Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Сыктывкарский государственный университет имени Питирима Сорокина»
(ФГБОУ ВО «СГУ им. Питирима Сорокина»)
Институт точных наук и информационных технологий

СЫКТЫВКАРСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ
имени Питирима Сорокина

П. А. Макаров, В. А. Устюгов

Практический минимум по квантовой механике

Учебно-методическое пособие

ISBN 978-5-87661-760-6

УДК 530.145(075)
ББК 22.314
М 15

Издается по постановлению редакционно-издательского совета ФГБОУ ВО «СГУ им. Питирима Сорокина» (протокол № 8 от 14.10.2022)

Рецензенты:

Асадуллин Ф. Ф., заведующий кафедрой физики, автоматических и технологических процессов и производств Сыктывкарского лесного института (филиал ФГБОУ ВПО Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет имени С. М. Кирова), д.ф.-м.н., профессор;
Казаков Д. В., заведующий лабораторией теоретической и вычислительной физики Физико-математического института ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, к.ф.-м.н.

Макаров П. А., Устюгов В. А.

М 15 Практический минимум по квантовой механике [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие: текстовое учебное электронное издание на компакт-диске / П. А. Макаров, В. А. Устюгов; Федер. гос. бюдж. образоват. учреждение высш. образования «Сыктыв. гос. ун-т им. Питирима Сорокина». — Электрон. текстовые дан. (1,0 МБ). — Сыктывкар: Изд-во СГУ им. Питирима Сорокина, 2022. — 1 опт. компакт-диск (CD-ROM). — Систем. требования: современный ПК с установленной программой для чтения файлов формата PDF. — ISBN 978-5-87661-760-6.

Предлагаемое пособие является сборником задач, сопровождающим семинарские занятия по курсам «Квантовая механика» и «Элементы квантовой теории», которые читаются в Сыктывкарском государственном университете имени Питирима Сорокина студентам бакалавриата третьего и четвёртого курсов, обучающимся по направлениям «Физика», «Радиофизика» и «Математика и компьютерные науки».

Настоящее издание также будет полезно студентам физико-математических, технических и естественно-научных специальностей высших учебных заведений, изучающих квантовые явления и их математическое описание в рамках курсов теоретической физики, а также всем желающим научиться решать задачи по квантовой механике.

УДК 530.145(075)
ББК 22.314

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Квантовая механика — это один из основных разделов современного естествознания. Предметом изучения этой дисциплины являются физические системы, свойства и поведение которых не могут быть объяснены в рамках классической физической науки — механики, созданной трудами Ньютона, Лагранжа и Гамильтона, даже получившей свое последующее развитие в теории относительности, сформировавшейся в работах Эйнштейна, Пуанкаре, Минковского и Лоренца.

Как и механика классическая, квантовая механика изучает механическое движение физических систем, т. е. процесс изменения их положения (на более глубоком уровне — динамику состояния системы) с течением времени, в заданных силовых полях (как правило, электромагнитной природы). Возникает закономерный вопрос: а в чём принципиальное различие между этими двумя науками, если они исследуют одни и те же объекты? Ответ на этот вопрос состоит в том, что квантовая механика предлагает принципиально отличный от классического способ исследования. Этот способ на заре "квантовой эпохи" по праву считался контринтуитивным и чрезмерно абстрактным, но в то же время показал свою состоятельность в тех задачах атомной, ядерной физики и спектроскопии, которые принципиально не могли быть решены в рамках классической науки.

В том числе и поэтому, к сожалению, достаточно часто встречаются некорректные рассуждения о том, что квантовая механика — это наука, посвящённая исключительно явлениям микромира, но в рамках макроскопических систем либо непригодна в практическом использовании, либо вообще несправедлива. Следует подчеркнуть, что подобные утверждения абсолютно несостоятельны.

Существуют многочисленные подтверждения того, что квантовая теория (и механика, в частности) — это единственная наука, объясняющая практически весь спектр известных на настоящий момент физических явлений, протекающих на самых разнообразных масштабах, от субатомных и вплоть до астрономических. Схематически это обстоятельство изображено на рис. 1, где показано взаимное отношение основных разделов современной теоретической физики и их связь с квантовой теорией. В завершение этого обсуждения, кратко отметим здесь ещё только тот факт, что современная теория электрических явлений (объясняющая саму возможность существования электрического тока в тех или иных проводниках) — существенно квантовая наука в своей основе.

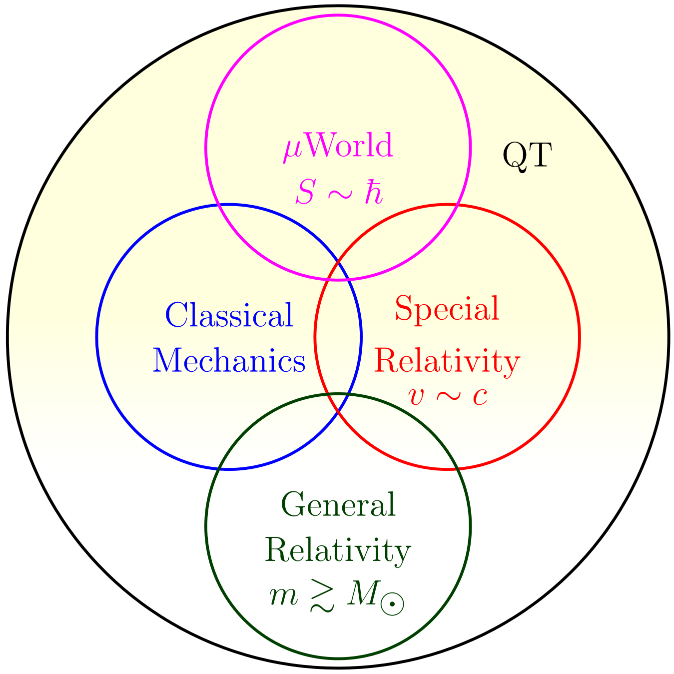

Рис. 1. Основные разделы современной теоретической физики

В то же время нельзя не признать тот факт, что изучение квантовой механики сопряжено с большими трудностями. Этому есть две причины. Первая состоит в том, что квантовая наука предлагает исследователю сформировать для себя абсолютно новую систему понятий (порой достаточно абстрактных) и, кроме того, существенно пересмотреть многие, казалось бы, обыденные и хорошо знакомые понятия. В частности, глубокому переосмыслению подвергаются даже такие термины, как *физическая величина, процесс измерения* и т. д. На пути преодоления первой проблемы, студентов неизбежно встречает проблема вторая — дело в том, что глубокая проработка новой системы физических понятий требует привлечения самого широкого круга математических концепций из разнообразных наук, включая (но далеко не ограничиваясь!) такие дисциплины, как «Математический анализ», «Линейная алгебра и аналитическая геометрия», «Дифференциальные и интегральные уравнения», «Теория вероятностей и математическая статистика», «Общая алгебра» и «Методы математической физики».

Большую роль в преодолении проблем, отмеченных в предыдущем абзаце играют два фактора. Первый — это глубокое, вдумчивое изучение основ квантовой теории, её системы понятий, терминов и постулатов, а также формального языка этой науки. Вторая составляющая успеха зиждется на приобретении опыта практических навыков решения разнообразных задач квантовой механики на семинарских занятиях. Именно это позволяет студентам привыкнуть к набору абстрактных понятий квантовой теории и её формальному языку, а также научиться использовать теоретические знания для решения проблем не только самой квантовой механики, но и других областей современной науки и техники.

Последнее обстоятельство сыграло решающую роль в появлении настоящего издания. Данное учебное пособие составлено на основе лекционных и семинарских занятий по дисциплинами «Квантовая механика», «Элементы квантовой теории» и «Квантовая теория», проведённых одним из соавторов в Институте точных наук и информационных технологий Сыктывкарского государственного университета имени Питирима Сорокина для студентов бакалавриата и магистратуры направлений обучения «Физика», «Радиофизика» и «Математика и компьютерные науки» на протяжении более чем десяти лет, начиная с 2011 года. Авторы смеют надеяться, что издание также будет полезно всем студентам физико-математических, технических и естественно-научных специальностей высших учебных заведений, изучающим квантовые явления и их математическое описание в рамках курсов теоретической физики, а также неограниченному кругу лиц, желающих научиться решать задачи по квантовой механике.

ТЕМА 1

Особенности физики микромира

Задачи

№ 1. С помощью законов сохранения энергии и импульса покажите, что свободный электрон не может полностью поглотить фотон.

№ 2. Составьте выражение для величины, имеющей размерность длины, используя скорость света c, массу частицы m и постоянную Планка $\hbar$. Что это за величина и какой физический смысл она имеет?

№ 3. Вычислите импульсы (в единицах эВ$/c$, c — скорость света) и энергии фотонов с длинами волн 0.50 мкм, 0.25 нм и 5.0 пм.

№ 4. Найдите дебройлевскую длину волны протонов, если при попадании в поперечное магнитное поле с индукцией $B = 1$ кГс радиус кривизны их траектории $\rho = 23$ мм.

№ 5. Определите, при какой кинетической энергии электрона его дебройлевская и комптоновская длины волн равны?

№ 6. Интерпретируйте квантовые условия Бора на основе волновых представлений: покажите, что электрон в атоме водорода может двигаться только по тем круговым орбитам, на которых укладывается целое число дебройлевских волн.

№ 7. Согласно постулату Бора — Зоммерфельда при периодическом движении частицы в потенциальном поле должно выполняться следующее правило квантования: $\oint p\,\mathrm{d}q = 2\pi n\hbar$, где q и p — обобщённые координата и импульс, n — целые числа. Воспользовавшись этим правилом, найдите разрешённые значения энергии частицы массы m, которая движется:

1) в одномерной прямоугольной потенциальной яме ширины a с бесконечно

высокими стенками;
2) по окружности радиуса R (жёсткий плоский ротатор);
3) в бесконечно глубокой сферической яме радиуса R (закрытая сферическая квантовая точка);
4) в одномерном потенциальном поле $U = \alpha x^2/2$, где $\alpha > 0$ (гармонический осциллятор).
5) по круговым и эллиптическим орбитам в поле, где потенциальная энергия частицы $U = -\alpha/r$ и $\alpha > 0$ (энергетический спектр водородоподобного атома по Бору).

№ 8. Оцените наименьшие погрешности, с которыми можно определить скорости электрона и протона локализованных в области размером 1 мкм, 10^{-8} см.

№ 9. След пучка электронов на экране электронно-лучевой трубки имеет диаметр $d \approx 0.5$ мм. Расстояние от электронной пушки до экрана $l \approx 20$ см, ускоряющее напряжение $U = 10$ кВ. Оцените неопределённость координаты электрона на экране.

№ 10. Исходя из соотношения неопределённостей, записанного в виде $\Delta p \cdot \Delta r \gtrsim \hbar$, объяснить устойчивость атома водорода. Покажите, что энергия основного состояния атома водорода:

$$-\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} = -13.6 \text{ эВ}.$$

№ 11. Оцените энергию основного состояния гелиеподобного атома, т. е. иона с двумя электронами.

№ 12. Сделайте оценку энергии основного состояния и неопределённости положения нейтрона в гравитационном поле Земли с помощью соотношения неопределённостей.

№ 13. В некоторой Вселенной электростатическая сила взаимодействия равна $-\alpha/r^\gamma$, $\alpha > 0$. При каких γ может существовать такая Вселенная?

№ 14. Исходя из соотношения неопределенностей Гейзенберга, установите несостоятельность протонно-электронной модели ядра, принятой до 1932 г.

№ 15. Японский физик Х. Юкава в 1935 г. предположил, что ядерные силы переносятся мезонами — некоторыми частицами тяжелее электронов, но легче протонов. Определите порядок их массы.

№ 16. Слабое взаимодействие переносится промежуточными бозонами $W^\pm$ и Z^0, открытыми в 1983 г. Их масса $m \sim 100$ ГэВ ($m_W \approx 80$ ГэВ, $m_Z \approx 90$ ГэВ).

Оцените радиус слабого взаимодействия.

№ 17. Крайне нестабильные частицы обладают чрезвычайно малыми временами жизни τ, а потому не имеют определённой энергии покоя mc^2, а значит массы m. Они проявляются в виде размытых максимумов в сечениях рассеяния и называются резонансами. В таблице элементарных частиц сказано, что ширина Γ у частицы Δ^{++} равна 120 МэВ. Что это значит? Чему равно время жизни этой частицы?

ТЕМА 2

Описание квантовых состояний с помощью волновых функций

Краткая теория

Волновая функция $\Psi(\mathbf{q})$ — это всякая комплекснозначная функция, определённая на всём конфигурационном пространстве $\mathbb{R}^n$ или в какой-то его области $\mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^n$ и удовлетворяющая требованиям ***однозначности***, ***непрерывности*** и ***ограниченности***.

$$\langle \Phi \,|\Psi \rangle \equiv \int\limits_{\mathbb{D}} \Phi^*(\mathbf{q})\Psi(\mathbf{q})\,\mathrm{d}\mathbf{q} \text{ — скалярное произведение волновых функций,}$$

$$\langle \Phi \,|\Psi \rangle = 0 \text{ — ортогональность функций } \Phi \text{ и } \Psi,$$

$$\|\Psi\| \equiv +\sqrt{\langle \Psi \,|\Psi \rangle} \text{ — норма функции } \Psi.$$

Если $\|\Psi\| = \infty$, то волновая функция является ***ненормируемой***. При выполнении условия $\|\Psi\| < \infty$ волновая функция ***квадратично интегрируемая*** или ***нормируемая***. Множество нормируемых функций образуют бесконечномерное гильбертово пространство $\mathscr{H}$. Волновую функцию называют ***нормированной***, если её норма $\|\Psi\| = 1$. Любую квадратично интегрируемую функцию можно нормировать.

В квантовой механике невозможно одновременно точно определить координату $\mathbf{q}$ и импульс $\mathbf{p}$ одной и той же частицы. По этой причине существует два равноправных описания состояния системы: ***координатное*** и ***импульсное*** представления. Квантовое состояние системы описывают абстрактным вектором $|\Psi\rangle \in \mathscr{H}$, который может быть записан в том или ином представлении:

$\Psi(\mathbf{q}) = \langle \mathbf{q}|\Psi\rangle$ — координатное,

$\Psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}|\Psi\rangle$ — импульсное представление.

В общем случае можно выбрать некий произвольный полный набор переменных A, B, C, D и т. п. Тогда $\Psi(A)$ — волновая функция полного набора переменных A и т. д.

Часто используются обозначения $\Psi_A(B) \equiv \Psi_{BA} \equiv \langle B \,|\, A\rangle \equiv \langle \Psi(B) \,|\, \Psi(A)\rangle$, имеющие физический смысл амплитуды вероятности обнаружить переменные B у микрочастицы, находящейся в состоянии A. Индекс A при этом называют ***индексом состояния***, а B — ***индексом представления***.

Плоская монохроматическая волна материи — волна де Бройля:

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \mathbf{r} \,|\, \Psi_{\mathbf{p}}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{i(\mathbf{pr}-Et)/\hbar}.$$

Задачи

№ 1. Какие из перечисленных функций являются волновыми функциями?
1) e^x и e^{-x}, если $x \in \mathbb{R}$, а также на интервалах $x \in (-\infty, 0]$ и $x \in [0, +\infty)$;
2) $e^{i\pi\varphi}$, где $\varphi \in [0, 2]$ и $\varphi \in \mathbb{R}$;
3) $e^{i2\varphi}$, $\varphi \in [-\pi, +\pi]$ и $\varphi \in \mathbb{R}$;
4) $e^{ax/2}\sin x$, $a \in \mathbb{R}$, если $x \in \mathbb{R}$, а также на интервалах $x \in (-\infty, 0]$ и $x \in [0, +\infty)$;
5) 1 на $[-2, +2]$;
6) $\varepsilon(x) = \begin{cases} -1, x \leqslant 0 \\ +1, x > 0 \end{cases}$ на $[-1, +1]$;
7) x^n, где $n \in \mathbb{N}$, $x \in \mathbb{R}$ и $x \in [-1, +1]$;
8) $\sqrt{z}$ и $\sqrt[3]{z}$, если $z \in \mathbb{C}$ или $z \in \mathbb{R}$, а также на вещественных интервалах $z \in [-1, 1]$ и $z \in [0, 1]$;
9) $\operatorname{sh}\varphi$, $\operatorname{ch}\varphi$ и $\operatorname{th}\varphi$, если $\varphi \in \mathbb{R}$ или $\varphi = i\alpha$, где $\alpha \in \mathbb{R}$.

№ 2. Найдите норму функции $\varphi(x)/\|\varphi\|$.

№ 3. Чему равны нормы волновых функций из задачи 1? Какие из этих функций нормируемые? Приведите их к нормированному виду.

№ 4. Определите норму функции $e^{i\alpha}\varphi(x)$ при $\alpha \in \mathbb{R}$ и $\alpha \in \mathbb{C}$.

№ 5. Какие из перечисленных функций

$$\alpha\, e^{-\alpha x^2+\beta}, \quad e^{\ln\beta+\alpha(x^2-1)}, \quad e^{2\alpha x}e^{-\alpha(x+1)^2}$$

соответствуют одинаковым состояниям?

№ 6. Чему равно $\langle \alpha\varphi \,|\, \psi\rangle$? Ответ получите двумя способами: из определения

$\langle\varphi\,|\,\psi\rangle$ и его свойств.

№ 7. Являются ли взаимно ортогональными при разных n функции:
1) x^n на $[-1,+1]$;
2) $e^{i\pi nx}$ на $[-1,+1]$.

№ 8. Ортогональны ли функции e^{ikx} при разных $k \in \mathbb{R}$?

№ 9. Образует ли базис система $\{x^n\}_0^\infty$ на $[-1,+1]$? Является ли он ортонормированным? Постройте методом Грама — Шмидта соответствующий ортонормированный базис (нормированные полиномы Лежандра $\mathtt{P}_n(x)$).

№ 10. Нормируйте функции:
1) $e^{i\pi nx/\ell}$, $x \in [-\ell,+\ell]$;
2) $\cos\dfrac{\pi nx}{a}$, $x \in [0,a]$.

№ 11. Волновая функция, зависящая от полярного угла φ, задаётся выражением

$$\Psi(\varphi) = A\,e^{i\alpha\varphi}, \quad \alpha = \mathrm{const} \in \mathbb{R}.$$

Используя стандартные условия, определите возможные значения α и нормируйте волновую функцию.

№ 12. Нормируйте волновые функции

$$\Psi_1(\varphi,\theta) = A_1; \quad \Psi_2(\varphi,\theta) = A_2\cos\theta$$

на единичной сфере.

№ 13. Найдите нормировочный коэффициент C для волновой функции основного состояния водородоподобного атома $\psi(\mathbf{r}) = Ce^{-Zr/a_0}$, где $a_0, Z > 0$. Определите наиболее вероятное, среднее и среднее квадратическое положения электрона.

№ 14. Волновая функция частицы, которая может двигаться только на интервале $(0,a)$ равна $\psi(x) = \sin\dfrac{\pi x}{a}$. Найдите вероятность обнаружения её в интервале $(0,a/4)$.

№ 15. Микрочастица может свободно двигаться вдоль всей прямой Ox. Её волновая функция при этом имеет следующий вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^x, x < 0 \\ e^{-x}, x \geqslant 0 \end{cases}.$$

Определите вероятность обнаружения частицы в интервале $[-1,+1]$.

№ 16. Волновая функция частицы, которая может двигаться по всей прямой, равна $\psi(x) = e^{ikx}\sin(kx)$. Найдите отношение вероятностей обнаружить её в интервалах $(0, \pi/2k)$ и $(0, \pi/k)$.

№ 17. По заданной волновой функции $\Psi(x, y, z)$ рассчитайте вероятность нахождения частицы в интервалах значений координаты z от z_1 до z_2 и импульса p_y от p_1 до p_2.

№ 18. Вычислите нормировочный коэффициент A и перейдите в импульсное представление для волнового пакета гауссовской формы

$$\Psi(x) = A\, e^{ip_0 x/\hbar - \alpha x^2}.$$

№ 19. Найдите волновые функции в $\mathbf{p}$- и $\mathbf{r}$-представлениях для частицы, локализованной в точке $\mathbf{r}_0$.

№ 20. Определите вероятность того, что импульс электрона в основном состоянии атома водорода заключён в интервале $(\mathbf{p}, \mathbf{p}+\mathrm{d}\mathbf{p})$, если известна волновая функция в координатном представлении (см. задачу 13).

ТЕМА 3

Операторы

Краткая теория

Оператор — правило, определённым образом сопоставляющее одной волновой функции другую. Оператор $\widehat{L}$ ***линейный***, если его действие на суперпозицию состояний равно суперпозиции действий:

$$\widehat{L}\sum_i c_i\psi_i = \sum_i c_i\widehat{L}\psi_i.$$

Коммутатор операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ есть оператор, действующий по правилу:

$$\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}.$$

Операторы $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ ***коммутирующие***, если их коммутатор равен нулю. В этом случае их действия независимы и их можно менять местами (*в общем случае этого делать нельзя!*).

Эрмитово сопряжённым, или просто ***сопряжённым,*** называют оператор $\widehat{L}^+$, действие которого на скалярное произведение связано с действием оператора $\widehat{L}$ правилом:

$$\langle\varphi\,|\,\widehat{L}\psi\rangle = \langle\widehat{L}^+\varphi\,|\,\psi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \int\varphi^*(q)\widehat{L}\psi(q)dq = \int\left(\widehat{L}^+\varphi^*(q)\right)\psi(q)dq.$$

Это же правило обычно представляют в другой записи:

$$\langle\varphi\,|\,\widehat{L}\,|\,\psi\rangle = \left(\langle\psi\,|\,\widehat{L}^+\,|\,\varphi\rangle\right)^* \quad \Leftrightarrow \quad \int\varphi^*(q)\widehat{L}\psi(q)dq = \left(\int\psi^*(q)\widehat{L}^+\varphi(q)dq\right)^*.$$

Оператор ***эрмитов,*** или ***самосопряжённый***, если его действие равно действию сопряжённого к нему оператора:

$$\langle\varphi\,|\,\widehat{L}\psi\rangle = \langle\widehat{L}\varphi\,|\,\psi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \widehat{L} = \widehat{L}^{+}.$$

Задачи

№ 1. Какие из приведённых операторов являются линейными?

1) единичный $\widehat{I}$;
2) нулевой $\widehat{0}$;
3) оператор координаты $\widehat{X} : \widehat{X}\psi = x\psi$;
4) оператор дифференцирования $\widehat{D}_x : \widehat{D}_x\psi = \dfrac{\partial}{\partial x}\psi$;
5) оператор комплексного сопряжения $\widehat{K} : \widehat{K}\psi = \psi^*$;
6) оператор возведения в квадрат $\widehat{S} : \widehat{S}\psi = \psi^2$;
7) оператор инверсии $\widehat{J} : \widehat{J}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$;
8) оператор сдвига $\widehat{T}_a : \widehat{T}_a\psi(x) = \psi(x-a)$;
9) оператор растяжения $\widehat{M_\lambda} : \widehat{M_\lambda}\psi(x) = \sqrt{\lambda}\psi(\lambda x)$;
10) оператор взятия логарифма $\widehat{L} : \widehat{L}\psi(x) = \ln\{\psi(x)\}$. Является ли это действие действительно оператором?

№ 2. Найдите обратные к операторам задачи №1.

№ 3. Чему равны квадраты операторов из задачи №1?

№ 4. Проверьте следующие операторные равенства:

1) $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x = 1 + x\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$;
2) $x^2\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\dfrac{1}{x} = x\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - 1$;
3) $\left(1 + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 = 1 + 2\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$;
4) $\left(x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 = 1 + x^2 + 2x\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$;
5) $\left(\dfrac{1}{x}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x\right)^2 = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \dfrac{2}{x}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$;
6) $\left(\dfrac{\partial}{\partial x} + \dfrac{\partial}{\partial y}\right)^2 = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\dfrac{\partial^2}{\partial x\partial y} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2}$.

№ 5. Найдите результат действия операторов $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}x^2$ и $\left(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x\right)^2$ на функции:

1) $\cos x$;
2) $\sin x$;
3) e^x.

№ 6. Чему равны коммутаторы:

1) $\left[\widehat{A}, \sum\limits_i \widehat{B}_i\right]$;
2) $\left[\widehat{A}, \widehat{B}\widehat{C}\right]$ и $\left[\widehat{A}\widehat{B}, \widehat{C}\right]$?

№ 7. Пусть даны операторы $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$, такие что их коммутатор есть единичный оператор: $\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right] = \widehat{I}$. Докажите следующие свойства:

1) $\left[\widehat{A}, \widehat{B}^2\right] = 2\widehat{B}$;
2) $\left[\widehat{A}^2, \widehat{B}^2\right] = 2\left\{\widehat{A}, \widehat{B}\right\}$;
3) $\left[\widehat{A}, \widehat{B}^n\right] = n\widehat{B}^{n-1}$.

№ 8. Найдите явный вид операторов:

1) $\widehat{F} = e^{ia\widehat{J}}$, рассмотрите частные случаи $a = \pi$ и $a = 2\pi$;
2) $\widehat{F} = e^{-a\widehat{D}_x}$;
3) $\widehat{F} = e^{-a\widehat{X}\widehat{D}_x}$.

№ 9. Чему равен коммутатор $\left[\widehat{D}_x, \widehat{X}\right]$?

№ 10. Вычислите коммутатор $\left[\widehat{D}_x, f(\widehat{X})\right]$. Задачу решите двумя способами: действуя непосредственно на волновую функцию и используя разложение Тейлора.

№ 11. Докажите, что если операторы $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ коммутирующие, то:

1) $\left(\widehat{A} + \widehat{B}\right)^2 = \widehat{A}^2 + 2\widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}^2$;
2) $\left(\widehat{A} + \widehat{B}\right)\left(\widehat{A} - \widehat{B}\right) = \widehat{A}^2 - \widehat{B}^2$;
3) $\left[\left(\widehat{A} + \widehat{B}\right), \left(\widehat{A} - \widehat{B}\right)\right] = \widehat{0}$;

№ 12. Оператор $\widehat{A}$ коммутирует с операторами $\widehat{B}$ и $\widehat{C}$. Можно ли сделать вывод, что операторы $\widehat{B}$ и $\widehat{C}$ коммутирующие?

№ 13. Пусть $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ — линейные операторы. Определите правила сопряжения операторов, для чего найти сопряжённые к операторам:

1) $\widehat{A} + \widehat{B}$;

2) $\alpha\widehat{A}$;
3) $\widehat{A}\,\widehat{B}$;
4) $\widehat{A}^{+}$.

№ 14. Найдите сопряжённые к линейным операторам задачи №1, а также к данным:
1) $\alpha\widehat{I}$, при $\alpha \in \mathbb{R}$, $\alpha \in \mathbb{C}$;
2) $i\widehat{X}$;
3) $i\widehat{D}_x$.
Какие из всех этих операторов эрмитовы?

№ 15. Покажите, что произвольный линейный оператор $\widehat{L}$ можно представить в виде $\widehat{L} = \widehat{A} + i\widehat{B}$, где $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ — эрмитовы операторы.

№ 16. Докажите различными способами эрмитовость оператора $\widehat{D}_x^2 = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$.

№ 17. Пусть $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ — самосопряжённые операторы, а $\widehat{L}$ — произвольный линейный оператор. Используя правила сопряжения, покажите эрмитовость следующих операторов:
1) $\widehat{L}^{+}\widehat{L}$ и $\widehat{L}\widehat{L}^{+}$;
2) $\widehat{L} + \widehat{L}^{+}$;
3) $i\left(\widehat{L} - \widehat{L}^{+}\right)$;
4) $\widehat{L}\widehat{A}\widehat{L}^{+}$;
5) $\widehat{A} + \widehat{B}$
6) $i\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]$.
7) $\left\{\widehat{A}, \widehat{B}\right\} = \widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}\widehat{A}$;

№ 18. Чему равны операторы 6) и 7) из предыдущей задачи при $\widehat{A} = \widehat{X}$ и $\widehat{B} = i\widehat{D}_x$?

№ 19. Докажите, что если $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ — коммутирующие эрмитовы операторы, то $\widehat{A}\widehat{B}$ также эрмитов оператор.

№ 20. Докажите, что оператор $\widehat{A}^n$ эрмитов, если эрмитов оператор $\widehat{A}$ $(n \in \mathbb{N})$.

№ 21. Пусть $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ — некоммутирующие эрмитовы операторы. Докажите, что оператор $\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right]$ не эрмитов и может быть представлен в виде $\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right] = i\widehat{C}$, где $\widehat{C}$ — эрмитов оператор.

№ 22. Покажите, что в случае, когда коммутатор операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ кратен единичному, т. е. $\left[\widehat{A}, \widehat{B}\right] = ic\widehat{I}$ справедливо соотношение:

$$e^{\widehat{A}+\widehat{B}} = e^{\widehat{A}}\, e^{\widehat{B}}\, e^{-ic/2}.$$

№ 23. В общем случае линейный оператор $\widehat{L}$ можно рассматривать как линейный интегральный оператор, т. е.

$$\Phi(q) = \widehat{L}\Psi(q) \equiv \int L(q,q')\Psi(q')\,dq',$$

где $L(q,q')$ — ***ядро*** оператора $\widehat{L}$ (q — совокупность переменных используемого представления).

1) Как ядро оператора $\widehat{L}^{+}$ связано с ядром оператора $\widehat{L}$?
2) Найдите ядра операторов $\widehat{I}$, $\widehat{T}_a$, $\widehat{M_c}$, $\widehat{X}$, $\widehat{P}_x \equiv -i\hbar\widehat{D}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$.
3) Какой вид имеет ядро оператора $\widehat{L}$, если этот оператор коммутирует с операторами: координаты $\widehat{X}$; импульса $\widehat{P}_x$?
4) Покажите, что оператор $\widehat{L}$, коммутирующий как с $\widehat{X}$ и $\widehat{P}_x$, кратен единичному, т. е. $\widehat{L} \equiv L_0\widehat{I}$, где $L_0 = \text{const}$.

ТЕМА 4

Собственные состояния и собственные значения операторов

Краткая теория

Задача на собственные значения и собственные функции оператора $\widehat{A}$ состоит в определении таких чисел A и функций ψ_A, для которых выполняется равенство:

$$\widehat{A}\,\psi_A = A\,\psi_A.$$

Если волновая функция рассматриваемого состояния выбрана нормированной, т. е. $\langle\psi\,|\,\psi\rangle = 1$, то среднее значение физической величины, представляемой оператором $\widehat{L}$ в данном состоянии может быть найдено по следующему правилу:

$$\langle L\rangle_\psi = \langle\psi\,|\,\widehat{L}\,|\,\psi\rangle = \int\limits_{\mathbb{D}} \psi^*(\mathbf{q})\,\widehat{L}\,\psi(\mathbf{q})\,\mathrm{d}\mathbf{q}.$$

Задачи

№ 1. Покажите, что приведённые ниже функции являются собственными для указанных операторов. Найдите отвечающие им собственные значения.

1) $\widehat{A} = -\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}, \quad \psi_A = \sin 2x;$

2) $\widehat{A} = -\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + x^2, \quad \psi_A = e^{-x^2/2};$

3) $\widehat{A} = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \dfrac{2}{x}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \quad \psi_A = \dfrac{\sin\alpha x}{x}.$

№ 2. Найдите собственные значения и нормированные собственные функции операторов:

1) $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ на множестве функций, которые заданы на интервале $(0, a)$ и обращаются в нуль на его концах;
2) $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ на множестве функций, заданных на прямой;
3) $i\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ на множестве функций, заданных на прямой.

№ 3. Каковы свойства собственных значений и собственных функций эрмитовых операторов?

№ 4. Покажите, что средние значения эрмитовых операторов $\widehat{L}^+\widehat{L}$ и $\widehat{L}\widehat{L}^+$ в произвольном состоянии неотрицательны.

№ 5. Докажите вещественность средних значений наблюдаемых.

№ 6. Докажите, что собственные значения оператора квадрата наблюдаемой величины неотрицательны.

№ 7. Эрмитов оператор $\widehat{A}$ удовлетворяет соотношению
1) $\widehat{A}^2 = \alpha^2\widehat{I}$;
2) $\widehat{A}^2 = \alpha\widehat{A}$;
3) $\widehat{A}^3 = \alpha^2\widehat{A}$;
где α — вещественный параметр. Каковы собственные значения такого оператора?

№ 8. Решите задачи на собственные значения и убедитесь в их “аномалиях” для следующих операторов:

1) $x - \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$;
2) $x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$;
3) $\widehat{A} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$;
4) $\widehat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$;

№ 9. Вычислите коммутатор $\left[\widehat{H}, \widehat{X}\right]$ в случае одномерного движения частицы, находящейся в стационарном силовом поле.

№ 10. Докажите с помощью решения предыдущей задачи, что для одномерного движения в стационарном состоянии дискретного спектра среднее значение импульса равно нулю.

№ 11. В состоянии частицы с волновой функцией

$$\psi(x) = C \exp\left\{\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{2a^2}\right\},$$

где p_0, x_0 и a — вещественные параметры, найдите распределение вероятностей различных значений координаты. Определите средние значения и флуктуации координаты и импульса частицы.

№ 12. Найдите связь между средними значениями координаты и импульса частицы в двух состояниях, волновые функции ψ_1 и ψ_2 которых связаны соотношением

1) $\psi_2(x) = \psi_1(x + a)$;
2) $\psi_2(x) = \psi_1(x) e^{ip_0 x/\hbar}$.

№ 13. Покажите, что среднее значение дипольного момента системы заряженных частиц в состоянии, характеризующимся определённой чётностью, равно нулю.

№ 14. Получите формулу для вычисления вероятностей из формулы для среднего значения.

№ 15. Покажите, что вероятность получить при измерении наблюдаемой F в состоянии ψ какое-то значение f равно 1.

№ 16. Докажите, что две физические величины A и B могут быть измеримы одновременно тогда и только тогда, когда операторы этих величин $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ коммутируют.

№ 17. Проверьте коммутационное соотношение Гейзенберга

$$\left[\widehat{X}, \widehat{P}_x\right] = i\hbar\,\widehat{I}.$$

№ 18. Вычислите коммутаторы:

1) $\left[\widehat{P}^2, \widehat{X}\right]$;
2) $\left[\widehat{P}_x, f\left(\widehat{X}\right)\right]$.

№ 19. Какие из пар наблюдаемых являются совместно измеримыми:

1) $\widehat{X} = x, \quad \widehat{Y} = y$;
2) $\widehat{P}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}, \quad \widehat{P}_y = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial y}$;
3) $\widehat{X}, \quad \widehat{P}_x$;

4) $\widehat{X}$, $\quad \widehat{P}_y$;
5) $\widehat{P}_x$, $\quad \widehat{P}^2 = \widehat{P}_x^2 + \widehat{P}_y^2 + \widehat{P}_z^2$;
6) $\widehat{X}$, $\quad \widehat{P}^2$?

№ 20. Найдите нормированные собственные функции $\psi_{x_0}(x)$ оператора координаты $\widehat{X}$.

№ 21. Выразите среднее значение координаты частицы $\langle x\rangle_\psi$ в данном состоянии ψ.

№ 22. Найдите спектр и нормированные собственные функции оператора импульса. Образуют ли найденные функции $\psi_p(x)$ базис? Чему соответствует разложение произвольной волновой функции по этому базису?

№ 23. Запишите функцию распределения значений импульса в состоянии ψ.

№ 24. Выразите среднее значение импульса $\langle P\rangle_\psi$.

№ 25. Определите явный вид оператора $\widehat{P}_x$, зная $\widehat{X}$ и коммутационное соотношение Гейзенберга.

№ 26. Какова строгая формулировка соотношения неопределённостей Гейзенберга?

№ 27. Для каких волновых функций минимизируется соотношение неопределённостей для наблюдаемых A и B?

№ 28. Получите строгую оценку для энергии основного состояния одномерного гармонического осциллятора.

ТЕМА 5

Уравнение Шрёдингера

Краткая теория

Волновая функция, вообще говоря, зависит не только от координаты, но и от времени. В фиксированный момент времени t_0 функция $\Psi(\xi, t_0)$ однозначно определяет состояние системы. Из принципа причинности также следует, что $\Psi(\xi, t_0)$ определяет и дальнейшую эволюцию системы, т. е. состояние $\Psi(\xi, t)$ в произвольный момент времени t. Поэтому волновая функция должна подчиняться некоторому дифференциальному уравнению первого порядка по времени:

$$i\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \widehat{\Omega}\Psi(x,t). \tag{5.1}$$

Здесь для определённости $\xi \equiv x$, а множитель i выделен для удобства, чтобы оператор $\widehat{\Omega}$ был эрмитовым: $\widehat{\Omega} = \widehat{\Omega}^{+}$. При этом $\widehat{\Omega}$ — некоторый дифференциальный оператор, не включающий производных по времени. В силу принципа суперпозиции $\widehat{\Omega}$ должен быть линейным.

Докажем эрмитовость оператора $\widehat{\Omega}$. Очевидно, что производная полной вероятности равна нулю, т. е.:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int |\Psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x = 0. \tag{5.2}$$

Вносим производную под знак интеграла и почленно дифференцируем:

$$\int \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx = 0. \tag{5.3}$$

Выразим производные $\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}$ и $\dfrac{\partial\Psi^*}{\partial t}$ из уравнения (5.1) и сопряжённого к нему:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\widehat{\Omega}\Psi, \quad \frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = i\Psi^*\widehat{\Omega}^+, \tag{5.4}$$

и подставив (5.4) в (5.3), получим:

$$i\int\Big(\Psi^*\widehat{\Omega}^+\Psi - \Psi^*\widehat{\Omega}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x = 0. \tag{5.5}$$

Из последнего равенства следует

$$\int\Psi^*\widehat{\Omega}\Psi\,\mathrm{d}x = \int\Psi^*\widehat{\Omega}^+\Psi\,\mathrm{d}x \quad\Longleftrightarrow\quad \boxed{\langle\Psi|\widehat{\Omega}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\widehat{\Omega}^+|\Psi\rangle.} \tag{5.6}$$

В силу произвольности Ψ из (5.6) очевидна эрмитовость оператора $\widehat{\Omega} = \widehat{\Omega}^+$.

Рассмотрим систему, на которую не действуют нестационарные внешние силы. Это означает, что оператор $\widehat{\Omega}$ не зависит от времени и решение уравнения (5.1) можно искать методом разделения переменных:

$$\Psi(x,t) = \theta(t)\Psi(x). \tag{5.7}$$

Подставляем (5.7) в (5.1):

$$\frac{1}{\theta(t)}\cdot\frac{d\theta(t)}{dt} = \frac{-i}{\Psi(x)}\,\widehat{\Omega}\Psi(x) = -i\omega, \tag{5.8}$$

где ω — константа разделения переменных, не зависящая от x и t.

Решение временной части (5.8) очевидно:

$$\theta(t) = \theta_0\,e^{-i\omega t}. \tag{5.9}$$

Значения ω найдём как собственные значения оператора $\widehat{\Omega}$:

$$\widehat{\Omega}\Psi(x) = \omega\Psi(x). \tag{5.10}$$

Для простоты будем считать спектр оператора $\widehat{\Omega}$ чисто дискретным, поэтому запишем решение уравнения (5.1) в виде суперпозиции собственных функций уравнения (5.10):

$$\Psi(x,t) = \sum_n \Psi_n(x)\,e^{-i\omega_n t}. \tag{5.11}$$

В (5.11) θ_0 и коэффициенты линейной комбинации включили в Ψ_n.

Разложим функции $\Psi_n(x)$ в интеграл Фурье и подставим в (5.11):

$$\Psi(x,t) = \sum_n \int \varphi_n(p_x)\, e^{-i\omega_n t + \frac{i}{\hbar} p_x x}\, \mathrm{d}p_x. \tag{5.12}$$

Коэффициенты $\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ опять внесли в $\varphi_n(p_x)$.

Опираясь на соотношения де Бройля и размерность величины ω_n вносим в показатель экспоненты (5.12) величину $E_n = \hbar\omega_n$. Тогда уравнение (5.12) примет вид разложения функции $\Psi(x,t)$ в ряд по волнам де Бройля. Теперь найдём явный вид операторов энергии и импульса. Для этого подействуем на функцию (5.12) оператором $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) &= \sum_n \int \varphi_n(p_x) i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar}E_n\right)\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n t - p_x x)}\, \mathrm{d}p_x = \\ &= \sum_n \int \varphi_n(p_x) E_n e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n t - p_x x)}\, \mathrm{d}p_x = \sum_n E_n \Psi_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}. \end{aligned} \tag{5.13}$$

В правой части (5.13) — ряд по собственным функциям оператора энергии в координатном представлении, т. к. коэффициентами этого разложения являются собственные значения энергии E_n. Следовательно, оператором энергии системы является оператор

$$\widehat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}.$$

Аналогично, действуя на (5.12) оператором $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$, получим:

$$\begin{aligned} -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t) &= \sum_n \int \varphi_n(p_x)(-i\hbar)\frac{i}{\hbar}p_x\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n t - p_x x)}\, dp_x = \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \int p_x\, \varphi_n(p_x)\, e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}\, dp_x \end{aligned} \tag{5.14}$$

В правой части (5.14) — интегралы по обобщённым собственным функциям оператора импульса, т. к. коэффициентами в этих интегралах являются собственные значения импульса p_x. Таким образом, оператор импульса в координатном представлении действительно

$$\widehat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

Возвращаясь к исходному уравнению (5.1) теперь можно написать:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hbar\widehat{\Omega}\Psi(x,t).$$

Очевидно, что $\widehat{H} = \hbar\widehat{\Omega}$. Таким образом приходим к основному динамическому уравнению квантовой механики — уравнению Шрёдингера:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi(\xi,t)}{\partial t} = \widehat{H}\Psi(\xi,t).} \tag{5.15}$$

Очень полезно сравнить уравнение (5.15) с классическим уравнением Гамильтона — Якоби:

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t} + H(q,p,t) = 0.}$$

Они очень близки по форме и основному содержанию!

Если гамильтониан системы $\widehat{H}$ не зависит от времени, то формально можно записать решение уравнения Шрёдингера (5.15) в виде:

$$\Psi(\xi,t) = \widehat{U}(t,t_0)\Psi(\xi,t_0), \tag{5.16}$$

где $\hat{U}(t,t_0)$ — оператор эволюции системы, определённый согласно

$$\widehat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}(t-t_0)} \equiv \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{k}\widehat{H}t\right)^k, \tag{5.17}$$

а $\Psi(\xi,t_0)$ — волновая функция при $t = t_0$ — аналог начального условия. Однако обычно проще решить (5.15), чем вычислить (5.16).

Задачи

№ 1. Запишите врменное и стационарное уравнения Шрёдингера для следующих случаев:

1) одномерное движение изолированной частицы массы m;
2) одномерный гармонический осциллятор с собственной частотой ω;
3) частица с одной степенью свободы в однородном поле;
4) одномерный гармонический осциллятор в однородном поле;
5) частица с одной степенью свободы в однородном поле, гармонически меняющимся во времени с амплитудой A и частотой ω;
6) трёхмерное движение изолированной частицы;

7) трёхмерный изотропный осциллятор;
8) трёхмерное движение частицы в однородном поле;
9) электрон в атоме водорода;
10) электрон в атоме водорода, помещённый в однородное электрическое поле;
11) атом водорода при учёте конечности массы ядра;
12) атом гелия, считая ядро бесконечно тяжёлым;
13) многоэлектронный атом, считая ядро бесконечно тяжёлым.

№ 2. Покажите, что стационарное уравнение Шрёдингера для частицы с одной степенью свободы в постоянном поле $U = \mathrm{const}$ сводится к одномерному стационарному уравнению Шрёдингера для изолированной частицы.

№ 3. Исходя из физического смысла волновой функции, определите вектор плотности потока вероятности. Запишите квантовомеханическое уравнение непрерывности.

№ 4. Запишите плотность тока вероятности для одномерного движения свободной частицы, обладающей определённым импульсом p.

№ 5. Волновая функция частицы

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi}\sin(ky)\, e^{-\alpha r^2}, \qquad k, \alpha \in \mathbb{R}.$$

Чему равна плотность тока вероятности?

№ 6. Волновая функция частицы, рассеянной на силовом центре, имеет вдали от него вид расходящейся сферической волны:

$$\Psi(\mathbf{r}) = f(\theta, \varphi|\mathbf{k})\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{r}, \quad \mathbf{k} \equiv \frac{\mathbf{p}}{\hbar}.$$

Вычислите радиальную компоненту плотности тока вероятности.

№ 7. Исходя из равенства среднего значения производной физической величины значению производной среднего $\langle \dot{a} \rangle = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle a \rangle$, получите выражение для квантовомеханического оператора $\hat{\dot{a}}$.

№ 8. Найдите энергетические уровни и нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a (т. е. в потенциале $U(x) = 0$ при $0 < x < a$ и $U(x) = \infty$ при $x < 0$ и $x > a$). Определите в таких состояниях средние значения и флуктуации координаты и импульса частицы.

№ 9. Определите распределение вероятностей различных значений импульса для основного состояния частицы, находящейся в бесконечно глубокой прямоугольной потенцальной яме.

№ 10. Найдите собственные значения дискретного спектра энергии частицы в несимметричной потенциальной яме конечной глубины.

№ 11. При изучении эмиссии электронов металлами необходимо принять во внимание то обстоятельство, что электроны с энергией, достаточной для выхода из металла, согласно квантовой механике, могут отражаться от границы металла. Рассматривая одномерную модель с потенциалом $U = -U_0$ при $x < 0$ (внутри металла) и $U = 0$ при $x > 0$ (вне металла), определите коэффициент отражения электрона с энергией $E > 0$ от поверхности металла (см. рис. 5.1).

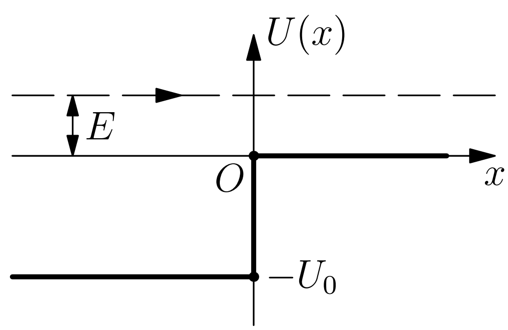

Рис. 5.1. К расчёту термоэлектронной эмиссии

№ 12. В предыдущей задаче предполагалось, что потенциал на границе металла изменяется скачкообразно. В действительности это изменение потенциала происходит непрерывно в области, размеры которой порядка межатомных расстояний в металле. Аппроксимируя потенциал вблизи поверхности металла с помощью функции

$$U(x) = -\frac{U_0}{1 + e^{x/a}} \qquad \text{(см. рис. 5.2)},$$

определите коэффициент отражения электрона с энергией $E > 0$.

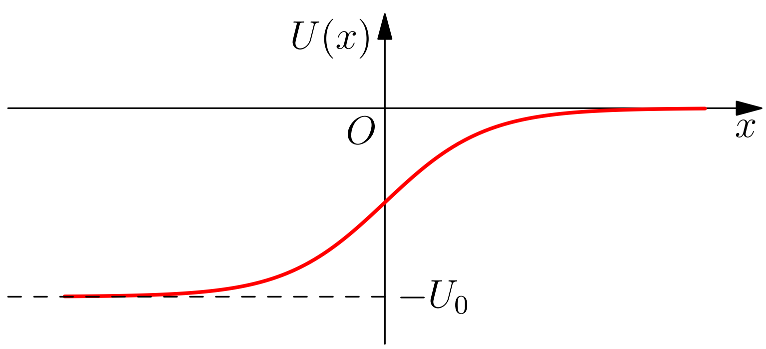

Рис. 5.2. Плавный барьер

№ 13. Вычислите коэффициент прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер (см. рис. 5.3)

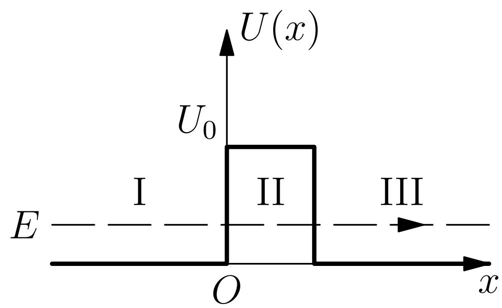

Рис. 5.3. Прямоугольный барьер

№ 14. Определите в квазиклассическом приближении коэффициент прохождения электронов через поверхность металла под действием сильного электрического поля напряженности $\mathcal{E}$ (рис. 5.4). Найдите границы применимости расчёта.

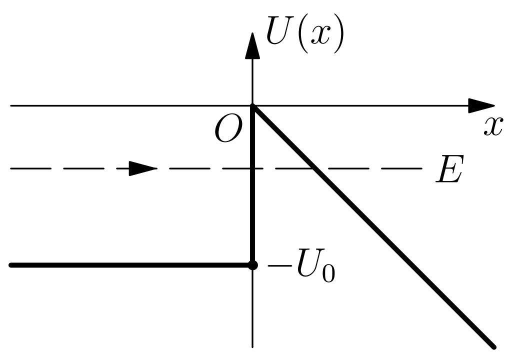

Рис. 5.4. К расчёту автоэлектронной эмиссии

№ 15. Найдите уровни энергии и нормированные волновые функции состояний дискретного спектра частицы в δ-потенциале $U(x) = -\alpha\delta(x)$. Определите средние значения кинетической и потенциальной энергии в этих состояниях. Вычислите произведение неопределённостей координаты и импульса. Каков вид волновой функции в импульсном представлении?

№ 16. Напишите уравнение Шрёдингера в импульсном представлении для частицы движущейся в периодическом потенциальном поле $U(x) = U(x + d)$.

№ 17. Определите зоны разрешённой энергии для частицы, движущейся в периодическом потенциальном поле, изображённом на рис. 5.5. Исследуйте предельный случай $U_0 \to \infty$, $b \to 0$ при условии, что $U_0 b = \text{const}$.

№ 18. Определите стационарные уровни энергии и нормированные волновые функции одномерного гармонического осциллятора с собственной частотой

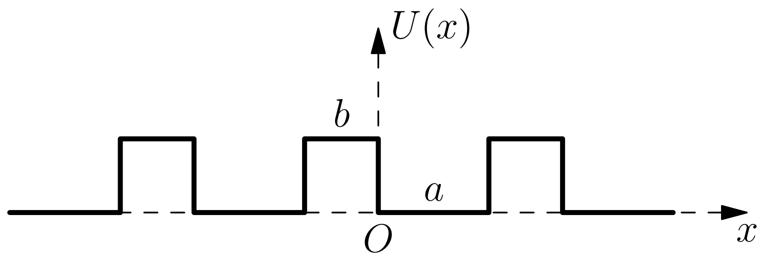

Рис. 5.5. Периодический потенциал

колебаний ω.

№ 19. Определите распределение вероятностей различных значений импульса для одномерного гармонического осциллятора.

№ 20. Используя рекуррентные соотношения для полиномов Эрмита, вычислите интегралы

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\,\widehat{x}\,\psi_m(x)\,dx, \quad \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\,\widehat{p}_x\,\psi_m(x)\,dx,$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\,\widehat{x}^{\,2}\psi_m(x)\,dx, \quad \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\,\widehat{p}_x^{\,2}\,\psi_m(x)\,dx,$$

где $\{\psi_k\}_0^\infty$ — волновые функции стационарных состояний линейного гармонического осциллятора.

№ 21. Вычислите средние значения потенциальной и кинетической энергии в n-ном стационарном состоянии линейного гармонического осциллятора.

№ 22. Линейный гармонический осциллятор находится при $t = 0$ в состоянии

$$\psi(x, t = 0) = \frac{\psi_0 + \psi_1}{\sqrt{2}}.$$

Вычислите $\langle x(t) \rangle$.

№ 23. Докажите соотношения

$$\frac{\mathrm{d}\psi_n(x)}{\mathrm{d}x} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\sqrt{n}\psi_{n-1}(x) - \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)\right),$$

$$x\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\psi_{n-1}(x) + \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)\right),$$

где $\{\psi_k\}_0^\infty$ — волновые функции стационарных состояний линейного гармонического осциллятора.

№ 24. Найдите изменение энергетических уровней и волновых функций стационарных состояний заряженного линейного осциллятора при наложении на него однородного электрического поля, направленного вдоль оси колебаний.

№ 25. Найдите спектр энергии и волновые функции в координатном и импульсном представлениях частицы заряда e, движущейся в однородном электрическом поле с напряжённостью $\mathcal{E}$, приложенном в направлении оси Ox.

ТЕМА 6

Элементы теории представлений

Задачи

№ 1. Напишите нормированные соответствующим образом собственные функции радиус-вектора $\Psi_{\mathbf{r}_0}$ и импульса $\Psi_{\mathbf{p}_0}$ в $\mathbf{r}$- и $\mathbf{p}$-представлениях.

№ 2. Найдите явный вид операторов отражения $\widehat{J}$ и сдвига $\widehat{T}_a$ в импульсном представлении.

№ 3. Запишите операторы $\widehat{r^{-1}}$ и $\widehat{r^{-2}}$ в импульсном представлении. Проверьте равенство $\widehat{r^{-2}} = \widehat{r^{-1}}\widehat{r^{-1}}$.

№ 4. Даны два эрмитовых оператора $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$. Найдите связь между собственными функциями оператора $\widehat{A}$ в B-представлении и собственными функциями оператора $\widehat{B}$ в A-представлении. В качестве конкретного примера рассмотрите операторы координаты и ипульса.

№ 5. Унитарный оператор удовлетворяет уравнению $\widehat{U}^2 = \widehat{U}$. Найдите явный вид этого оператора.

№ 6. Оператор $\widehat{U}$ — унитарный. В каком случае оператор $\widehat{U}' = c\,\widehat{U}$, где c — некоторое число, также является унитарным оператором?

№ 7. Покажите, что произведение $\widehat{U}_1\widehat{U}_2$ двух унитарных операторов также является унитарным оператором.

№ 8. Может ли унитарный оператор (матрица) являться одновременно и эрмитовым? В качестве примера рассмотрите оператор инверсии $\widehat{J}$.

№ 9. Покажите, что оператор вида $\widehat{U} = \exp\left(i\widehat{F}\right)$ является унитарным, если $\widehat{F}$ — эрмитов оператор.

№ 10. Даны квадратные матрицы одного ранга операторов $\widehat{A}$ и $\widehat{A}'$, связанных унитарным преобразованием $\widehat{A}' = \widehat{U}\widehat{A}\widehat{U}^{+}$. Покажите, что шпуры и определители этих матриц — одинаковые.

№ 11. Каковы характерные свойства детерминанта унитарной матрицы? Покажите, что, используя преобразование унитарной матрицы вида $U' = cU$, унитарную матрицу можно сделать унимодулярной, т. е. $\det U' = 1$.

№ 12. Найдите закон преобразования операторов $\widehat{x}$ и $\widehat{p}$ при унитарных преобразованиях, осуществляемых операторами:

1) отражения $\widehat{J}$;
2) сдвига $\widehat{T}_a$;
3) изменения масштаба $\widehat{M}_c$.

ТЕМА 7

Угловой момент и спин

Задачи

№ 1. Выразите оператор поворота $\widehat{R}(\varphi_0)$, описывающий преобразование волновой функции системы N частиц при вращении системы координат на угол φ_0 относительно оси, направление которой в пространстве определяется единичным вектором $\mathbf{n}_0$, через оператор момента системы.

Является ли оператор $\widehat{R}(\varphi_0)$: *а*) эрмитовым? *б*) унитарным?

№ 2. Дайте простую интерпретацию коммутативности операторов проекций импульса и некоммутативности операторов проекций момента импульса, исходя из кинематического смысла этих операторов, связанного с бесконечно малыми переносами и поворотами.

№ 3. Покажите, что равенство $\mathbf{L}^2 = \hbar\ell(\ell+1)$ получается с помощью элементарных формул теории вероятностей, исходя из того, что возможные проекции момента на произвольную ось равны $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$, и все эти значения проекции момента равновероятны, а оси равноправны.

№ 4. Получите выражения для $\widehat{L}_x, \widehat{L}_y, \widehat{L}_z, \widehat{L}^2$ в декартовых и сферических координатах.

№ 5. Установите коммутационные соотношения $\left[\widehat{L}_j, \widehat{X}_k\right]$ и $\left[\widehat{L}_j, \widehat{P}_k\right]$.

№ 6. Определите алгебру углового момента, т. е. найдите коммутаторы

$\left[\widehat{L}_j, \widehat{L}_k\right]$, а также $\left[\widehat{L}^2, \widehat{L}_j\right]$.

№ 7. Выясните смысл оператора

$$\widehat{R}(\alpha) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\alpha\widehat{L}_z\right\}.$$

№ 8. Определите собственные функции и собственные значения оператора $\widehat{L}_z$.

№ 9. Найдите спектр энергии вращательного движения жёсткого ротатора. В качестве примера рассмотрите молекулу угарного газа $^{12}C^{16}O$ ($\ell_{CO} = 112.8$ пм).

№ 10. Докажите, что в состоянии Ψ_m с определённым значением проекции орбитального момента $m = L_z/\hbar$ на заданную ось Oz средние значения проекций момента $\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$.

№ 11. Найдите следующие коммутаторы:

1) $\left[\widehat{L}_j, \widehat{\mathbf{r}}^2\right]$, $\left[\widehat{L}_j, \widehat{\mathbf{p}}^2\right]$, $\left[\widehat{L}_j, (\widehat{\mathbf{p}}\widehat{\mathbf{r}})\right]$, $\left[\widehat{L}_j, (\widehat{\mathbf{p}}\widehat{\mathbf{r}})^2\right]$;
2) $\left[\widehat{L}_j, (\widehat{\mathbf{p}}\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{p}}\right]$, $\left[\widehat{L}_j, (\widehat{\mathbf{p}}\widehat{\mathbf{r}})\,\widehat{\mathbf{r}}\right]$, $\left[\widehat{L}_j, (a\widehat{\mathbf{r}} + b\widehat{\mathbf{p}})\right]$;
3) $\left[\widehat{L}_i, \widehat{x}_j\widehat{x}_k\right]$, $\left[\widehat{L}_i, \widehat{p}_j\widehat{p}_k\right]$, $\left[\widehat{L}_i, \widehat{x}_j\widehat{p}_k\right]$.

№ 12. Найдите коммутатор $\left[\widehat{L}_i, \widehat{L}'_j\right]$, где $\widehat{\mathbf{L}}$ и $\widehat{\mathbf{L}}'$ — операторы момента импульса частицы по отношению к двум центрам, находящимся на расстоянии $\mathbf{a}$ друг от друга.

№ 13. Используя коммутационные соотношения для оператора момента, найдите $\mathrm{Sp}\,\tilde{L}_i$, где $\tilde{L}_i$ — матрица i-й компоненты момента $\mathbf{L}$.

№ 14. Представьте оператор момента системы из двух частиц в виде двух слагаемых, описывающих момент частиц в системе центра инерции (момент относительного движения) и момент самого центра инерции.

№ 15. Найдите нормированные соответсивующим образом волновые функции $\Psi_{r_0\ell m}$, описывающие состояния частицы, находящейся на расстоянии r_0 от начала координат и имеющей момент ℓ и его проекцию m на ось Oz.

№ 16. Найдите общие собственные функции операторов квадрата момента частицы и его проекции на ось Oz в импульсном представлении следующими двумя способами:

1) непосредственно из решения задачи на собственные функции и собственные значения операторов $\widehat{\mathbf{L}}$ и $\widehat{L}_z$ в импульсном представлении;

2) используя соотношение между волновыми функциями в **r**- и **p**-представлениях.

Вид собственных функций $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ в координатном представлении считайте известным (см. Математическое дополнение).

№ 17. Покажите, что функции, получающиеся в результате действия операторов $\widehat{L}_\pm = \widehat{L}_x \pm i\widehat{L}_y$ на собственные функции Ψ_m оператора проекции момента на ось Oz ($\widehat{L}_z\Psi_m = \hbar m\Psi_m$), также являются собственными функциями оператора $\widehat{L}_z$, отвечающими собственным значениям $m+1$ и $m-1$ в случаях $\widehat{L}_+$ и $\widehat{L}_-$ соответственно.

№ 18. В состоянии частицы, характеризующемся угловой зависимостью волновой функции вида $\Psi = A\cos^n\varphi$ (φ — угол поворота относительно некоторой оси Oz, n — целое), найдите вероятности различных значений m проекции момента на ось Oz.

№ 19. В состоянии частицы, волновая функция которого имеет угловую зависимость вида $\Psi = A\exp(2i\varphi)$ (φ — азимутальный угол сферической системы координат), найдите вероятности различных значений ℓ момента частицы.

№ 20. Найдите закон преобразования волновой функции состояния частицы с определённым значением момента L в L_z-представлении при вращении системы координат на угол φ_0.

№ 21. Моменты $\mathbf{L}_1$ и $\mathbf{L}_2$ двух слабо взаимодействующих систем складываются в результирующий момент величины L. Покажите, что в таких состояниях (с определённым значением L) скалярные произведения $\widehat{\mathbf{L}}_1\widehat{\mathbf{L}}_2$, $\widehat{\mathbf{L}}_1\widehat{\mathbf{L}}$, $\widehat{\mathbf{L}}_2\widehat{\mathbf{L}}$ также имеют определённые значения.

№ 22. Для частицы со спином $s = 1/2$ найдите из решения задачи на собственные функции и собственные значения спиновые функции Ψ_{s_i} $(i = 1, 2, 3)$, описывающие состояния частицы с определённой проекцией спина на оси Ox, Oy, Oz системы координат.

№ 23. Укажите вид оператора проекции спина $\widehat{s}_{\mathbf{n}}$ на произвольное направление, определяемое единичным вектором $\mathbf{n}$. Чему равно среднее значение проекции спина на ось $\mathbf{n}$ в состоянии с определённой проекцией спина $s_z = \pm 1/2$ на ось Oz? Каковы вероятности проекций спина $\pm 1/2$ на направление $\mathbf{n}$ в указанных состояниях?

№ 24. Найдите собственные значения оператора $\widehat{f} = a + \mathbf{b}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ (a — число, $\mathbf{b}$ — обычный вектор, $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ — вектор, составленный из матриц Паули).

№ 25. Могут ли квадраты проекций электронного спина на оси Ox, Oy, Oz

иметь одновременно определённые значения?

№ 26. Произвольный линейный оператор $\widehat{L}$, действующий в пространстве спиновых переменных частицы с $s = 1/2$, является квадратной матрицей второго ранга. Какие ограничения накладывает эрмитовость оператора $\widehat{L}$ на элементы этой матрицы? Найдите собственные значения такого эрмитова оператора.

№ 27. Убедитесь в полноте системы из четырёх двухрядных матриц $\widehat{I}$, $\widehat{\sigma}_x$, $\widehat{\sigma}_y$, $\widehat{\sigma}_z$. Покажите, что коэффициенты в разложении произвольной квадратной матрицы второго ранга $\widehat{A}$ по этим матрицам

$$\widehat{A} = a_0\widehat{I} + a_x\widehat{\sigma}_x + a_y\widehat{\sigma}_y + a_z\widehat{\sigma}_z \equiv a_0 + \mathbf{a}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$$

могут быть вычислены по формулам

$$a_0 = \frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}\,\widehat{A}, \quad \mathbf{a} = \frac{1}{2}\,\mathrm{Sp}\left(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{A}\right).$$

№ 28. Укажите возможный вид операторов проекций электронного спина $\widehat{s}_x$, $\widehat{s}_y$, $\widehat{s}_z$ в s_x-представлении.

№ 29. Для спина $s = 1/2$ выпишите в явном виде повышающий и понижающий операторы $\widehat{s}_\pm$ и рассмотрите их действие на собственные функции Ψ_{s_z}. Каковы операторы $\widehat{s}_\pm^2$?

№ 30. Для частицы со спином $s = 1/2$ укажите закон преобразования спиновой волновой функции

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

при вращении системы координат на угол φ_0 относительно оси, направление которой определяется единичным вектором $\mathbf{n}_0$. Покажите, что величина

$$\Phi^*\Psi \equiv \varphi_1^*\psi_1 + \varphi_2^*\psi_2$$

не изменяется при указанном преобразовании, т. е. является скаляром.

№ 31. Состояния частицы с определённым значением проекции спина на направление импульса называют *спиральными* состояниями. Для частицы со спином $s = 1/2$ найдите волновые функции $\Psi_{\mathbf{p}_0,\lambda}$, описывающие состояния с определённым импульсом $\mathbf{p}_0$ и *спиральностью* $\lambda = \pm 1/2$.

ТЕМА 8

Пространственное движение

Задачи

№ 1. Определите уровни энергии и нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в прямоугольном «потенциальном ящике», т. е. для трёхмерного движения в поле с потенциальной энергией $U = 0$ при $0 < x < a$, $0 < y < b$, $0 < z < c$ и $U = \infty$ вне этой области.

№ 2. Найдите уровни энергии $E_{n_r\ell}$ и волновые функции $\Psi_{n_r\ell m}$ стационарных состояний частицы в бесконечно глубокой сферической яме

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

№ 3. Найдите волновые функции стационарных состояний и уровни энергии пространственного ротатора с моментом инерции I. Какова кратность вырождения уровней?

№ 4. Определите уровни энергии и нормированные волновые функции стационарных состояний сферического осциллятора $U(r) = kr^2/2$, используя метод разделения переменных в уравнении Шрёдингера в декартовых координатах. Какова кратность вырождения этих уровней?

№ 5. Найдите уровни энергии и собственные функции $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ оператора Гамильтона сферического осциллятора из решения уравнения Шрёдингера в сферических координатах. Какова кратность вырождения уровней?

№ 6. Система состоит из двух частиц, массы которых m_1 и m_2. Выразитt оператор суммарного орбитального момента $\widehat{\mathbf{l}}_1 + \widehat{\mathbf{l}}_2$ и суммарного импульса $\widehat{\mathbf{p}}_1 + \widehat{\mathbf{p}}_2$

через координаты центра тяжести $\mathbf{R} = \dfrac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}$ и взаимного расстояния $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$. Покажите, что если потенциальная энергия взаимодействия частиц зависит от их взаимного расстояния $U = U(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$, то гамильтониану можно придать вид:

$$\widehat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\Delta_R - \frac{\hbar^2(m_1 + m_2)}{2m_1m_2}\Delta_r + U(r),$$

где Δ_R и Δ_r — операторы Лапласа по компонентам векторов $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}$.

Оператор Лапласа в криволинейных координатах

В произвольных ортогональных криволинейных координатах в трёхмерном пространстве $\mathbf{q} = \{q_i\}_{i=1}^3 \in \mathbb{R}^3$:

$$\operatorname{grad} f(\mathbf{q}) = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{H_i} \frac{\partial f}{\partial q_i} \mathbf{e}_i,$$

$$\operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{q}) = \frac{1}{H_1 H_2 H_3} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} (A_1 H_2 H_3) + \frac{\partial}{\partial q_2} (H_1 A_2 H_3) + \frac{\partial}{\partial q_3} (H_1 H_2 A_3) \right],$$

$$\Delta = \operatorname{div} \operatorname{grad} = \\ = \frac{1}{H_1 H_2 H_3} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \left(\frac{H_2 H_3}{H_1} \frac{\partial}{\partial q_1} \right) + \frac{\partial}{\partial q_2} \left(\frac{H_1 H_3}{H_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_3} \left(\frac{H_1 H_2}{H_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \right) \right].$$

В сферических координатах $q_1 = r$, $q_2 = \theta$, $q_3 = \varphi$; $H_1 = 1$, $H_2 = r$, $H_3 = r \sin\theta$, поэтому оператор Лапласа имеет вид:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_\Omega,$$

где $\Delta_\Omega = \widehat{L}^2$ — угловая часть оператора Лапласа:

$$\Delta_\Omega = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Дельта-функция Дирака

Дельта-функция Дирака (δ-функция) определяется как непрерывный линейный функционал на некотором функциональном пространстве $\mathscr{F}$ (в частности, на множестве квадратично интегрируемых функций $\mathscr{L}^2$).

Функционал — это некое действие, ставящее в соответствие функциям из множества $\mathscr{F}$ некоторое число по определённому закону.

Примеры функционалов:

1) производная в определённой точке: $\left.\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_0}$;
2) определённый интеграл на заданном отрезке: $\int\limits_a^b \mathrm{d}x$;
3) норма волновой функции: $\|\psi\|$.

Пусть $\psi(\xi)$ — произвольный элемент множества $\mathscr{F}$. Тогда дельта-функция Дирака определяется следующим правилом:

$$\delta\left[\psi(\xi)\right] = \psi(0), \qquad \forall\psi \in \mathscr{F}. \tag{8.1}$$

Определение (8.1) принято условно записывать в виде скалярного произведения[1] некоторой обобщённой функции $\delta(\xi)$ и заданной функции $\psi(\xi)$:

$$\langle\delta(\xi)|\psi(\xi)\rangle = \int \delta(\xi)\,\psi(\xi)\,d\xi = \psi(0), \qquad \forall\psi \in \mathscr{F}. \tag{8.2}$$

Легко показать, что не существует такой функции $\delta(\xi)$, которая удовлетворяла бы равенству (8.2), однако в функциональном анализе доказывается, что δ-функция может быть представлена в виде предела последовательности функций $\{f_\nu(\xi)\}_1^\infty \in \mathscr{L}^2$:

$$\delta(\xi) = \lim_{\nu\to\infty} f_\nu(\xi). \tag{8.3}$$

Предел (8.3) понимается в следующем смысле:

$$\lim_{\nu\to\infty}\langle f_\nu(\xi)|\psi(\xi)\rangle = \langle\delta(\xi)|\psi(\xi)\rangle = \psi(0), \tag{8.4}$$

где $\psi(\xi)$ — произвольная функция из $\mathscr{F}$.

В элементарной интерпретации дельта-функция одной вещественной переменной может быть определена как функция, удовлетворяющая следующим условиям:

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty, & x = 0, \\ 0, & x \neq 0. \end{cases} \qquad \text{и} \qquad \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,dx = 1. \tag{8.5}$$

В такой интерпретации наиболее важным оказывается фильтрующее свойство δ-функции, часто используемое в приложениях:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-y) f(x)\,\mathrm{d}x = f(y). \tag{8.6}$$

[1]Здесь использован тот факт, что $\delta^*(\xi) = \delta(\xi)$.

Многомерную функцию Дирака при этом можно понимать как произведение одномерных δ-функций. Так, в трёхмерном случае

$$\delta^3(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z). \tag{8.7}$$

Наиболее часто используют следующие представления δ-функции:

$$\begin{gathered}\delta(x) = \frac{1}{\pi}\lim_{\nu\to\infty}\frac{\sin\nu x}{x} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\lim_{\nu\to\infty}\nu\, e^{-\nu^2x^2} = \frac{1}{\pi}\lim_{\nu\to\infty}\frac{\nu}{1+\nu^2x^2} = \\ = \frac{1}{\pi}\lim_{\nu\to\infty}\frac{\sin^2\nu x}{\nu x^2}.\end{gathered} \tag{8.8}$$

Используя первое из соотношений (8.8), легко показать, что:

$$\delta(x) = \lim_{\nu\to\infty}\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\nu}^{\nu} e^{ikx}\,\mathrm{d}k = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\,\mathrm{d}k. \tag{8.9}$$

Для доказательства вычислим

$$\int\limits_{-\nu}^{\nu} e^{ikx}\,\mathrm{d}k = \frac{1}{ix}\,e^{ikx}\Big|_{-\nu}^{\nu} = \frac{e^{i\nu x}-e^{-i\nu x}}{ix} = \frac{2\,\mathrm{sh}\,i\nu x}{ix} = 2\,\frac{\sin\nu x}{x},$$

что и подтверждает справедливость интегрального представления (8.9).

Таким образом, имеет место очень часто встречаемое на практике соотношение

$$\boxed{2\pi\,\delta(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\,\mathrm{d}k.} \tag{8.10}$$

Важнейшие свойства δ-функции Дирака

1) Чётность

$$\delta(x) = \delta(-x). \tag{8.11}$$

2) Фильтрующее свойство

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a), \tag{8.12}$$

в частности, очевидно даёт $x\delta(x) = 0$.

3) Дельта-функция сложного аргумента

$$\delta\,[f(x)] = \sum_{i=1}^{n}\frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|}, \tag{8.13}$$

где x_i — нули функции $f(x)$, а n — их количество на всей оси Ox; $f'(x_i) = \left.\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_i}$.
В частности,

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}, \quad a \neq 0.$$

4) Производная δ-функции

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\frac{\mathrm{d}^n\delta(x)}{\mathrm{d}x^n}\,\mathrm{d}x = (-1)^n \left.\frac{\mathrm{d}^n f(x)}{\mathrm{d}x^n}\right|_{x=0}. \tag{8.14}$$

Интеграл Эйлера — Пуассона

$$\int\limits_0^{\infty} e^{-x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Γ-функция

Интегральное определение:

$$\Gamma(z) = \int\limits_0^{\infty} t^{z-1}e^{-t}\,\mathrm{d}t, \qquad z \in \mathbb{C} : \mathrm{Re}(z) > 0.$$

Основные свойства:

- Рекуррентное уравнение:

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad \Longrightarrow \quad \Gamma(n+1) = n! \quad \forall n \in \mathbb{N}_0.$$

- Формула дополнения Эйлера:

$$\Gamma(1-z)\Gamma(z) = \frac{\pi}{\sin \pi z} \quad \Longrightarrow \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}.$$

Полиномы Чебышева — Эрмита

Полиномы Чебышева — Эрмита $H_n(x)$ представляют собой последовательность полиномов одной вещественной переменной, которые можно определить следующим образом:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} e^{-x^2}.$$

Первые шесть полиномов имеют вид:

$$\begin{aligned}
H_0(x) &= 1,\\
H_1(x) &= 2x,\\
H_2(x) &= 4x^2 - 2,\\
H_3(x) &= 8x^3 - 12x,\\
H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12,\\
H_5(x) &= 32x^5 - 160x^3 + 120x.
\end{aligned}$$

Норма полиномов Эрмита:

$$\|H_n\| = \sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}.$$

Полиномы Эрмита являются частным решением дифференциального уравнения:

$$y''(x) - 2xy'(x) + 2ny(x) = 0, \quad \forall n \in \mathbb{N}_0.$$

Основные свойства:

- Определённая чётность.
- Первая производная:
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} H_n(x) = 2nH_{n-1}(x).$$
- Рекуррентное соотношение:
$$H_n(x) - 2xH_{n-1}(x) + 2(n-1)H_{n-2}(x) = 0, \quad n \geqslant 2.$$
- Ортогональность с весом e^{-x^2}:
$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}\,\mathrm{d}x = 2^n n! \sqrt{\pi}\delta_{nm}.$$

Сферические функции и полиномы Лежандра

Сферические функции $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ являются ограниченными решениями уравнения

$$\widehat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = L^2 Y_{\ell m}(\theta, \varphi),$$

т. е.

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] Y_{\ell m}(\theta, \varphi) + \frac{L^2}{\hbar^2} Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = 0,$$

принадлежащими собственным значениям

$$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1), \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \ldots,$$

причём $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm \ell$.

Сферические функции можно представить в виде

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \Theta_{\ell m}(\theta) \Phi_m(\varphi),$$

где

$$\Theta_{\ell m}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \cdot \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\, P_\ell^m(\cos\theta),$$

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{\mathrm{d}^{\ell+m}}{\mathrm{d}x^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell,$$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

Полином $P_\ell^m(x)$ называется присоединённой функцией или присоединённым полиномом Лежандра. При $m > 0$ эта функция выражается через полином Лежандра $P_\ell(x)$:

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} P_\ell(x),$$

где

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{\mathrm{d}^\ell}{\mathrm{d}x^\ell} (x^2-1)^\ell.$$

Легко проверить, что

$$\Theta_{\ell m}(x) = (-1)^m \Theta_{\ell, -m}(x), \qquad \Phi_m^*(\varphi) = \Phi_{-m}(\varphi),$$

откуда получаем

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

Сферические функции образуют ортонормированный набор

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

который является полным в пространстве квадратично интегрируемых функций, зависящих от θ и φ.

Явный вид нескольких первых полиномов Лежандра, нормированных присоединённых полиномов Лежандра и сферических функций приведён в таблице 8.1.

Таблица 8.1. Первые $P_\ell(x)$, $\Theta_{\ell m}(x)$ и $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$

ℓ	m	$P_\ell(x)$	$\Theta_{\ell m}(x)$	$Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$
0	0	1	$\dfrac{1}{\sqrt{2}}$	$\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$
	-1		$\sqrt{\dfrac{3}{4}(1-x^2)}$	$\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\varphi}$
1	0	x	$\sqrt{\dfrac{3}{2}}x$	$\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$
	$+1$		$-\sqrt{\dfrac{3}{4}(1-x^2)}$	$-\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}$
	-2		$\sqrt{\dfrac{15}{16}}(1-x^2)$	$\dfrac{1}{4}\sqrt{\dfrac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{-i2\varphi}$
	-1		$\sqrt{\dfrac{15}{4}}x\sqrt{1-x^2}$	$\dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{15}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta\, e^{-i\varphi}$
2	0	$\dfrac{1}{2}(3x^2-1)$	$\sqrt{\dfrac{5}{8}}(3x^2-1)$	$\dfrac{1}{4}\sqrt{\dfrac{5}{\pi}}\left(3\cos^2\theta-1\right)$
	$+1$		$-\sqrt{\dfrac{15}{4}}x\sqrt{1-x^2}$	$-\dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{15}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta\, e^{i\varphi}$
	$+2$		$\sqrt{\dfrac{15}{16}}(1-x^2)$	$-\dfrac{1}{4}\sqrt{\dfrac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{i2\varphi}$

Вырожденная гипергеометрическая функция и обобщённые полиномы Чебышева — Лаггера

Вырожденная гипергеометрическая функция $F(a,c;z)$ определяется рядом:

$$F(a,c;z) = 1 + \frac{a}{c}\frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{z^2}{2!} + \frac{a(a+1)(a+2)}{c(c+1)(c+2)}\frac{z^3}{3!} + \ldots,$$

где a, c — константы, причём $c \neq -k$, $\forall k \in \mathbb{N}_0$.

Эта функция удовлетворяет уравнению

$$z\frac{\mathrm{d}^2F(z)}{\mathrm{d}z^2} + (c-z)\frac{\mathrm{d}F(z)}{dz} - aF(z) = 0.$$

Если $a = -n$, $\forall n \in \mathbb{N}_0$, то $F(a, c; z)$ сводится к полиному степени n, который можно представить в виде

$$F(-n, c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c+n)} L_n^{c-1}(z),$$

где

$$L_n^{c-1}(z) = z^{-c} e^{z} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}z^n} \left(z^{c+n} e^{-z} \right)$$

есть обобщённый полином Чебышева — Лаггера.

Обобщённые полиномы Лаггера удовлетворяют следующему условию ортонормированности:

$$\int\limits_0^{\infty} L_m^c(z) L_n^c(z) e^{-z} z^c \, \mathrm{d}z = n! \, \Gamma(n + c + 1) \, \delta_{mn}.$$

Функции Эйри

Функция Эйри — это частное решение дифференциального уравнения Эйри:

$$y''(x) - x \, y(x) = 0.$$

Различают две специальных функции, являющихся частным решением этого уравнения. В случае действительного аргумента они определяются следующими несобственными интегралами:

- функция Эйри 1-го рода:

$$\mathrm{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int\limits_0^{\infty} \cos\left(\frac{t^3}{3} + xt \right) \mathrm{d}t.$$

- функция Эйри 2-го рода:

$$\mathrm{Bi}(x) = \frac{1}{\pi} \int\limits_0^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{t^3}{3} + xt \right) + \sin\left(\frac{t^3}{3} + xt \right) \right] \mathrm{d}t.$$

Графики функций Эйри приведены на рисунке 8.1.

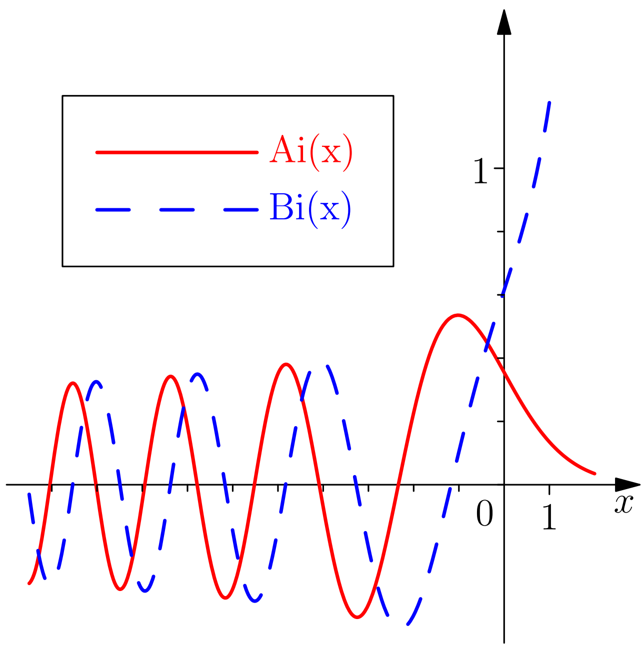

Рис. 8.1. Графики функций Эйри Ai(x) и Bi(x)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данном учебном пособии представлен сравнительно небольшой по объёму материал для практического изучения основ нерелятивистской квантовой механики, покрывающий важнейшие вводные разделы этой дисциплины. Вне рамок нашего рассмотрения остались многие темы, однако работа с приведённым в конце пособия Библиографическим списком позволит пытливому студенту самостоятельно преодолеть эту проблему и выйти за рамки указанного минимализма.

Авторы надеются, что данное издание будет полезно всем, кто хочет начать разбираться в квантовой механике, научиться её языку и понять, как именно решаются основные задачи этой науки. В конце пособия приведено небольшое Математическое дополнение, внимательное изучение которого может быть большим подспорьем в этой несомненно очень увлекательной, но и весьма сложной работе.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Балашов В. В., Долинов В. К. **Курс квантовой механики** — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1982. — 280 с.

2. Блохинцев Д. И. **Основы квантовой механики.** — 5-е изд., перераб. — М.: Наука, 1976. — 664 с.

3. Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. **Задачи по квантовой механике.** — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Наука, 1992. — 880 с.

4. Гинзбург И. Ф. **Введение в физику твёрдого тела. Ч. 1. Основы квантовой механики и отдельные задачи физики твёрдого тела.** — Новосибирск.: Изд-во Новосиб. гос. ун-та, 2003. — 218 с.

5. Гольдин Л. Л., Новикова Г. И. **Квантовая физика. Вводный курс.** — М.: Институт компьютерных исследований, 2002. — 496 с.

6. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. **Сборник задач по квантовой механике** — М.: Гос. изд-во технико-теоретической литературы, 1957. — 274 с.

7. Грашин А. Ф. **Квантовая механика.** Учеб. пособие для студентов физ.-мат. фак-тов пед. ин-тов. — М.: Просвещение, 1974. — 207 с.

8. Давыдов А. С. **Квантовая механика.** — 2-е изд., перераб. — М.: Наука, 1973. — 703 с.

9. Елютин П. В., Кривченков В. Д. **Квантовая механика (с задачами)** / Под ред. Н. Н. Боголюбова —2-е изд., перераб. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 304 с.

10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. **Курс теоретической физики**: Учеб. пособие для вузов. В 10 т. Т. 3. **Квантовая механика (нерелятивистская теория)** / Под ред. Л. П. Питаевского. — 6-е изд., испр. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. — 800 с.

11. Макаров П. А. **Квантовая теория. Вводный курс: демонстрационные материалы.** — Сыктывкар: Изд-во СГУ им. Питирима Сорокина, 2021. — 159 с.

12. Тарасов Л. В. **Основы квантовой механики.** — М.: Высшая школа, 1978. — 287 с.

13. Флюгге З. **Задачи по квантовой механике.** В 2 т. Т. 1. — М.: Мир, 1974. — 340 с.

14. Флюгге З. **Задачи по квантовой механике.** В 2 т. Т. 2. — М.: Мир, 1974. — 314 с.

Учебное издание

Макаров Павел Андреевич
Устюгов Владимир Александрович

Практический минимум по квантовой механике

Учебно-методическое пособие

Выполнено с использованием системы компьютерной вёрстки $\LaTeX\,2_\varepsilon$

Системные требования:
Любой современный ПК с установленной программой для чтения файлов формата PDF.

Редактор Л. Н. Руденко
Корректор Е. М. Насирова
Вёрстка и компьютерный макет П. А. Макаров
Выпускающий редактор Л. В. Гудырева

1,0 МБ. 1 компакт-диск, пластиковый бокс, вкладыш.
Подписано к использованию 25.10.2022 г.
Заказ № 92. Тираж 100 экз.

Издательский центр СГУ им. Питирима Сорокина
167982, Сыктывкар, ул. Коммунистическая, 23Б
Тел. (8212) 390-472, 390-473.

E-mail: ipo@syktsu.ru, makarovpa@ipm.komisc.ru
https://www.syktsu.ru