат переходить в ліву систему координат. Як показують досліди, оператор енергії $\hat{H}$ замкненої системи, коли діють ядерні та електромагнітні взаємодії, інваріантний відносно перетворення інверсії. Така є інваріантність має місце і для систем, що поміщені в центральносиметричне поле, якщо центр інверсії вибрати в центрі поля.

Позначимо оператор просторової інверсії через $\hat{P}$. Тоді симетрія між правим та лівим буде означати, що

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0, \quad (18.14)$$

де оператор $\hat{P}$ визначається рівнянням

$$\psi(-\vec{r}) = \hat{P}\psi(\vec{r}). \quad (18.15)$$

Визначимо власне значення оператора інверсії:

$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = P\psi(\vec{r}). \quad (18.16)$$

Подіємо на рівняння (18.15) і (18.16) оператором інверсії:

$$\hat{P}^2\psi(\vec{r}) = \hat{P}\psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r}), \quad (18.15')$$

$$\hat{P}^2\psi(\vec{r}) = P\hat{P}\psi(\vec{r}) = P^2\psi(\vec{r}). \quad (16')$$

З (18.15') та (18.16') видно, що $P^2 = 1$, тому

$$P = \pm 1. \quad (18.17)$$

Якщо повернутись до (18.15), то неважко побачити, що система характеризується двома класами хвильових функцій:

$$1. \psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \equiv \psi_{(+)},$$

$$2. \psi(-\vec{r}) = -\psi(\vec{r}) \equiv \psi_{(-)}.$$

Функції $\psi_{(+)}$ відповідають парним станам, $\psi_{(-)}$ – непарним станам. Враховуючи (18.14), приходимо до висновку, що парність є інтегралом руху. Інваріантність $\hat{H}$ відносно інверсії приводить до закону збереження парності. Виявилось, однак, що при слабких взаємодіях (наприклад, β - розпад ядер) спостерігається порушення закону збереження парності.

§ 19. Вектор стану. Позначення Дірака

Стан квантово-механічної системи задається хвильовою функцією $\psi_{\alpha}(q,t)$, що є функцією узагальнених координат q та часу t . Число α є набором фізичних величин або квантових чисел, які визначають стан системи. Тому індекс α називають індексом стану. Букву q , якою позначена сукупність узагальнених координат, називають індексом представлення. Функція $\psi_{\alpha}(q,t)$ є хвильовою функцією стану α в координатному представленні.

Діраком було запропоновано записувати цю функцію, використовуючи дужки:

$$\psi_{\alpha}(q) \equiv \langle q | \alpha \rangle. \quad (19.1)$$

Стан α квантово-механічної системи можна описувати так званим кет-вектором $|\alpha\rangle$. Через принцип суперпозиції кет-вектори можна задавати, домножувати на комплексні скалярні величини, отримуючи нові кет-вектори. Сукупність всіх можливих векторів $|\alpha\rangle$ утворює абстрактний комплексний безмежно вимірний простір Гільберта.

Кожному вектору $|\alpha\rangle$ можна поставити у відповідність вектор стану бра-, який позначають $\langle\alpha|$, який дорівнює $|\alpha\rangle^+$. Стан системи можна описувати як кет-вектором, так і бра-вектором. Сукупність всіх можливих бра-векторів утворює простір, який є дуальним до гільбертового простору кет-векторів. Вектори $|\alpha\rangle$ та $\langle\alpha|$ мають різну

природу, їх не можна додавати, а ермітові оператори $\hat{F} = \hat{F}^+$ діють на кет-вектори зліва, а на бра-вектори – права:

$$\hat{F}|a\rangle = |b\rangle, \langle a|\hat{F} = \langle b|. \quad (19.2)$$

Скалярний добуток двох кет-векторів $|a\rangle$ і $|b\rangle$ позначають дужкою $\langle b|a\rangle$. Скалярний добуток $\langle b|a\rangle$ є звичайним комплексним числом, для якого справедлива умова

$$\langle b|a\rangle = \langle a|b\rangle^*. \quad (19.3)$$

Стан системи задається лише напрямком вектора $|a\rangle$ в гільбертовому просторі, а не величиною, тому вектор стану нормується на одиницю:

$$\langle a|a\rangle = 1. \quad (19.4)$$

Зважаючи на все сказане вище, хвильову функцію $\psi_a(\xi)$ можна розглядати як скалярний добуток вектора стану $|a\rangle$ і векторів станів $|q\rangle$ для всіх значень координат q . Отже, всі величини $\langle q|a\rangle$ при різних q є сукупністю проекцій вектора стану на повну базисну систему векторів $|q\rangle$. Тоді хвильова функція $\langle q|a\rangle$ є звичайним комплексним числом.

Для квантово-механічної частинки хвильова функція стану α в координатному представленні запишеться в позначеннях Дірака так:

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\alpha\rangle. \quad (19.5)$$

А хвильову функцію цього ж стану в імпульсному та енергетичному представленнях будемо позначати таким чином:

$$\psi_\alpha(\vec{p}) = \langle \vec{p}|\alpha\rangle, \quad (19.6)$$

$$\psi_\alpha(E_n) = \langle E_n|\alpha\rangle. \quad (19.7)$$

Дія оператора $\hat{F}(r)$ на функцію $\langle \vec{r}|\alpha\rangle$ в координатному представленні приведе до нової хвильової функції $\langle \vec{r}|\beta\rangle$.

$$\hat{F}\langle \vec{r}|\alpha\rangle = \langle \vec{r}|\beta\rangle. \quad (19.8)$$

Для будь-якого представлення умову (19.8) можна подати таким рівнянням

$$\hat{F}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \quad (19.9)$$

Запишемо через нові позначення умову нормування хвильової функції на одиницю:

$$\int \psi_{\alpha}^*(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r}) d\vec{r} = \int \langle \alpha | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \alpha \rangle d\vec{r} = \langle \alpha | \alpha \rangle = 1. \quad (19.10)$$

Розкладемо $\psi_{\alpha}(\vec{r})$, наприклад, по власних функціях оператора енергії $\hat{H}$:

$$\begin{aligned} \hat{H} \varphi_n(\vec{r}) &= E_n \varphi_n(\vec{r}), \\ \psi_{\alpha}(\vec{r}) &= \sum_n \psi_{\alpha}(E_n) \varphi_n(\vec{r}). \end{aligned} \quad (19.11)$$

Запишемо відомі формули для енергетичного представлення хвильових функцій та оператора.

$$\psi_{\alpha}(E_n) = \int \varphi_n^*(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (19.12)$$

$$\sum_m F_{nm} \psi_{\alpha}(E_n) = \psi_{\beta}(E_m), \quad (19.13)$$

$$F_{nm} = \int \varphi_n^*(\vec{r}) \hat{F} \varphi_m(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (19.14)$$

В позначеннях Дірака формули (19.11)-(19.14) мають вигляд:

$$\langle \vec{r} | \alpha \rangle = \sum_n \langle \vec{r} | n \rangle \langle E_n | \alpha \rangle, \quad (19.11')$$

$$\langle E_n | \alpha \rangle = \int \langle n | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \alpha \rangle d\vec{r}, \quad (19.12')$$

$$\sum_m F_{nm} \langle E_n | \alpha \rangle = \langle E_m | \beta \rangle, \quad (19.13')$$

$$F_{nm} = \int \langle n | \vec{r} \rangle \hat{F} \langle \vec{r} | m \rangle d\vec{r} \equiv \langle n | F | m \rangle. \quad (19.14')$$

Формули (19.11')-(19.14') задають правила, як можна згортати чи розгортати необхідні математичні співвідношення. Необхідно, щоб по внутрішніх індексах проводилось інтегрування (для неперервної змінної) чи вводилась сума, якщо індекс дискретно змінюється. Наприклад, можна записати таке рівняння:

$$\langle \vec{r} | \alpha \rangle = \sum_{n,m} \int d\vec{p} \langle \vec{r} | n \rangle \langle n | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | m \rangle \langle m | \alpha \rangle \quad (19.15)$$

§ 20. Унітарні перетворення. Унітарні оператори

Унітарним оператором називають такий оператор, який задовольняє умові:

$$\hat{U}^{\dagger} U = 1, \quad (20.1)$$

або

$$U^{\dagger} = U^{-1}.$$

З умови (20.1) зрозуміло, що

$$U^*U = UU^*. \quad (20.2)$$

Розглянемо перехід від хвильової функції частинки в координатному зображенні до хвильової функції в імпульсному зображенні:

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = \int \varphi_{\vec{p}}^*(\vec{r}) \psi_\alpha(\vec{p}) d\vec{p}, \quad \langle \vec{r} | \alpha \rangle = \int d\vec{p} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \alpha \rangle. \quad (20.3)$$

Можна довести, що перетворення (20.3) від ψ_α $\langle \vec{r} | \alpha \rangle$ до $\langle \vec{p} | \alpha \rangle$ є унітарним перетворенням:

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = U^{-1} \psi_\alpha(\vec{p}), \quad (20.4)$$

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = U \langle \vec{r} | \alpha \rangle.$$

Визначимо, як при такому перетворенні змінюються оператори фізичних величин.

У координатному представленні маємо:

$$\hat{F} \psi_\alpha(\vec{r}) = \psi_\beta(\vec{r}). \quad (20.5)$$

Підставимо (20.4) в (20.5) і домножимо отримане рівняння на U зліва:

$$U \cdot \hat{F} U^{-1} \psi_\alpha(\vec{p}) = U^{-1} \psi_\beta(\vec{p}), \quad (20.6)$$

$$U \hat{F} U^{-1} \psi_\alpha(\vec{p}) = \psi_\beta(\vec{p}).$$

Тому

$$\hat{F}(\vec{p}) = U \hat{F}(\vec{r}) U^{-1}. \quad (20.7)$$

Отже, перехід від одного представлення до іншого для хвильової функції здійснюється за допомогою унітарного перетворення, яке полягає у дії унітарного оператора на хвильову функцію. Для переходу від одного представлення до іншого для операторів необхідно заданий оператор домножити зліва на унітарний, а справа на його обернений.

Доведемо, що при унітарному перетворенні власні значення оператора не змінюються. Розглянемо стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n. \quad (20.8)$$

Здійснимо унітарне перетворення над рівнянням (8), подівавши оператором на праву і ліву частину

$$U \hat{H} \varphi_n = E_n U \varphi_n. \quad (20.9)$$

Використаємо умову

$$U^{-1}U = 1. \quad (20.10)$$

Одержимо

$$U\hat{H}U^{-1}U\varphi_n = E_n U\varphi_n. \quad (20.11)$$

Хвильова функція $U\varphi_n$ є функцією в новому представленні, а $U\hat{H}U^{-1}$ оператором енергії в цьому представленні:

$$\hat{H}\tilde{\varphi}_n = E_n \tilde{\varphi}_n, \quad (20.12)$$

але власні значення оператора $\hat{H}$ є такими ж як і оператора $\hat{H}$. Ця властивість унітарного перетворення використовується для знаходження спектру оператора.

Приклади розв'язування задач:

Задача 1. Чи є оператори $\frac{d^2}{dx^2}$, $\sqrt[4]{}$ лінійними?

Розв'язування:

Розглянемо довільну лінійну комбінацію функцій:

$$\sum C_i \Psi_i = C_1 \psi_1 + C_2 \psi_2.$$

Подіємо на неї вихідними операторами:

$$\text{а) } \frac{d^2}{dx^2} (C_1 \psi_1 + C_2 \psi_2) = C_1 \frac{d^2}{dx^2} \psi_1 + C_2 \frac{d^2}{dx^2} \psi_2.$$

Отже, $\frac{d^2}{dx^2}$ – лінійний оператор.

$$\text{б) } \sqrt[4]{C_1 \psi_1 + C_2 \psi_2} \neq C_1 \sqrt[4]{\psi_1} + C_2 \sqrt[4]{\psi_2}.$$

Таким чином, оператор $\sqrt[4]{}$ нелінійний.

Задача 2. Довести, що оператор $-i \frac{d}{dx}$ самоспряжений.

Розв'язування:

Самоспряжені оператори задовольняють наступну рівність:

$$\int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 d\tau = \int \Psi_2 \hat{A}^* \Psi_1^* d\tau,$$

де ψ_1 і ψ_2 – функції, що на нескінченності дорівнюють нулю.

Потрібно довести, що

$$-i \int \Psi_1^* \frac{d\Psi_2}{dx} dx = i \int \Psi_2 \frac{d\Psi_1^*}{dx} dx.$$

Візьмемо ліву частину рівняння та проінтегруємо за частинами:

$$u = \Psi_1^*, \quad dv = \frac{d\Psi_2}{dx} dx \quad \text{тоді} \quad du = \frac{d\Psi_1^*}{dx} dx, \quad \text{а} \quad v = \Psi_2,$$

$$-i \int \Psi_1^* \frac{d\Psi_2}{dx} dx = -i \left(\Psi_1^* \Psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \Psi_2 \frac{d\Psi_1^*}{dx} dx \right) = i \int \Psi_2 \frac{d\Psi_1^*}{dx} dx.$$

Властивість доведено.

Задача 3. Перевірити, чи є функції $\cos(2x)$, e^{3x} та x^{3n} власними функціями для оператора $\frac{d^2}{dx^2}$.

Розв'язання:

Рівняння на власні функції та власні значення має вигляд:

$$\hat{A}\Psi = A\Psi.$$

Подіємо оператором $\frac{d^2}{dx^2}$ на дані функції:

$$\text{а) } \frac{d^2}{dx^2}(\cos(2x)) = \frac{d}{dx}(-2\sin(2x)) = -4\cos(2x),$$

$\cos(2x)$ – власна функція оператора $\frac{d^2}{dx^2}$, -4 – власне значення.

$$\text{б) } \frac{d^2}{dx^2}(e^{3x}) = \frac{d}{dx}(3e^{3x}) = 9e^{3x},$$

Отже, e^{3x} – власна функція оператора $\frac{d^2}{dx^2}$, а 9 – власне значення.

$$\text{в) } \frac{d^2}{dx^2}(x^{3n}) = \frac{d}{dx}(3ne^{3n-1}) = 3n(3n-1)x^{3n-2}.$$

Функція x^{3n} не є власною функцією оператора $\frac{d^2}{dx^2}$.

Задача 4. Знайти комутатор $\left[x, \frac{d}{dx} \right]$.

Розв'язування:

Подіємо комутатором на деяку функцію:

$$\left[x, \frac{d}{dx} \right] \Psi = x \frac{d}{dx} \Psi - \frac{d}{dx} (x\Psi) = x \frac{d}{dx} \Psi - \Psi - x \frac{d}{dx} \Psi = -\Psi \quad x \frac{d}{dx} \Psi.$$

Отже, комутатор $\left[x, \frac{d}{dx} \right] = -1$.

Задача 5. Покажіть, що у диференціальному рівнянні

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y)}{\partial y^2} + \frac{\Psi(x, y)}{\sqrt{x^2 + y^2}} + \Psi(x, y) = 0$$

можна розділити змінні за допомогою перетворення координат.

Розв'язування:

Використаємо полярну систему координат:

$$x = \rho \cdot \cos(\varphi); \quad y = \rho \cdot \sin(\varphi).$$

Лапласіан в цій системі координат має вигляд:

$$\nabla^2 = \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{d^2}{d\varphi^2}.$$

Провівши зазначені вище заміни, отримаємо наступне рівняння:

$$\frac{d^2 \Psi(\rho, \varphi)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\Psi(\rho, \varphi)}{d\rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{d^2 \Psi(\rho, \varphi)}{d\varphi^2} + \frac{\Psi(\rho, \varphi)}{\rho} + \Psi(\rho, \varphi) = 0.$$

Помножимо цю рівність на ρ^2 та перенесемо доданок з другою похідною по φ вправо:

$$\rho^2 \frac{d^2 \Psi(\rho, \varphi)}{d\rho^2} + 2\rho \frac{d\Psi(\rho, \varphi)}{d\rho} + (\rho^2 + \rho) \Psi(\rho, \varphi) = -\frac{d^2 \Psi(\rho, \varphi)}{d\varphi^2}.$$

Представимо функцію $\Psi(\rho, \varphi)$ у вигляді добутку:

$$\Psi(\rho, \varphi) = R(\rho) \Phi(\varphi)$$

та підставимо в попереднє рівняння. Провівши нескладні перетворення, отримаємо:

$$\rho^2 \frac{\Phi(\varphi) d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + 2\rho \frac{\Phi(\varphi) dR(\rho)}{d\rho} + (\rho^2 + \rho) R(\rho) \Phi(\varphi) = -R(\rho) \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2}.$$

Поділимо отримане рівняння на $R(\rho) \Phi(\varphi)$:

$$\frac{\rho^2 \frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + 2\rho \frac{dR(\rho)}{d\rho}}{R(\rho)} + (\rho^2 + \rho) = -\frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} \cdot \frac{1}{\Phi(\varphi)}.$$

Ліва частина залежить тільки від ρ , а права – від φ . Тобто, кожна з частин дорівнює сталій величині. В результаті отримаємо два рівняння:

$$\rho^2 \frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + 2\rho \frac{dR(\rho)}{d\rho} + (\rho^2 + \rho - m)R(\rho) = 0, \quad \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + m\Phi(\varphi) = 0,$$

де m – стала розділення змінних.

Задача 6. Безпосередніми обчисленнями переконатися в ортонормованості власних функцій оператора $\hat{L}_z$.

Розв'язування:

Нормовані власні функції оператора $\hat{L}_z$ мають вигляд:

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Щоб функції були ортонормованими, повинна виконуватись умова:

$$\int \Psi_{m'}^*(\varphi) \Psi_m(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'} = \begin{cases} 1, & m = m' \\ 0, & m \neq m' \end{cases}.$$

Підставивши вигляд власної функції в рівність для перевірки ортонормованості, отримаємо:

$$\int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im'\varphi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi.$$

Знайдемо значення отриманого інтегралу. Нехай $m = m'$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{0\varphi} d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} 1 \cdot d\varphi = \frac{1}{2\pi} \varphi \Big|_0^{2\pi} = \frac{1}{2\pi} (2\pi - 0) = 1.$$

Якщо ж $m - m' = n$, де n – відмінне від нуля ціле число, то

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{in\varphi} d\varphi &= \frac{1}{2\pi in} e^{in\varphi} \Big|_0^{2\pi} = \\ &= \frac{1}{2\pi in} (\cos 2n\pi + i \sin 2n\pi - \cos 0 - i \sin 0) = \frac{1}{2\pi in} \cdot 0 = 0 \end{aligned}$$

Отже, власні функції оператора $\hat{L}_z$ є ортонормованими.

Задача 7. Перейти до імпульсного представлення для хвильової функції:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} e^{\frac{i}{\hbar} x p_0}, & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ 0, & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}.$$

Розв'язання:

Щоб записати хвильову функцію в імпульсному представленні, потрібно скористатись формулою:

$$\Psi(p_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p_x}^*(x) \Psi(x) dx,$$

де $\Psi_{p_x}^*(x)$ має вигляд:

$$\Psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip_x \frac{x}{\hbar}}.$$

Підставивши її в попереднє рівняння, отримаємо:

$$\Psi(p_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip_x \frac{x}{\hbar}} \Psi(x) dx.$$

Врахувавши вигляд хвильової функції в координатному представленні, маємо:

$$\Psi(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} e^{-\frac{ix}{\hbar}(p_x - p_0)} dx.$$

Отримаємо вигляд хвильової функції в імпульсному представленні:

$$\begin{aligned} \Psi(p_x) &= -\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \cdot \frac{e^{-\frac{ix}{\hbar}(p_x - p_0)}}{i(p_x - p_0)} \Bigg|_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} = -\frac{\hbar i \left(\cos\left(\frac{x}{\hbar}(p_0 - p_x)\right) \right)}{\sqrt{2\pi\hbar a}(p_x - p_0)} \Bigg|_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} = \\ &= \frac{\hbar i \left(\cos\left(\frac{a}{2\hbar}(p_x - p_0)\right) \right) + i \sin\left(\frac{a}{2\hbar}(p_x - p_0)\right) - \cos\left(-\frac{a}{2\hbar}(p_x - p_0)\right) + i \sin\left(-\frac{a(p_0 - p_x)}{2\hbar}\right)}{\sqrt{2\pi\hbar a}(p_x - p_0)} = \\ &= \frac{2\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \cdot \frac{\sin\left(\frac{a}{2\hbar}(p_0 - p_x)\right)}{p_0 - p_x}. \end{aligned}$$

Задачі для самостійного опрацювання:

1. Знайти результат дії операторів $\frac{d}{dx}$ та $\frac{d^2}{dx^2}$ на функції: 1) $\sin^2(3x+2)$; 2) e^{x^2+2} ; 3) 4^{x+3} ; 4) $\frac{x^3}{3} - \frac{2}{7}x^2 + 5x^{\frac{1}{2}} - 34$; 5) $\log_3(2x+5)$.
2. Виразити оператор паралельного переносу $\hat{T}_a \Psi(x) = \Psi(x+a)$ через оператор імпульсу.
3. Показати, що коли $\hat{A}, \hat{B}$ – лінійні оператори, то їхня сума $\hat{A} + \hat{B}$ та їхній добуток $\hat{A} \times \hat{B}$ також є лінійними операторами.
4. Чи є лінійним оператор комплексного спряження: $\hat{M} \Psi = \Psi^*$.
5. Довести комутаційні співвідношення:

$$\text{а) } \left[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C} \right] = \left[\hat{A}, \hat{B} \right] + \left[\hat{A}, \hat{C} \right];$$

$$\text{б) } \left[\hat{A}, \hat{B} \hat{C} \right] = \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \hat{C} + \hat{B} \left[\hat{A}, \hat{C} \right].$$

6. Показати, що коли $\left[\hat{A}, \hat{B} \right]$ комутують між собою, то:

$$\text{а) } \left(\hat{A} + \hat{B} \right)^2 = \hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2;$$

$$\text{б) } (\hat{A} + \hat{B})(\hat{A} - \hat{B}) = \hat{A}^2 - \hat{B}^2;$$

$$\text{в) } \left[(\hat{A} + \hat{B}), (\hat{A} - \hat{B}) \right] = 0.$$

7. Довести, що при $\left[\hat{A}, \hat{B} \right] = 1$, виконуються умови:

$$\text{а) } \left[\hat{A}, \hat{B}^2 \right] = 2\hat{B};$$

$$\text{б) } \left[\hat{A}, \hat{B}^3 \right] = 3\hat{B}^2;$$

$$\text{в) } \left[\hat{A}^2, \hat{B}^2 \right] = 2(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}).$$

8. Знайти: а) $\left[x, \hat{p}_x \right]$; б) $\left[x, \hat{p}_y \right]$; в) $\left[x, \hat{p}_z \right]$; г) $\left[\hat{p}_x, \hat{p}_y \right]$; д) $\left[\hat{p}_x, \hat{p}_z \right]$; е) $\left[\hat{p}_y, \hat{p}_z \right]$.

9. Знайти комутатор оператора Лапласа та оператора x .

10. Довести, що:

$$\text{а) } \left[\hat{H}, \hat{y} \right] = i \frac{\hbar}{m_0} \hat{p}_y;$$

$$\text{б) } \left[\hat{H}, \hat{p}_x \right] = i\hbar \frac{dU}{dx};$$

$$\text{в) } \left[\hat{H}, \hat{p}_x^2 \right] = 2i\hbar \frac{dU}{dx} \hat{p}_x + \hbar^2 \frac{d^2U}{dx^2}.$$

11. Показати, що: а) $\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y \right] = i\hbar \hat{L}_z$; б) $\left[\hat{L}_y, \hat{L}_z \right] = i\hbar \hat{L}_x$; $\left[\hat{L}_z, \hat{L}_x \right] = i\hbar \hat{L}_y$.

12. Довести наступні правила комутації:

$$\text{а) } \left[\hat{L}_x, \hat{p}_x \right] = 0; \text{ б) } \left[\hat{L}_x, \hat{p}_y \right] = i\hbar \hat{p}_z; \text{ в) } \left[\hat{L}_x, \hat{p}_z \right] = -i\hbar \hat{p}_y.$$

13. Чи є оператор комплексного спряження ермітовим оператором?

14. Показати, що сума операторів $\hat{A} + \hat{A}^+$ є ермітовим оператором.

15. Показати, що оператор будь-якої фізичної величини є ермітовим.

16. Довести, що коли оператори $\hat{A}, \hat{B}$ ермітові, то $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ буде ермітовим оператором:

17. Використовуючи сферичні координати, знайдіть зв'язок оператора квадрата моменту імпульсу $\hat{L}^2$ з оператором Лапласа і з оператором кінетичної енергії $\hat{T}$.

18. Довести, що оператор $\hat{L}^2$ комутує з оператором кінетичної енергії $\hat{T}$.

19. Відомо, що коли оператори $\hat{A}$ і $\hat{B}$ не комутують, то динамічні змінні A та B не можуть бути точно визначені одночасно. Чи можна точно визначити одночасно:

а) p_x і x ? б) p_x і y ? Чи можуть бути визначені одночасно три координати?

20. При якому A функція $\sin(kx)$ є розв'язком рівняння: $\hat{A}\psi = A\psi$, де $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$?

21. Чи задовольняє функція $\psi(x) = e^{ax}$ рівнянню: $\hat{A}\psi = A\psi$, де $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$?

22. Довести, що рівнянню $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$ задовольняє $\psi(x) = \cos(kx)$, а також лінійна комбінація $\psi(x) = C_1 \sin(kx) + C_2 \cos(kx)$.

23. Знайти власні функції ψ і власні значення наступних операторів:

а) $-i \frac{d}{dx}$, якщо $\psi(x) = \psi(x+a)$ (де a – стала величина);

б) $-\frac{d^2}{dx^2}$, якщо $\psi(0) = \psi(l) = 0$.

24. Знайти нормовані власні функції оператора $\hat{p}$ у координатному представленні.

25. Знайти власні значення і нормовані власні функції наступних операторів:

а) $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$;

б) $\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$;

в) $\hat{A} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} + a \sin(\varphi)$.

26. Знайти ті власні значення оператора квадрата моменту імпульсу $\hat{L}^2$, що відповідають його власній функції $Y(\theta, \varphi) = A(\cos(\theta) + 2\sin(\theta)\cos(\varphi))$.

27. Показати, що коли ψ_1 і ψ_2 – дві власні функції оператора Гамільтона, які відповідають різним власним значенням E_1 і E_2 , то будь-яка їх лінійна комбінація не буде власною функцією оператора Гамільтона.

28. Розділити змінні в рівнянні $\frac{\partial \psi(x, y)}{\partial x} - \frac{\partial \psi(x, y)}{\partial y} = 0$.

29. Показати, що в диференціальному рівнянні

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

можна розділити змінні.

30. У деякий момент часу частинка знаходиться в стані $\Psi(x) = Ae^{ikx - \frac{x^2}{a^2}}$, де A , a – сталі величини. Знайти середні значення координати x та проекції імпульсу p_x .

31. Довести, що в стаціонарному стані дискретного спектра середнє значення проекції імпульсу частинки дорівнює нулю.

32. Показати, що в стані ψ , якому відповідає визначене власне значення оператора

$\hat{L}_z$, середні значення $\hat{L}_x$ і $\hat{L}_y$ дорівнюють нулю.

33. Обчислити середні значення: а) r^{-1} ; б) r^{-2} ; в) r ; г) r^2 , якщо хвильова функція системи має вигляд: $\psi_n(r) = A r e^{-\alpha r}$.

34. Показати, що оператор радіуса-вектора частинки в p -представленні має вигляд:

$$\hat{\vec{r}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}.$$

35. Визначити власні функції і спектр власних значень оператора $\hat{x}$ в імпульсному представленні.

36. Стан частинки описується хвильовим пакетом гаусівської форми $\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2 + \frac{i}{\hbar} x p_0}$.

Знайти коефіцієнт нормування A і перейти до імпульсного представлення.

37. Знайти хвильові функції в $\vec{r}$ - і $\vec{p}$ -представленнях для частинки, яка локалізована в точці $\vec{r}_0$, і для частинки, що рухається з визначеним імпульсом $\vec{p}_0$.

38. За заданою хвильовою функцією $\Psi(x, y, z)$ обчислити імовірність перебування частинки в стані з координатою x , що лежить в інтервалі від x_1 до x_2 та з компонентою імпульсу p_x , що лежить в інтервалі від p_1 до p_2 .

39. Частинка знаходиться в нескінченно глибокій потенціальній ямі ($0 \leq x \leq a$) у стані

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{a} x\right). \text{ Одержати для неї розподіл за імпульсами.}$$

40. Гармонічний осцилятор в основному стані характеризується хвильовою функцією $\psi(x) = Ae^{-\alpha^2 x^2}$. Одержати хвильову функцію в p -представленні і знайти розподіл ймовірностей за імпульсами.

41. Частинка знаходиться в однорідному потенціальному полі $U(x) = \alpha x$. Знайти власні значення і власні функції оператора енергії в p -представленні.

42. В одновимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками ($0 \leq x \leq a$) знаходиться частинка в стані $\psi(x) = Ax(a-x)$. Знайти хвильову функцію в енергетичному представленні і обчислити середню енергію частинки.

43. Плоский ротатор знаходиться в стані, що описується функцією $\psi(\varphi) = A \sin^2(\varphi)$.

Знайти хвильову функцію в L_z -представленні та обчислити середні значення L_z та L_z^2 .

44. Визначити власні значення операторами L_z та їх імовірності для системи, що знаходиться в стані $\psi(\varphi) = A(1 + \cos(\varphi))^2$.

45. Визначити матричні елементи оператора імпульсу в енергетичному представленні для частинки, що знаходиться в нескінченно глибокій одновимірній потенціальній ямі ($0 \leq x \leq a$).
46. Показати, що часове рівняння Шредінгера дає стаціонарні розв'язки, якщо потенціальна енергія U не залежить явно від часу.
47. Як зміниться повна хвильова функція $\Psi(x, t)$, що описує стаціонарні стани, якщо змінити початок відліку потенціальної енергії на величину ΔU ?
48. З'ясувати, чи хвильова функція $\Psi(x, t) = \sum_k \psi_k(x) e^{-i\omega_k t}$, яка є суперпозицією стаціонарних станів, задовольняє часове і стаціонарне рівняння Шредінгера $\left(\omega_k = \frac{E_k}{\hbar} \right)$.
49. Використовуючи рівняння Шредінгера, одержати умову $\frac{d}{dt} \int \Psi^* \Psi d\tau = 0$, яка вказує на збереження нормування хвильової функції зі зміною часу.
50. Показати, що в стаціонарних станах густина імовірності та густина струму імовірності не залежать від часу.
51. Довести, що імовірність заданого значення будь-якої фізичної величини в стаціонарному стані не залежить від часу.
52. Знайти загальний розв'язок часового рівняння Шредінгера для вільної частинки.
53. Показати, що вільна частинка має неперервний енергетичний спектр.
54. Стан вільної частинки в момент часу $t=0$ описується хвильовою функцією:

$$\text{а) } \Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \sin\left(\frac{x p_0}{\hbar}\right); \text{ б) } \Psi(x, 0) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(i \frac{x p_0}{\hbar}\right).$$

Знайти хвильову функцію стану в наступні моменти часу.

55. Плоским ротатором називають систему з двох жорстко зв'язаних частинок, що обертаються у площині навколо свого центра інерції. Оператор енергії такого ротатора має вигляд $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ (де I - момент інерції системи). Як змінюється з часом стан плоского ротатора, якщо в момент $t=0$ він описується хвильовою функцією $\Psi(\varphi, 0) = A \sin^2(\varphi)$?

56. У момент часу $t=0$ вільна частинка описується функцією

$$\Psi(x,0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x\right). \text{ Визначити коефіцієнт } A \text{ та область локалізації частинки.}$$

Знайти густину струму імовірності j .

57. Довести, що для частинки, яка рухається в потенціальному полі $U(x)$, виконуються операторні рівності:

$$\text{а) } \frac{d}{dt}(x^2) = \frac{1}{m_0} \left(x \hat{p}_x + \hat{p}_x x \right); \quad \text{б) } \frac{d}{dt} \left(x \hat{p}_x \right) = \frac{\hat{p}_x^2}{m_0} = x \frac{\partial U}{\partial x};$$

$$\text{в) } \frac{d}{dt} \left(\hat{p}_x^2 \right) = - \left(\hat{p}_x \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial x} \hat{p}_x \right).$$

58. З'ясувати, чи буде зберігатися енергія E , проекції імпульсу, проекції і квадрат моменту імпульсу при вільному русі частинки.

59. Які з механічних величин (енергія E , проекції імпульсу, проекції і квадрат моменту імпульсу) зберігаються при русі частинки: а) в однорідному потенціальному полі $U(z) = az$ (де a – стала величина); б) у центральносиметричному потенціальному полі $U(r)$; в) в однорідному змінному полі $U(z,t) = a(t)z$?

60. Визначити, при яких умовах квадрат моменту імпульсу $\hat{L}^2$ і його проекція $\hat{L}_z$ можуть бути інтегралами руху.

61. Показати, що для системи частинок при відсутності зовнішніх сил імпульс системи буде інтегралом руху.

62. Довести справедливості наступних операторних рівнянь руху частинки в потенціальному полі $U(r)$:

$$\text{а) } \frac{dx}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{m_0}; \quad \text{б) } \frac{d \hat{p}_x}{dt} = - \frac{\partial U}{\partial x}.$$

63. Показати, що для середніх значень фізичних величин в квантовій механіці справедливе рівняння класичної динаміки

$$\frac{d \langle \vec{p} \rangle}{dt} = \langle \vec{F} \rangle,$$

де $\vec{p}$ – імпульс, а $\vec{F} = -\nabla U$, U – потенціальна енергія частинки.

64. Довести, що похідна по часу від оператора проекції моменту імпульсу $\hat{L}_z$ дорівнює оператору проекції моменту зовнішніх потенціальних сил:

$$\frac{d\hat{L}_z}{dt} = y \frac{\partial U}{\partial x} - x \frac{\partial U}{\partial y} \equiv \hat{M}_z.$$

65. Показати, що для середніх значень класичний зв'язок між моментом кількості руху і моментом потенціальної сили має місце і у квантовій механіці:

$$\frac{d\langle \vec{L} \rangle}{dt} = \langle \vec{r} \times \vec{F} \rangle, \quad \vec{F} = -\nabla U.$$

66. Показати, що збереження моменту кількості руху замкненої системи зв'язане з ізо트로пією простору.

67. Довести, що закон збереження імпульсу замкненої системи зв'язаний з однорідністю простору.

Розділ 3. Найпростіші задачі квантової механіки

§ 1. Частинка в нескінченно глибокій потенціальній ямі

Як приклад одновимірного руху можна розглянути рух частинки в прямокутній потенціальній ямі. Для простоти задачі оберемо потенціальну яму з нескінченно великими стінками.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x = 0, \quad x = a. \end{cases}$$

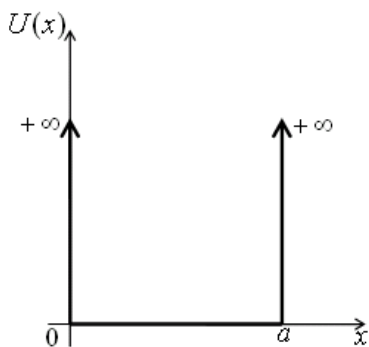


Рис. 1.

З точки зору класичної механіки у цьому випадку частинка пружно відбивається від стінок. Теплові властивості не враховуються. Для класичної частинки (кульки), яка пружно відбивається від двох стінок справедливий закон збереження енергії, тому швидкість частинки (імпульс) в кожній точці простору буде однаковою. Отже, імовірність перебування частинки в будь-якій точці простору також однакова. Енергія буде змінюватися від 0 до як завгодно великого значення.

Перейдемо до квантово-механічної задачі. Через те, що потенціальна енергія від часу не залежить, достатньо розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x). \quad (1.1)$$

Запишемо Гамільтоніан $\hat{H}$:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x). \quad (1.2)$$

Ми пишемо повні похідні, оскільки у нас одна змінна.

Розглянемо задачу в області $0 < x < a$. Тоді потенціальна енергія $U = 0$. Наше рівняння (1.1) можна записати у вигляді

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = E\varphi(x), \quad (1.3)$$

де $E > 0$. Повна енергія є невід'ємною зважаючи на те, що $U = 0$ або $U = +\infty$. Рівняння (1.3) можна звести до наступного:

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi = 0. \quad (1.4)$$

Введемо позначення

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2. \quad (1.5)$$

Отже, рівняння (1.4) можна записати у вигляді:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0. \quad (1.6)$$

Це диференціальне рівняння є рівнянням другого порядку з сталими коефіцієнтами, однорідне. Розв'язок такого рівняння шукається у вигляді експоненти

$$\varphi \sim e^{\alpha x}. \quad (1.7)$$

Підставивши (1.7) у (1.6), отримаємо

$$\alpha^2 e^{\alpha x} + k^2 e^{\alpha x} = 0. \quad (1.8)$$

Характеристичне рівняння має вигляд:

$$\alpha^2 + k^2 = 0, \quad (1.9)$$

або $\alpha^2 = -k^2$, де $\alpha_{1,2} = \pm ik$.

Запишемо розв'язок рівняння (1.6) у вигляді лінійної комбінації плоских хвиль

$$\varphi = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}. \quad (1.10)$$

У точках $x=0$ і $x=a$ потенціальна енергія перетворюється в нескінченність, тому частинка не може мати таку енергію, отже вона не може знаходитися в цих точках. Тобто,

$$\varphi(x=0) = \varphi(x=a) = 0. \quad (1.11)$$

Якщо підставити першу умову з (1.11) у рівняння (1.10), то отримаємо

$$C_1 + C_2 = 0, \quad C_2 = -C_1. \quad (1.12)$$

Тоді (1.10) можна записати так:

$$\varphi = C_1 e^{ikx} - C_1 e^{-ikx} = C_1 (\cos kx + i \sin kx - \cos kx + i \sin kx) = 2C_1 \sin kx \equiv C \sin kx. \quad (1.13)$$

Використавши другу умову з (1.11), отримаємо

$$\varphi(a) = C \sin ka = 0. \quad (1.14)$$

Коефіцієнт $C \neq 0$, тоді $\varphi(x)$ в (1.13) було б рівне нулю для будь-якого x . Але $\varphi(x)$ задає імовірність частинки, яка існує. Тому з рівняння (1.14) видно, що $\sin ka = 0$. Отже,

$$ka = \pi n, \quad k_n = \frac{\pi n}{a}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.15)$$

Знаючи k_n , визначаємо енергію частинки

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad (1.16)$$

Зазначимо, що $n \neq 0$, оскільки при $n=0$ функція $\varphi(x)=0$ для будь-якого значення x . Серед всіх n достатньо вибрати додатнє значення, бо від'ємні значення задають ту ж саму енергію. Нової інформації про систему від'ємні значення n не дають. Тому у формулі (1.16) $n=1,2,3,\dots$ – квантове число, а хвильова функція частинки представляється формулою:

$$\varphi_n(x) = C \sin \frac{\pi n}{a} x. \quad (1.17)$$

З умови нормування хвильової функції

$$\int_0^a \varphi^*(x) \varphi(x) dx = \int_0^a \varphi^2(x) dx = C^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n}{a} x dx = 1 \quad (1.18)$$

можна визначити C

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (1.19)$$

Запишемо тепер хвильову функцію стаціонарного стану з енергією:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad (1.20)$$

яка є розв'язком загального рівняння Шредінгера

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} e^{-\frac{i \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 t} \sin \frac{\pi}{a} nx. \quad (1.21)$$

З формули (1.20) видно, що енергія частинки змінюється дискретно при зміні квантового числа n . Зокрема,

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad E_2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} 4 = 4E_1, \quad E_3 = 9E_1.$$

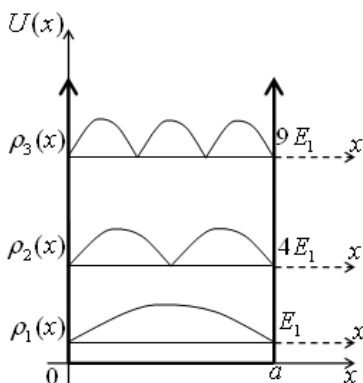


Рис. 2.

Причому «відстань» між сусідніми енергетичними рівнями зростає при збільшенні квантового числа n , а мінімальне значення енергії відмінне від нуля. Найменше значення енергії називається енергією основного стану, інші значення енергії – це енергії збуджених станів.

Видно, що властивості квантової частинки

відрізняються від властивостей класичної частинки. Зокрема, те, що найменше значення енергії квантової частинки відмінне від нуля, можна пояснити на основі принципу невизначеності Гайзенберга. Коли частинка рухається від 0 до a , то середнє квадратичне відхилення координати відмінне від нуля, але скінченне. Згадаймо нерівність Гайзенберга

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Якщо $\langle (\Delta x)^2 \rangle \neq 0$, то середньо-квадратичне відхилення імпульсу $\langle (\Delta p_x)^2 \rangle$ відмінне від нуля, а це означає, що відмінне від нуля середнє значення кінетичної енергії частинки, яка для розглядуваної задачі дорівнює повній енергії частинки ($U(x) = 0$).

Густину імовірності перебування частинки в просторі задає хвильова функція відповідного стану:

$$\rho_n = \psi_n^* \psi_n = e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \varphi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \varphi_n(x) = \varphi_n^2(x) = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi}{a} n x.$$

Для перших трьох стаціонарних станів отримуємо наступні функції для густин імовірностей:

$$\rho_1(x) = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi}{a} x;$$

$$\rho_2(x) = \frac{2}{a} \sin^2 2 \frac{\pi}{a} x;$$

$$\rho_3(x) = \frac{2}{a} \sin^2 3 \frac{\pi}{a} x.$$

Графічне зображення цих функцій подано на рис. 2. Бачимо, що частинка, яка перебуває в основному стані, найімовірніше знаходиться на середині квантової ями. Якщо частинка буде перебувати в першому збудженому стані, то точками максимуму $\rho_2(x)$ є

$$x_1 = \frac{1}{4} a \text{ і } x_2 = \frac{3}{4} a.$$

Для дуже великого n кількість максимумів буде великою і також дорівнюватиме n . Частинка рівноімовірно перебуває в будь-якій точці простору. Отже, властивості квантової частинки і класичної частинки збігаються для дуже великих n .

Покажемо, що класична задача зводиться до системи з дуже великим n . Нехай енергія частинки дорівнює $1\text{ аґ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Аґе}$. Використаємо отримані формули для класичної та квантової задач.

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} n^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_k L_y^2} N^2,$$

де $m_e \sim 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$; $m_k \sim 10^{-3} \text{ кг}$; $a \sim 10^{-10} \text{ м}$; $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$; $L_y \sim 1 \text{ м}$.

$$N^2 = \frac{m_k L_y}{m_e a^2} n^2; \quad N = \sqrt{\frac{m_k L_y}{m_e a^2}} n; \quad N \sim \sqrt{\frac{10^{-3} \cdot 1}{10^{-30} \cdot 10^{-20}}} n = \sqrt{10^{47}} n = 10^{23} \sqrt{10} n.$$

Якщо розглядати класичну систему, то енергія її буде визначатися дуже великим квантовим числом, тому густина імовірності практично буде однаковою в кожній точці простору. Коли ж змінювати енергію класичної частинки, то її зміна (при зміні N на одиницю) буде надзвичайно малою. Тобто, енергія буде змінюватися практично неперервно.

$$E_N = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_y^2} N^2; \quad E_{N+1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_y^2} (N+1)^2; \quad \Delta E_N = E_{N+1} - E_N \approx 0.$$

Отже, результати квантової механіки і класичної механіки однакові для станів з дуже великими квантовими числами або для частинок з відносно великими масами ($m_0 > 10^{-3} \text{ кг}$).

§ 2. Лінійний гармонічний осцилятор

Класичний осцилятор – це частинка, яка коливається. Лінійний осцилятор коливається вздовж прямої лінії. Гармонічний осцилятор коливається за законом синуса або косинуса

$$x = a \sin(\omega t + \varphi), \quad (2.1)$$

якщо на частинку діє пружня сила

$$F = -kx = -m\omega x. \quad (2.2)$$

Повна енергія осцилятора, що задається амплітудою коливань, визначається формулою:

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 a^2. \quad (2.3)$$

При зміні амплітуди коливань енергія класичного осцилятора змінюється неперервно від нуля до як завгодно великої величини. Що стосується імовірності перебування частинки в просторі, то максимальне значення густини імовірності буде знаходитися біля точок повороту, мінімальне – біля положення рівноваги.

Розглянемо тепер квантово-механічну задачу. Гамільтоніан системи має вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad (2.4)$$

бо $U(x) = \frac{1}{2} kx^2$, оскільки $F = -\text{grad}U = -\frac{\partial U}{\partial x} = -kx$.

Запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера, провівши ряд перетворень:

$$\hat{H} \varphi(x) = E \varphi(x), \quad (2.5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \varphi(x) = E \varphi(x), \quad (2.6)$$

$$-\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{m \omega^2}{\hbar^2} x^2 \varphi(x) = \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x). \quad (2.7)$$

Для зручності варто перейти до безрозмірних змінних $\xi = \frac{x}{x_0}$, де x_0 – деяка характеристична довжина. Тоді

$$\frac{d\varphi}{dx} = \frac{d\varphi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{x_0} \frac{d\varphi}{d\xi}. \quad (2.8)$$

Проведемо перетворення рівняння (2.7):

$$-\frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x_0^4 \xi^2 \varphi(\xi) = \frac{2mE}{\hbar^2} x_0^2 \varphi(\xi). \quad (2.9)$$

Виберемо x_0 таким, щоб виконувалась умова $\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x_0^4 = 1$, тому $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

$$\frac{2mE}{\hbar^2} x_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{\hbar}{m\omega} = \frac{2E}{\hbar\omega}.$$

Рівняння (2.9) зведеться до наступного рівняння:

$$-\frac{d^2 \varphi}{d\xi^2} + \xi^2 \varphi(\xi) = \frac{2E}{\hbar\omega} \varphi(\xi). \quad (2.10)$$

Проведемо аналіз рівняння (2.10). З цією метою розглянемо випадок, коли ξ є дуже великим ($\xi \rightarrow \infty$). Тоді (2.10) спроститься:

$$-\frac{d^2\varphi_\infty}{d\xi^2} + \xi^2\varphi_\infty = 0. \quad (2.11)$$

Розв'язок цього рівняння необхідно вибрати у вигляді $\varphi_\infty = e^{\alpha\xi^2}$. Можна переконатися, що φ_∞ буде розв'язком (2.11) при певних значеннях α . Визначимо похідні:

$$\varphi_\infty' = 2\alpha\xi e^{\alpha\xi^2}; \quad \varphi_\infty'' = 2\alpha e^{\alpha\xi^2} + 4\alpha^2\xi^2 e^{\alpha\xi^2} = 4\alpha^2\xi^2 e^{\alpha\xi^2}, \quad (2.12)$$

Бо перший доданок є набагато менше за другий.

Підставимо φ_∞'' у рівняння (2.11). Отримаємо, що

$$4\alpha^2\xi^2 e^{\alpha\xi^2} + \xi^2 e^{\alpha\xi^2} = 0; \quad (1 - \alpha^2)\xi^2 e^{\alpha\xi^2}; \quad \alpha_{1,2} = \pm \frac{1}{2}.$$

Є два розв'язки з додатнім і від'ємним α , але $\varphi_\infty = e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ – не фізичний розв'язок, оскільки $\varphi_\infty \rightarrow \infty$ при $\xi \rightarrow \infty$. Тому

$$\varphi_\infty = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \quad (2.13)$$

що є гаусівською кривою.

Використовуючи (2.13), запишемо хвильову функцію з (2.10) у вигляді:

$$\varphi(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U(\xi), \quad (2.14)$$

де $U(\xi)$ – деяка невідома функція. Тоді маємо:

$$\begin{aligned} \varphi'(\xi) &= -\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U(\xi) + e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U'(\xi); \\ \varphi''(\xi) &= -e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U(\xi) + \xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U(\xi) - 2\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U'(\xi) + e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U''(\xi). \end{aligned}$$

Підставляємо знайдену похідну в (2.10)

$$e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U(\xi) - \xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U(\xi) + 2\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U'(\xi) - e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U''(\xi) + \xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U(\xi) - \varepsilon e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U(\xi) = 0 \quad (2.15)$$

Рівняння (2.15) спрощується до наступного:

$$U''(\xi) - 2\xi^2 U'(\xi) + (\varepsilon - 1)U(\xi) = 0. \quad (2.16)$$

Розв'язок (2.16) шукаємо у вигляді степеневого ряду:

$$U(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k. \quad (2.17)$$

Отже,

$$U'(\xi) = \sum_k a_k k \xi^{k-1}; \quad U''(\xi) = \sum_k a_k k(k-1) \xi^{k-2}. \quad (2.18)$$

Підставимо (2.18) у (2.17). Отримаємо

$$\sum_k k(k-1) a_k \xi^{k-2} - \sum_k 2k a_k \xi^k + (\varepsilon - 1) \sum_k a_k \xi^k = 0 \quad (2.19)$$

або

$$\sum_k b_k \xi^k = 0. \quad (2.20)$$

З точки зору математики рівняння (2.20) виконується тоді, коли всі коефіцієнти біля кожного ξ^k дорівнюють нулю. Визначимо коефіцієнт біля ξ^k

$$\xi^k : b_k = (k+2)(k+1)a_{k+2} - 2ka_k + (\varepsilon - 1)a_k = 0.$$

Отже,

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2)(k+1)} a_k. \quad (2.21)$$

Аналіз ряду (2.17) при умові (2.21) показує, що, наприклад, для парних значень k при великих ξ ($\xi \rightarrow \infty$) функція $U(\xi) \propto e^{\xi^2}$. Тоді функція φ буде прямувати до ∞ . Але згідно з фізичними міркуваннями функція φ має бути обмеженою. Тому ряд (2.17) треба обірвати, тобто замінити його поліномом. Це можна зробити тому, що в (2.21) входить невідома величина ε .

Припустимо, що при $k=n$, коефіцієнт $a_{k=n} \neq 0$. Підберемо ε так, щоб $a_{n+2} = 0$. Тоді, згідно з (2.21), $a_{n+4} = 0$. Це буде тоді, коли $\varepsilon = 2n+1$. Отже, $U(\xi)$ стає поліномом n -ого степеня.

$$U_n(\xi) = \sum_{k=0}^n a_k \xi^k. \quad (2.22)$$

Можна довести, що цей поліном виражається через поліном Ерміта

$$U_n(\xi) = C_n H_n(\xi), \quad (2.23)$$

де $H_n = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$ – поліном Ерміта.

Коефіцієнт C_n шукаємо з умови нормування хвильової функції

$$\varphi_n(\xi) = C_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad (2.24)$$

$$\text{а саме: } \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^2(x) dx = x_0 \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^2(\xi) d\xi = 1. \quad (2.25)$$

Рівняння (2.25) зводиться до наступного:

$$C_n x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2} H_n^2(\xi) d\xi = 1. \quad (2.26)$$

Після інтегрування отримаємо, що

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} x_0 2^n n!}}.$$

Визначимо енергію частинки: $\varepsilon = 2n + 1$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, тому

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

Найменша енергія $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ – енергія основного стану.

Її також називають енергією «нульових» коливань. Вона відмінна від нуля. Тобто, квантовий осцилятор завжди коливається. Енергії збуджених станів можна записати так:

$$E_1 = E_0 + \hbar\omega, \quad E_2 = E_0 + 2\hbar\omega,$$

тобто

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega.$$

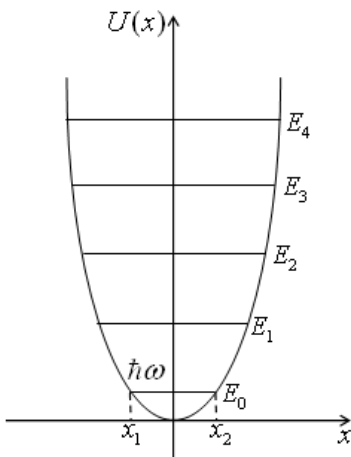


Рис. 3.

Енергетичні рівні подібні на фоні графіку для потенціальної енергії $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ (рис. 3).

Сукупність енергетичних рівнів називається спектром осцилятора. Видно, що спектр є еквідистантним. Варто зазначити, що енергію основного стану можна визначити із принципу невизначеності Гайзенберга.

Розглянемо тепер імовірність перебування частинки в просторі. Для класичної частинки $E = T + U$. Частинка рухається між точками повороту (x_1 , x_2), які можна знайти з рівняння $E = U(x)$.

Для квантової частинки знайдемо хвильову функцію основного стану ($n=0$).

Маємо, що

$$\varphi_0(\xi) = C_0 e^{-\xi^2/2} H_0(\xi),$$

$$\text{де } C_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} x_0}}, \quad H_0(\xi) = (-1)^0 e^{\xi^2} e^{-\xi^2} = 1.$$

Отже, функція $\varphi_0(\xi)$ має вигляд:

$$\varphi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} x_0}} e^{-\xi^2/2} = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} x_0}} e^{-\frac{x^2}{\alpha x_0}} = \varphi_0(x).$$

Знайдемо «класичні» точки повороту осцилятора:

$$E_0 = U(x), \quad \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Rightarrow \frac{\hbar}{m \omega} = x^2; \quad x_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} = \pm x_0.$$

Видно, що густина імовірності відмінна від нуля для $x \in (-\infty, +\infty)$, оскільки

$$\rho_0(x) = \varphi_0^2(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi} x_0} e^{-\frac{x^2}{x_0}} \neq 0 \quad \text{не лише для}$$

$-x_0 \leq x \leq x_0$, але й тоді, коли $|x| > x_0$ (рис. 4.).

Розглянемо перший збуджений стан.

Хвильова функція знаходиться з ряду перетворень:

$$\varphi_1(\xi) = C_1 e^{-\xi^2/2} H_1(\xi); \quad C_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{1/2} x_0}}; \quad H_1(\xi) = (-1)^1 e^{\xi^2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2} = -e^{\xi^2} e^{-\xi^2} (-2\xi) = 2\xi.$$

Отримуємо, що

$$\rho_1(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi} x_0} e^{-\xi^2} 4\xi^2 = \frac{1}{2\sqrt{\pi} x_0} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} \frac{x^2}{x_0^2} = \frac{2}{\sqrt{\pi} x_0^3} x^2 e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}.$$

На основі наведених формул можна зробити наступні висновки.

1. Якщо осцилятор знаходиться в основному стані, то густина імовірності приймає максимальне значення в точці $x=0$, тобто осцилятор найбільш імовірно знаходиться в положенні рівноваги. Поведінка квантового осцилятора в цьому стані є абсолютно протилежною до поведінки класичного осцилятора.

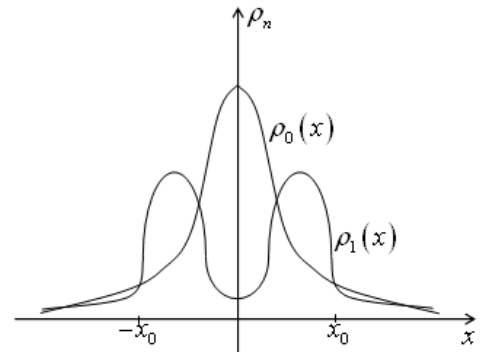


Рис. 4.

2. Імовірність перебування частинки не дорівнює нулю і в тій області простору, де класичний осцилятор знаходиться не може. Отже імовірність перебування квантового осцилятора не дорівнює нулю навіть в області поза точками повороту класичного осцилятора. Кажуть, що осцилятор «тунелює» в цю область.

3. Якщо частинка перебуває у першому збудженому стані, то густина імовірності дорівнює нулю в точці $x=0$ і є а максимальною в точках, які знаходяться близько до класичних точок повороту.

4. Аналіз показує, що кількість максимумів у функції $\rho_n(x)$ дорівнює $n+1$, тому, коли n велике, максимуми знаходяться в області $|x| \leq x_0$ і величина їх зростає біля класичних

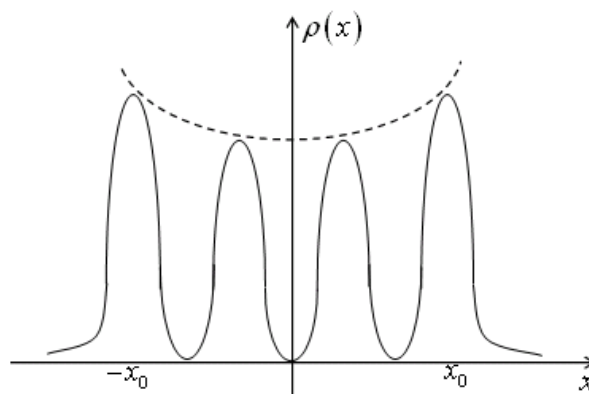


Рис. 5.

точок повороту (рис. 5).

§ 3. Проходження частинки в полі потенціального бар'єру

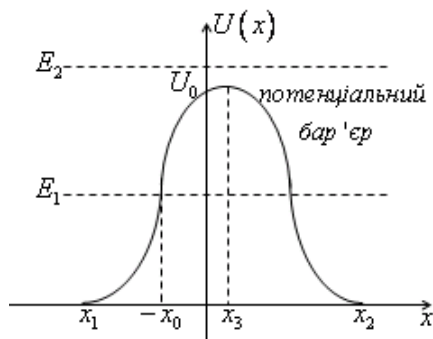


Рис. 6

Нехай потенціальна енергія частинки $U(x)$ має вигляд, що наведений на рис. 6. Частинка має певну енергію E і рухається вздовж осі OX . Розглянемо два випадки:

- 1) $E < U_0$,
- 2) $E > U_0$,

де U_0 – максимум функції $U = U(x)$. U_0 називають висотою бар'єру. В такому потенціальному полі енергія класичної частинки є однакова в усьому просторі:

$$E = T + U = \text{const}, \quad -\infty < x < +\infty.$$

Розглянемо перший випадок, коли енергія частинки (E_1) менша за висоту бар'єру. Виходячи з того, що повна енергія є інтегралом руху, приходимо до висновку, що класична частинка дійде лише до точки x_0 , яка є точкою повороту. В області від x_1 до x_0 частинка буде рухатися з прискоренням. Якщо ж енергія частинки (E_2) більша за U_0 (другий випадок), то частинка в області від x_1 до $-x_2$,

буде рухатися з прискоренням. В області від x_1 до x_3 прискорення буде направленим проти осі OX , тобто рух буде рівносповільненим, а якщо $x_3 \leq x \leq x_2$ – рівноприскореним. В областях простору $x < x_1$ і $x > x_2$ частинка рухається з початковою швидкістю. Отже, в першому випадку частинка з енергією E_1 обов'язково (ймовірність дорівнює одиниці) відіб'ється від бар'єра, а в другому випадку, коли її енергія $E_2 > U_0$, вона обов'язково пройде через бар'єр.

Перейдемо до вивчення властивостей квантової частинки. Спростимо задачу, розглянувши прямокутний бар'єр (рис. 7).

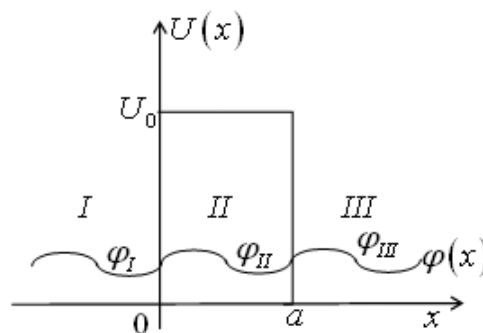


Рис. 7

Гамільтоніан задачі запишемо у вигляді:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x), \quad (3.1)$$

де

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > a \\ U_0, & x \in [0, a] \end{cases}. \quad (3.2)$$

Розв'язком стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (3.3)$$

є хвильова функція виду:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_I, & x < 0 \\ \varphi_{II}, & x \in [0, a] \\ \varphi_{III}, & x > a. \end{cases}$$

Знайдемо розв'язки рівняння Шредінгера (3.3) для всіх трьох областей зміни x . Для першої області ($x < 0$) отримаємо:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_I(x) = E\varphi_I(x).$$

Хвильова функція має вигляд:

$$\varphi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{-ik_1 x}, \quad (3.4)$$

де $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$

Аналогічний результат отримаємо для третьої області ($x > a$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_{III}(x) = E \varphi_{III}(x);$$

$$\varphi_{III}(x) = C_1 e^{ik_3 x} + C_2 e^{-ik_3 x} = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}, \quad (3.5)$$

$$\text{де } k_3 = k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

У другій області ($x \in [0, a]$) рівняння (3.3) запишеться так:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_0 \right) \varphi_{II}(x) = E \varphi_{II}(x).$$

Це рівняння зводиться до наступного:

$$\frac{d^2 \varphi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \varphi_{II}(x) = 0. \quad (3.6)$$

Розв'язок такого рівняння має вигляд експоненти

$$\varphi_{II}(x) = e^{\alpha x}.$$

Величина α знаходиться з характеристичного рівняння

$$\alpha^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) = 0.$$

Знайдемо α для різних співвідношень між енергією частинки і висотою бар'єру.

Нехай $E > U_0$. Тоді $\alpha = \pm i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)}$, а

$$\varphi_{II}(x) = B_1 e^{i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)} x} + B_2 e^{-i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)} x} = B_1 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad (3.7)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)}.$$

Якщо ж $E < U_0$, то $\alpha_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} = \pm \chi$, $\chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}$, а хвильова функція буде мати вигляд:

$$\varphi_{II}(x) = B_1 e^{\chi x} + B_2 e^{-\chi x}. \quad (3.8)$$

Розглянемо знову хвильову функцію частинки в області $x < 0$. Потенціальна енергія в цій області рівна нулю. Отже, частинка є вільною, тому вона характеризується певним значенням імпульсу (хвиля де Бройля) $p_x = \hbar k_1$. Перший доданок у формулі (3.4) описує рух частинки вздовж осі OX , а другий – в протилежному напрямі.

Тоді $|A_1|^2$ – імовірність руху частинки вздовж осі OX , тому $|A_1|^2 = 1$, $A_1^2 = 1$, а тоді $|A_2|^2$ – імовірність руху частинки в протилежному напрямку. В третій області частинка також є вільною, бо її потенціальна енергія дорівнює нулю. Тому якщо частинка потрапила в третю область з першої, то вона може рухатися тільки вздовж осі OX . Не існує причини, щоб вона в цій області почала рухатись в протилежному напрямку. Отже, $|C_2|^2 = 0$, тому $C_2 = 0$.

Величина $|C_1|^2$ задає імовірність того, що частинка в III області рухається вздовж осі OX . Ця фізична ситуація можлива тоді, коли частинка з області I перейшла в область III. Отже, $|C_1|^2$ є імовірністю того, що частинка пройшла через потенціальний бар'єр (не відбилася від нього). Введемо величину коефіцієнту прозорості потенціального бар'єру:

$$D \equiv |C_1|^2.$$

Нагадаємо, що $|A_2|^2$ є імовірністю того, що частинка рухається в області I у протилежному напрямку до осі OX . Тому логічно назвати цю величину коефіцієнтом відбивання від потенціального бар'єру:

$$R \equiv |A_2|^2. \quad (3.10)$$

Зрозуміло, що повинна виконуватись загальна умова:

$$D + R = 1.$$

Враховуючи те, що хвильова функція частинки визначає імовірність перебування її в просторі, вона повинна бути неперервною, обмеженою та однозначною. Крім того, справедливе рівняння неперервності:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0, \quad (3.11)$$

де

$$\rho = \psi^* \psi, \text{ а } \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right). \quad (3.12)$$

З рівнянь (3.11) і (3.12) видно, що неперервною повинна бути також і перша похідна від хвильової функції. В областях $x < 0$, $0 < x < a$, $x > a$ хвильова функція задовольняє

всім необхідним умовам. Запишемо умови неперервності для функцій та їх похідних у точках $x=0$ і $x=a$.

$$\left. \begin{aligned} \psi_I(x=0) &= \psi_{II}(x=0) \\ \frac{\partial \psi_I}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} \Big|_{x=0} \\ \psi_{II}(x=a) &= \psi_{III}(x=a) \\ \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} \Big|_{x=a} &= \frac{\partial \psi_{III}}{\partial x} \Big|_{x=a} \end{aligned} \right\} \quad (3.13)$$

Умови (3.13) називають умовами «зшивання» хвильової функції. Розглянемо випадок, коли $E > U_0$.

Підставимо (3.4)-(3.7) у (3.13):

$$\left. \begin{aligned} 1 + A_2 &= B_1 + B_2 \\ ik_1(1 - A_2) &= ik_2(B_1 - B_2) \\ B_1 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} &= C_1 e^{ik_1 a} \\ ik_2(B_1 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a}) &= ik_1 C_1 e^{ik_1 a} \end{aligned} \right\} \quad (3.14)$$

Є система чотирьох лінійних алгебраїчних рівнянь відносно чотирьох невідомих. Система має єдиний розв'язок:

$$C_1 = \frac{e^{-ik_2 a}}{\cos k_2 a + \frac{i}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2 a}. \quad (3.15)$$

Тоді коефіцієнт D запишеться у вигляді

$$\begin{aligned} D = C_1^* C_1 &= \frac{e^{ik_2 a}}{\cos k_2 a - \frac{i}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2 a} \cdot \frac{e^{-ik_2 a}}{\cos k_2 a + \frac{i}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2 a} = \\ &= \frac{1}{\cos^2 k_2 a + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2 k_2 a}. \end{aligned}$$

Після деяких перетворень

$$\cos^2 k_2 a = 1 - \sin^2 k_2 a,$$

$$\left(\frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right)^2 - 1 \right) \sin^2 k_2 a = \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2 k_2 a,$$

отримуємо компакту формулу для коефіцієнта проходження частинки крізь бар'єр:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2 k_2 a}. \quad (3.16)$$

Коефіцієнт відбивання від бар'єра дорівнює:

$$R = 1 - D = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2 k_2 a} = \frac{\frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2 k_2 a}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2 k_2 a}. \quad (3.17)$$

Формула (3.17) справедлива для випадку, коли енергія частинки більша за висоту бар'єру $E > U_0$. Для класичної частинки коефіцієнт відбивання від бар'єру дорівнював би нулю, але з (3.17) видно, що $R \neq 0$. Тобто квантова частинка може відбитися від бар'єру. Тоді зрозуміло, що $D < 1$. Лише для певних значень енергії $R = 0$, а саме коли $\sin k_2 a = 0, k_2 a = \pi n$. Для таких станів отримуємо, що

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)} a = \pi n,$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} + U_0, \quad n \neq 0.$$

Стани з такою енергією називаються резонансними. Для резонансних станів коефіцієнт прозорості дорівнює 1. При інших значеннях енергії $R \neq 0$, а $D < 1$.

Розглянемо тепер випадок, коли $E < U_0$. Тоді

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)} = i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} \equiv i\chi,$$

$$\varphi_{II}(x) = B_1 e^{\chi x} + B_2 e^{-\chi x},$$

φ_I і φ_{III} залишаються такими самими.

Записуємо умови зшивання, визначаємо C_1 і коефіцієнт проходження частинки крізь потенціальний бар'єр. Отримуємо, що

$$D = \frac{1}{\cos^2 k_2 a + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2 k_2 a}.$$

Перейдемо від параметра k_2 до χ :

$$\cos k_2 a = \frac{e^{ik_2 a} + e^{-ik_2 a}}{2} = \frac{e^{-\chi a} + e^{\chi a}}{2} = \operatorname{ch} \chi a;$$

$$\sin k_2 a = \frac{e^{ik_2 a} - e^{-ik_2 a}}{2i} = \frac{e^{-\chi a} - e^{\chi a}}{2i} = -\frac{1}{i} \operatorname{sh} \chi a.$$

Тоді формула для коефіцієнта проходження D буде мати вигляд:

$$D = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \chi a - \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{i\chi} + \frac{i\chi}{k_1} \right)^2 \operatorname{sh}^2 \chi a} = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \chi a + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{\chi} + \frac{\chi}{k_1} \right)^2 \operatorname{sh}^2 \chi a};$$

Якщо врахувати, що $\operatorname{ch}^2 \chi a - \operatorname{sh}^2 \chi a = 1$, отримаємо:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{\chi} + \frac{\chi}{k_1} \right)^2 \operatorname{sh}^2 \chi a}. \quad (3.18)$$

Досить часто в різних задачах розглядається широкий бар'єр, для якого виконується умова $\chi a \gg 1$. Для цього випадку матимемо

$$\operatorname{sh}^2 \chi a = \left(\frac{e^{\chi a} - e^{-\chi a}}{2} \right)^2 = \left(\frac{e^{\chi a}}{2} \right)^2 = \frac{e^{2\chi a}}{4},$$

а формула (3.18) спроститься до наступного вигляду

$$D = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{\chi} + \frac{\chi}{k_1} \right)^2 \frac{e^{2\chi a}}{4}} \approx \frac{1}{\frac{1}{16} \left(\frac{k_1}{\chi} + \frac{\chi}{k_1} \right)^2} e^{-2\chi a} = D_0 e^{-2\chi a}. \quad (3.19)$$

Коефіцієнт D_0 біля експоненти слабо залежить від енергії і близький до одиниці, тому часто D записують так:

$$D = e^{-2\chi a}. \quad (3.20)$$

Повернемось до формули (3.19) і проаналізуємо її, записавши χ в явному вигляді:

$$D = D_0 e^{-2a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}}. \quad (3.21)$$

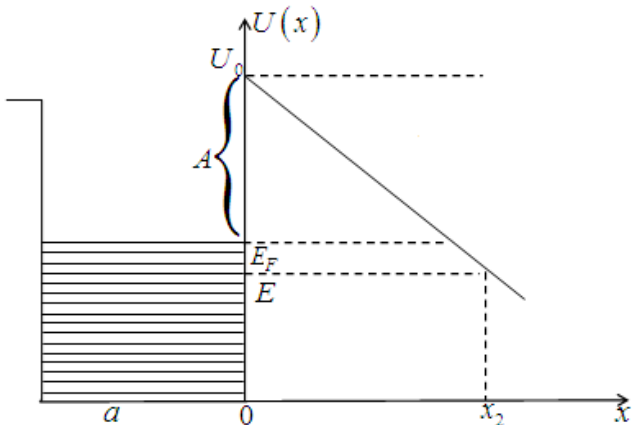


Рис. 8.

Коли $E < U_0$, то класична частинка обов'язково відіб'ється від бар'єру, тобто для неї $D=0$. Для квантової частинки $D \neq 0$ навіть у цьому випадку. Таким чином, незважаючи на те, що $E < U_0$ існує імовірність проходження частинки через цей бар'єр. У цьому випадку кажуть, що частинка тунелює через бар'єр. Як видно з

(3.21), коефіцієнт проходження частинки буде найбільший, коли бар'єр дуже вузький, а різниця між енергією і висотою бар'єру мінімальна.

Для електронів металу справедлива модель потенціальної ями скінченої висоти, тобто електрони металу знаходяться в такій потенціальній ямі. При низькій температурі вони займають енергетичні рівні ями до певного значення енергії, тому що їх є скінченне число, яке дорівнює числу атомів у кристалі. Кожен атом має один валентний електрон і на кожному рівні перебуває два електрони з різними спінами. Енергія, яка дорівнює різниці між висотою потенціальної ями і найбільшою енергією електронів (енергією Фермі) називається роботою виходу. При накладанні до поверхні металу зовнішнього електричного поля змінюється форма потенціальної ями, як показано на рис. 8, тому за відсутності поля, електрони не можуть вийти на поверхню металу без додаткової енергії (енергії фотона, коливань ґратки). У зовнішньому електричному полі завдяки тому, що бар'єр має скінчену ширину, електрони можуть тунелювати через цей бар'єр. Цим пояснюється явище холодної емісії – явище викидання електронів з поверхні металу під дією електричного поля. Зауважимо, що цей ефект можна пояснити лише на основі квантово-механічного підходу.

Узагальнимо формулу для бар'єру довільної форми

$$D = D_0 e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E)} dx}, \quad (3.22)$$

де x_1, x_2 – точки повороту, які знаходяться з умови

$$U(x) = E. \quad (3.23)$$

Розглянемо детальніше найпростішу теорію явища холодної емісії. Використовуючи умову (3.23) визначимо x_1 та x_2 :

$$x_1 = 0, \quad U_0 - e\epsilon x = E, \quad x_2 = \frac{U_0 - E}{e\epsilon}. \quad (3.24)$$

Тоді маємо:

$$\begin{aligned} \int_0^{x_2} \sqrt{U(x) - E} dx &= \int_0^{x_2} \sqrt{U_0 - e\epsilon x - E} dx = \int_0^{x_2} \sqrt{e\epsilon} \sqrt{\frac{U_0 - E}{e\epsilon} - x} dx = \\ &= \sqrt{e\epsilon} \int_0^{x_2} (x_2 - x)^{1/2} d(x_2 - x) = \sqrt{e\epsilon} \left. \frac{(x_2 - x)^{3/2}}{3/2} \right|_0^{x_2} = \sqrt{e\epsilon} \frac{2}{3} x_2^{3/2} = \\ &= \frac{2}{3} \sqrt{e\epsilon} \left(\frac{U_0 - E}{e\epsilon} \right)^{3/2} = \frac{2}{3} \frac{(U_0 - E)^{3/2}}{e\epsilon}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Підставимо (3.25) у (3.22):

$$D = D_0 e^{-2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{2(U_0 - E)^{3/2}}{3e\varepsilon}}. \quad (3.26)$$

Формулу (3.26) можна записати компактно:

$$D = D_0 e^{-\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}}, \quad (3.27)$$

де

$$\varepsilon_0 = \frac{4}{3e} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (U_0 - E)^{3/2}. \quad (3.28)$$

З фізичних міркувань зрозуміло, що густина струму буде пропорційною коефіцієнту прозорості бар'єру. Отже, $J = J_0 e^{-\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}}$ – залежність густини струму від напруженості ε . Така залежність густини струму від напруженості електричного поля узгоджується з експериментальними результатами і вказує на те, що в електричному полі не виконується закон Ома.

§4. Обертальний момент імпульсу (момент кількості руху)

квантово-механічної системи

Виходячи з ізотропності простору для замкненої системи отримаємо закон збереження моменту імпульсу. Оператор повороту системи на кут $\delta\varphi$ дорівнює:

$$\hat{T}_{\delta\varphi} = e^{\frac{i}{\hbar}\delta\varphi\hat{L}} = e^{\frac{i}{\hbar}\delta\varphi\hbar\hat{L}} = e^{\frac{i}{\hbar}\delta\varphi L_z}.$$

З ізотропності простору маємо:

$$[\hat{T}_{\delta\varphi}, \hat{H}] = 0. \quad (4.1)$$

Отже, $[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$.

Таким чином, очевидно, що ця проекція імпульсу є інтегралом руху. З теореми про можливість одночасного вимірювання двох фізичних величин можна зробити висновок: існують стани системи, в яких можна виміряти як енергію, так і проекцію імпульсу $\hat{L}_z$. Ці стани описуються власними функціями $\hat{H}$ і $\hat{L}_z$:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (4.2)$$

$$\hat{L}_z\Psi = L_z\Psi. \quad (4.3)$$

Оператори $\hat{H}$ і L_z мають спільні власні функції. Проте відомо, що

$$\left[L_x, L_y \right] = i\hbar L_z; \quad \left[L_z, L_x \right] = i\hbar L_y; \quad \left[L_y, L_z \right] = -i\hbar L_x. \quad (4.4)$$

Отже, справедливі наступні нерівності Гайзенберга:

$$\left. \begin{aligned} & \left\langle (\Delta L_x)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta L_y)^2 \right\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \left\langle \Delta L_z^2 \right\rangle \\ & \left\langle (\Delta L_z)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta L_x)^2 \right\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \left\langle \Delta L_y^2 \right\rangle \\ & \left\langle (\Delta L_y)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta L_z)^2 \right\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \left\langle \Delta L_x^2 \right\rangle \end{aligned} \right\} \quad (4.5)$$

Це означає, що не існує стану, в якому можна точно виміряти проекції імпульсу L_x, L_y, L_z . Зупинимося тепер на властивостях квадрату моменту імпульсу замкненої системи. Оператор цієї величини дорівнює:

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2; \quad (4.6)$$

Доведемо, що цей оператор комутує з проекціями $\hat{L}$. Розглянемо

$$\begin{aligned} \left[L_x, L^2 \right] &= \left[L_x, \left(L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \right) \right] = \left[L_x, L_x^2 \right] + \left[L_x, L_y^2 \right] + \left[L_x, L_z^2 \right] = \\ &= L_x \left[L_x, L_x \right] + \left[L_x, L_x \right] L_x + L_y \left[L_x, L_y \right] + \left[L_x, L_y \right] L_y + L_z \left[L_x, L_z \right] + \left[L_x, L_z \right] L_z = \\ &= L_x i\hbar L_y + i\hbar L_y L_x + L_y \left(-i\hbar L_x \right) - i\hbar L_x L_y = 0 \end{aligned}$$

Отже, комутатор

$$\left[L_x, L^2 \right] = 0. \quad (4.7)$$

Аналогічно

$$\left[L_x, L^2 \right] = 0, \left[L_y, L^2 \right] = 0.$$

Бачимо, що квадрат модуля моменту імпульсу і одна з проекцій моменту імпульсу можуть бути одночасно точно виміряні. Як правило, у парі з L^2 вибирають проекцію L_z . Часто зручно ввести нові оператори

$$L_+ = L_x + iL_y; \quad L_- = L_x - iL_y. \quad (4.8)$$

Розглянемо комутатор

$$\begin{aligned} \left[L_z, L_+ \right] &= \left[L_z, \left(L_x + iL_y \right) \right] = \left[L_z, L_x \right] + i \left[L_z, L_y \right] = \\ &= i\hbar L_y + i(-i\hbar) L_x = \hbar \left(L_x + iL_y \right) = \hbar L_+; \end{aligned} \quad (4.9)$$

Можна довести, що

$$\left[L_z, L_- \right] = -\hbar L_- . \quad (4.10)$$

Рівняння (4.3) та (4.10) об'єднаємо в одне

$$\left[L_z, L_{\pm} \right] = \pm \hbar L_{\pm} .$$

Крім того, важливим є такий комутатор

$$\begin{aligned} \left[L_+, L_- \right] &= \left[\left(L_x + iL_y \right), \left(L_x - iL_y \right) \right] = \\ &= \left[L_x, L_x \right] - i \left[L_x, L_y \right] + i \left[L_y, L_x \right] + \left[L_y, L_y \right] = -2i\hbar L_z = 2\hbar L_z . \end{aligned} \quad (4.11)$$

Розглянемо випадок однієї частинки, що рухається в просторі.

У сферичних координатах $\vec{r}(r, \vartheta, \varphi)$

$$\begin{aligned} 0 \leq r \leq \infty, & \quad x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \\ 0 \leq \vartheta \leq \pi, & \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi, & \quad x = r \cos \vartheta, \end{aligned}$$

$$dV = r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi .$$

Оператор проекції моменту імпульсу представляється формулами:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad (4.12)$$

$$L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right); \quad (4.13)$$

$$L_y = i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right);$$

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 . \quad (4.14)$$

Тоді оператор L^2 буде мати вигляд:

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) = \hbar^2 \left(\nabla_{\vartheta}^2 + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \nabla_{\varphi}^2 \right). \quad (4.15)$$

Знайдемо власні функції і власні значення L_z і L^2 . Спочатку визначимо їх для оператора L_z :

$$L_z \Phi(\varphi) = L_z \Phi(\varphi). \quad (4.16)$$

Підставимо (4.12) в (4.16):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) = L_z \Phi(\varphi) .$$

Отримаємо:

$$\frac{d\Phi}{d\varphi} = -\frac{L_z}{i\hbar}\Phi(\varphi) = \frac{iL_z}{\hbar}\Phi(\varphi),$$

$$\frac{d\Phi}{\Phi} = i\frac{L_z}{\hbar}d\varphi; \ln \Phi = i\frac{L_z}{\hbar}\varphi + \ln C.$$

Отже,

$$\Phi = Ce^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi}. \quad (4.17)$$

Власна функція оператора L_z повинна бути однозначною. Тому

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi). \quad (4.18)$$

Підставимо (4.17) в умову (4.18):

$$Ce^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi} = Ce^{i\frac{L_z}{\hbar}(\varphi+2\pi)};$$

$$Ce^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi} = Ce^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi} e^{i\frac{L_z}{\hbar}2\pi}. \quad (4.19)$$

Отримуємо, що $e^{i\frac{L_z}{\hbar}2\pi} = 1$. Знаючи рівняння Ейлера $e^{\pm i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$, знаходимо:

$$\cos \frac{L_z}{\hbar} 2\pi = 1; \quad \sin \frac{L_z}{\hbar} 2\pi = 0;$$

$$\frac{L_z}{\hbar} 2\pi = 2\pi m; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Отже, L_z дорівнює:

$$L_z = \hbar m; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.20)$$

m – магнітне квантове число. Повертаючись до власної функції L_z з (17), маємо:

$$\Phi(\varphi) = Ce^{im\varphi}. \quad (4.21)$$

Визначимо сталу C з умови нормування:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) d\varphi = 1; \quad (4.22)$$

$$\int_0^{2\pi} C^* e^{-im\varphi} C e^{im\varphi} d\varphi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = |C|^2 2\pi = 1;$$

$$C = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}. \quad (4.23)$$

Остаточно отримуємо:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.24)$$

Нагадаємо, що з теореми про можливість одночасного вимірювання двох фізичних величин випливає, що коли оператори цих величин комутують між собою, то вони мають спільні власні функції. Запишемо рівняння для власних функцій та власних значень оператора L^2 :

$$L^2 Y(\vartheta, \varphi) = L^2 Y(\vartheta, \varphi). \quad (4.25)$$

Отже, $Y(\vartheta, \varphi)$ буде також власною функцією оператора L_z :

$$L_z Y(\vartheta, \varphi) = L_z Y(\vartheta, \varphi). \quad (4.26)$$

Підставимо вираз для L^2 з (4.15) у (4.25). Отримаємо, що

$$-\hbar^2 \left(\nabla_{\vartheta}^2 + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \nabla_{\varphi}^2 \right) Y(\vartheta, \varphi) = L^2 Y(\vartheta, \varphi). \quad (4.27)$$

Домножимо (4.27) на $\sin^2 \vartheta$

$$(-\hbar^2 \sin^2 \vartheta \nabla_{\vartheta}^2 - \sin^2 \vartheta L^2 - \hbar^2 \nabla_{\varphi}^2) Y(\vartheta, \varphi) = 0. \quad (4.28)$$

Операторна частина рівняння (4.28) є сумою операторів від незалежних координат ϑ і φ . Тому функція $Y(\vartheta, \varphi)$ буде добутком функцій від цих змінних.

$$Y(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi). \quad (4.29)$$

Можна довести, що

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), l = 0, 1, 2, \dots \quad (4.30)$$

l – орбітальне квантове число, а

$$\Theta_m^l(\cos \vartheta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta), \quad m \geq 0; \quad (4.31)$$

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{l+m} (1-x^2)^l, \quad (4.32)$$

$P_l^m(x)$ – приєднані поліноми Лежандра,

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (4.33)$$

Для сферичної функції $Y(\vartheta, \varphi) = \Theta_l^m(\vartheta) \Phi_m(\varphi)$ справедлива умова:

$$Y_{l,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{l,m}^*(\vartheta, \varphi); \quad (4.34)$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (4.35)$$

Розглянемо конкретний приклад. Визначимо $Y_{0,0}(\vartheta, \varphi)$.

$$l=0, \quad m=0, \quad \Phi_0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}; \quad P_0^0 = 1.$$

$$\text{Отже, } Y_{0,0}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

Нагадаємо, як записується умова нормування функції $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$. Для цього необхідно провести інтегрування по всьому тілесному куту. Маємо:

$$\int d\Omega |Y(\vartheta, \varphi)|^2 = 1, \quad (4.36)$$

де $\sin \vartheta d\vartheta d\varphi = d\Omega$ або

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l,m}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = 1. \quad (4.36')$$

Запишемо $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ у позначеннях Дірака

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \langle \vartheta, \varphi | l, m \rangle.$$

Тоді рівняння (4.25) та (4.26) можна записати наступним чином:

$$L^2 |l, m\rangle = L^2 |l, m\rangle; \quad (4.37)$$

$$L_z |l, m\rangle = L_z |l, m\rangle, \quad (4.38)$$

де $|l, m\rangle$ – вектор стану. Подіємо на цей вектор оператором $L_z L_+$:

$$L_z L_+ |l, m\rangle = (L_+ L_z + \hbar L_+) |l, m\rangle = L_+ L_z |l, m\rangle + \hbar L_+ |l, m\rangle = (L_z + \hbar) L_+ |l, m\rangle. \quad (4.39)$$

Видно, що $L_+ |l, m\rangle$ є власною функцією L_z з власним значенням

$$L_z + \hbar = \hbar m + \hbar = \hbar(m+1).$$

Отже, $L_+ |l, m\rangle$ може відрізнитись від $|l, m+1\rangle$ лише невідомим коефіцієнтом:

$$L_+ |l, m\rangle = C_1 |l, m+1\rangle. \quad (4.40)$$

Аналогічно можна довести, що

$$L_- |l, m\rangle = C_2 |l, m-1\rangle. \quad (4.41)$$

Оператори $L_\pm$ переводять стан $|l, m\rangle$ у стан $|l, m\pm 1\rangle$. Але ж $|m| \leq l$, тому

$$\begin{aligned} L_+ |l, l\rangle &= 0, \\ L_- |l, -l\rangle &= 0, \end{aligned} \quad (4.42)$$

бо таких станів $(|l, l+1\rangle, |l, -l-1\rangle)$ не існує.

Ми розглянули властивості однієї частинки, при її русі у просторі. Однак може виникнути задача про рух декількох частинок. Для цієї системи також справедливий закон збереження моменту імпульсу. Необхідно лише знати, що в такому випадку для системи частинок $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$, де $\vec{L}_i$ – оператор моменту імпульсу i -тої частинки. Всі формули (4.1)-(4.10) також справедливі для оператора $\vec{L}$.

Експериментально встановлено, що кожна частинка характеризується своїм власним механічним моментом, який називають спіном. Тобто, крім орбітального моменту імпульсу системи існує її власний момент імпульсу (спін системи). Отже, маємо:

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots; \quad \vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \dots$$

Тоді оператор повного моменту імпульсу запишеться так:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}.$$

§ 5. Загальні властивості повного моменту імпульсу системи

Запишемо без коментарів всі основні комутаційні співвідношення для моменту імпульсу $\vec{J}$.

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z; \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y; \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x; \quad (5.1)$$

$$[J_x, J^2] = 0; \quad (5.2)$$

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y; \quad (5.3)$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (5.4)$$

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm}. \quad (5.5)$$

З (5.2) видно, що J_z і J^2 мають спільні власні функції. Запишемо рівняння, що аналогічні до (4.37) і (4.38):

$$J^2 |j, m_j\rangle = J^2 |j, m_j\rangle; \quad (5.6)$$

$$J_z |j, m_j\rangle = J_z |j, m_j\rangle; \quad (5.7)$$

Можна довести, що J_z обмежене величиною J , тобто $-J \leq J_z \leq J$. Маємо:

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad \text{або} \quad J^2 - J_z^2 = J_y^2 + J_x^2. \quad (5.8)$$

На основі (5.8) запишемо середнє значення фізичних величин. Нагадаємо, що

$$\langle A \rangle = \langle \alpha | A | \alpha \rangle.$$

Отже, ми отримуємо

$$\langle J^2 \rangle - \langle J_z^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle + \langle J_x^2 \rangle. \quad (5.9)$$

Очевидно, що

$$\langle J_x^2 \rangle \geq 0, \quad \langle J_y^2 \rangle \geq 0; \quad (5.10)$$

Тоді $\langle J^2 \rangle - \langle J_z^2 \rangle \geq 0$ тому

$$\langle J^2 \rangle \geq \langle J_z^2 \rangle. \quad (5.11)$$

Проведемо усереднення на власних векторах стану $|j, m\rangle$ з (5.6) та (5.7)

$$\begin{aligned} \langle J_z^2 \rangle &= \langle jm_j | J_z^2 | jm_j \rangle = \langle jm_j | J_z J_z | jm_j \rangle = \langle jm_j | J_z J_z | jm_j \rangle = \\ &= J_z \langle jm_j | J_z | jm_j \rangle = J_z^2 \langle jm_j | jm_j \rangle = J_z^2, \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\langle J^2 \rangle = \langle jm_j | J^2 | jm_j \rangle = J^2 \langle jm_j | jm_j \rangle = J^2. \quad (5.13)$$

Підставимо значення $\langle J_z^2 \rangle$ та $\langle J^2 \rangle$ з (5.12) і (5.13) у нерівність (5.11).

Отримаємо $J^2 \geq J_z^2$ або

$$-J \leq J_z \leq J, \quad (5.14)$$

що і потрібно було довести. Умова (5.14) є досить загальною. Зрозуміло, що вона виконується для частинного випадку – орбітального руху однієї частинки (див. рівняння (4.20) і (4.30)). Аналогічно до (4.40) і (4.41) попереднього параграфу можна отримати, що

$$J_{\pm} |jm_j\rangle = C_{1,2} |jm_j \pm 1\rangle. \quad (5.15)$$

Формула (5.15) доводиться на основі комутаторів (5.5). Враховуючи (5.14) і (5.15), одержимо:

$$J_+ |jj\rangle = 0; \quad (5.16)$$

$$J_- |j, -j\rangle = 0. \quad (5.17)$$

Оскільки m_j змінюється на 1 ($\Delta m_j = \pm 1$), можна записати, що

$$J_z = \hbar m_j. \quad (5.18)$$

Можна довести, що

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad (5.19)$$

де $J = \max m_j$. Якщо використаємо нерівність (5.14), то отримаємо, що

$$-j \leq m_j \leq j. \quad (5.20)$$

Для того, щоб виконувалась умова (5.20) а m_j змінювалось на одиницю, необхідно,

щоб j було цілими бо напівцілими додатніми числами: $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \dots$

Якщо $j = 0$, то згідно (5.20) $m_j = 0$,

$$j = \frac{1}{2}, \quad m_j = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2};$$

$$j = 1, \quad m_j = -1, 0, 1;$$

$$j = \frac{3}{2}, \quad m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}.$$

Ще раз підкреслимо, що на відміну від орбітального квантового числа l , квантове число j може приймати як цілі так і напівцілі значення. Скориставшись комутатором (5.4), можна визначити коефіцієнти C_1 та C_2 рівняння (5.15):

$$J_+ |jm_j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j+1)} |jm_j+1\rangle; \quad (5.21)$$

$$J_- |jm_j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j-1)} |jm_j-1\rangle. \quad (5.22)$$

Тоді згідно з (5.16) та (5.17)

$$J_+ |jj\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - j(j+1)} |jj+1\rangle = 0;$$

$$J_- |j-j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - j(-j+1)} |j-j-1\rangle = 0.$$

Запишемо рівняння (5.21) і (5.22) в дещо іншому вигляді. Подіємо вектором $\langle jm_j+1|$ на рівність (5.21), а на (5.22) – $\langle jm_j-1|$. Отже,

$$\langle jm_j+1|J_+|jm_j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j+1)} \langle jm_j+1|jm_j+1\rangle.$$

Умова нормування для векторів стану запишеться так: $\langle jm_j \pm 1|jm_j \pm 1\rangle = 1$, тому:

$$\langle jm_j+1|J_+|jm_j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j+1)}; \quad (5.23)$$

$$\langle jm_j-1|J_-|jm_j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j-1)}. \quad (5.24)$$

Нагадаємо, що A у J^2 -представленні (чи J_z -представленні) є матрицею з матричними елементами

$$\langle j' m_j' | A | j m_j \rangle.$$

Таким чином, J_z у своєму представленні буде діагональною матрицею:

$$\langle j' m_j' | J_z | j m_j \rangle = J_z \langle j' m_j' | j m_j \rangle = J_z \delta_{j',j} \delta_{m_j',m_j}.$$

Розглянемо для прикладу наступний випадок. Нехай $j' = j = \frac{3}{2}$, тоді

$$m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}.$$

$$J_z = \hbar m_j$$

Оператор J_z має вигляд наступної матриці:

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

Якщо система складається з двох підсистем, то

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2,$$

$$J_z = J_{z_1} + J_{z_2}. \quad (5.25)$$

Власні значення операторів J^2 , J_z системи дорівнюють:

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1),$$

$$J_z = \hbar m_j; \quad -j \leq m_j \leq j.$$

Аналогічні умови справедливі для кожної підсистеми:

$$J_1^2 = \hbar^2 j_1(j_1+1); \quad J_{1z} = \hbar m_{j_1}, -j_1 \leq m_{j_1} \leq j_1;$$

$$J_2^2 = \hbar^2 j_2(j_2+1); \quad J_{2z} = \hbar m_{j_2}, -j_2 \leq m_{j_2} \leq j_2.$$

Із формули (5.25) випливає: $J_z = J_{z_1} + J_{z_2}$, або $\hbar m_j = \hbar m_{j_1} + \hbar m_{j_2}$; $m_j = m_{j_1} + m_{j_2}$.

§ 6. Спін частинки

На основі дослідів Штерна і Герлаха та Айнштейна і де Гааза встановлено, що електрон характеризується своїм власним моментом імпульсу, який не пов'язаний з

орбітальним рухом. Виявилося, що інші частинки також мають свої власні моменти імпульсу, які називаються спіном. Тому для однієї частинки можна записати оператор повного моменту імпульсу у вигляді:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (6.1)$$

Якщо немає орбітального моменту імпульсу (частинка не рухається), то

$$\vec{J} = \vec{S}. \quad (6.2)$$

Всі рівняння з попереднього параграфа, що записані для $\vec{J}$, будуть справедливими і для $\vec{S}$. Зокрема,

$$S^2 |s, m_s\rangle = S^2 |s, m_s\rangle; \quad (6.3)$$

$$S_z |s, m_s\rangle = S_z |s, m_s\rangle; \quad (6.4)$$

$$-s \leq m_s \leq s; \quad (6.5)$$

$$S_z = \hbar m_s; \quad (6.6)$$

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1). \quad (6.7)$$

Коли $s = \frac{1}{2}$, то тоді кажуть, що частинка має спін $\frac{1}{2}$. Це стосується наприклад електрона або протона. Тоді

$$m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}.$$

Частинки, які мають напівцілі спіни називаються ферміонами, а частинки зі спіном $0, 1, 2, \dots$ є бозонами. Аналогічно до $\hat{J}$ введемо

$$S_+ = S_x + iS_y;$$

$$S_- = S_x - iS_y.$$

Маємо також, що

$$\langle s m_s + 1 | S_+ | s m_s \rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s + 1)}; \quad (6.8)$$

$$\langle s m_s - 1 | S_- | s m_s \rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s - 1)}. \quad (6.9)$$

Запишемо z -проекцію спіна у своєму власному представленні. Згадаймо, що

$$S_z |s, m_s\rangle = S_z |s, m_s\rangle;$$

$$S_z = \hbar m_s,$$

а матриця з $\langle s', m'_s | S_z | s, m_s \rangle$ і буде оператором S_z у своєму власному представленні.

Розглянемо випадок, коли спін частинки $s = \frac{1}{2}$. Справедливими є наступні рівняння:

$$m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; \quad S_z = \frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}; \quad s' = s = \frac{1}{2}.$$

Визначимо матричні елементи:

$$\begin{aligned} \langle s, m'_s | S_z | s, m_s \rangle &= \langle s, m'_s | S_z | s, m_s \rangle = \\ &= \hbar m_s \langle s, m'_s | s, m_s \rangle = \hbar m_s \delta_{s,s} \delta_{m'_s, m_s} = \hbar m_s \delta_{m'_s, m_s}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Підставивши конкретні значення квантових чисел, отримаємо:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| S_z \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{\hbar}{2}; \\ \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| S_z \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= 0; \\ \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| S_z \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= 0; \\ \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| S_z \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= -\frac{\hbar}{2}. \end{aligned}$$

Таким чином, S_z у своєму власному представленні для частинки з спіном $\frac{1}{2}$ має вигляд:

$$S_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix},$$

тому

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_z. \quad (6.11)$$

Визначимо у цьому ж представленні оператори S_+ та S_- . Рівняння (6.8) задає відмінні від нуля матричні елементи для S_+ . При заданій сукупності квантових чисел отримуємо:

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right| S_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0; \quad (6.12)$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2} + 1 \right)} = \hbar; \quad (6.13)$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_+ \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0; \quad (6.14)$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_+ \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0. \quad (6.15)$$

Отже, оператор S_+ є матрицею виду:

$$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.16)$$

Проведемо тепер аналогічний аналіз на основі формули (6.9).

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S_- \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0;$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \hat{S}_- \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0;$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_- \right| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar;$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| S_- \right| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = 0.$$

Оператор S_- задається наступною матрицею:

$$S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.17)$$

Повернемося до вихідних матриць S_x та S_y :

$$S_+ = S_x + iS_y; \quad S_- = S_x - iS_y, \quad (6.18)$$

тому

$$S_x = \frac{1}{2} (S_+ + S_-); \quad (6.19)$$

$$S_y = \frac{1}{2i} (S_+ - S_-). \quad (6.20)$$

Запишемо оператори S_x та S_y у S_z -представленні:

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_x; \quad (6.21)$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_y. \quad (6.22)$$

§ 7. Матриці Паулі

З рівнянь (6.18), (6.20) та (6.22) попереднього параграфа видно, що оператори S_x , S_y та S_z можна представити через матриці:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.1)$$

Згадані вище рівняння записуються в компактній формі:

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad i=1,2,3.$$

Матриці σ_x , σ_y та σ_z називають матрицями Паулі.

Зупинимось на властивостях матриць Паулі:

1. Квадрат матриці дорівнює одиничній матриці:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

$$2. \quad \sigma_x \sigma_y = i \sigma_z; \quad \sigma_z \sigma_x = i \sigma_y; \quad \sigma_y \sigma_z = i \sigma_x; \quad (7.3)$$

Ці властивості доводяться безпосередньою підстановкою матриць (1) у відповідні умови.

Знайдемо власні функції оператора S_z . Знаючи, що

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

Запишемо рівняння на власні функції та власні значення:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = S_z \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (7.4)$$

Знайдемо власну функцію оператора, що відповідає власному значенню $S_z = \frac{\hbar}{2}$. Ліва частина рівняння (7.4) спрощується наступним чином:

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

Тоді рівняння (7.4) зводиться до вигляду:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Отже, $\alpha = \alpha$; $\beta = -\beta$, звідки видно, що $\beta = 0$ але α не визначено. Власна функція χ має вигляд $\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}$. Запишемо умову нормування: $\chi^+ \chi = 1$, де $\chi^+ = (\alpha^* \ 0)$ – матриця ермітово-спряжена до χ , бо для будь-якої матриці виконується умова $A^+ = (A^T)^*$, де A^T – транспонована матриця. Отже, з умови нормування $|\alpha|^2 = 1$ або $\alpha = 1$. Таким чином ми отримали власну функцію оператора S_z , що відповідає власному значенню $S_z = \frac{\hbar}{2}$. Цей стан частинки часто називають зі спіном «вгору», тому позначимо цю функцію як $\chi_{\uparrow}$:

$$\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

Для власного значення $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ аналогічні обчислення приводять до наступних рівнянь:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha \\ -\beta \end{pmatrix}.$$

Отже, $\alpha = 0$, тому

$$\chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Аналогічно до попередніх розрахунків умова нормування $\chi_{\downarrow}^+ \chi_{\downarrow} = 1$, де $\chi_{\downarrow}^+ = (0 \ \beta^*)$, дозволяє встановити наступне: $|\beta|^2 = 1$ або $\beta = 1$. Остаточна власна функція частинки зі спіном «вниз» дорівнює:

$$\chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.6)$$

Зауважимо, що стан спіну «вгору» чи «вниз» не означає, що вектор спіну напрямлений вздовж осі OZ чи в протилежному напрямку. Дійсно, нехай $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$. Тоді:

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1) = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) = \hbar^2 \frac{3}{4}.$$

Бачимо, що $S \neq |S_z|$, бо $S = \hbar \frac{\sqrt{3}}{2} \approx 1,7|S_z|$. Отже, вектор спіну утворює з віссю OZ гострий (відмінний від нуля) або тупий (відмінний від π) кут.

§ 8. Рух частинки в центрально-симетричному полі

Поле, в якому знаходиться частинка, називається центрально-симетричним або центральним, якщо потенціальна енергія цієї частинки залежить від відстані до деякої точки. Ця точка називається центром поля. Потенціальна енергія є функцією модуля радіус-вектора:

$$U = U(r). \quad (8.1)$$

Тоді гамільтоніан частинки має вигляд:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 + U(r). \quad (8.2)$$

Задача про рух двох частинок також зводиться до руху частинки в центрально-симетричному полі, якщо

потенціальна енергія залежить лише від відстані між частинками: $U = U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$.

Оператор енергії системи в даному випадку представляється формулою:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_{\vec{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_{\vec{r}_2}^2 + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|). \quad (8.3)$$

Якщо перейти до нових змінних: $\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$ – радіус-вектор центра мас та $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, то гамільтоніан (8.3) запишеться наступним чином:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + U(r), \quad (8.4)$$

де $M = m_1 + m_2$ – маса системи, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ – зведена маса.

Стационарне рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (8.4)

$$H\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E\Psi(\vec{R}, \vec{r}) \quad (8.5)$$

має розв'язок виду

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = e^{ik\vec{R}} \varphi(\vec{r}). \quad (8.6)$$

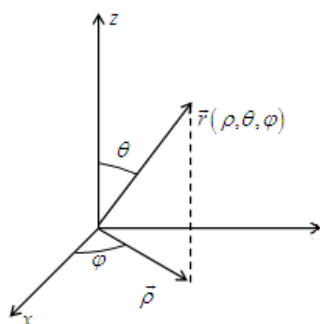
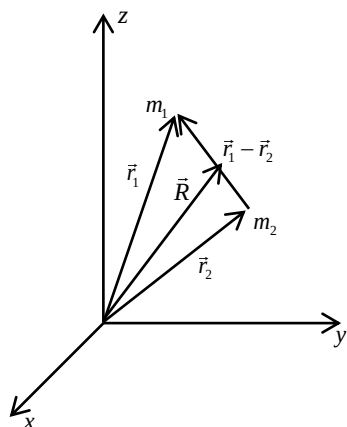


Рис. 9.



Переконаємось, що хвильова функція (8.6) є розв'язком рівняння (8.5):

$$-\frac{\hbar^2}{2M}(-k^2)e^{i\vec{k}\vec{R}}\varphi(\vec{r})+e^{i\vec{k}\vec{R}}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^2+U(r)\right)\varphi(\vec{r})=Ee^{i\vec{k}\vec{R}}\varphi(\vec{r}). \quad (8.7)$$

Одержимо рівняння для невідомої функції $\varphi(\vec{r})$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^2+U(r)\right)\varphi(\vec{r})=\underbrace{\left(E-\frac{\hbar^2 k^2}{2M}\right)}_{\tilde{E}}\varphi(\vec{r})\equiv\tilde{E}\varphi(\vec{r}). \quad (8.8)$$

Гамільтоніан цього рівняння аналогічний до гамільтоніана (8.2).

У рівняння (8.8) входить зведена маса $\frac{1}{\mu}=\frac{1}{M_{\text{я}}}+\frac{1}{m_e}$. Оцінімо цю величину для атома

водню:
$$\mu=\frac{M_{\text{я}}m_e}{M_{\text{я}}+m_e}=\frac{m_e}{1+\frac{m_e}{M_{\text{я}}}}\cong m_e\left(1-\frac{m_e}{M_{\text{я}}}\right)\approx m_e.$$

Розглянемо рівняння (8.8) для частинки з масою m_0 і з енергією E . Наше завдання полягає в тому, щоб записати його у сферичній системі координат:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla_{\vec{r}}^2+U(r)\right)\varphi(r,\vartheta,\varphi)=E\varphi(r,\vartheta,\varphi). \quad (8.9)$$

Оператор Лапласа у сферичній системі координат має вигляд:

$$\nabla_{\vec{r}}^2=\nabla_r^2+\frac{1}{r^2}\nabla_{\vartheta,\varphi}^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)+\frac{1}{\sin^2\varphi}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right). \quad (8.10)$$

Нагадаємо, що квадрат моменту імпульсу

$$L^2=-\hbar^2\nabla_{\vartheta,\varphi}^2. \quad (8.11)$$

Підставимо оператор (8.10) в рівняння (8.9). Отримаємо, що

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla_r^2-\frac{\hbar^2}{2m_0r^2}\nabla_{\vartheta,\varphi}^2+U(r)\right)\Psi(r,\vartheta,\varphi)=E\Psi(r,\vartheta,\varphi). \quad (8.12)$$

Рівняння (8.12) можна записати за допомогою (8.11)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla_r^2-\frac{L^2}{2m_0r^2}+U(r)\right)\Psi(r,\vartheta,\varphi)=E\Psi(r,\vartheta,\varphi). \quad (8.13)$$

З рівняння (8.13) видно, що

$$\left[L^2,H\right]=0. \quad (8.14)$$

Отже, у центральньо-симетричному полі квадрат моменту імпульсу буде інтегралом руху. Крім того, зрозуміло, що

$$[L_z, H] = 0, \quad (8.15)$$

де $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

Тому буде виконуватися також закон збереження z -проекції моменту імпульсу. Із теореми про одночасне вимірювання двох фізичних величин робимо висновок, що L^2 і H мають спільні власні функції. Оскільки H є більш загальним оператором, ніж L^2 , то власні функції H будуть і власними функціями L^2 . Згадаймо, що

$$L^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = L^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (8.16)$$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (8.17)$$

У зв'язку з тим, що операторна частина рівняння (8.13) є сумою доданків, що залежить лише від r і доданок який залежить від ϑ і φ , то хвильова функція Ψ буде добутком невідомої функції $R(r)$ і $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (8.18)$$

Підставимо (8.18) у рівняння (8.13):

$$\begin{aligned} -Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 R(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) R(r) + U(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \\ = ER(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (8.19)$$

Отримали рівняння для невідомої функції R :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} + U(r) \right) R(r) = ER(r). \quad (8.20)$$

Рівняння (8.20) називають радіальним рівнянням Шредінгера. Здійснимо перехід до нової невідомої функції:

$$R(r) = \frac{X(r)}{r}. \quad (8.21)$$

Тоді рівняння (8.20) можна спростити, врахувавши, що

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{X}{r} \right) = \frac{X}{r^2} + \frac{X'}{r}, \quad X' = \frac{dx}{dr}, \quad (8.22)$$

$$\frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{X}{r} \right) = \frac{2X}{r^3} - 2 \frac{X'}{r^2} + \frac{X''}{r}. \quad (8.23)$$

Підставимо рівняння (8.22) і (8.23) у (8.20):

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{2X}{r^3} - 2 \frac{X'}{r^2} + \frac{X''}{r} - \frac{2X}{r^3} + 2 \frac{X'}{r^2} \right) \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0} \frac{X}{r} + U(r) \frac{X}{r} = E \frac{X}{r} \quad (8.24)$$

або

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 X}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} + U(r) \right) X(r) = E X(r). \quad (8.25)$$

Рівняння (8.25) аналогічне до рівняння Шредінгера для частинки при її одновимірному русі.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dr^2} X(r) + U_{ef}(r) X(r) = E X(r), \quad (8.26)$$

де $U_{ef}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}$.

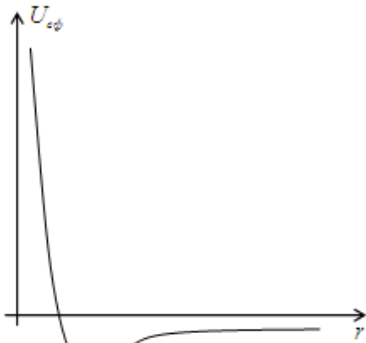


Рис.11.

Якщо $U(r) = -\frac{e^2}{r}$, то U_{ef} має вигляд кривої, що

подана на рис.11. Рух частинки у центрально-симетричному полі можна представити як рух при одновимірному русі у деякому ефективному потенціальному полі. Другий доданок в U_{ef} пов'язаний з орбітальним рухом частинки. Аналіз задачі спрощується,

якщо розглянути S стан, коли $l = 0$. Тоді $U_{ef} = U$, тому рівняння (8.26) буде мати вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 X}{dr^2} + U(r) X(r) = E X(r). \quad (8.27)$$

Розглянемо приклад. Нехай частинка знаходиться в нескінченно глибокій сферичній потенціальній ямі виду $U(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r > R \end{cases}$, де r – радіус цієї ями. Згадаймо задачу про рух частинки в нескінченно глибокій потенціальній ямі. Маємо, що

$$X_n(r) = C \sin \frac{\pi}{R} nr, \quad (8.28)$$

де $n=1,2,3,\dots$, $C = \sqrt{\frac{2}{R}}$.

Енергія частинки дорівнює:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mR^2} n^2. \quad (8.29)$$

Запишемо тепер радіальну функцію $R(r)$:

$$R_n(r) = C \frac{\sin \frac{\pi}{R} nr}{r} = C J_0 \left(\frac{\pi}{R} nr \right), \quad (8.30)$$

де $J_0(x)$ – функція Беселя.

§ 9. Теорія атома водню

Для водневоподібного атома (атома з одним електроном)

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (9.1)$$

де Ze – заряд ядра. Дану потенціальну енергію можна записати наступним чином:

$U(r) = -\frac{\tilde{e}^2}{r}$; $\tilde{e} = \sqrt{Ze}$, а для атома водню $\tilde{e} = e$, тому що

$$U(r) = -\frac{e^2}{r}. \quad (9.2)$$

Запишемо рівняння для X , використовуючи $U(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 X}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} - \frac{e^2}{r} \right) X(r) = EX(r). \quad (9.3)$$

Перейдемо від r до безрозмірної величини $\rho = \frac{r}{a}$, враховуючи, що

$$\frac{d}{dr} = \frac{d}{d\rho} \frac{d\rho}{da} = \frac{1}{a} \frac{d}{d\rho}; \quad \frac{d^2}{dr^2} = \frac{1}{a^2} \frac{d^2}{d\rho^2}.$$

Тоді рівняння (9.3) запишеться у вигляді:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0 a^2} \frac{d^2 X(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 a^2 \rho^2} - \frac{e^2}{a\rho} \right) X(\rho) = E X(\rho), \quad (9.4)$$

або

$$\frac{d^2 X(\rho)}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2m_0 a e^2}{\hbar^2} \frac{1}{\rho} X(\rho) = -\frac{E}{\hbar^2 / 2m_0 a^2} X(\rho). \quad (9.5)$$

Виберемо величину a такою, що $\frac{m_0 a e^2}{\hbar^2} = 1$, тому $a = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} = a_B = 0,5 \text{ \AA}$. Енергія

$$\frac{\hbar^2}{2m_0 a_B^2} = \frac{\hbar^2}{2m_0 \left(\frac{\hbar^2}{m_0 e^2} \right)^2} = \frac{m_0 e^4}{2\hbar^2} = R_y \quad (9.6)$$

є енергією Рідберга. Введемо безрозмірну енергію ε :

$$-\frac{E}{\hbar^2 / 2m_0 a_B^2} \equiv \varepsilon. \quad (9.7)$$

У зв'язку з тим, що нас цікавить атом водню, то електрон зв'язаний з ядром. Це означає, що потенціальна енергія притягання по модулю буде більшою, ніж кінетична енергія електрона. Отже, енергія системи буде від'ємною. Тому будемо шукати розв'язок рівняння (9.5) при умові $E < 0$, тобто $\varepsilon > 0$. Отже,

$$\frac{d^2 X(\rho)}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} X(\rho) + \frac{2}{\rho} X(\rho) = \varepsilon X(\rho). \quad (9.8)$$

Проаналізуємо це рівняння, розглянувши малі та великі відстані. Нехай $\rho \rightarrow 0$. У такому випадку рівняння (9.8) спроститься:

$$\frac{d^2 X_0}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} X_0 = 0. \quad (9.9)$$

Розв'язок треба шукати у вигляді $X_0 = \rho^\alpha$, тому

$$X'_0 = \alpha \rho^{\alpha-1}, \quad X''_0 = \alpha(\alpha-1) \rho^{\alpha-2}.$$

Рівняння (9.9) зводиться до наступного:

$$\alpha(\alpha-1) \rho^{\alpha-2} - l(l+1) \rho^{\alpha-2} = 0.$$

З даного рівняння отримуємо два значення α , для яких $X_0 = \rho^\alpha$ є розв'язком (9.9):

$$\alpha_1 = l+1, \quad \alpha_2 = -l.$$

Таким чином, отримуємо два розв'язки: $X_0 \propto \rho^{l+1}$ і $X_0 \propto \rho^{-l}$. Другий розв'язок є нефізичним, оскільки при $\rho \rightarrow 0$, функція прямує до ∞ . Якщо $\rho \rightarrow \infty$, то рівняння (9.8) зведеться до наступного рівняння:

$$\frac{d^2 X_\infty}{d\rho^2} = \varepsilon X_\infty. \quad (9.10)$$

Розв'язок рівняння (9.10) потрібно шукати у вигляді $X_\infty = e^{\beta\rho}$. Одержимо $\beta^2 = \varepsilon$, тому $\beta_{1,2} = \pm\sqrt{\varepsilon}$. Два розв'язки рівняння (9.10) за даної умови мають вигляд:

$$X_\infty = e^{\sqrt{\varepsilon}\rho}, \quad X_\infty = e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho}.$$

Перший розв'язок є нефізичним, оскільки при $\rho \rightarrow \infty$ хвильова функція експоненціального прямує до 0.

Запишемо X для будь-якого ρ :

$$X(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho} W(\rho). \quad (9.11)$$

Підставимо рівняння (9.11) у (9.8) та перейдемо до нової змінної $x = 2\sqrt{\varepsilon}\rho$.

Тоді:

$$\frac{dX}{d\rho} = \frac{dX}{dx} \frac{dx}{d\rho} = 2\sqrt{\varepsilon} \frac{dX}{dx}, \quad (9.12)$$

$$\frac{d^2 X}{d\rho^2} = 4\varepsilon \frac{d^2 X}{dx^2}, \quad (9.13)$$

а після скорочень одержимо диференціальне рівняння для невідомої функції W :

$$xW''(x) + (2l(l+1) - x)W'(x) + \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} - l - 1\right)W(x) = 0. \quad (9.14)$$

Розв'язок цього рівняння шукаємо у вигляді ряду

$$W(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k. \quad (9.15)$$

Підставляємо (9.15) в (9.14), враховуючи, що

$$W'(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k x^{k-1}; \quad (9.16)$$

$$W''(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1) x^{k-2}. \quad (9.17)$$

Отримаємо

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1)x^{k-1} + 2(l+1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k kx^{k-1} - \sum_{k=0}^{\infty} a_k kx^k + \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} - l - 1 \right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k = 0. \quad (9.18)$$

Маємо нескінченний степеневий ряд, який дорівнює нулю. Рівняння (9.18) виконується, коли коефіцієнти біля кожного x^k будуть рівні нулю. Знайдемо коефіцієнт біля x^k . Він дорівнює

$$a_{k+1}(k+1)k + a_{k+1}(k+1)2(l+1) - a_k k + \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} - l - 1 \right) a_k = 0. \quad (9.19)$$

Отримуємо рекурентне співвідношення для коефіцієнтів:

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1 - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}}{(k+1)(k+2l+2)} a_k. \quad (9.20)$$

Степеневий ряд $W(x)$ при $x \rightarrow 0$, прямує до нескінченності таким чином, що хвильова функція $X(\rho) \rightarrow \infty$. Щоб цього не було, степеневий ряд треба обірвати, замінивши його поліномом. Це можна зробити підбором невідомої величини ε .

Нехай для якогось $k = n_r$ коефіцієнт $a_{n_r} \neq 0$. Підберемо ε так, щоб

$$a_{n_r+1} = 0. \quad (9.21)$$

Тоді всі наступні коефіцієнти, як видно з (9.20), дорівнюють нулю і ряд перетвориться в поліном. Отже,

$$n_r + l + 1 - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} = 0, \text{ де } n = 0, 1, 2, \dots \quad (9.22)$$

Звідси

$$\varepsilon = \frac{1}{(n_r + l + 1)^2}. \quad (9.23)$$

Величину n_r називають радіальним квантовим числом. Введемо головне квантове число $n = n_r + l + 1$. Тоді $n = 1, 2, 3, \dots$ і воно задає енергію частинки

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{\hbar^2}{2m_0 a_B^2 n^2}. \quad (9.24)$$

Видно, що енергія залежить лише від головного квантового числа. Зокрема, енергія основного стану атома водню

$$E_1 = -\frac{m_0 e^4}{2\hbar^2} = -13,6 \text{ eV}.$$

Поліном W – це відомий в математиці приєднаний поліном Лагера. Він буде залежати від головного і орбітального квантового числа. Запишемо радіальну функцію, перейшовши до вихідних змінних. Одержимо:

$$R_{nl}(r) = C_{nl} \left(\frac{2r}{na_B} \right)^l e^{-\frac{r}{na_B}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_B} \right), \quad (9.25)$$

де $L_k^p(x) = \frac{k!}{(k-p)!} e^x \frac{d^k}{dx^k} e^{-x} x^{k-p}$ – поліном Лагера, а $C_{n,l} = \sqrt{\frac{4}{n^4 a_B^3} \frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}$ – коефіцієнт нормування.

Декілька прикінцевих зауважень. Хвильова функція має вигляд:

$$\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\vartheta) \Phi_m(\varphi). \quad (9.26).$$

Умова нормування для неї

$$\int \Psi_{nlm}^*(r, \vartheta, \varphi) \Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) dv = 1, \quad (9.27)$$

де $dv = r^2 d \sin \vartheta d \vartheta d \varphi$. Запишемо (9.27) наступним чином

$$\int_0^\infty dr r^2 |R_{nl}|^2 \int_0^\pi d \vartheta \int_0^{2\pi} d \varphi \sin \vartheta |Y_{lm}|^2 = 1.$$

Ця умова виконується, якщо

$$\int_0^\infty dr r^2 |R_{nl}|^2 = 1, \quad (9.28)$$

$$\int_0^\pi d \vartheta \int_0^{2\pi} d \varphi \sin \vartheta |Y_{lm}|^2 = 1. \quad (9.29)$$

Останнє рівняння справедливе при

$$\int_0^\pi d \vartheta \sin \vartheta |\Theta_{lm}(\vartheta)|^2 = 1, \quad (9.30)$$

$$\int_0^{2\pi} d \varphi |\Phi_m(\varphi)|^2 = 1.$$

З умови (9.28) отримуємо коефіцієнт нормування радіальної функції (9.25).

Розглянемо приклад. Знайдемо вигляд хвильової функції для основного стану $n=1, l=0, m=0$. Цей стан є не виродженим. Хвильова функція:

$$\Psi_{100} = R_{10} Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{10}.$$

Визначимо R_{10} . З рівняння (9.25) маємо

$$C_{10} = -\sqrt{\frac{4}{a_B^3}}; \quad p=1, \quad k=1. \quad L_1'(x) = e^x \frac{d}{dx} e^{-x} = 1.$$

Тому

$$Y_{00} \cdot R_{10}(r) = \sqrt{\frac{4}{a_B^3}} e^{-\frac{r}{a_B}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

або

$$\Psi_{100} = \sqrt{\frac{1}{\pi a_B^3}} e^{-\frac{r}{a_B}}.$$

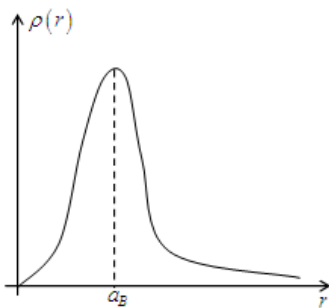


Рис. 12

Енергії з $n=2$ відповідають хвильові функції $\Psi_{200}, \Psi_{210}, \Psi_{211}, \Psi_{212}$. Отже, цей рівень є чотирикратно вироджений, а n рівень буде n^2 кратно виродженим. В полі виду $U(r) = \frac{\alpha}{r}$ виникає так зване випадкове виродження, бо енергія не залежить від орбітального квантового числа. Якщо

ж $U(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ U_0, & r > R \end{cases}$, то E залежить і від головного і від орбітального чисел. У такому випадку виродження визначається квантовим числом m , бо E не залежить від m . Це пояснюється тим, що для будь-якої сферично симетричної задачі $\hat{H}$ не залежить від $\hat{L}_z$.

Запишемо хвильову функцію основного стану:

$$\Psi_{100} = \Psi_{1s} = \sqrt{\frac{1}{\pi a_B^3}} e^{-\frac{r}{a_B}}.$$

Густина імовірності знаходження електрона на відстані r дорівнює

$$\rho(r) = \frac{1}{\pi a_B^3} e^{-\frac{2r}{a_B}} r^2.$$

Величина $\rho(r)dr = dW$ задає імовірність того, що електрон знаходиться в області $[r, r+dr]$. Функція $\rho = \rho(r)$ має максимум (див. рис. 12) при $r = a_B$. Видно, що квантова механіка уточнює теорію Бора. Електрон не рухається по орбіті з

радіусом a_B , як припускалось в теорії Бора. Ця відстань є лише найбільш імовірною.

Приклади розв'язування задач:

Задача 1. Частинка масою m знаходиться в одновимірній потенціальній прямокутній ямі з нескінченно високими стінками. Знайти число d енергетичних рівнів в інтервалі енергій $(E, E + dE)$, якщо рівні розташовані дуже густо.

Розв'язання:

Рівняння Шредінгера в області $0 < x < l$ зводиться до рівняння:

$$\Psi'' + k^2 \Psi = 0, \text{ де } k = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

Його розв'язки шукаємо у вигляді $\Psi(x) = A \sin(kx + \alpha)$. В точках $x=0$ та $x=l$ потенціальна енергія частинки дорівнює нескінченності, тому $\Psi(0)=0$ і $\Psi(l)=0$. Маємо, що $\alpha = 0$, $\sin(kl)=0$, $kl = n\pi$ ($n=1, 2, \dots$). Отже,

$$E_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ml^2}; n = \frac{l}{\pi \hbar} \sqrt{2mE}; dn = \frac{l}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} dE.$$

Задача 2. Частинка масою m_0 рухається в потенціальній ямі:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 \leq x \leq l, \\ U_0 & \text{при } x > l. \end{cases}$$

Одержати рівняння, що визначає спектр власних значень енергії.

Розв'язання:

Розглянемо випадок коли $E < U_0$. В області $0 < x < l$ маємо рівняння Шредінгера:

$$\psi'' + k^2 \psi = 0, \text{ де } k = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} E}.$$

(штрих означає диференціювання по x), а області за межами квантової ями

$$\psi'' + \chi^2 \psi = 0, \text{ де } \chi = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U_0)}.$$

При $x=0$ та $x=l$ розв'язки цих рівнянь повинні переходити один в одного неперервно і з неперервною похідною. А при $x=\pm\infty$ розв'язки другого рівняння мають бути скінченими і для дискретного спектру перетворюватись в нуль.

Розв'язком першого рівняння буде функція

$$\psi(x) = A \sin(kx + \delta),$$

а другого – $\psi(x) = B e^{\chi x}$ при $x < 0$ і $\psi(x) = C e^{-\chi x}$ при $x > 0$, враховуючи скінченність хвильової функції.

Умови неперервності $\frac{\psi'}{\psi}$ на межах ями, дають наступні рівняння:

$$k \cdot \operatorname{ctg}(\delta) = \chi = \sqrt{\frac{2m_0 U_0}{\hbar^2} - k^2}, \quad k \cdot \operatorname{ctg}(kl + \delta) = -\chi = -\sqrt{\frac{2m_0 U_0}{\hbar^2} - k^2},$$

або

$$\sin(\delta) = \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}, \quad \sin(kl + \delta) = -\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}.$$

Виключаючи δ , отримаємо трансцендентне рівняння для знаходження енергії частинки

$$kl = n\pi - 2 \arcsin\left(\frac{k\hbar}{\sqrt{2m_0 U_0}}\right), \quad \text{де } n \in N.$$

Задача 3. Використовуючи розв'язок попередньої задачі, знайти значення величини $l^2 U_0$ при якому:

- енергія основного стану частинки $E_1 = U_0/2$;
- виникає в ямі другий рівень, n -й рівень. Скільки дискретних рівнів містить яма, якщо $l^2 U_0 = 75\hbar^2/m$?

Розв'язання:

а) В попередній задачі отримане рівняння, що визначає можливі значення енергії E частинки в скінченій прямокутній потенціальній ямі:

$$kl = n\pi - 2 \arcsin\left(\frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}\right), \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad n \in N.$$

Основному стану відповідає $n = 1$ в цій формулі. При $E = U_0/2$

$$kl = \pi - 2 \arcsin \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\sqrt{4mE}} \right) = \pi - 2 \cdot \frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{2}; \quad l = \frac{\pi}{2k} = \frac{\pi \hbar}{\sqrt{8mE}}; \quad l^2 U_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2 \cdot 2E}{8mE} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m}.$$

б) З тієї ж формули випливає, що з появою другого, третього, ..., n -го рівня

$$kl = \pi, 2\pi, \dots, \pi(n-1).$$

Тоді $2 \arcsin \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\sqrt{4mE}} \right) = \pi$ і аргумент арксинуса дорівнює 1, тобто

$$\hbar k = \sqrt{2mU_0} (E = U_0); \quad l = \frac{\pi(n-1)}{k}; \quad l^2 U_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n-1)^2 E}{2mE} = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n-1)^2}{2m}.$$

Звідси число рівнів $n = \frac{l}{\pi \hbar} \sqrt{2mU_0} + 1$; $n = \frac{\sqrt{l^2 U_0} \cdot \sqrt{2}}{\pi} + 1$; $n = \frac{\sqrt{75} \cdot \sqrt{2}}{3,14} + 1 = 4$.

Задача 4. Частинка масою m падає на прямокутний потенціальний бар'єр шириною l та висотою U_0 , причому її енергія $E < U_0$. Знайти:

а) коефіцієнт прозорості D бар'єра;

б) спростити отриманий вираз для D у випадку $D \ll 1$;

в) імовірність проходження електрона і протона з $E = 5$ еВ крізь цей бар'єр, якщо $U_0 = 10$ еВ і $l = 0,1$ нм.

Розв'язання:

а) У випадку $E < U_0$ рівняння Шредінгера для

областей $x < 0$ і $x > l$ має вигляд:

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0,$$

а для області $0 < x < l$

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \Psi = 0.$$

Розв'язуючи їх, отримаємо:

$$x < 0, \quad \Psi_1 = a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar,$$

$$0 < x < l, \quad \Psi_2 = a_2 e^{k_0 x} + b_2 e^{-k_0 x}, \quad k_0 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar,$$

$$x > l, \quad \Psi_3 = a_3 e^{ikx}.$$

У третьому випадку залишено тільки один доданок, що відповідає хвилі, яка поширюється в нескінченність, тому що падаюча хвиля характеризується e^{ikx} .

Хвильова функція повинна бути неперервною на границях бар'єру. Отже, повинні виконуватися умови неперервності:

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0); \quad \Psi_1(l) = \Psi_2(l);$$

та гладкості

$$\Psi_1'(x)|_{x=0} = \Psi_2'(x)|_{x=0}; \quad \Psi_1'(x)|_{x=l} = \Psi_2'(x)|_{x=l}.$$

Звідси знаходимо

$$\frac{a_3}{a_1} = \frac{4ikk_0 e^{-ikl}}{(k + ik_0)^2 e^{k_0 l} - (k - ik_0)^2 e^{-k_0 l}}.$$

Згідно означення, коефіцієнт прозорості бар'єра дорівнює:

$$D = \left| \frac{a_3}{a_1} \right|^2 = \left[1 + \left(\frac{k^2 + k_0^2}{2kk_0} \right)^2 sh^2 k_0 l \right]^{-1} = \left(1 + \frac{U_0^2 sh^2 k_0 l}{4E(U_0 - E)} \right)^{-1} \quad \text{де} \quad sh(k_0 l) = \frac{e^{k_0 l} - e^{-k_0 l}}{2}.$$

б) Видно, що $D \ll 1$, якщо виконується умова $k_0 l \gg 1$. В цьому випадку $sh(k_0 l) = \frac{e^{k_0 l}}{2}$ і

$$D \approx \frac{16k^2 k_0^2}{(k^2 + k_0^2)^2} e^{-2k_0 l} = 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0} \right) e^{\frac{-2l\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}}.$$

в) Для електронів:

$$D = \left(1 + \frac{1,6 \cdot 10^{-36} sh^2 \left(\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} (1,6 \cdot 10^{-18} - 8 \cdot 10^{-19})} \cdot 10^{-10} \right)}{4 \cdot 8 \cdot 10^{-19} \cdot (1,6 \cdot 10^{-18} - 8 \cdot 10^{-19})} \right)^{-1} = 0,27$$

для протонів:

$$D = \left(1 + \frac{1,6 \cdot 10^{-36} sh^2 \left(\sqrt{2 \cdot 1,62 \cdot 10^{-27} (1,6 \cdot 10^{-18} - 8 \cdot 10^{-19})} \cdot 10^{-10} \right)}{4 \cdot 8 \cdot 10^{-19} \cdot (1,6 \cdot 10^{-18} - 8 \cdot 10^{-19})} \right)^{-1} \approx 10^{-47}$$

Задача 5. Використовуючи підстановку $R(r) = \chi(r)/r$, знайти асимптотичний вигляд радіальної частини хвильової функції $R(r)$ для зв'язаних станів електрона в кулонівському полі ядра:

а) на великих відстанях від ядра;

б) на малих відстанях від ядра.

Розв'язання:

а) Запишемо рівняння Шредінгера для радіальної частини хвильової функції $R(r)$ в центральносиметричному полі $U(r)$:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - U - \frac{L^2}{2mr^2} \right) R = 0.$$

Нехтуючи малими величинами, приведемо його до вигляду:

$$\chi'' - \chi^2 \chi = 0, \chi = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}.$$

Це диференціальне рівняння другого порядку з сталим коефіцієнтом. Розв'язуючи його, одержуємо

$$\chi = Ae^{xr} + Be^{-xr}.$$

З умови скінченності $R(r)$ маємо, що $A = 0$, і тому $R(r)$ має вигляд Be^{-xr}/r .

б) З огляду на те, що $L^2 = l(l+1)\hbar^2$, перетворимо рівняння Шредінгера до вигляду:

$$\chi'' - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0, \chi'' r^2 - l(l+1)\chi = 0.$$

Це рівняння Ейлера. Отже, розв'язок має вигляд $\chi = Ar^\alpha$. Після підстановки в рівняння знаходимо два значення α : $1+l$ і $-l$. Функція $R(r)$ буде скінченою тільки при $\alpha = 1+l$ і буде мати вигляд Ar^l .

Задача 6. Знайти нормовану хвильову функцію гармонічного осцилятора в стані $n=1$.

Розв'язання:

Власна функція оператора Гамільтона для гармонічного осцилятора в стані $n=1$ має вигляд:

$$\psi_1(\xi) = A_1 \cdot H_1(\xi) e^{-\xi^2/2} = A_1 e^{-\xi^2/2} (-1) e^{\xi^2} \frac{d}{d\xi} (e^{-\xi^2}) = A_1 \cdot 2\xi e^{-\xi^2/2}, \text{ де } \xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

Коефіцієнт нормування знаходимо з умови:

$$A_1^2 \int \psi_1^2(x) dx = 1.$$

Тоді

$$A_1^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(2\xi e^{-\xi^2/2} \right)^2 d\xi = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \left(2\xi e^{-\xi^2/2} \right)^2 d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{2},$$

$$A_1^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} = 1.$$

Звідси $A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4}$.

Задача 7. Записати в явному вигляді радіальну складову хвильової функції електрона в атомі водню R_{10} і знайти коефіцієнт нормування.

Розв'язування:

Загальний вигляд радіальної складової хвильової функції в атомі водню можна записати наступним чином:

$$R_{n,l}(r) = C_{n,l} \left(\frac{2\rho}{n} \right)^l e^{-\rho/n} L_{n-l}^{2l+1} \left(\frac{2\rho}{n} \right),$$

$$\text{де } L_{n-l}^{2l+1}(x) = -\frac{(n-l)!}{(n-l-1)!} x^{-(2l+1)} e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^{n-l-1} e^{-x} x^{n+l}, \quad \rho = \frac{r}{a_B} = r \frac{me^2}{\hbar^2}.$$

Тоді $R_{10}(r) = C_{10} e^{-\rho} L_1^1(2\rho),$

$$L_1^1(x) = -x^{-1} e^x e^{-x} x = -1.$$

Коефіцієнт нормування знайдемо з умови:

$$\int_0^\infty r^2 R_{10}^2 dr = 1.$$

Отже,

$$C_{10}^2 a_B^3 \int_0^\infty \rho^2 R_{10}^2(\rho) d\rho = C_{10}^2 a_B^3 \int_0^\infty \rho^2 e^{-2\rho} d\rho = C_{10}^2 a_B^3 \frac{1}{4} = 1,$$

$$C_{10} = \frac{2}{a_B^{3/2}} = \frac{2e^3 m^{3/2}}{\hbar^3}.$$

Тоді $R_{10}(r) = \frac{2}{a_B^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_B}}.$

Задача 8. Визначити середню відстань 1s-електрона до ядра в атомі водню.

Розв'язування:

Середню відстань можна визначити за допомогою формули для обчислення середнього значення відстані:

$$\bar{r} = \int |R(r)|^2 r^2 dr.$$

Хвильова функція електрона 1s-стану в атомі водню на має вигляд:

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-\frac{r}{a_B}}.$$

Підставивши її в попередню формулу, отримаємо:

$$\frac{1}{\pi a_B^3} \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{2r}{a_B}} dr \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{4\pi a_B^4}{\pi a_B^3} \frac{3}{8} = \frac{3}{2} a_B.$$

Задачі для самостійного опрацювання:

1. Обчислити найменше значення енергії нейтрона, що знаходиться в потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками, відстань між якими дорівнює 10^{-14} м.
2. Для частинки, яка знаходиться на n -му рівні в одновимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками, обчислити $\bar{x}$, $\bar{p}_x$, $\overline{(\Delta x)^2}$, $\overline{(\Delta p_x)^2}$.
3. В одновимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками шириною a знаходиться частинка, стан якої описується хвильовою функцією $\psi(x) = A \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$. Визначити ймовірність перебування частинки в основному стані і середнє значення кінетичної енергії.
4. Для частинки в одновимірній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками обчислити ймовірність її знаходження в області $\frac{1}{4}a \leq x \leq \frac{3}{4}a$, якщо вона має найменшу можливу енергію. Визначити також кількість енергетичних рівнів в інтервалі між E та $E + dE$.
5. Частинка масою m_0 знаходиться в двовимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками ($0 < x < a$, $0 < y < b$). Визначити спектр власних значень енергії та власні функції частинки.
6. Частинка знаходиться у двовимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками. Обчислити ймовірність її знаходження в області $(\frac{1}{3}a \leq x \leq \frac{2}{3}a, \frac{1}{3}b \leq y \leq \frac{2}{3}b)$ для основного стану.
7. Визначити власні значення енергії та власні функції для частинки масою m_0 , яка знаходиться в тривимірній прямокутній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками ($0 < x < a$, $0 < y < b$, $0 < z < c$). Обчислити значення енергії для перших трьох рівнів, якщо $a = b = c$.
8. Записати розподіл ймовірностей різних значень імпульсу частинки в одномірній потенціальній ямі з абсолютно непроникними стінками, якщо відомо, що ця частинка знаходиться на n -му енергетичному стані.
9. Частинка масою m_0 знаходиться в потенціальній ямі:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ U_0, & x \geq a \end{cases}.$$

Отримати рівняння, що визначає спектр власних значень енергії частинки в області

$E < U_0$, і звести його до вигляду $\sin(ka) = \pm \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{1}{2m_0 U_0}} ka$, де $k = \frac{\sqrt{2m_0 E}}{\hbar}$. Обґрунтувати дискретність енергетичного спектру для $E \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m_0 a^2}$.

10. Використовуючи результати попередньої задачі, знайти: а) значення величини $a^2 U_0$, при якому в ямі виникає n -ий дискретний рівень; б) число рівнів у ямі, в якій $a^2 U_0 = \frac{110 \hbar^2}{m_0}$; в) значення $a^2 U_0$, при якому енергія єдиного рівня дорівнює $E = \frac{1}{2} U_0$.

Яка при цьому імовірність перебування частинки поза ямою?

11. Використовуючи результати задачі 11, знайти: а) значення $a^2 U_0$ при якому енергія основного стану частинки $E_1 = \frac{3}{4} U_0$; б) значення $a^2 U_0$ при якому в ямі виникає третій рівень; в) число енергетичних рівнів у ямі, якщо $a^2 U_0 = 125 \frac{\hbar^2}{m_0}$.

12. Для частинки в глибокій прямокутній потенціальній ямі

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a, \\ U_0 & \text{при } x > a. \end{cases}$$

знайти наближений аналітичний вираз енергії нижніх рівнів ($E \ll U_0$), якщо

$$a^2 U_0 \gg \frac{\hbar^2}{m_0}.$$

13. Частинка масою m_0 знаходиться в потенціальній ямі вигляду

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a, (U_1 < U_2). \\ U_2 & \text{при } x > a. \end{cases}$$

Одержати рівняння, що визначає спектр власних значень енергії в області енергій $E < U_1$.

14. Для лінійного гармонічного осцилятора, що знаходиться на n -му рівні, обчислити $\overline{x^2}$ і середню потенціальну енергію.

15. Для лінійного гармонічного осцилятора, енергія якого дорівнює $\frac{5}{2}\hbar\omega$, обчислити середню кінетичну енергію.

16. Знайти розподіл ймовірностей різних значень імпульсу для лінійного гармонічного осцилятора.

17. Для лінійного гармонічного осцилятора масою m_0 і зарядом e , що поміщений в постійне електричне поле, знайти рівні енергії і хвильові функції стаціонарних станів.

18. Знайти енергетичні рівні частинки масою m_0 , що рухається в потенціальному полі наступного вигляду:

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x \leq 0, \\ \frac{1}{2}kx^2 & \text{при } x > 0. \end{cases}$$

19. Знайти рівні енергії і власні функції тривимірного гармонічного осцилятора з потенціальною енергією $U(x, y, z) = \frac{1}{2}k_1x^2 + \frac{1}{2}k_2y^2 + \frac{1}{2}k_3z^2$.

20. Тривимірний ізотропний гармонічний осцилятор має власні значення енергії $\hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right)$, де $n = 0, 1, 2, \dots$. Яка ступінь виродження кожного квантового енергетичного рівня?

21. Частинка масою m_0 рухається в потенціальному полі виду

$$U_x = \begin{cases} U_0 & \text{при } x > 0, \\ 0 & \text{при } x \leq 0. \end{cases}$$

Знайти хвильову функцію в області енергій $E > U_0$. Визначити коефіцієнт відбивання R і коефіцієнт прозорості D .

22. Для потенціального поля попередньої задачі показати, що коефіцієнт відбивання бар'єра $R = 1$, якщо енергія частинки $E < U_0$.

23. Частинка масою m_0 , що має енергію $E > 0$, рухається з ліва на право у потенціальному полі вигляду $U(x) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } 0 < x < a, \\ 0 & \text{при } x \leq 0 \text{ та } x \geq a. \end{cases}$

Знайти коефіцієнт прозорості D і коефіцієнт відбивання R .

24. Використовуючи результат попередньої задачі, визначити енергію, при якій частинка буде безперешкодно проходити через яму. Установити для цього випадку зв'язок між шириною ями і довжиною хвилі де Бройля в середині ями.

25. Частинка масою m_0 і енергією E падає на прямокутний потенціальний бар'єр:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{ї̇ δē} \quad 0 < x < a, \\ 0 & \text{ї̇ δē} \quad x \leq 0 \text{ і } x \geq a. \end{cases}$$

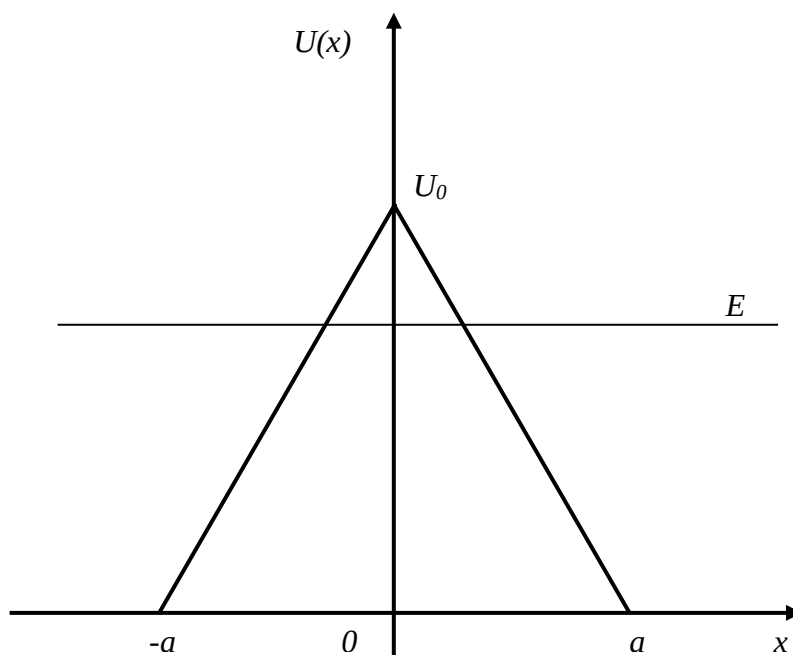
Знайти для випадку $E > U_0$ коефіцієнт прозорості D і коефіцієнт відбивання R .

Обчислити також D при $E \rightarrow U_0$.

26. Для електрона в потенціальному полі, представленому в попередній задачі, знайти перші два значення енергії E , при яких електрон безперешкодно проходить через бар'єр, якщо $U_0 = 15 \text{ eV}$ і $a = 10^{-10} \text{ м}$.

27. Визначити хвильові функції і рівні енергії частинки з масою m_0 і нульовим орбітальним моментом, що знаходиться в сферично-симетричній потенціальній ямі радіусом r_0 з нескінченними стінками.

28. Для частинки масою m_0 , що падає на прямокутний потенціальний бар'єр висотою U_0 і шириною a , знайти коефіцієнт прозорості D , якщо повна енергія частинки



$E < U_0$. Спростити отриманий вираз для випадку, коли $D \ll 1$.

Рис. до задачі 29.

29. Обчислити коефіцієнт прозорості бар'єра, зображеного на рисунку, для частинки масою m_0 при енергії $E < U_0$.

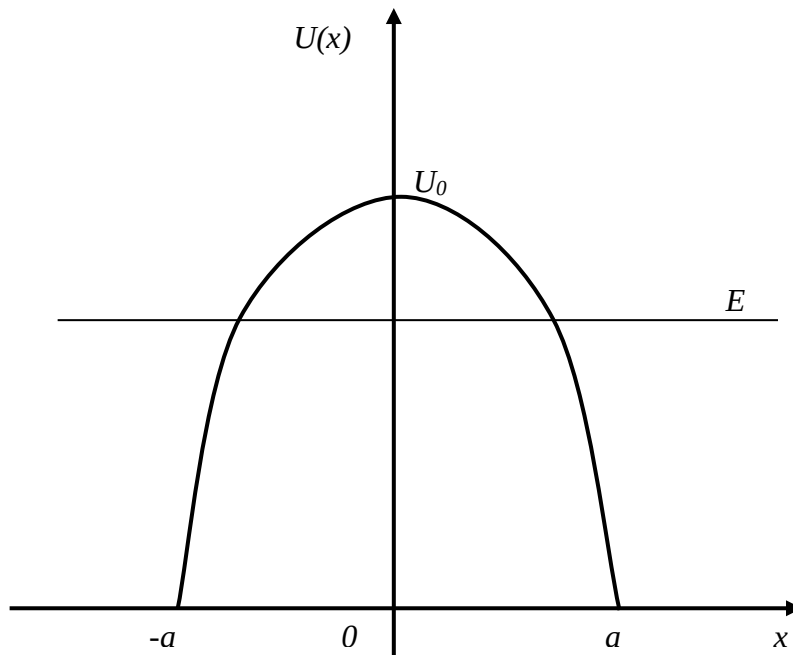


Рис. до задачі 30.

30. Для частинки з масою m_0 і енергією $E < U_0$ знайти коефіцієнт прозорості D

бар'єра, заданого потенціальною кривою на рисунку: $U(x) = U_0 \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right)$.

31. Показати, що для частинки масою m , що рухається в центральносиметричному полі $U(r)$, рівняння Шредінгера допускає розділення змінних. Записати рівняння для радіальної і для кутової частин хвильової функції $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$. Визначити залежність хвильової функції від азимутального кута φ .

32. Обчислити середні значення проекцій L_x , L_y та L_z моменту імпульсу, якщо хвильова функція частинки, що рухається в центральносиметричному полі $U(r)$, залежить від кутів θ і φ як сферична функція $Y(\theta, \varphi)$.

33. Обчислити середні значення проекцій L_x , L_y та L_z моменту імпульсу для частинки, що рухається в центральносиметричному полі $U(r)$, якщо кутова частина хвильової функції є лінійною комбінацією сферичних функцій Y_{lm} і $Y_{l,-m}$, що відповідають заданому значенню квантового числа l .

34. Обчислити середнє значення квадрата моменту імпульсу в стані $\psi(\theta, \varphi) = A \sin(\theta) \cos(\varphi)$.

35. Знайти власне значення оператора квадрата моменту імпульсу $\hat{L}^2$, що відповідає його власній функції $Y(\theta, \varphi) = A(3\cos^2(\theta) - 1 + \sin(2\theta)\cos(\varphi))$.

36. Частинка, що рухається в центральносиметричному полі $U(r)$, знаходиться в стані $\psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Який фізичний зміст функції $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$? Обчислити коефіцієнти нормування сферичних функцій для p -, d - і f -станів.

37. Скориставшись результатами попередньої задачі, знайти середні значення $\bar{r}$, $\overline{r^2}$, $\overline{(\Delta r^2)}$ для частинки, що знаходиться на n -му s -рівні ($l=0$).

38. Обчислити для основного s -стану частинки, що знаходиться в сферично-симетричній потенціальній ямі радіусом r_0 з нескінченними стінками, найбільш ймовірне значення відстані r_w та ймовірність перебування частинки в області $r < r_w$. Зобразити схематичний графік функції $|\psi(r)|^2$. Який фізичний зміст цієї функції?

39. Знайти хвильові функції, що описують p -стан частинки ($l=1$) з масою m_0 , якщо вона знаходиться в сферично-симетричній потенціальній ямі радіусом r_0 з нескінченними стінками. Показати, що енергетичні рівні в цьому стані визначаються рівнянням

$$\operatorname{tg}(kr_0) = kr_0,$$

$$\text{де } k^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}.$$

40. Одержати імпульсне представлення хвильової функції $2s$ -електрона в атомі водню і записати розподіл ймовірностей за імпульсами.

41. Знайти розподіл ймовірностей різних значень імпульсу в основному стані частинки масою m_0 , що знаходиться в сферично-симетричній потенціальній ямі радіусом r з абсолютно непроникними стінками.

42. Частинка масою m_0 знаходиться в сферично-симетричному потенціальному полі

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0, \\ U_0, & r \geq r_0. \end{cases}$$

Показати за допомогою підстановки $R(r) = \frac{1}{r} \chi(r)$, що рівняння, яке визначає власні значення енергії частинки в s-стані ($l=0$) при ($E < U_0$), має вигляд

$$\sin(kr_0) = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_0 r_0^2 U_0}} kr_0,$$

де $k = \frac{\sqrt{2m_0 E}}{\hbar}$. Який енергетичний спектр частинки в цьому випадку?

43. Використовуючи результати задачі 42, обчислити інтервал значень для глибини U_0 сферично-симетричної потенціальної ями радіусом r_0 , при якій існує лише один енергетичний s-рівень. Визначити також положення цього рівня в момент його появи і при подальшому збільшенні глибини ями.

44. Показати, що енергетичний спектр частинки з нульовим орбітальним моментом ($l=0$), що знаходиться в сферично-симетричній потенціальній ямі з радіусом r_0 і з скінченною глибиною U_0 , є неперервним, якщо повна енергія частинки $E > U_0$.

45. Звести рівняння, що визначає радіальну частину хвильової функції електрона у водневоподібному атомі, до безрозмірного вигляду

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0,$$

вибравши за одиниці вимірювань атомну одиницю довжини r_1 (перший борівський радіус) і атомну одиницю енергії $E_{\text{ат}} = -E_1$ (енергія іонізації атома водню для основного стану) і ввівши позначення: $\rho = \frac{r}{r_1}$, $\varepsilon = \frac{E}{-E_1}$.

46. Обчислити коефіцієнти нормування хвильових функцій електрона в 1s-, 2s-, 3p-станах атому водню.

47. Електрон атому водню знаходиться в стаціонарному стані, що описується сферично-симетричною хвильовою функцією $\psi(r) = A(1+ar)e^{\alpha r}$ (де A , a , α – деякі сталі величини). За допомогою рівняння Шредінгера знайти значення сталих a , α й енергію електрона. Визначити, у якому стані знаходиться електрон.

48. Обчислити для електрона 1s- стану атому водню найбільш ймовірну відстань від ядра r_w та імовірність перебування частинки в області $r < r_w$.

49. Обчислити імовірність перебування 1s-електрона в атомі водню поза класичними точками повороту.
50. Обчислити для 1s-електрона в атомі водню величини $\bar{r}$, $\overline{r^2}$ та $\overline{(\Delta r^2)}$.
51. Обчислити середнє значення кінетичної енергії і середньоквадратичну швидкість для 1s-електрона в атомі водню.
52. Обчислити найбільш ймовірну відстань 2p- і 3d-електронів від ядра у водневоподібному атомі.
53. Пронормувати хвильові функції для 2p- і 3d- електронів в атомі водню й обчислити середню відстань $\bar{r}$ електрона від ядра і середньоквадратичне відхилення $\overline{(\Delta r^2)}$.
54. Обчислити середні значення сили взаємодії з ядром і потенціальної енергії для 2p-електрона в атомі водню і для іонів з одним електроном.
55. Знайти середній електростатичний потенціал, що створює 1s-електрон у центрі водневоподібного атома.
56. Визначити середній електростатичний потенціал поля, що створюють ядро і електрон в основному стані атома водню.
57. Підрахувати кратність виродження енергетичного рівня $E = -\frac{m_0 e^4}{128 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$ в атомі водню. Записати хвильові функції $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ різних станів електрона з зазначеною енергією.
58. Обчислити енергію іонізації атома водню. Показати, що зі зростанням головного квантового числа n інтервал між сусідніми енергетичними рівнями зменшується. Накреслити схему рівнів енергії атома водню.

