

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

ОПОРНЫЙ ВУЗ РОССИИ

П. А. Макаров

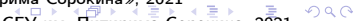
**Квантовая теория. Вводный курс:
демонстрационные материалы**

Учебно-методическое пособие

Сыктывкар
Издательство СГУ имени Питирима Сорокина
2021

- © Макаров П. А., 2021
- © ФГБОУ ВО «СГУ им. Питирима Сорокина», 2021
- © Оформление. Издательство СГУ им. Питирима Сорокина, 2021

ISBN 987-5-87661-676-0



УДК 530.145
ББК 22.31
М15

Все права на размножение и распространение в любой форме остаются за организацией-разработчиком.

Нелегальное копирование и использование данного продукта запрещено.

*Издается по постановлению научно-методического совета
ФГБОУ ВО «СГУ им. Питирима Сорокина»*

Рецензенты:

- В. И. Пунегов**, главный научный сотрудник лаборатории теоретической и вычислительной физики Физико-математического института ФИЦ «Коми НЦ УрО РАН», д. ф. - м. н, профессор;
Ф. Ф. Асадуллин, 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

Макаров, П. А.

М15
Квантовая теория. Вводный курс: демонстрационные материалы [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие: текстовое научное электронное издание на компакт-диске / П. А. Макаров; Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования «Сыктыв. гос. ун-т им. Питирима Сорокина». — Электрон. текстовые дан. (1.7 Мб) — Сыктывкар: Изд-во СГУ им. Питирима Сорокина, 2021. — 1 опт. компакт-диск (CD-ROM). — Систем. требования: современный ПК с установленной программой для чтения файлов формата PDF. — Загл. с титул. экрана. — ISBN 987-5-87661-676-0

Пособие представляет собой демонстрационные материалы, используемые автором во время чтения лекций по дисциплинам «Квантовая механика», «Элементы квантовой теории» и «Квантовая теория». Предлагаемый материал апробирован в ФГБОУ ВО «СГУ им. Питирима Сорокина» в течение ряда лет (с 2015 по 2021 г.) и ориентирован на студентов бакалавриата третьего курса, обучающихся по направлениям подготовки 03.03.02 «Физика» и 03.03.03 «Радиофизика», а также студентов четвёртого курса бакалавриата по направлению 02.03.01 «Математика и компьютерные науки» и второго курса магистратуры по направлению 02.04.01 «Математика и компьютерные науки». Пособие может быть полезно студентам и других физико-математических, естественно-научных и инженерно-технических направлений подготовки и специальностей при изучении квантовой теории.

Квантовая теория. Вводный курс: демонстрационные материалы

П. А. Макаров



СЫКТЫВКАРСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ПИТИРИМА СОРОКИНА

ОПОРНЫЙ ВУЗ РОССИИ

версия от 4 сентября 2021 г.

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Квантовая теория — это один из основных разделов теоретической физики. Без глубокого изучения квантовой теории совершенно невозможно понимание широкого круга явлений, происходящих на самых разных масштабах: от физики микромира и элементарных частиц до макроскопических систем многих квантовых частиц.

- 1 Тахтаджян Л. А. Квантовая механика для математиков. — М. — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2011. — 496 с.
- 2 Фаддеев Л. Д., Якубовский О. А. Лекции по квантовой механике для студентов-математиков. — Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1980. — 200 с.
- 3 Гальцов Д. В. Теоретическая физика для студентов-математиков. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 2003. — 318 с.
- 4 Hall В. С. Quantum Theory for Mathematicians. — New York: Springer, 2013. — 566 p.

- 1 Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. — 800 с.
- 2 Балашов В. В., Долинов В. К. Курс квантовой механики. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1982. — 280 с.
- 3 Елютин П. В., Кривченков В. Д. Квантовая механика (с задачами) — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 304 с.
- 4 Мессиа А. Квантовая механика: в 2 т. — М.: Наука, 1978.
- 5 Коэн-Таннуджи К., Диу Б., Лалоз Ф. Квантовая механика: в 2 т. — Екатеринбург: Изд-во Уральского ун-та, 2000.
- 6 Зелевинский В. Г. Квантовая физика: в 3 т. — Новосибирск: РИЦ НГУ, 2014, 2015.

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Физические объекты

- Частицы;
- Поля.

Физические объекты

- Частицы;
- Поля.

Основы механики

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt = 0, \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0, \quad (2)$$

$$\dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}. \quad (3)$$

Уравнения Максвелла

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (4)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi \rho_v, \quad (6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (7)$$

Уравнения Максвелла

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (4)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi \rho_v, \quad (6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (7)$$

Формула Рэля — Джинса

$$\frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{H} \cdot \mathbf{B}}{8\pi} = \int_0^{\infty} \rho_{\text{кл}}(\omega) d\omega, \quad (8)$$

$$\rho_{\text{кл}}(\omega) = \frac{kT\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (9)$$

Формула Планка для объёмной плотности излучения

$$\rho(\omega) = \rho_{\text{кл}}(\omega) \frac{\hbar\omega/kT}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}, \quad \hbar = 1.054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}. \quad (10)$$

Квант энергии

$$\mathcal{E} = \hbar\omega = h\nu = \frac{hc}{\lambda}. \quad (11)$$

Формула Планка для объёмной плотности излучения

$$\rho(\omega) = \rho_{\text{кл}}(\omega) \frac{\hbar\omega/kT}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}, \quad \hbar = 1.054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}. \quad (10)$$

Квант энергии

$$\mathcal{E} = \hbar\omega = h\nu = \frac{hc}{\lambda}. \quad (11)$$

Формула Планка для излучательной способности

$$\varphi(\lambda) = \frac{c}{4} \rho(\lambda) = \frac{2\pi c kT}{\lambda^4} \cdot \frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1}. \quad (12)$$

Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП

Спектр излучения абсолютно чёрного тела

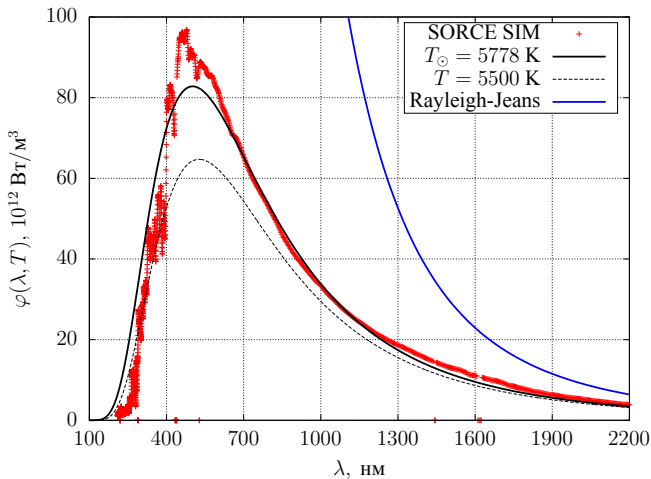


Рис. 1 : Испускательная способность Солнца в сравнении с формулой Планка

Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта

$$\hbar\omega = A_{\text{выл}} + \frac{m_e v^2}{2}. \quad (13)$$

Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта

$$\hbar\omega = A_{\text{выл}} + \frac{m_e v^2}{2}. \quad (13)$$

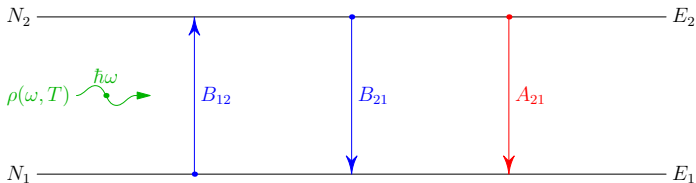


Рис. 2 : К выводу формулы Планка по Эйнштейну

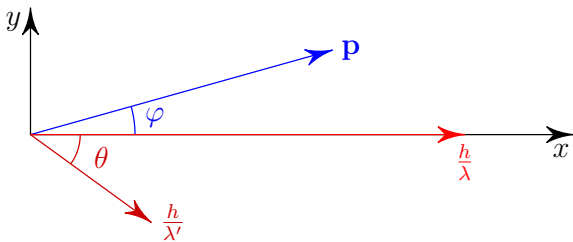


Рис. 3 : Закон сохранения импульса для процесса рассеяния света на покоемшем свободном электроне

Формула Комптона

$$\Delta\lambda = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (14)$$

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{9.11 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}} = 2.42 \cdot 10^{-12} \text{ м}. \quad (15)$$

- 1 Как называются и какую роль в механике играют уравнения (1)–(3)?
- 2 Каков физический смысл равенства (8)?
- 3 Перейти от формулы Планка для объёмной плотности излучения (10) к формуле Планка для излучательной способности (12).
- 4 Изучите основные функции и параметры спектрометра SIM эксперимента SORCE. Постройте с помощью инструмента LASP Interactive Solar Irradiance Data Center график, аналогичный экспериментальной кривой на рис. 1.
- 5 Выведите формулу Планка “по Эйнштейну”, рассматривая двухуровневую квантовую систему, находящуюся в термодинамическом равновесии с резонансным электромагнитным полем. Учтите все три возможных процесса взаимодействия излучения со средой (см. рис. 2).
- 6 Определите изменение длины волны (14), величину и направление импульса отдачи электрона при эффекте Комптона в зависимости от угла рассеяния фотона, предполагая: а) что электрон первоначально покоится; б) что электрон первоначально имеет импульс p_0 в направлении исходного пучка фотонов. Какова в обоих случаях максимальная величина импульса, передаваемого электрону?

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Теория атома водорода Резерфорда — Бора

Модель атома Резерфорда

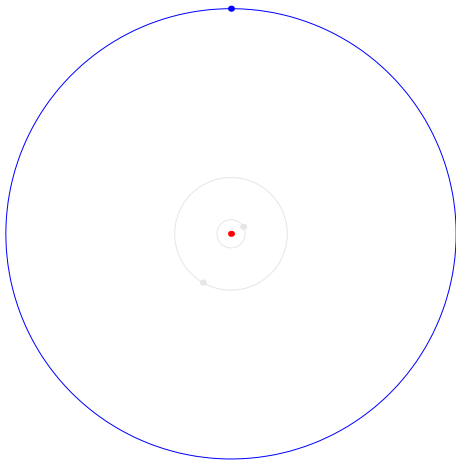


Рис. 4 : Модель атома Резерфорда

Теория атома водорода Резерфорда — Бора

Модель атома Резерфорда

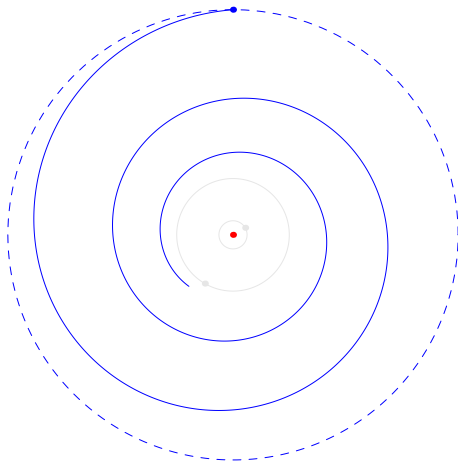


Рис. 4 : Модель атома Резерфорда

Теория атома водорода Резерфорда — Бора

Испускательный спектр водорода

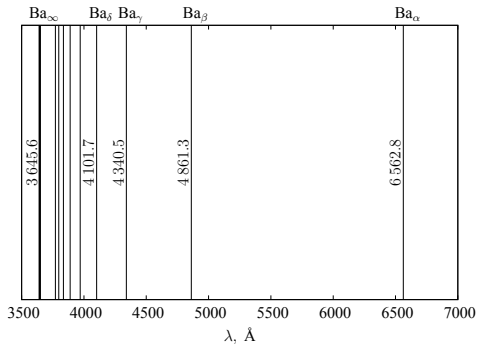


Рис. 5 : Серия Бальмера в спектре испускания атомарного водорода

Обобщённая формула Бальмера

$$\omega_{nm} = \mathcal{R}_{\omega} Z^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n, m \in \mathbb{N} : n > m, \quad (16)$$

Постулат Бора — Зоммерфельда

$$\oint p_k dq_k = 2\pi\hbar n_k, \quad n_k \in \mathbb{N}. \quad (17)$$

Правило частот Бора

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \quad (18)$$

Исходные уравнения

$$m_e \cdot \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{Ze^2}{r_n^2}, \quad (19)$$

$$E_n = \frac{m_e v_n^2}{2} - \frac{Ze^2}{r_n}, \quad (20)$$

$$m_e v_n r_n = \hbar n. \quad (21)$$

Результаты

$$r_n = a_0 \frac{n^2}{Z}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \quad (22)$$

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2}. \quad (23)$$

Теория атома водорода Резерфорда — Бора

Боровская теория водородоподобного атома

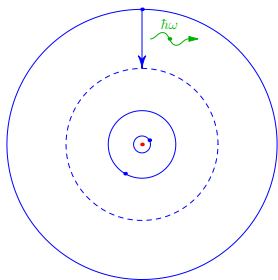


Рис. 6 : Атомный переход, сопровождаемый излучением кванта света

Результаты

$$r_n = a_0 \frac{n^2}{Z}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ м.} \quad (22)$$

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2}. \quad (23)$$

- 1 Каков физический смысл правила частот Бора (18)?
- 2 Решая систему уравнений (19)–(21), получите (23).
- 3 Исходя из основного результата Боровской теории (23), определите значение постоянной Ридберга \mathcal{R}_ω , фигурирующей в обобщённой формуле Бальмера (16).
- 4 Используя значение \mathcal{R}_ω , найденное в предыдущей задаче, вычислите для атома водорода по формуле (16) длины волн первых четырёх линий серии Бальмера ($m = 2$), а также границу этой серии. Сравните результаты с экспериментальными данными (*Wood, 1922*), приведёнными на рис. 5.
- 5 В чём причина неточности результата (23) и как можно её повысить? Оцените корректность рис. 6 в рамках Боровской теории.
- 6 Опираясь на постулат Бора — Зоммерфельда (17), выведите формулу для энергии атома водорода при движении электрона по эллиптическим орбитам. Сравните ответ с (23).

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

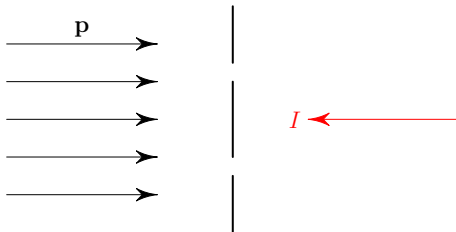


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

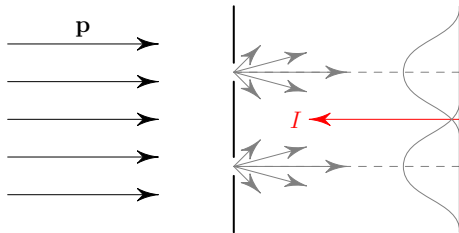


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

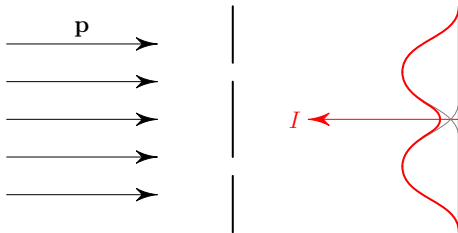


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

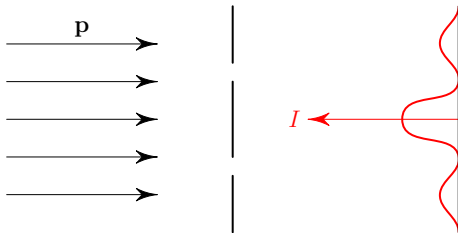


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

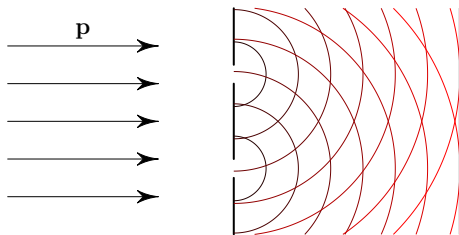


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

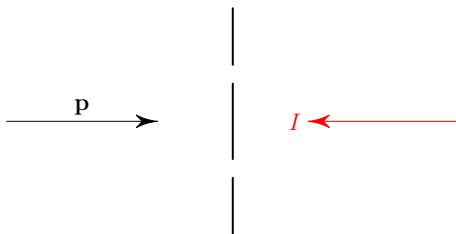


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

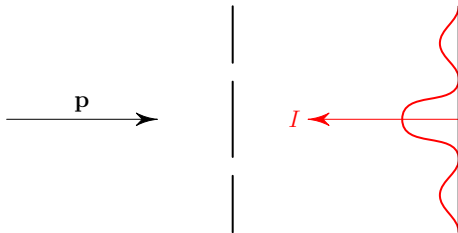


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

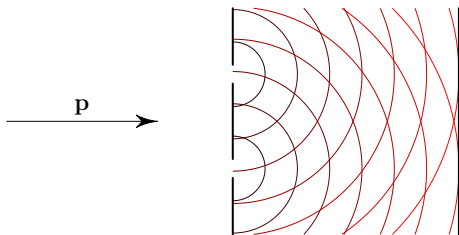


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

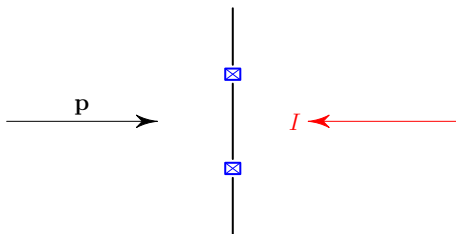


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Волны де Бройля и их статистическая интерпретация

Гипотеза де Бройля и дифракция частиц

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

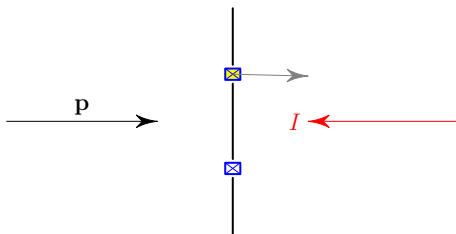


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Волны де Бройля и их статистическая интерпретация

Гипотеза де Бройля и дифракция частиц

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

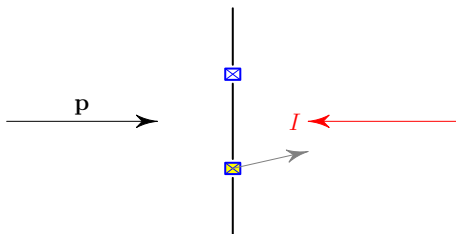


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Волны де Бройля и их статистическая интерпретация

Гипотеза де Бройля и дифракция частиц

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

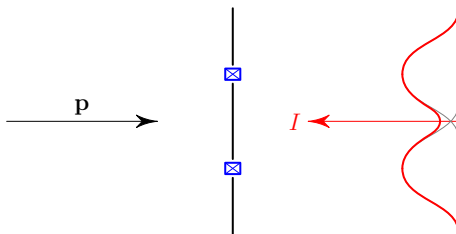


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Плоская монохроматическая волна материи

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)], \quad (24)$$

Соотношения Эйнштейна и де Бройля

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (25)$$

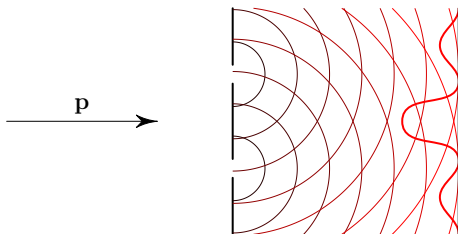


Рис. 7 : Дифракция частиц на двух щелях

Статистическая интерпретация

$$P \sim I = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (26)$$

$$\int_{\mathcal{V}} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1, \quad \rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (27)$$

Статистическая интерпретация

$$P \sim I = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad (26)$$

$$\int_{\mathcal{V}} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1, \quad \rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (27)$$

Нормировка

$$\int_{\mathbb{R}^s} |\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = \infty. \quad (28)$$

Фазовая скорость

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \begin{cases} v/2, \\ c\sqrt{1 + m^2c^2/p^2} > c. \end{cases} \quad (29)$$

Условие нормировки на δ -функцию

$$\int \Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}, t) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}). \quad (30)$$

Условие полноты

$$\int \Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}', t) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{p} = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (31)$$

Волновой пакет

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int C(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{p}. \quad (32)$$

$$C(p) = \begin{cases} C_0, & p \in [p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p], \\ 0, & p \in (-\infty, p_0 - \Delta p) \cup (p_0 + \Delta p, +\infty). \end{cases} \quad (33)$$

Пусть $\Delta p \ll p_0$. Тогда при $p \approx p_0$

$$E(p) = E_0 + (p - p_0) \cdot \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p_0} + \frac{(p - p_0)^2}{2} \cdot \left. \frac{d^2E}{dp^2} \right|_{p_0} + \dots \quad (34)$$

$$E(p) \approx E_0 + (p - p_0) \cdot \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p_0}. \quad (35)$$

$$C(p) = \begin{cases} C_0, & p \in [p_0 - \Delta p, p_0 + \Delta p], \\ 0, & p \in (-\infty, p_0 - \Delta p) \cup (p_0 + \Delta p, +\infty). \end{cases} \quad (33)$$

Пусть $\Delta p \ll p_0$. Тогда при $p \approx p_0$

$$E(p) = E_0 + (p - p_0) \cdot \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p_0} + \frac{(p - p_0)^2}{2} \cdot \left. \frac{d^2E}{dp^2} \right|_{p_0} + \dots \quad (34)$$

$$E(p) \approx E_0 + (p - p_0) \cdot \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p_0}. \quad (35)$$

$$\Psi(x, t) = C_0 \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_0 x - E_0 t) \right] \cdot \frac{\sin \left[\frac{\Delta p}{\hbar} (x - v_g t) \right]}{\frac{\Delta p}{\hbar} (x - v_g t)}, \quad (36)$$

$$v_g = \left. \frac{dE}{dp} \right|_{p_0}, \quad \boxed{v_g = v.} \quad (37)$$

Волны де Бройля и их статистическая интерпретация

Простейший волновой пакет

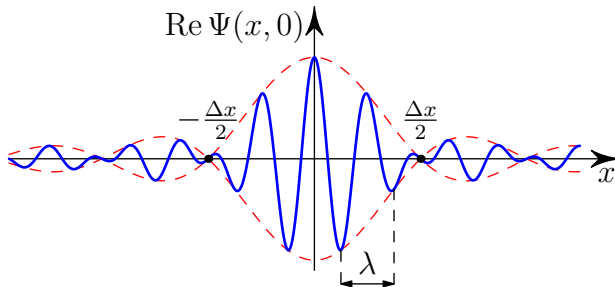


Рис. 8 : Координатная зависимость вещественной части волнового пакета в начальный момент времени

$$\Delta x \cdot \Delta p = 2\pi\hbar,$$

Волны де Бройля и их статистическая интерпретация

Простейший волновой пакет

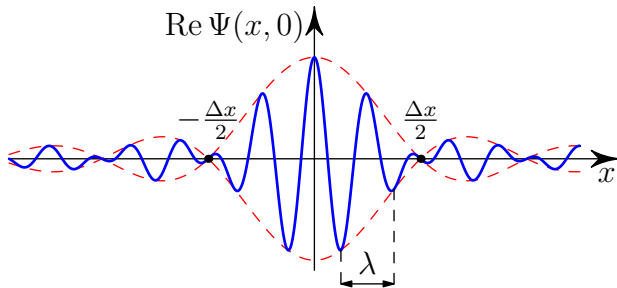


Рис. 8 : Координатная зависимость вещественной части волнового пакета в начальный момент времени

$$\Delta x \cdot \Delta p = 2\pi\hbar,$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Волны де Бройля и их статистическая интерпретация

Простейший волновой пакет

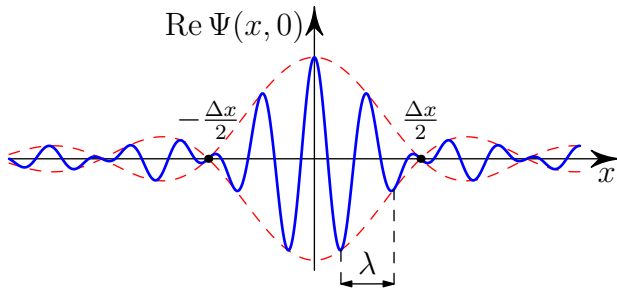


Рис. 8 : Координатная зависимость вещественной части волнового пакета в начальный момент времени

$$\Delta x \cdot \Delta p = 2\pi\hbar, \quad \boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$$t_{\text{diff}} \sim \frac{\hbar}{(\Delta p)^2} \cdot \left(\left. \frac{d^2 E}{dp^2} \right|_{p_0} \right)^{-1}. \quad (38)$$

- 1 Чем обусловлен выбор множителя перед экспонентой в формуле (24)?
- 2 Докажите справедливость (29). Что означает этот результат? Какой физический смысл имеет фазовая скорость?
- 3 Непосредственным вычислением интеграла (32) для волнового пакета (33) в приближении (35) проверьте результат (36).
- 4 Убедитесь в том, что групповая скорость v_g , определённая согласно (37), действительно соответствует реальной скорости движения v частицы как в нерелятивистском, так и в релятивистском случае.
- 5 Как будет меняться с течением времени картина, изображённая на рис. 8? Постройте аналог рис. 8 для мнимой части волнового пакета (36).
- 6 Оцените время расплывания (38) волнового пакета для нерелятивистской, релятивистской частиц и для фотонов.

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Математические объекты квантовой теории

- квантовые состояния:
 - чистые $|\psi\rangle$, $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$; $\langle\text{bra}|\text{c ket}\rangle$
 - смешанные $\hat{\rho}$;
- наблюдаемые.

Математические объекты квантовой теории

- квантовые состояния:
 - чистые $|\psi\rangle$, $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$; $\langle\text{bra}|\text{cket}\rangle$
 - смешанные $\hat{\rho}$;
- наблюдаемые.

Определение 1

Гильбертовым \mathcal{H} называется бесконечномерное линейное, нормированное пространство над полем комплексных чисел, полное относительно сходимости по норме, порождаемой скалярным произведением со следующими свойствами:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*, \quad \langle\psi|\sum_i c_i\varphi_i\rangle = \sum_i c_i\langle\psi|\varphi_i\rangle, \quad \langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \quad (39)$$

$$\forall c_i \in \mathbb{C}, \quad \forall |\psi\rangle, |\varphi_i\rangle \in \mathcal{H}.$$

Основные постулаты квантовой механики

Скалярное произведение векторов гильбертова пространства

Ортогональность векторов $|\varphi\rangle$ и $|\psi\rangle$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = 0.$$

Условие нормировки

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1,$$

$$\langle\Psi_{\mathbf{p}'}|\Psi_{\mathbf{p}}\rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}).$$

Норма вектора

$$\|\psi\| = +\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

Постулат 1

Пусть произвольной изолированной системе соответствует конфигурационное пространство $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{R}^s : \mathbf{q} = \{q_i\}_{i=1}^s \in \mathcal{V}$. Тогда система полностью описывается волновой функцией $\Psi(\mathbf{q}, t) = \langle \mathbf{q} | \Psi \rangle$, такой, что $d\omega = |\Psi(\mathbf{q}, t)|^2 d\mathbf{q}$ — есть вероятность обнаружить систему в элементе объёма конфигурационного пространства $d\mathbf{q}$ вблизи точки \mathbf{q} в момент времени t .

Условие нормировки чистых состояний:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \quad \Longleftrightarrow \quad \int_{\mathcal{V}} |\Psi(\mathbf{q}, t)|^2 d\mathbf{q} = 1.$$

Постулат 2

- Пусть $\psi_i(\mathbf{q}, t)$ — волновая функция состояния $|\psi_i\rangle$.

Тогда $\sum_{i=1}^N c_i \psi_i(\mathbf{q}, t)$ (где $c_i \in \mathbb{C}$) — волновая функция

некого нового состояния $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N c_i |\psi_i\rangle$.

- Если измерение некой физической величины F в состоянии $|\psi_i\rangle$ даёт результат F_i , то измерение той же величины в состоянии суперпозиции $|\psi\rangle$ даст любой возможный результат $\{F_i\}_1^N$ с вероятностью, определяемой $|c_i|^2$.

Основные постулаты квантовой механики

Принцип суперпозиции и квантовая интерференция

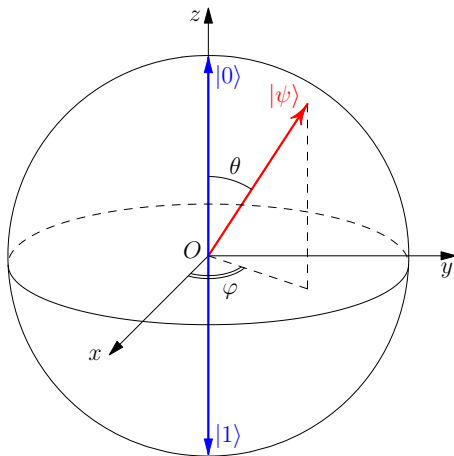


Рис. 9 : Представление кубита с помощью сферы Блоха

Понятие оператора

$$\hat{F} : |\varphi\rangle \rightarrow |\psi\rangle, \quad |\psi\rangle = \hat{F}|\varphi\rangle = |\hat{F}\varphi\rangle, \quad (40)$$

причём

$$\forall |\varphi\rangle \in \mathcal{H} : |\hat{F}\varphi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Обобщение понятия оператора

Вообще говоря, для гарантии $|\hat{F}\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ необходимо выбрать более узкую область определения $D_{\hat{F}} \subset \mathcal{H}$. Тогда под оператором понимают: $(\hat{F}, D_{\hat{F}})$.

Сумма

$$(\hat{A} \pm \hat{B}) |\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \pm \hat{B}|\psi\rangle.$$

Произведение

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle).$$

Сумма

$$(\hat{A} \pm \hat{B}) |\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle \pm \hat{B}|\psi\rangle.$$

Произведение

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle).$$

Определение 2

Коммутатором двух операторов \hat{A} и \hat{B} называется оператор

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (41)$$

Если $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ операторы \hat{A} и \hat{B} называются коммутирующими, иначе — некоммутирующими.

Определение 3

Оператор \hat{F} линейный на множестве векторов Ω , если

$$\hat{F} \sum_i c_i |\psi_i\rangle = \sum_i c_i \hat{F} |\psi_i\rangle, \quad \forall c_i \in \mathbb{C}, \quad \forall |\psi_i\rangle \in \Omega. \quad (42)$$

Определение 4

Оператор \hat{F}^{-1} — обратный по отношению к оператору \hat{F} , если

- 1 $D_{\hat{F}^{-1}} = D_{\hat{F}}$;
- 2 $\hat{F}^{-1} \hat{F} |\psi\rangle = \hat{F} \hat{F}^{-1} |\psi\rangle, \quad \forall |\psi\rangle \in D_{\hat{F}}$.

Другими словами, $\hat{F}^{-1} \hat{F} = \hat{F} \hat{F}^{-1} = \hat{I}$,

где $\hat{I} : \hat{I} |\psi\rangle = |\psi\rangle, \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ — единичный оператор.

Определение 5

Оператор \hat{F}^\dagger — эрмитово-сопряжённый по отношению к оператору \hat{F} на множестве векторов Ω , если

$$\langle \varphi | \hat{F} \psi \rangle = \langle \hat{F}^\dagger \varphi | \psi \rangle, \quad \forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \Omega. \quad (43)$$

Определение 6

Оператор \hat{F} — эрмитов (самосопряжённый), если $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$.

Определение 7

Оператор \hat{U} называется унитарным, если $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$.
Другими словами, если \hat{U} — унитарный, то $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I}$.

Постулат 3

Каждой физической величине F сопоставляется некоторый линейный эрмитов оператор \hat{F} , действующий в пространстве \mathcal{H} (или более широком пространстве, включающем \mathcal{H}).

Явный вид операторов основных физических величин постулируется (как правило, при помощи принципа соответствия). Зависимой физической величине G , которая является функцией другой физической величины F , сопоставляется оператор:

$$\hat{G} = \frac{G(\hat{F}) + (G(\hat{F}))^\dagger}{2}. \quad (44)$$

Определение 8

Число F называется собственным значением оператора \hat{F} , если в области определения оператора $D_{\hat{F}}$ существует вектор $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$, $|\varphi\rangle \neq 0$, называемый собственным вектором, такой что:

$$\hat{F}|\varphi\rangle = F|\varphi\rangle, \quad \hat{F}\varphi(\mathbf{q}) = F\varphi(\mathbf{q}), \quad \varphi(\mathbf{q}) \in \mathbb{L}^2. \quad (45)$$

Определение 9

Число f называется обобщённым собственным значением оператора \hat{F} , если в $D_{\hat{F}}$ существует вектор $|\chi\rangle \notin \mathcal{H}$, называемый обобщённым собственным вектором, такой что:

$$\hat{F}|\chi\rangle = f|\chi\rangle, \quad \hat{F}\chi_f(\mathbf{q}) = f\chi_f(\mathbf{q}), \quad \chi_f(\mathbf{q}) \notin \mathbb{L}^2. \quad (46)$$

Теорема 1

Полный спектр эрмитова оператора лежит на вещественной оси: $\{F_n\} \cup \{f\} \in \mathbb{R}$.

Теорема 2 (Спектральная теорема)

Набор собственных векторов любого эрмитова оператора образует полный базис в \mathcal{H} .

$$\hat{T} = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| + \int |\chi_f\rangle\langle\chi_f| df. \quad (47)$$

Теорема 1

Полный спектр эрмитова оператора лежит на вещественной оси: $\{F_n\} \cup \{f\} \in \mathbb{R}$.

Теорема 2 (Спектральная теорема)

Набор собственных векторов любого эрмитова оператора образует полный базис в \mathcal{H} .

$$\hat{T} = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| + \int |\chi_f\rangle\langle\chi_f| df. \quad (47)$$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle + \int c(f) |\chi_f\rangle df, \quad (48)$$

$$c_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle, \quad c(f) = \langle\chi_f|\psi\rangle.$$

Следствие 1

Физическая величина F в любом квантовомеханическом состоянии может принимать только те значения, которые принадлежат спектру её оператора \hat{F} , причём

- 1 измерение F даёт F_n с вероятностью $|c_n|^2$;
- 2 измерение F даёт значение в интервале $(f, f + df)$ с вероятностью $|c(f)|^2 df$;
- 3 условие нормировки можно записать в виде

$$\sum_n |c_n|^2 + \int |c(f)|^2 df = 1. \quad (49)$$

Следствие 2

Среднее значение физической величины F в нормированном состоянии $|\psi\rangle$ даётся диагональным матричным элементом

$$\langle F \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \iff \langle F \rangle = \sum_n F_n |c_n|^2 + \int f |c(f)|^2 df. \quad (50)$$

Определение для собственных векторов оператора \hat{F}

$$G(\hat{F})|\varphi_n\rangle = G(F_n)|\varphi_n\rangle, \quad G(\hat{F})|\chi_f\rangle = G(f)|\chi_f\rangle. \quad (51)$$

Основные постулаты квантовой механики

Пояснения к понятию функции от оператора, введённой в (44)

Определение для собственных векторов оператора \hat{F}

$$G(\hat{F})|\varphi_n\rangle = G(F_n)|\varphi_n\rangle, \quad G(\hat{F})|\chi_f\rangle = G(f)|\chi_f\rangle. \quad (51)$$

Обобщение на произвольные векторы состояния

$$G(\hat{F})|\psi\rangle = \sum_n c_n G(F_n)|\varphi_n\rangle + \int c(f) G(f)|\chi_f\rangle df. \quad (52)$$

Основные постулаты квантовой механики

Пояснения к понятию функции от оператора, введённой в (44)

Определение для собственных векторов оператора \hat{F}

$$G(\hat{F})|\varphi_n\rangle = G(F_n)|\varphi_n\rangle, \quad G(\hat{F})|\chi_f\rangle = G(f)|\chi_f\rangle. \quad (51)$$

Обобщение на произвольные векторы состояния

$$G(\hat{F})|\psi\rangle = \sum_n c_n G(F_n)|\varphi_n\rangle + \int c(f) G(f)|\chi_f\rangle df. \quad (52)$$

Случай, когда функция $G(x)$ разложима в ряд Тейлора

$$G(\hat{F}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot \left. \frac{d^n G(x)}{dx^n} \right|_{x=0} \hat{F}^n. \quad (53)$$

Операторы пространственного положения и импульса частицы

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}. \quad (54)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (55)$$

Операторы пространственного положения и импульса частицы

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}. \quad (54)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (55)$$

Некоммутативность операторов $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$

$$[\hat{\mathbf{r}}_n, \hat{\mathbf{p}}_k] = i\hbar \delta_{nk}. \quad (56)$$

Операторы пространственного положения и импульса частицы

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}. \quad (54)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (55)$$

Некоммутативность операторов $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$

$$[\hat{\mathbf{r}}_n, \hat{\mathbf{p}}_k] = i\hbar \delta_{nk}. \quad (56)$$

Гамильтониан

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{r}}, t). \quad (57)$$

Основные постулаты квантовой механики

Контрольные вопросы и задания

- 1 Функция $\psi(\varphi) = Ce^{ik\varphi}$ задана на интервале $0 \leq \varphi < 2\pi$. Найдите C .
- 2 Является ли линейным оператор $\hat{S} : \hat{S}\psi = \psi^2$?
- 3 Для операторов \hat{A} и \hat{B} , удовлетворяющих соотношению $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{I}$, найдите $[\hat{A}, \hat{B}^2]$, $[\hat{A}^2, \hat{B}]$ и $[\hat{A}^2, \hat{B}^2]$.
- 4 Определите спектр СЗ и СФ оператора

$$\hat{D}_k = \frac{d^2}{dx^2} + k^2, \quad \forall k \in \mathbb{R}$$

на интервале $0 \leq x \leq a$. Граничные условия: $\psi(0) = \psi(a) = 0$.

- 5 Докажите Теорему 1.
- 6 Покажите справедливость результатов (49) и (50) из Следствий 1–2.
- 7 Проверьте (56), опираясь на явный вид операторов координаты (54) и импульса (55).
- 8 Найдите среднее значение координаты $\langle x \rangle$ и импульса $\langle p_x \rangle$ частицы, находящейся в состоянии

$$\psi(x) = A \exp\left[ikx - \frac{x^2}{a^2}\right].$$

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Определение 10

Физические величины F и G одновременно измеримы, если операторы \hat{F} и \hat{G} , соответствующие этим величинам, обладают общей системой собственных векторов

$$\hat{F}|\varphi_n\rangle = f_n|\varphi_n\rangle, \quad \hat{G}|\varphi_n\rangle = g_n|\varphi_n\rangle. \quad (58)$$

Теорема 3

Физические величины F и G одновременно измеримы тогда и только тогда, когда соответствующие им операторы коммутируют

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0. \quad (59)$$

Замечание 1

Пусть спектр оператора \hat{F} вырожден, то есть одному собственному значению F_n отвечает несколько собственных векторов $|\varphi_{n\alpha}\rangle$. Другими словами, квантовое число F_n не определяет однозначно квантовое состояние системы.

В этом случае всегда существует набор взаимно коммутирующих операторов $\{\hat{G}_i\}$, коммутирующих с \hat{F} . Любой собственный вектор $|\varphi_{n\dots i\dots}\rangle$ этих операторов характеризуется определённым набором квантовых чисел F_n, \dots, G_i, \dots , которые однозначно фиксируют квантовое состояние.

Определение 11

Набор коммутирующих операторов, собственные значения которых однозначно определяют квантовое состояние системы, называется полным.

Теорема 4

Пусть \hat{F} и \hat{G} — операторы физических величин, неизмеримых одновременно. Тогда их коммутатор всегда можно представить в виде

$$[\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{A}, \quad \text{где } \hat{A}^\dagger = \hat{A}. \quad (60)$$

Теорема 5 (О неравенстве Шрёдингера — Робертсона)

В любом чистом состоянии $|\psi\rangle$ для неизмеримых одновременно физических величин F и G выполняется неравенство

$$\mathcal{D}_\psi[F] \cdot \mathcal{D}_\psi[G] \geq \frac{\langle A \rangle_\psi^2}{4}, \quad (61)$$

где дисперсия

$$\mathcal{D}_\psi[L] = \langle L^2 \rangle_\psi - \langle L \rangle_\psi^2. \quad (62)$$

- 1 Докажите Теорему 3.
- 2 Оператор \hat{A} коммутирует с операторами \hat{B} и \hat{C} . Можно ли сделать вывод, что физические величины A , B и C одновременно измеримы? Приведите примеры.
- 3 Докажите Теорему 4.
- 4 Какие из пар наблюдаемых являются совместно измеримыми: $\{x, y\}$, $\{p_x, p_y\}$, $\{x, p_x\}$, $\{x, p_y\}$, $\{x, p^2\}$, $\{p_x, p^2\}$?
- 5 Докажите Теорему 5.
- 6 Вычислите (61) для случая $\hat{F} = \hat{x}$, $\hat{G} = \hat{p}_x$. Что означает этот результат и как он связан с соотношением неопределённости Гейзенберга?
- 7 Для каких волновых функций минимизируется соотношение неопределённости Гейзенберга для наблюдаемых A и B ?

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Постулат 4

Временная эволюция чистого квантового состояния описывается уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} |\Psi\rangle. \quad (63)$$

Постулат 4

Временная эволюция чистого квантового состояния описывается уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle. \quad (63)$$

Основная задача волновой механики

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}\Psi(\mathbf{q}, t), \\ \Psi(\mathbf{q}, 0) = \Psi_0(\mathbf{q}). \end{cases} \quad (64)$$

Разделение переменных и временная часть ВФ

Если $\hat{\mathcal{H}} \neq \hat{\mathcal{H}}(t)$, то

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = \psi(\mathbf{q}) \cdot T(t). \quad (65)$$

$$i\hbar \frac{\dot{T}(t)}{T(t)} = \frac{\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{q})}{\psi(\mathbf{q})} = E. \quad (66)$$

$$T(t) = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right). \quad (67)$$

Стационарное уравнение Шрёдингера и стационарные ВФ

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{q}) = E\psi(\mathbf{q}), \quad (68)$$

$$\Psi_E(\mathbf{q}, t) = \psi(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right). \quad (69)$$

Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера

Общее решение уравнения Шрёдингера

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_n = E_n\psi_n, \quad \hat{\mathcal{H}}\psi_E = E\psi_E. \quad (70)$$

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{q}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} + \int c(E) \psi_E(\mathbf{q}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} dE, \quad (71)$$

$$c_n = \langle \psi_n | \Psi_0 \rangle, \quad c(E) = \langle \psi_E | \Psi_0 \rangle. \quad (72)$$

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_n = E_n\psi_n, \quad \hat{\mathcal{H}}\psi_E = E\psi_E. \quad (70)$$

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{q}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} + \int c(E) \psi_E(\mathbf{q}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} dE, \quad (71)$$

$$c_n = \langle \psi_n | \Psi_0 \rangle, \quad c(E) = \langle \psi_E | \Psi_0 \rangle. \quad (72)$$

Замечание 2

Если оператор $\hat{\mathcal{H}}$ вырожден, то необходимо построить полный набор операторов (включающий в себя $\hat{\mathcal{H}}$) данной физической системы. СВ этого набора формируют полный базис в \mathcal{H} . Тогда общее решение уравнения Шрёдингера (64) представляет собой разложение по этому базису. Формально можно понимать индексы n и E в (71) как наборы квантовых чисел, однозначно определяющих квантовое состояние системы.

Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера

Пример: одномерное свободное движение нерелятивистской частицы

Полный набор операторов

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad [\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_x] = 0. \quad (73)$$

Решения стационарного уравнения Шрёдингера

$$\hat{p}_x \psi_{p_x, E}(x) = p_x \psi_{p_x, E}(x), \quad \hat{\mathcal{H}} \psi_{p_x, E}(x) = E \psi_{p_x, E}(x). \quad (74)$$

$$\psi_{p_x, E}(x) = \psi_0 e^{ip_x x / \hbar}, \quad E = \frac{p_x^2}{2m}. \quad (75)$$

Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера

Пример: одномерное свободное движение нерелятивистской частицы

Полный набор операторов

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad [\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_x] = 0. \quad (73)$$

Решения стационарного уравнения Шрёдингера

$$\hat{p}_x \psi_{p_x, E}(x) = p_x \psi_{p_x, E}(x), \quad \hat{\mathcal{H}} \psi_{p_x, E}(x) = E \psi_{p_x, E}(x). \quad (74)$$

$$\psi_{p_x, E}(x) = \psi_0 e^{ip_x x / \hbar}, \quad E = \frac{p_x^2}{2m}. \quad (75)$$

Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера

Пример: одномерное свободное движение нерелятивистской частицы

Полный набор операторов

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad [\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_x] = 0. \quad (73)$$

Решения стационарного уравнения Шрёдингера

$$\hat{p}_x \psi_{p_x, E}(x) = p_x \psi_{p_x, E}(x), \quad \hat{\mathcal{H}} \psi_{p_x, E}(x) = E \psi_{p_x, E}(x). \quad (74)$$

$$\psi_{p_x, E}(x) = \psi_0 e^{ip_x x/\hbar}, \quad E = \frac{p_x^2}{2m}. \quad (75)$$

Решения временного уравнения Шрёдингера

$$\psi_{p_x}(x, t) \stackrel{(69)}{=} \psi_{p_x}(x) e^{-iEt/\hbar} \stackrel{(30)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i(p_x x - Et)/\hbar}. \quad (76)$$

Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера

Пример: одномерное свободное движение нерелятивистской частицы

Полный набор операторов

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad [\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_x] = 0. \quad (73)$$

Решения стационарного уравнения Шрёдингера

$$\hat{p}_x \psi_{p_x, E}(x) = p_x \psi_{p_x, E}(x), \quad \hat{\mathcal{H}} \psi_{p_x, E}(x) = E \psi_{p_x, E}(x). \quad (74)$$

$$\psi_{p_x, E}(x) = \psi_0 e^{ip_x x / \hbar}, \quad E = \frac{p_x^2}{2m}. \quad (75)$$

Решения временного уравнения Шрёдингера

$$\psi_{p_x}(x, t) \stackrel{(69)}{=} \psi_{p_x}(x) e^{-iEt/\hbar} \stackrel{(30)}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i(p_x x - Et)/\hbar}. \quad (76)$$

$$\Psi(x, t) = \int c(p_x) \psi_{p_x}(x, t) dx. \quad (77)$$

$$(72) : \begin{cases} c_n = \langle \psi_n | \Psi_0 \rangle = \int \psi_n^*(\mathbf{q}') \Psi_0(\mathbf{q}') d\mathbf{q}', \\ c(E) = \langle \psi_E | \Psi_0 \rangle = \int \psi_E^*(\mathbf{q}') \Psi_0(\mathbf{q}') d\mathbf{q}'. \end{cases} \quad (78)$$

$$(78) \rightarrow (71) : \boxed{\Psi(\mathbf{q}, t) = \int G(\mathbf{q}, t; \mathbf{q}', 0) \Psi_0(\mathbf{q}') d\mathbf{q}',} \quad (79)$$

$$G(\mathbf{q}, t; \mathbf{q}', 0) = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{q}') \psi_n(\mathbf{q}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} + \int \psi_E^*(\mathbf{q}') \psi_E(\mathbf{q}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}. \quad (80)$$

$$(72) : \begin{cases} c_n = \langle \psi_n | \Psi_0 \rangle = \int \psi_n^*(\mathbf{q}') \Psi_0(\mathbf{q}') d\mathbf{q}', \\ c(E) = \langle \psi_E | \Psi_0 \rangle = \int \psi_E^*(\mathbf{q}') \Psi_0(\mathbf{q}') d\mathbf{q}'. \end{cases} \quad (78)$$

$$(78) \rightarrow (71) : \boxed{\Psi(\mathbf{q}, t) = \int G(\mathbf{q}, t; \mathbf{q}', 0) \Psi_0(\mathbf{q}') d\mathbf{q}',} \quad (79)$$

$$G(\mathbf{q}, t; \mathbf{q}', 0) = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{q}') \psi_n(\mathbf{q}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} + \int \psi_E^*(\mathbf{q}') \psi_E(\mathbf{q}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}. \quad (80)$$

Уравнение для функции Грина

$$\begin{cases} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{\mathcal{H}} \right) G(\mathbf{q}, t; \mathbf{q}', t') = i\hbar \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \delta(t - t'), \\ \lim_{\tau \rightarrow 0} G(\mathbf{q}, t + \tau; \mathbf{q}', t) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'). \end{cases} \quad (81)$$

Постановка задачи

$$(63) : i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} |\Psi(t)\rangle, \quad |\Psi(0)\rangle = |\Psi_0\rangle.$$

Гамильтониан — генератор временной эволюции

$$\hat{\mathcal{H}} \neq \hat{\mathcal{H}}(t) \rightarrow \hat{U}(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t}. \quad (82)$$

$$\hat{U}^\dagger(t, 0) = \hat{U}^{-1}(t, 0) = \hat{U}(0, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t}. \quad (83)$$

Временная эволюция квантового состояния

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, 0) |\Psi_0\rangle, \quad (84)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}(t) \Psi(\mathbf{q})$$

Пусть $\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}(t)$, где

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}_0 \psi_n(\mathbf{q}, t) = E_n \psi_n(\mathbf{q}, t), \quad (85)$$

$$\psi_n(\mathbf{q}, t) = \psi_n(\mathbf{q}) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (86)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}(t) \Psi(\mathbf{q})$$

Пусть $\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{V}}(t)$, где

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}_0 \psi_n(\mathbf{q}, t) = E_n \psi_n(\mathbf{q}, t), \quad (85)$$

$$\psi_n(\mathbf{q}, t) = \psi_n(\mathbf{q}) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (86)$$

Волновая функция возмущённого состояния

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = \sum_n a_n(t) \psi_n(\mathbf{q}, t). \quad (87)$$

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_n a_n \int \psi_k^*(\mathbf{q}, t) \hat{\mathcal{V}}(t) \psi_n(\mathbf{q}, t) d\mathbf{q}. \quad (88)$$

Пусть $\hat{F} = \hat{F}(t)$. Тогда $\langle F(t) \rangle_\Psi = \langle \Psi(t) | \hat{F}(t) | \Psi(t) \rangle$.

$$\begin{aligned} \frac{d\langle F(t) \rangle_\Psi}{dt} &= \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \hat{F} | \Psi \right\rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{F} | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle \stackrel{(63)}{=} \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \hat{\mathcal{H}} \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle + \left\langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \Psi \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{F} | \hat{\mathcal{H}} \Psi \rangle = \\ &= \langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{F}] | \Psi \rangle = \langle \Psi | \frac{d\hat{F}}{dt} | \Psi \rangle = \left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle_\Psi. \end{aligned} \quad (89)$$

Пусть $\hat{F} = \hat{F}(t)$. Тогда $\langle F(t) \rangle_\Psi = \langle \Psi(t) | \hat{F}(t) | \Psi(t) \rangle$.

$$\begin{aligned} \frac{d\langle F(t) \rangle_\Psi}{dt} &= \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \hat{F} | \Psi \right\rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{F} | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \rangle \stackrel{(63)}{=} \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \hat{\mathcal{H}} \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle + \left\langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \Psi \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{F} | \hat{\mathcal{H}} \Psi \rangle = \\ &= \langle \Psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{F}] | \Psi \rangle = \langle \Psi | \frac{d\hat{F}}{dt} | \Psi \rangle = \left\langle \frac{dF}{dt} \right\rangle_\Psi. \end{aligned} \quad (89)$$

$$\boxed{\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{F}].} \quad (90)$$

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{\mathcal{H}, f\}.$$

- Полная энергия замкнутой системы

$$\hat{\mathcal{H}} \neq \hat{\mathcal{H}}(t), \quad [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0 \quad \Longrightarrow \quad E = \text{const.}$$

- Импульс свободной частицы

$$\hat{\mathbf{p}} \neq \hat{\mathbf{p}}(t), \quad \left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{p}} \right] = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \hat{\mathbf{p}} \right] = 0 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{p} = \text{const.}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{r}}, t).$$

- Оператор скорости

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{r}}] = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \hat{\mathbf{r}} \right] = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}. \quad (91)$$

- Оператор ускорения

$$\hat{\mathbf{a}} = \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt} = \frac{\partial \hat{\mathbf{v}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{v}}] = \frac{i}{\hbar} [U, \hat{\mathbf{v}}] = -\frac{1}{m} \nabla U(\hat{\mathbf{r}}, t). \quad (92)$$

Мотивация

Уравнение Шрёдингера

- 1 не является релятивистски ковариантным;
- 2 не описывает поведение частиц со спином в магнитном поле.

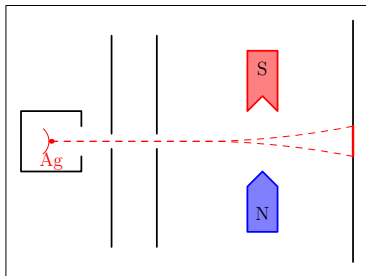


Рис. 10 : Опыт Штерна и Герлаха

Мотивация

Уравнение Шрёдингера

- 1 не является релятивистски ковариантным;
- 2 не описывает поведение частиц со спином в магнитном поле.

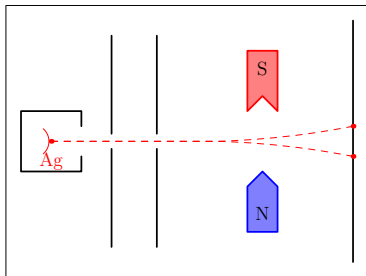


Рис. 10 : Опыт Штерна и Герлаха

Уравнение Клейна — Гордона — Фока

$$(\square - m^2) \psi = 0. \quad (93)$$

Уравнение Паули

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi - \frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}) \right] \psi, \quad (94)$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (95)$$

Уравнение Дирака

$$(i\hbar c \gamma^{\mu} \partial_{\mu} - mc^2) \psi = 0, \quad (96)$$

- 1 Найдите возможные значения энергии и их вероятности для свободной частицы массы m , находящейся в состоянии $\psi(x) = Ax(a - x)$ в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a . Покажите, что данная волновая функция $\psi(x)$ достаточно точно описывает основное состояние частицы.
- 2 Частица массы m находится в полубесконечной потенциальной яме вида

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0; \\ 0, & 0 < x < a; \\ U_0, & x \geq a. \end{cases}$$

Напишите уравнение, определяющее уровни энергии. Найдите условие появления первого и n -го дискретного энергетического уровня.

Пусть энергия единственного уровня в данной яме $E = U_0/2$. Для данного случая постройте график $\rho(x)$ и определите: параметры ямы $U_0 a^2$; наиболее вероятное значение координаты частицы; вероятность нахождения частицы внутри ямы.

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Определение 12

Вектор $|\Psi\rangle$ понимается вне связи с каким-либо базисом, то есть в бескоординатном виде. Переход к определённом базису (выбор конкретной системы координат) называется представлением квантового состояния.

Примеры — координатное и импульсное представления

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle, \quad \varphi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle. \quad (97)$$

Определение 12

Вектор $|\Psi\rangle$ понимается вне связи с каким-либо базисом, то есть в бескоординатном виде. Переход к определённому базису (выбор конкретной системы координат) называется представлением квантового состояния.

Примеры — координатное и импульсное представления

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle, \quad \varphi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle. \quad (97)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \varphi(\mathbf{p}) d^s \mathbf{p}, \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}, \quad (98)$$

$$\varphi(\mathbf{p}) = \int \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \psi(\mathbf{r}) d^s \mathbf{r}, \quad \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{s/2}} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}. \quad (99)$$

Тензорное произведение кет и бра

$$\langle P = |\psi\rangle\langle\varphi| \quad P-?$$

Тензорное произведение кет и бра

$$\triangleleft P = |\psi\rangle\langle\varphi| \quad P-?$$

$$|\psi\rangle\langle\varphi|a\rangle = \langle\varphi|a\rangle|\psi\rangle, \quad \langle b|\psi\rangle\langle\varphi| = \langle\varphi|\langle b|\psi\rangle.$$

Тензорное произведение кет и бра

$$\triangleleft P = |\psi\rangle\langle\varphi| \quad P-?$$

$$|\psi\rangle\langle\varphi|a\rangle = \langle\varphi|a\rangle|\psi\rangle, \quad \langle b|\psi\rangle\langle\varphi| = \langle\varphi|b\rangle\langle\psi|.$$

Оператор проектирования

Пусть $\{|\varphi_m\rangle\}_1^\infty$ — полный ортонормированный набор.

$$\triangleleft \hat{P}_m = |\varphi_m\rangle\langle\varphi_m| : \quad \hat{P}_m|\xi\rangle = |\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|\xi\rangle. \quad (100)$$

Единичный оператор

$$\hat{P} = \sum_{m=1}^{\infty} \hat{P}_m : \quad \hat{P}|\xi\rangle = |\xi\rangle, \quad \forall |\xi\rangle \in \mathcal{H} \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{P} \equiv \hat{I}. \quad (101)$$

Единичный оператор

$$\hat{P} = \sum_{m=1}^{\infty} \hat{P}_m : \quad \hat{P}|\xi\rangle = |\xi\rangle, \quad \forall |\xi\rangle \in \mathcal{H} \quad \iff \quad \hat{P} \equiv \hat{I}. \quad (101)$$

Разложение оператора по проекторам

Пусть векторы $\{|\varphi_m\rangle\}_1^{\infty}$ — полный набор СВ оператора \hat{F} :

$$\hat{F}|\varphi_m\rangle = F_m|\varphi_m\rangle. \quad (102)$$

Тогда

$$\hat{F} = \sum_{m=1}^{\infty} F_m \hat{P}_m. \quad (103)$$

Преобразование Фурье

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \varphi(\mathbf{p}) d^s \mathbf{p} = \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle d^s \mathbf{p} = \\ &= \langle \mathbf{r} | \left(\int d^s \mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \right) | \Psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{T} | \Psi \rangle.\end{aligned}\tag{104}$$

Преобразование Фурье

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \varphi(\mathbf{p}) d^s \mathbf{p} = \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle d^s \mathbf{p} = \\ &= \langle \mathbf{r} | \left(\int d^s \mathbf{p} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \right) | \Psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{T} | \Psi \rangle.\end{aligned}\tag{104}$$

Оператор Фурье

$$\psi(\mathbf{a}) = \widehat{\mathcal{F}}_{\mathbf{ab}} \psi(\mathbf{b}), \quad \widehat{\mathcal{F}}_{\mathbf{ab}} = \int d^s \mathbf{b} \langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle.\tag{105}$$

Пусть спектр оператора \hat{G} чисто дискретный:

$$\hat{G}|n\rangle = g_n|n\rangle, \quad |n\rangle \equiv |\psi_n\rangle, \quad (106)$$

где $n = 1, 2, \dots$ — индекс состояний дискретного спектра.

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle. \quad (107)$$

Волновая функция в g -представлении

$$\langle n|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (108)$$

Оператор в g -представлении

$$\begin{aligned}\langle n|\widehat{F}\psi\rangle &= \langle n|\widehat{F}\left(\sum_{n'}|n'\rangle\langle n'|\right)|\psi\rangle = \sum_{n'}\langle n|\widehat{F}|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle = \\ &= \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (109)$$

Сопряжение операторов в матричном представлении

$$\langle n'|\widehat{F}^\dagger|n\rangle = \langle n|\widehat{F}|n'\rangle^*.\quad (110)$$

$$\widehat{F}^\dagger = \widehat{F} \iff F_{n'n} = F_{nn'}^*.\quad (111)$$

Произведение операторов

$$\langle n | \widehat{A}\widehat{B} | n'' \rangle = \sum_{n'} \langle n | \widehat{A} | n' \rangle \langle n' | \widehat{B} | n'' \rangle = \sum_{n'} A_{nn'} B_{n'n''} \quad (112)$$

Задача на СВ и СЗ

$$\widehat{F}|f\rangle = f|f\rangle \rightarrow \sum_{n'} F_{nn'} \langle n' | f \rangle = f \langle n | f \rangle = f \delta_{nn'} \langle n' | f \rangle, \quad (113)$$

$$\sum_{n'} (F_{nn'} - f \delta_{nn'}) \langle n' | f \rangle = 0. \quad (114)$$

$$\det \| F_{nn'} - f \delta_{nn'} \| = 0. \quad (115)$$

Матрица оператора \widehat{F} в собственном f -представлении

$$\langle f' | \widehat{F} | f \rangle = f \langle f' | f \rangle = f \delta_{f'f}. \quad (116)$$

Пусть спектры операторов \hat{L} и \hat{M} дискретны:

$$\hat{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad \hat{M}|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle. \quad (117)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda|\Psi\rangle = \sum_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu|\Psi\rangle. \quad (118)$$

$$\langle\lambda|\Psi\rangle = \psi_{\lambda}, \quad \langle\mu|\Psi\rangle = \psi'_{\mu}. \quad (119)$$

$$\psi'_{\mu} = \langle\mu|\Psi\rangle = \sum_{\lambda} \underbrace{\langle\mu|\lambda\rangle}_{U_{\mu\lambda}} \langle\lambda|\psi\rangle = \sum_{\lambda} U_{\mu\lambda} \psi_{\lambda}. \quad (120)$$

$$\langle\mu| = \sum_{\lambda} \underbrace{\langle\mu|\lambda\rangle}_{U_{\mu\lambda}} \langle\lambda| = \sum_{\lambda} U_{\mu\lambda} \langle\lambda|, \quad (121)$$

$$|\mu\rangle = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda|\mu\rangle = \sum_{\lambda} U_{\mu\lambda}^* |\lambda\rangle.$$

Из условий ортонормировки имеем:

$$\langle \mu | \mu' \rangle = \delta_{\mu\mu'}, \quad \langle \lambda | \lambda' \rangle = \delta_{\lambda\lambda'}. \quad (122)$$

поэтому

$$\begin{aligned} \delta_{\mu\mu'} = \langle \mu | \mu' \rangle &= \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \underbrace{\langle \mu | \lambda \rangle}_{U_{\mu\lambda}} \underbrace{\langle \lambda | \lambda' \rangle}_{\delta_{\lambda\lambda'}} \underbrace{\langle \lambda' | \mu' \rangle}_{(U^\dagger)_{\lambda'\mu'}} = \\ &= \sum_{\lambda} U_{\mu\lambda} (U^\dagger)_{\lambda\mu'}. \end{aligned} \quad (123)$$

$$\sum_{n'} U_{nn'} (U^\dagger)_{n'n''} = \delta_{nn''} \iff U^\dagger = U^{-1}. \quad (124)$$

$$\psi'_\mu = \hat{U} \psi_\lambda. \quad (125)$$

Пусть \hat{F} — оператор физической величины в исходном λ -представлении, \hat{F}' — соответствующий оператор в новом μ -представлении.

$$\begin{aligned} F_{\mu\mu'} &= \langle \mu | \hat{F} | \mu' \rangle = \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} \underbrace{\langle \mu | \lambda \rangle}_{U_{\mu\lambda}} \underbrace{\langle \lambda | \hat{F} | \lambda' \rangle}_{F_{\lambda\lambda'}} \underbrace{\langle \lambda' | \mu' \rangle}_{(U^\dagger)_{\lambda'\mu'}} = \\ &= \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} U_{\mu\lambda} F_{\lambda\lambda'} (U^\dagger)_{\lambda'\mu'}. \end{aligned} \quad (126)$$

Следовательно, матрицы F' и F одного и того же оператора \hat{F} в μ - и λ -представлениях связаны друг с другом следующим образом

$$F' = U F U^\dagger \iff F = U^\dagger F' U. \quad (127)$$

$$\hat{F}' = \hat{U} \hat{F} \hat{U}^\dagger \iff \hat{F} = \hat{U}^\dagger \hat{F}' \hat{U} \quad (128)$$

- 1 Скалярное произведение любых двух векторов $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ инвариантно к их унитарному преобразованию:
$$\langle\psi'_1|\psi'_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle.$$
- 2 Унитарные преобразования не меняют собственных значений наблюдаемой: если $\hat{F}|f\rangle = f|f\rangle$, то $\hat{F}'|f'\rangle = f|f'\rangle$.
- 3 Унитарные преобразования не нарушают эрмитовости оператора: если $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$, то $(\hat{F}')^\dagger = \hat{F}'$.
- 4 Унитарные преобразования сохраняют коммутационные соотношения: если $[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{K}$, то $[\hat{F}', \hat{G}'] = \hat{K}'$.
- 5 Значения матричных элементов и средние значения наблюдаемых не меняются при унитарных преобразованиях: $\langle\psi_1|\hat{F}|\psi_2\rangle = \langle\psi'_1|\hat{F}'|\psi'_2\rangle$.

Преобразования векторов и волновых функций

$$\mathbf{r}' = \hat{g}(\eta) \mathbf{r}. \quad (129)$$

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}). \quad (130)$$

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\hat{g}^{-1}(\eta) \mathbf{r}'). \quad (131)$$

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\hat{g}^{-1}(\eta) \mathbf{r}). \quad (132)$$

$$\hat{U}(\eta) \psi(\mathbf{r}) = \psi(\hat{g}^{-1}(\eta) \mathbf{r}). \quad (133)$$

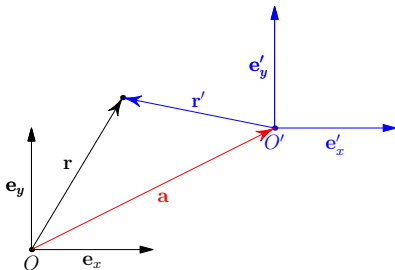


Рис. 10 : Пространственный сдвиг системы координат

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{a}. \quad (134)$$

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}). \quad (135)$$

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\mathbf{a}\nabla_{\mathbf{r}})^j}{j!} \psi(\mathbf{r}) = \exp(\mathbf{a}\nabla_{\mathbf{r}})\psi(\mathbf{r}). \quad (136)$$

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}\right). \quad (137)$$

Определение 13

Описание временной эволюции квантовой системы, когда вектор состояния (или волновая функция) зависит от времени, а операторы — не зависят, называется представлением (картиной) Шрёдингера.

$$|\Psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi_S(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}|\Psi_S(0)\rangle, \quad \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}_S}{\partial t} = 0. \quad (138)$$

$$\hat{F}_S \neq \hat{F}_S(t), \quad \frac{d\hat{F}_S}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}_S, \hat{F}_S]. \quad (139)$$

Определение 14

Описание временной эволюции квантовой системы, когда временная зависимость переносится с векторов состояния (или волновых функций) на операторы, называется представлением (картиной) Гейзенберга.

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_S(0)\rangle = \hat{U}^\dagger(t)|\Psi_S(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}|\Psi_S(t)\rangle. \quad (140)$$

$$\hat{F}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{F}_S\hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}\hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}. \quad (141)$$

Определение 14

Описание временной эволюции квантовой системы, когда временная зависимость переносится с векторов состояния (или волновых функций) на операторы, называется представлением (картиной) Гейзенберга.

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_S(0)\rangle = \hat{U}^\dagger(t)|\Psi_S(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}|\Psi_S(t)\rangle. \quad (140)$$

$$\hat{F}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{F}_S\hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}\hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}. \quad (141)$$

$$\hat{F}_H(t) = \hat{F}_S + \frac{it}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}_S, \hat{F}_S] + \frac{(it)^2}{2!\hbar^2} [\hat{\mathcal{H}}_S, [\hat{\mathcal{H}}_S, \hat{F}_S]] + \dots \quad (142)$$

Определение 14

Описание временной эволюции квантовой системы, когда временная зависимость переносится с векторов состояния (или волновых функций) на операторы, называется представлением (картиной) Гейзенберга.

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_S(0)\rangle = \hat{U}^\dagger(t)|\Psi_S(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}|\Psi_S(t)\rangle. \quad (140)$$

$$\hat{F}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{F}_S\hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}\hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}_S t}. \quad (141)$$

$$\hat{F}_H(t) = \hat{F}_S + \frac{it}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}_S, \hat{F}_S] + \frac{(it)^2}{2!\hbar^2} [\hat{\mathcal{H}}_S, [\hat{\mathcal{H}}_S, \hat{F}_S]] + \dots \quad (142)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_H = \hat{\mathcal{H}}_S = \hat{\mathcal{H}}. \quad (143)$$

Квантовые уравнения движения в картине Гейзенберга

$$\hat{F}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{F}_S \hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t} \hat{F}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} t}. \quad (144)$$

$$\boxed{\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{F}_H]}. \quad (145)$$

Канонические уравнения Гамильтона

$$\dot{q} = \{\mathcal{H}, q\}, \quad \dot{p} = \{\mathcal{H}, p\}. \quad (146)$$

- 1 Может ли унитарный оператор (матрица) являться одновременно и эрмитовым? Приведите примеры.
- 2 Докажите свойства унитарных преобразований, приведённые на слайде 75.
- 3 Определите распределение вероятностей различных значений импульса для основного состояния частицы, находящейся в прямоугольном потенциальном «ящике» с бесконечно высокими стенками размерами $a \times b \times c$.
- 4 Напишите нормированные соответствующим образом СФ радиус-вектора Ψ_{r_0} и импульса Ψ_{p_0} в \mathbf{r} - и \mathbf{p} -представлениях.
- 5 Найдите закон преобразования операторов \hat{x} и \hat{p} при унитарных преобразованиях, осуществляемых операторами: отражения \hat{J} ; сдвига \hat{T}_a ; изменения масштаба \hat{M}_c .
- 6 Сравните соотношение (145) с равенством (90). В чем их формальное сходство и принципиальное отличие?

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Оператор орбитального момента

Определение

Определение, основанное на принципе соответствия

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}]. \quad (147)$$

Явный вид в декартовой системе координат

$$\hat{L}_k = \varepsilon_{kmn} \hat{x}_m \hat{p}_n = -i\hbar \varepsilon_{kmn} x_m \frac{\partial}{\partial x_n}. \quad (148)$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (149)$$

Алгебра углового момента

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_m] = i\hbar \varepsilon_{kmn} \hat{L}_n, \quad [\hat{L}_k, \hat{L}^2] = 0. \quad (150)$$

Оператор орбитального момента

Момент импульса как генератор группы вращений

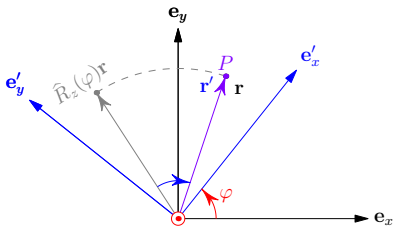


Рис. 11 : Поворот системы координат

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \varphi [\mathbf{n} \times \mathbf{r}]. \quad (151)$$

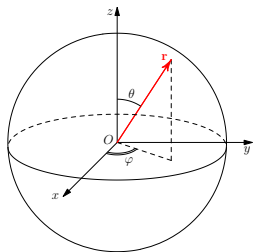
$$\hat{R}_{\mathbf{n}}(\varphi) \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \varphi [\mathbf{n} \times \mathbf{r}]). \quad (152)$$

$$\psi(\mathbf{r} + \varphi [\mathbf{n} \times \mathbf{r}]) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(\varphi \mathbf{n} [\mathbf{r} \times \nabla_{\mathbf{r}}])^j}{j!} \psi(\mathbf{r}). \quad (153)$$

$$\hat{R}_{\mathbf{n}}(\varphi) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \varphi \mathbf{n} \hat{\mathbf{L}}\right). \quad (154)$$

Оператор орбитального момента

Оператор момента в сферических координатах



$$x = r \sin \theta \cos \varphi,$$

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

$$z = r \cos \theta.$$

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (155)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (156)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (157)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\Omega}, \quad (158)$$

$$\Delta_{\Omega} = \frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (159)$$

Оператор орбитального момента

Задача на СВ и СЗ оператора \hat{L}^2

Алгебраическая форма

$$\hat{L}^2|\Psi\rangle = L^2|\Psi\rangle. \quad (160)$$

Постановка в форме дифференциального уравнения

$$\Psi = \Psi(\theta, \varphi) \equiv \langle \theta, \varphi | \Psi \rangle,$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \lambda \Psi = 0, \quad \lambda = \frac{L^2}{\hbar^2}. \quad (161)$$

Решение

$$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1), \quad (162)$$

$$\Psi_{\ell m} = Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad m = \underbrace{-\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell}_{2\ell + 1}. \quad (163)$$

Оператор орбитального момента

Свойства СФ и СЗ оператора \hat{L}^2

Ортогональность сферических функций

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}. \quad (164)$$

Чётность состояний с определённым ℓ

$$\hat{P}\Psi_{\ell m}(r, \theta, \varphi) \equiv \Psi_{\ell m}(r, \pi - \theta, \varphi + \pi) = P\Psi_{\ell m}(r, \theta, \varphi). \quad (165)$$

$$P = (-1)^\ell. \quad (166)$$

Вырождение СЗ

$$\hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \implies L_z = \hbar m. \quad (167)$$

Оператор орбитального момента

Задача на СЗ оператора \hat{j}^2

Оператор углового момента, выраженный в единицах \hbar

$$\hat{\ell} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}, \quad \hat{\ell} \longrightarrow \hat{\mathbf{j}}. \quad (168)$$

$$\boxed{[\hat{j}_k, \hat{j}_m] = i \varepsilon_{kmn} \hat{j}_n, \quad [\hat{j}_k, \hat{j}^2] = 0.} \quad (169)$$

Оператор орбитального момента

Задача на СЗ оператора \hat{j}^2

Оператор углового момента, выраженный в единицах \hbar

$$\hat{\ell} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}, \quad \hat{\ell} \longrightarrow \hat{\mathbf{j}}. \quad (168)$$

$$\boxed{[\hat{j}_k, \hat{j}_m] = i \varepsilon_{kmn} \hat{j}_n, \quad [\hat{j}_k, \hat{j}^2] = 0.} \quad (169)$$

Задача на СЗ операторов \hat{j}^2 и \hat{j}_z

$$\hat{j}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda |\lambda, m\rangle, \quad \hat{j}_z |\lambda, m\rangle = m |\lambda, m\rangle. \quad (170)$$

“Повышающий” и “понижающий” операторы

$$\hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y, \quad \hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y. \quad (171)$$

Оператор орбитального момента

Действие операторов \hat{j}_{\pm} на векторы $|\lambda, m\rangle$

Рассмотрим коммутатор $[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}]$:

$$\hat{j}_z \hat{j}_{\pm} - \hat{j}_{\pm} \hat{j}_z = [\hat{j}_z, \hat{j}_x] \pm i [\hat{j}_z, \hat{j}_y] = \overbrace{i \hat{j}_y \pm \hat{j}_x}^{\pm \hat{j}_{\pm}}, \quad (172)$$

$$\hat{j}_z \hat{j}_{\pm} = \hat{j}_{\pm} (\hat{j}_z \pm 1), \quad (173)$$

$$\hat{j}_z (\hat{j}_{\pm} |\lambda, m\rangle) = (m \pm 1) (\hat{j}_{\pm} |\lambda, m\rangle). \quad (174)$$

Оператор орбитального момента

Действие операторов \hat{j}_{\pm} на векторы $|\lambda, m\rangle$

Рассмотрим коммутатор $[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}]$:

$$\hat{j}_z \hat{j}_{\pm} - \hat{j}_{\pm} \hat{j}_z = [\hat{j}_z, \hat{j}_x] \pm i [\hat{j}_z, \hat{j}_y] = \overbrace{i \hat{j}_y \pm \hat{j}_x}^{\pm \hat{j}_{\pm}}, \quad (172)$$

$$\hat{j}_z \hat{j}_{\pm} = \hat{j}_{\pm} (\hat{j}_z \pm 1), \quad (173)$$

$$\hat{j}_z (\hat{j}_{\pm} |\lambda, m\rangle) = (m \pm 1) (\hat{j}_{\pm} |\lambda, m\rangle). \quad (174)$$

$$\hat{j}_+ |\lambda, m-1\rangle = \alpha_m |\lambda, m\rangle, \quad (175)$$

$$\hat{j}_- |\lambda, m\rangle = \beta_m |\lambda, m-1\rangle. \quad (176)$$

Оператор орбитального момента

Действие операторов \hat{j}_{\pm} на векторы $|\lambda, m\rangle$

Рассмотрим коммутатор $[\hat{j}_z, \hat{j}_{\pm}]$:

$$\hat{j}_z \hat{j}_{\pm} - \hat{j}_{\pm} \hat{j}_z = [\hat{j}_z, \hat{j}_x] \pm i [\hat{j}_z, \hat{j}_y] = \overbrace{i \hat{j}_y \pm \hat{j}_x}^{\pm \hat{j}_{\pm}}, \quad (172)$$

$$\hat{j}_z \hat{j}_{\pm} = \hat{j}_{\pm} (\hat{j}_z \pm 1), \quad (173)$$

$$\hat{j}_z (\hat{j}_{\pm} |\lambda, m\rangle) = (m \pm 1) (\hat{j}_{\pm} |\lambda, m\rangle). \quad (174)$$

$$\hat{j}_+ |\lambda, m-1\rangle = \alpha_m |\lambda, m\rangle, \quad (175)$$

$$\hat{j}_- |\lambda, m\rangle = \beta_m |\lambda, m-1\rangle. \quad (176)$$

$$\alpha_m^* = \langle \lambda, m | \hat{j}_+ | \lambda, m-1 \rangle^* = \langle \lambda, m-1 | \hat{j}_- | \lambda, m \rangle = \beta_m. \quad (177)$$

Так как состояния $|\psi\rangle$ и $e^{i\delta}|\psi\rangle$ эквивалентны $\forall \delta \in \mathbb{R}$, то подбором δ всегда можно добиться того, чтобы $\alpha_m \in \mathbb{R}$ и $\alpha_m = \beta_m$. Тогда

$$\hat{j}_+ |\lambda, m-1\rangle = \alpha_m |\lambda, m\rangle, \quad \hat{j}_- |\lambda, m\rangle = \alpha_m |\lambda, m-1\rangle. \quad (178)$$

Оператор орбитального момента

Ограниченность спектра \hat{j}_z

Так как

$$\lambda = \langle \lambda, m | \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 | \lambda, m \rangle = m^2 + a + b, \quad (179)$$

$$a = \langle \lambda, m | \hat{j}_x^2 | \lambda, m \rangle \geq 0,$$

$$b = \langle \lambda, m | \hat{j}_y^2 | \lambda, m \rangle \geq 0,$$

то $\lambda \geq m^2$, а значит значения m для всякого λ ограничены сверху и снизу

$$\mu_\lambda \leq m \leq M_\lambda, \quad (180)$$

причём

$$\hat{j}_+ | \lambda, M_\lambda \rangle = 0, \quad \hat{j}_- | \lambda, \mu_\lambda \rangle = 0. \quad (181)$$

Оператор орбитального момента

Решение для λ

Вспомогательные операторы

$$\hat{j}_- \hat{j}_+ = \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z, \quad (182)$$

$$\hat{j}_+ \hat{j}_- = \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z. \quad (183)$$

Действуя оператором (182) на вектор $|\lambda, M_\lambda\rangle$ и (183) на $|\lambda, \mu_\lambda\rangle$, получаем

$$\lambda - M_\lambda^2 - M_\lambda = 0, \quad (184)$$

$$\lambda - \mu_\lambda^2 + \mu_\lambda = 0. \quad (185)$$

Избавляемся в последних двух уравнениях от λ

$$(M_\lambda - \mu_\lambda + 1)(M_\lambda + \mu_\lambda) = 0. \quad (186)$$

Так как по условию (180) $M_\lambda \geq \mu_\lambda$, то

$$M_\lambda = -\mu_\lambda = j \implies \boxed{\lambda = j(j+1)}. \quad (187)$$

Оператор орбитального момента

Окончательные результаты для m

Как следует из (180) и (187), при любом заданном λ проекция момента m принимает $2j + 1$ отличающихся на единицу значения

$$m = \underbrace{-j, -j + 1, \dots, 0, \dots, j - 1, j}_{2j+1}. \quad (188)$$

В силу этого разность $M_\lambda - \mu_\lambda = 2j$ — есть целое число.

Таким образом, собственные значения проекции момента j_z (а значит и j) могут быть

- целыми $m = k, k \in \mathbb{Z}$;
- полуцелыми $m = k + \frac{1}{2}, k \in \mathbb{Z}$.

Оператор орбитального момента

Матричные элементы операторов \hat{j}_{\pm} в базисе $|j, m\rangle$

Из (178) и (182), (183) имеем

$$\hat{j}_- \hat{j}_+ |j, m-1\rangle = \alpha_m \hat{j}_- |j, m\rangle = \alpha_m^2 |j, m-1\rangle, \quad (189)$$

$$j(j+1) - (m-1)^2 - (m-1) = \alpha_m^2, \quad (190)$$

$$\boxed{\alpha_m = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}}. \quad (191)$$

Подставляя последнее в (178), получаем

$$\hat{j}_+ |j, m-1\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m\rangle. \quad (192)$$

Таким образом, матричный элемент оператора \hat{j}_+ есть

$$\langle j, n | \hat{j}_+ | j, m-1 \rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{n,m}. \quad (193)$$

Аналогично

$$\langle j, n | \hat{j}_- | j, m \rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{n,m-1}. \quad (194)$$

Оператор орбитального момента

Матричные элементы операторов \hat{j}_x и \hat{j}_y в базисе $|j, m\rangle$

Возвращаясь к определению (171), несложно получить матричные элементы

$$\langle j, m | \hat{j}_x | j, m - 1 \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j + m)(j - m + 1)}, \quad (195)$$

$$\langle j, m | \hat{j}_y | j, m - 1 \rangle = -\frac{i}{2} \sqrt{(j + m)(j - m + 1)}. \quad (196)$$

Оператор орбитального момента

Пример $j = 1$

В этом случае пространство квантовых состояний углового момента трёхмерно, так как $2j + 1 = 3$.

Базисные векторы: $|+\rangle \equiv |1, +1\rangle$, $|0\rangle \equiv |1, 0\rangle$ и $|-\rangle \equiv |1, -1\rangle$

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (197)$$

Матрицы основных операторов

$$\hat{j}^2 = 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{j}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (198)$$

$$\hat{j}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{j}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (199)$$

Оператор орбитального момента

Контрольные вопросы и задания

- 1 Докажите эрмитовость оператора \hat{L} , определённого согласно (147).
- 2 Проверьте коммутационные соотношения (150).
- 3 Выведите соотношения (155)–(158), приведённые на слайде 85.
- 4 Найдите возможные собственные значения оператора

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

и их вероятности для частицы, находящейся в состояниях:

$$\psi(\varphi) = A \sin^3 \varphi; \quad \psi(\varphi) = A(2 - \cos 4\varphi).$$

- 5 Найдите среднее значение квадрата момента импульса $\langle L^2 \rangle$ частицы, находящейся в состоянии

$$\psi(\theta, \varphi) = A \sin \theta \cos \varphi.$$

- 6 Покажите, что равенство (162) получается с помощью элементарных формул теории вероятностей, исходя из того, что возможные проекции момента на произвольную ось равны m ($m = -l, -l + 1, \dots, l$) и все эти значения проекции момента равновероятны, а оси равноправны.
- 7 Докажите тождества (182) и (183).

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Рассмотрим дифференциальное уравнение

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \lambda \Psi = 0. \quad (200)$$

Требуется найти его **непрерывные, однозначные и ограниченные** решения $\Psi(\theta, \varphi)$ во всей области $0 \leq \theta \leq \pi$; $0 \leq \varphi < 2\pi$, а также те собственные значения λ , при которых эти решения могут существовать.

Сферические функции

Разделение переменных и задача для функции $\Phi(\varphi)$

Разделение переменных

$$\Psi(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi). \quad (201)$$

Подстановка (201) в (200) приводит к разделению переменных:

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2 \theta = \frac{1}{\Phi} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -m^2. \quad (202)$$

Задача для функции $\Phi(\varphi)$

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi = 0. \quad (203)$$

$$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}. \quad (204)$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (205)$$

Сферические функции

Задача для функции $\Theta(\theta)$

Подставляем (204) в (200) и делим на $\Phi_m(\varphi)$:

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta + \lambda \Theta = 0. \quad (206)$$

Сферические функции

Задача для функции $\Theta(\theta)$

Подставляем (204) в (200) и делим на $\Phi_m(\varphi)$:

$$\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta + \lambda \Theta = 0. \quad (206)$$

Вводим вместо θ новую переменную:

$$\xi = \cos \theta, \quad -1 \leq \xi \leq +1, \quad d\xi = -\sin \theta d\theta. \quad (207)$$

и рассмотрим функцию $\Theta(\xi(\theta))$. Тогда из (206):

$$\begin{aligned} -\frac{d}{d\xi} \left(-\sin^2 \theta \frac{d\Theta}{d\xi} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta + \lambda \Theta &= 0, \\ \frac{d}{d\xi} \left((1 - \xi^2) \frac{d\Theta}{d\xi} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) \Theta &= 0, \\ \boxed{(1 - \xi^2)\Theta'' - 2\xi\Theta' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right) \Theta} &= 0. \end{aligned} \quad (208)$$

Сферические функции

Решение $\Theta(\xi)$ вблизи особой точки $\xi = +1$

Рассмотрим поведение решения $\Theta(\xi)$ вблизи особых точек уравнения $\xi = \pm 1$. Сначала выберем точку $\xi = +1$ и сделаем замену переменной

$$z = \xi - 1. \quad (209)$$

Тогда из (208) получаем:

$$\left[1 - (z + 1)^2\right] \Theta'' - 2(z + 1)\Theta' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1 - (z + 1)^2}\right) \Theta = 0,$$

После деления этого уравнения на $-z(z + 2)$ имеем:

$$\Theta'' + \frac{2(z + 1)}{z(z + 2)}\Theta' - \left[\frac{\lambda}{z(z + 2)} + \frac{m^2}{z^2(z + 2)^2}\right] \Theta = 0. \quad (210)$$

Сферические функции

Решение $\Theta(z)$ в виде ряда по степеням z

$$\Theta(z) = z^\gamma v(z) = z^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i z^i. \quad (211)$$

При $z \rightarrow 0$: $\Theta(z) \rightarrow a_0 z^\gamma$. Подставляем это в (210) и, пренебрегая бесконечно малыми большего порядка малости, чем $z^{\gamma-2}$, получаем:

$$\gamma(\gamma-1)a_0 z^{\gamma-2} + \frac{2(z+1)}{z(z+2)} \gamma a_0 z^{\gamma-1} - \left[\frac{\lambda}{z(z+2)} + \frac{m^2}{z^2(z+2)^2} \right] a_0 z^\gamma = 0,$$

$$\gamma(\gamma-1)a_0 z^{\gamma-2} + \frac{2(z+1)\gamma - \lambda z}{(z+2)} a_0 z^{\gamma-2} - \frac{m^2}{(z+2)^2} a_0 z^{\gamma-2} = 0,$$

$$\left[\gamma(\gamma-1) + \gamma - \frac{m^2}{4} \right] a_0 z^{\gamma-2} = 0. \quad (212)$$

$$\boxed{\gamma = \pm \frac{m}{2}}. \quad (213)$$

То же значение γ получается и для разложения вблизи особой точки $\xi = -1$. Для того, чтобы решение оставалось конечным при $\xi = \pm 1$, необходимо в (211) взять

$$\boxed{\gamma = \frac{|m|}{2}}. \quad (214)$$

Таким образом, приходим к

$$\Theta(z) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} v(z), \quad (215)$$

Теперь надо перейти к v в виде ряда по ξ

$$v = \sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu} \xi^{\nu}. \quad (216)$$

Сферические функции

Требование ограниченности решения $\Theta(z)$

Подставляя (215) в (208), получаем:

$$(1 - \xi^2)v'' - 2(|m| + 1)\xi v' + (\lambda - |m| - m^2)v = 0. \quad (217)$$

Рекуррентная формула для определения коэффициентов b_ν

Подставляем ряд (216) в (217) и сравниваем коэффициенты при одинаковых степенях ξ :

$$b_{\nu+2} = \frac{\nu(\nu - 1) + 2(|m| + 1)\nu - \lambda + |m| + m^2}{(\nu + 2)(\nu + 1)} b_\nu. \quad (218)$$

Требование ограниченности решения

Для того, чтобы решение (215) было ограниченным, необходимо, чтобы ряд $v(\xi)$ обрывался на некотором $\nu = k$.

$$\lambda = k^2 + k + 2|m|k + |m| + m^2 = (k + |m|)(k + |m| + 1). \quad (219)$$

Теперь полагаем

$$\ell = k + |m|, \quad (220)$$

что позволяет записать

$$\lambda = \ell(\ell + 1), \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (221)$$

$$|m| = 0, 1, 2, \dots, \ell. \quad (222)$$

Можно доказать, что никаких других собственных значений уравнения (200) не существует!

Решение $\Theta(\xi)$, принадлежащее характеристическим числам ℓ и m , обозначим:

$$\Theta(\xi) = P_\ell^{|m|}(\xi), \quad \xi = \cos \theta. \quad (223)$$

Если дифференцировать уравнение (217) по ξ , то получится уравнение, в котором $|m| \rightarrow |m| + 1$. Поэтому, если через $P_\ell(\xi)$ обозначить решение для $m = 0$, то:

$$P_\ell^{|m|}(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \cdot \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_\ell(\xi). \quad (224)$$

Здесь $P_\ell(\xi)$ — многочлен степени ℓ , называемый многочленом (полиномом) Лежандра. Нормировочный коэффициент выбирается так, чтобы

$$P_\ell(1) = 1. \quad (225)$$

Из (218) для $|m| = 0$ получаем:

$$b_{\nu+2} = \frac{\nu(\nu+1) - \ell(\ell+1)}{(\nu+1)(\nu+2)} b_\nu. \quad (226)$$

$$P_\ell(\xi) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \cdot \frac{d^\ell}{d\xi^\ell} (\xi^2 - 1)^\ell. \quad (227)$$

Сферические функции

Сферические функции — собственные функции уравнения (200)

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \mathcal{N}_{\ell m} P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (228)$$

$$\mathcal{N}_{\ell m} = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}}. \quad (229)$$

Сферические функции

Сферические функции — собственные функции уравнения (200)

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm} P_{\ell}^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (228)$$

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}}. \quad (229)$$

Разложение в ряд по сферическим гармоникам

$$\psi(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} C_{\ell m} Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (230)$$

$$C_{\ell m} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \psi(\theta, \varphi) Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta. \quad (231)$$

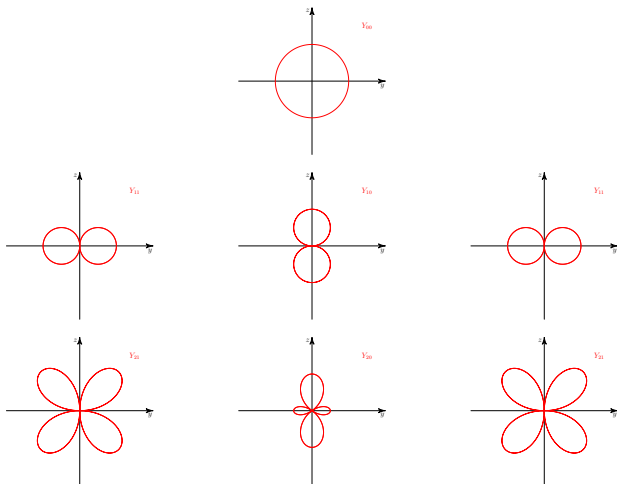


Рис. 12 : Сечения нескольких первых сферических гармоник плоскостью Oyz

Умножение на $\xi = \cos \theta$ или $\sqrt{1 - \xi^2} = \sin \theta$

$$\begin{aligned} \xi Y_{lm} = & \sqrt{\frac{(\ell + m + 1)(\ell - m + 1)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}} Y_{\ell+1, m+} \\ & + \sqrt{\frac{(\ell + m)(\ell - m)}{(2\ell + 1)(2\ell - 1)}} Y_{\ell-1, m}, \end{aligned} \quad (232)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{1 - \xi^2} Y_{lm} = & \left\{ \sqrt{\frac{(\ell + m)(\ell + m - 1)}{(2\ell + 1)(2\ell - 1)}} Y_{\ell-1, m-1-} \right. \\ & \left. - \sqrt{\frac{(\ell - m + 1)(\ell - m + 2)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}} Y_{\ell+1, m-1} \right\} e^{i\varphi}. \end{aligned} \quad (233)$$

Действие операторов проекций углового момента

$$\hat{L}_z Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}, \quad (234)$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ Y_{\ell m} &\equiv (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) Y_{\ell m} = \\ &= -\hbar \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} Y_{\ell, m+1}, \end{aligned} \quad (235)$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_- Y_{\ell m} &\equiv (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) Y_{\ell m} = \\ &= -\hbar \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} Y_{\ell, m-1}. \end{aligned} \quad (236)$$

- 1 Почему собственные значения m уравнения (203) согласно (205) принимают только целые значения?
- 2 Образуют ли сферические функции (228) ортогональную систему функций?
- 3 Вычислите нормировочную константу (229).
- 4 Непосредственным вычислением проверьте равенства (234)–(236).
- 5 Найти СФ операторов квадрата момента частицы и его проекции на ось Oz в импульсном представлении следующими двумя способами:
а) непосредственно из решения задачи на СФ и СЗ операторов \hat{L} и \hat{L}_z в импульсном представлении; б) используя соотношение между волновыми функциями в \mathbf{r} - и \mathbf{p} -представлениях.
- 6 В состоянии частицы, характеризующемся угловой зависимостью ВФ вида $\Psi = A \cos^n \varphi$ (φ — угол поворота относительно некоторой оси Oz , n — целое), найти вероятности различных значений m проекции момента на ось Oz .
- 7 В состоянии частицы, ВФ которого имеет угловую зависимость вида $\Psi = A \exp(2i\varphi)$ (φ — азимутальный угол сферической системы координат), найти вероятности различных значений ℓ момента частицы.

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - **Разделение переменных в задаче двух тел**
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Разделение переменных в задаче двух тел

Гамильтониан системы двух тел

Исходный двухчастичный гамильтониан

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}_1}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2}{2m_2} + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_{\mathbf{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_{\mathbf{r}_2} + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).\end{aligned}\quad (237)$$

Замена переменных

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (238)$$

$$M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (239)$$

Конечный гамильтониан

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}). \quad (240)$$

Задача на СФ и СЗ гамильтониана двухчастичной системы

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (241)$$

Разложение двухчастичного гильбертова пространства

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^6) = L^2(\mathbb{R}^3, d^3\mathbf{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}^3, d^3\mathbf{r}). \quad (242)$$

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}). \quad (243)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{R}} + \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{r}}, \quad (244)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{R}} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}}, \quad \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{r}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}). \quad (245)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{R}) = E_1\Psi(\mathbf{R}), \quad (246)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = E_2\psi(\mathbf{r}). \quad (247)$$

$$E = E_1 + E_2. \quad (248)$$

$$\Psi(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}, \quad \mathbf{k}^2 = \frac{2ME_1}{\hbar^2}, \quad \forall E_1 \geq 0. \quad (249)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{r}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + U(\mathbf{r}) = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + U(\mathbf{r}). \quad (250)$$

Разделение переменных в задаче двух тел

Контрольные вопросы и задания

- 1 Преобразуйте гамильтониан (237) к виду (240), используя замену переменных (238)–(239).
- 2 Система состоит из двух частиц, массы которых равны m_1 и m_2 . Выразите оператор суммарного орбитального момента $\hat{\mathbf{L}}_1 + \hat{\mathbf{L}}_2$ через переменные (238)–(239).
- 3 Убедитесь в справедливости решения (249) задачи (246), описывающей движение центра масс системы.
- 4 Что такое \hat{T}_r , фигурирующее в равенстве (250), и каков его явный вид?
- 5 Две частицы, связанные друг с другом упругой силой $F = k(x_1 - x_2)$ (одномерная задача), свободно передвигаются вдоль оси Ox . Найдите стационарную волновую функцию и спектр энергии системы.

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Движение в поле центральной силы

Стационарное уравнение Шрёдингера в центральном силовом поле

Гамильтониан частицы массой μ в центральном силовом поле

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + U(r), \quad (251)$$

Стационарное уравнение Шрёдингера в поле центральной силы

$$\hat{T}_r \psi + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} \psi + U(r) \psi = E \psi. \quad (252)$$

Будем решать уравнение (252) в сферической системе координат: $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$. Мы должны найти однозначные, непрерывные и ограниченные решения уравнения (252) во всём конфигурационном пространстве: $0 \leq r < \infty$; $0 \leq \theta \leq \pi$; $0 \leq \varphi < 2\pi$.

Движение в поле центральной силы

Уравнение Шрёдингера для радиальной части волновой функции

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}^2] = 0 \implies \hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi, \quad \hat{L}^2\psi = \hbar^2\ell(\ell + 1)\psi. \quad (253)$$

Уравнение (252) принимает вид:

$$\hat{T}_r\psi + \frac{\hbar^2\ell(\ell + 1)}{2\mu r^2}\psi + U(r)\psi = E\psi. \quad (254)$$

Радиальное уравнение Шрёдингера

Полагаем

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (255)$$

где $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ — СФ оператора \hat{L}^2 .

$$(254) \implies \boxed{\hat{T}_r R + \frac{\hbar^2\ell(\ell + 1)}{2\mu r^2}R + U(r)R = ER.} \quad (256)$$

Движение в поле центральной силы

Характер взаимодействия частиц в реальных физических системах

Взаимодействие на бесконечно больших расстояниях

$$U(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \text{const} = C, \quad (257)$$

где C — постоянная, определяющая уровень потенциальной энергии на бесконечности. В силу её произвольности мы будем полагать $C = 0$ и различать два случая:

- $E > 0$;
- $E < 0$.

Взаимодействие вблизи силового центра

Будем считать, что $U(r)$ имеет в нуле полюс, порядок которого меньше двух:

$$U(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{A}{r^\alpha}, \quad \alpha < 2. \quad (258)$$

Запишем решение уравнения (256) в виде:

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}. \quad (259)$$

Подставляем (259) в (256) и, используя явный вид радиальной части оператора Лапласа:

$$\hat{T}_r R = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dr^2}, \quad (260)$$

получаем:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2\mu r^2} u + U(r)u = Eu.} \quad (261)$$

Движение в поле центральной силы

Асимптотики при $r \rightarrow \infty$

При этом можно пренебречь слагаемым $\sim 1/r^2$ и, считая, что в (257) $C = 0$, получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} = Eu. \quad (262)$$

- $E > 0$: $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$, $u(r) = C_1 e^{ikr} + C_2 e^{-ikr}$;
- $E < 0$: $\lambda^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$, $u(r) = C_1 e^{-\lambda r} + C_2 e^{\lambda r}$.

Таким образом, общее решение (256) при $r \rightarrow \infty$ имеет вид:

$$R(r) = C_1 \frac{e^{ikr}}{r} + C_2 \frac{e^{-ikr}}{r} \quad (E > 0), \quad (263)$$

$$R(r) = C_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r} + C_2 \frac{e^{\lambda r}}{r} \quad (E < 0). \quad (264)$$

Движение в поле центральной силы

Поведение асимптотических решений на бесконечности при $E > 0$

При $E > 0$ решение (263) конечно и непрерывно при любых значениях C_1 и C_2 и представляет собой суперпозицию сходящихся и расходящихся сферических волн. Вероятность найти частицу в шаровом слое между r и $r + dr$:

$$\omega(r) dr = |R|^2 4\pi r^2 dr = 4\pi \left| C_1 e^{ikr} + C_2 e^{-ikr} \right|^2 dr. \quad (265)$$

Такие состояния — суть аperiодические орбиты классической механики, когда частица движется из бесконечности к центру сил и опять уходит на бесконечность. В силу стационарности рассматриваемого состояния, поток входящих частиц равен потоку уходящих частиц, т. е. $|C_1| = |C_2|$.

Выбирая $C_1 = \frac{A}{2i} e^{i\alpha}$, $C_2 = -\frac{A}{2i} e^{-i\alpha}$, где A и $\alpha \in \mathbb{R}$, получаем асимптотику (263) в форме стоячей сферической волны:

$$R(r) = A \frac{\sin(kr + \alpha)}{r}. \quad (266)$$

Движение в поле центральной силы

Поведение асимптотических решений на бесконечности при $E < 0$

В этом случае необходимо положить $C_2 = 0$, иначе при $r \rightarrow \infty$ решение будет неограниченным $R \rightarrow \infty$. Поэтому

$$R(r) = C_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r}. \quad (267)$$

Вероятность найти частицу в шаровом слое между r и $r + dr$:

$$\omega(r) dr = 4\pi |C_1|^2 e^{-2\lambda r} dr, \quad (268)$$

при этом $\omega(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$, т. е. частицу можно найти лишь вблизи центра сил (финитное движение). Такие состояния соответствуют периодическим орбитам в классической механике.

Движение в поле центральной силы

Поведение решений вблизи силового центра, т. е. при $r \rightarrow 0$

Будем искать $u(r)$ в виде степенного ряда:

$$u(r) = r^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i. \quad (269)$$

Подставляем (269) в (261). Тогда низшей степенью r будет $r^{\gamma-2}$ или $r^{\gamma-\alpha}$. Согласно (258) $\alpha < 2$, а значит $r^{\gamma-2}$ — низшая степень r и при $r \rightarrow 0$ этот член даёт наибольший вклад в ряд, поэтому:

$$[\gamma(\gamma - 1) - \ell(\ell + 1)] r^{\gamma-2} + \dots = 0, \quad (270)$$

$$\gamma(\gamma - 1) = \ell(\ell + 1). \quad (271)$$

Это уравнение имеет два корня $\gamma = \ell + 1$, $\gamma = -\ell$, а значит при $r \rightarrow 0$ решение $R = u/r$ имеет вид:

$$R = C'_1 r^\ell \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i + C'_2 r^{-\ell-1} \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i, \quad \forall C'_1, C'_2 \in \mathbb{C}. \quad (272)$$

В силу конечности R при $r \rightarrow 0$ необходимо положить $C_2' = 0$.

$$R = C_1' r^\ell \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i. \quad (273)$$

При $r \rightarrow \infty$ это частное решение перейдёт либо в (263) при $E > 0$, либо в (264) при $E < 0$. Полагая $C_2' = 0$, мы выбираем частное решение уравнения (261). Поэтому коэффициенты C_1 и C_2 в (263) или (264) уже будут находиться в определённом отношении друг к другу (абсолютная величина этих коэффициентов не имеет значения, т. к. уравнение (261) — однородное). Это отношение зависит только от параметров уравнения (261), в частности от E . Таким образом, имеем:

$$\frac{C_2}{C_1} = f(E), \quad (274)$$

где $f(E)$ — некая функция, зависящая от вида $U(r)$.

Движение в поле центральной силы

Энергетический спектр при $E > 0$

Если $E > 0$, то оба частных решения уравнения (261) конечны, поэтому при любом отношении C_2/C_1 решение (263) является допустимым. Значит на отношение C_2/C_1 не должно накладываться больше никаких дополнительных условий, кроме того, чтобы данное C_2/C_1 удовлетворяло требованию $C_2' = 0$. При этом параметр E может иметь любое значение! Отсюда следует, что при $E > 0$ энергия не квантуется, а может принимать любое значение $0 \leq E < +\infty$, что соответствует непрерывному спектру энергий.

Движение в поле центральной силы

Энергетический спектр при $E < 0$

В данной ситуации из требования $C_2' = 0$ не следует $C_2 = 0$, так что в общем случае при конечном в нуле R решение может неограниченно возрастать на бесконечности. Чтобы этого избежать, нужно дополнительно потребовать $C_2 = 0$, что накладывает ограничение на возможные значения энергии E :

$$\boxed{\frac{C_2}{C_1} = f(E) = 0.} \quad (275)$$

В общем случае (275) — это некое трансцендентное уравнение для E , корни которого:

$$E = E_1, E_2, \dots, E_n \quad (276)$$

будут СЗ оператора энергии, т. к. только при этих значениях E решение R конечно и при $r = 0$, и при $r = \infty$. Т. о. при $E < 0$ получается дискретный спектр возможных значений энергии — система квантовых уровней.

Движение в поле центральной силы

Простейшие примеры: кулоновское отталкивание заряженных частиц

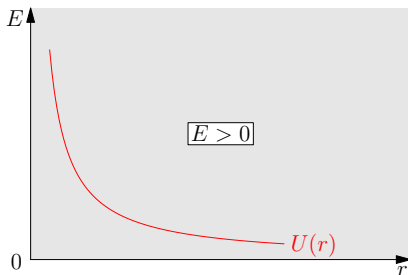


Рис. 13 : Сплошной спектр энергии при кулоновском отталкивании

$$U(r) = + \frac{|q_1| \cdot |q_2|}{r}.$$

В этом случае энергия частицы строго положительна:

$$E = \frac{1}{2\mu} \langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle + \langle \psi | U(\hat{r}) | \psi \rangle > 0,$$

а значит спектр энергий — непрерывный.

Движение в поле центральной силы

Простейшие примеры: кулоновское притяжение

$$U(r) = -\frac{|q_1| \cdot |q_2|}{r}.$$

При этом есть две возможности:
 $E > 0$ и $E < 0$.

Величина $E_i = 0 - E_1 = -E_1$
называется энергией ионизации.

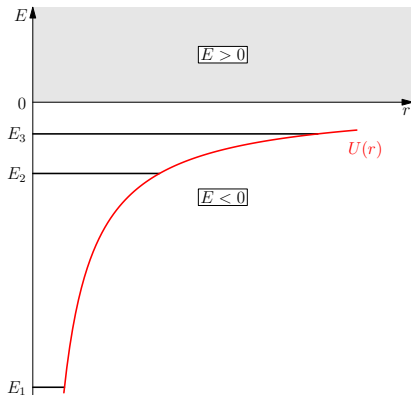


Рис. 14 : Смешанный спектр

Движение в поле центральной силы

Простейшие примеры: потенциальная энергия двухатомных молекул АВ

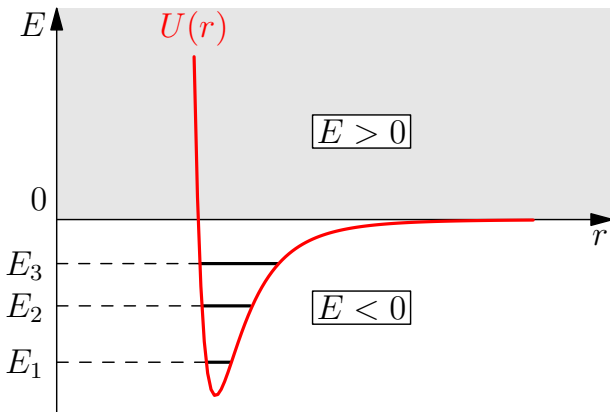


Рис. 15 : Характер спектра в случае двухатомной молекулы

Величина $D = -E_1$ — есть энергия диссоциации молекулы.

- 1 Чем гамильтониан (251) принципиально отличается от гамильтониана (250)?
- 2 Как изменится решение (272) в случае $\alpha \geq 2$?
- 3 Определите уровни энергии частицы, находящейся в сферически симметричном потенциальном ящике с бесконечными стенками и радиусом R .
- 4 Для частицы в сферически симметричном поле вычислите квадрупольный момент в случае состояния с определёнными значениями квадрата момента и его проекции на ось Oz .
- 5 Найдите уровни энергии и собственные функции трёхмерного гармонического осциллятора с потенциальной энергией вида

$$U(\mathbf{r}) = \frac{m\omega_1^2 x^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 y^2}{2} + \frac{m\omega_3^2 z^2}{2}.$$

Рассмотрите случай изотропного осциллятора.

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - **Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр**
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Радиальное уравнение Шрёдингера в случае кулоновского притяжения

Радиальное уравнение Шрёдингера (261) в кулоновском поле

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (277)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} u - \frac{Ze^2}{r} u = Eu. \quad (278)$$

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Радиальное уравнение Шрёдингера в случае кулоновского притяжения

Радиальное уравнение Шрёдингера (261) в кулоновском поле

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (277)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} u - \frac{Ze^2}{r} u = Eu. \quad (278)$$

Атомные единицы длины и энергии

$$\rho = \frac{r}{a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ см}. \quad (279)$$

$$\varepsilon = \frac{E}{E_0}, \quad E_0 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a_0} = 13.55 \text{ эВ}. \quad (280)$$

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Радиальное уравнение Шрёдингера и его асимптотическое решение

Подставляя (279) и (280) в (278) и умножая на $-\frac{2\hbar^2}{\mu e^4}$, получаем радиальное уравнение Шрёдингера в безразмерной форме

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left(\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) u = 0. \quad (281)$$

В соответствии с анализом асимптотического поведения функции $u(\rho)$, проведённым на слайдах 122 и 124, будем искать её в виде:

$$u(\rho) = e^{-\alpha\rho} f(\rho), \quad \alpha = \sqrt{-\varepsilon} > 0, \quad (282)$$

где $f(\rho)$ — новая искомая функция. Для её определения подставляем (282) в (281) и получаем

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{df}{d\rho} + \left(\frac{2Z}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) f = 0. \quad (283)$$

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Решение уравнения (283) для функции $f(\rho)$

Решение уравнения (283) будем искать в виде ряда по степеням ρ . В соответствии с (273), конечное при $r \rightarrow 0$ решение — это ряд, начинающийся с элемента $\rho^{\ell+1}$, поэтому

$$f(\rho) = \rho^{\ell+1} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{\nu}. \quad (284)$$

Ряд (284) должен быть таким, чтобы функция

$$|R(\rho)| = \left| \frac{e^{-\alpha\rho} f(\rho)}{\rho} \right| < \infty \quad (285)$$

оставалась ограниченной при $r \rightarrow \infty$.

Для определения коэффициентов ряда (284) подставим его в (283) и приведём коэффициенты при одинаковых степенях ρ :

$$\sum_{\nu} \{ a_{\nu+1} [(\nu + \ell + 2)(\nu + \ell + 1) - \ell(\ell + 1)] + a_{\nu} [2Z - 2\alpha(\nu + \ell + 1)] \} \rho^{\nu+\ell} = 0. \quad (286)$$

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Рекуррентная формула для коэффициентов ряда (284)

Для того чтобы ряд (284) был решением уравнения (283), необходимо, чтобы (286) было справедливо для $\forall \rho \in [0, \infty)$. Это возможно тогда и только тогда, когда коэффициенты при всех степенях ρ одновременно равны нулю:

$$a_{\nu+1} [(\nu + \ell + 2)(\nu + \ell + 1) - \ell(\ell + 1)] + a_{\nu} [2Z - 2\alpha(\nu + \ell + 1)] = 0.$$

Таким образом, приходим к рекуррентной формуле, связывающей коэффициенты $a_{\nu+1}$ с a_{ν}

$$a_{\nu+1} = \frac{2\alpha(\nu + \ell + 1) - 2Z}{(\nu + \ell + 2)(\nu + \ell + 1) - \ell(\ell + 1)} a_{\nu}, \quad \nu = 0, 1, \dots \quad (287)$$

С помощью (287) можно выразить все коэффициенты ряда (284), но a_0 остаётся, вообще говоря, произвольным, так как исходное уравнение (283) — однородное. Произвол в выборе a_0 устраняется с помощью условия нормировки.

Замечание 3

Подробный анализ показывает, что построенный с помощью рекуррентной формулы (287) ряд (284) сходится при всех значениях ρ , но при больших ρ растёт столь сильно, что условие ограниченности (285) не выполняется.

Таким образом, как и следует из общей теории, изложенной на слайде 128, решение конечное при $\rho = 0$, вообще говоря, не будет конечным при $\rho \rightarrow \infty$.

Для того, чтобы сделать решение конечным и при $\rho \rightarrow \infty$, необходимо “оборвать ряд” (284) на каком-нибудь слагаемом. Тогда $f(\rho)$ будет многочленом некоторой степени n_k и условие ограниченности (285) окажется выполненным.

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Требование ограниченности решения и энергетический спектр

“Обрыв ряда” на слагаемом номера n_k может произойти лишь при определённом значении α . Действительно, пусть $a_{n_k} \neq 0$, а $a_{n_k+1} = 0$. Тогда из (287) имеем

$$\alpha(n_k + \ell + 1) - Z = 0 \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\alpha = \frac{Z}{n_k + \ell + 1}}. \quad (288)$$

Равенство (288) — это необходимое и достаточное условие того, чтобы решение $f(\rho)$ обращалось в многочлен, а функция $R(\rho)$ оставалась бы всюду конечной.

Вводя обозначение

$$\boxed{n = n_k + \ell + 1} \quad (289)$$

и возвращаясь с помощью (282) от α от ε , получаем

$$\varepsilon = -\frac{Z^2}{n^2}. \quad (290)$$

Подставляя (280) в (290), получаем, что непрерывные, конечные и ограниченные решения $R(\rho)$ радиального уравнения Шрёдингера существуют только при следующих значениях энергии

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2}, \quad (291)$$

где согласно (289)

$$n = 1, 2, 3, \dots \iff \forall n \in \mathbb{N}.$$

Число n определяет энергию водородоподобного атома и называется главным квантовым числом. По своему определению радиальное квантовое число $n_k \in \mathbb{N}_0$. При этом из (289) следует, что

$$\ell = n - n_k - 1 \leq n - 1. \quad (292)$$

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Явный вид членов ряда (284)

Подставляя согласно (288) $\alpha = \frac{Z}{n}$ в (287), получаем

$$a_{\nu+1} = -\frac{2Z}{n} \cdot \frac{n - (\nu + \ell + 1)}{(\nu + 1)(\nu + 2\ell + 2)} a_{\nu}. \quad (293)$$

Таким образом, ряд (284) принимает вид

$$\begin{aligned} f(\rho) = a_0 \rho^{\ell+1} & \left\{ 1 - \frac{n - \ell - 1}{1!(2\ell + 2)} \left(\frac{2Z\rho}{n} \right) + \right. \\ & + \frac{(n - \ell - 1)(n - \ell - 2)}{2!(2\ell + 2)(2\ell + 3)} \left(\frac{2Z\rho}{n} \right)^2 + \dots + \\ & \left. + \frac{(n - \ell - 1)(n - \ell - 2) \cdot \dots \cdot 1}{n_k!(2\ell + 2)(2\ell + 3) \cdot \dots \cdot (2\ell + 2 + n_k)} \left(\frac{2Z\rho}{n} \right)^{n_k} \right\}. \end{aligned} \quad (294)$$

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Явный вид радиальной функции R

Удобно ввести новую безразмерную переменную

$$\xi = \frac{2Z\rho}{n}. \quad (295)$$

Тогда, подставляя (294) в $R(\rho) = \frac{e^{-\alpha\rho} f(\rho)}{\rho}$ и используя (288) и (295), а также объединяя все постоянные множители в один фактор \mathcal{N}_{nl} , получаем, что функция $R_{nl}(\xi)$, принадлежащая квантовым числам n и ℓ , имеет вид

$$R_{nl}(\xi) = \mathcal{N}_{nl} e^{-\xi/2} \xi^\ell L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\xi). \quad (296)$$

Через $L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\xi)$ обозначен многочлен, стоящий в фигурных скобках в (294) и совпадающий с точностью до постоянного множителя с обобщённым многочленом (полиномом) Лагерра

$$L_k^{(s)}(x) = \frac{x^{-s} e^x}{k!} \cdot \frac{d^k}{dx^k} \left(x^{k+s} e^{-x} \right). \quad (297)$$

Ортогональность

Обобщённые полиномы Лагерра ортогональны на интервале $[0, +\infty)$ с весом $x^s e^{-x}$

$$\int_0^{\infty} x^s e^{-x} L_i^{(s)}(x) L_j^{(s)}(x) dx = \frac{(i+s)!}{i!} \delta_{ij}. \quad (298)$$

Рекуррентная формула

Для обобщённых полиномов Лагерра справедливо рекуррентное соотношение

$$x L_k^{(s)} = (2k + s + 1) L_k^{(s)} - (k + 1) L_{k+1}^{(s)} - (k + s) L_{k-1}^{(s)}. \quad (299)$$

Нормировочный множитель $\mathcal{N}_{n\ell}$ в (296) определяется так, чтобы

$$\int_0^{\infty} r^2 R_{n\ell}(r) dr = 1. \quad (300)$$

Вычисляя (300) с помощью (299) и (298), получаем

$$\mathcal{N}_{n\ell} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n - \ell - 1)!}{(n + \ell)!}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}. \quad (301)$$

Здесь и далее a_0 — это уже не коэффициент ряда (294), а первый Боровский радиус, определённый согласно (279).

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Конечный вид собственной функции $R_{n\ell}(r)$

Таким образом, радиальная функция водородоподобного атома окончательно принимает вид:

$$R_{n\ell}(r) = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \times$$
$$\times \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right). \quad (302)$$

Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр

Замечание о видах полиномов Лагерра

В литературе часто встречаются другие определения многочленов, стоящих в фигурных скобках (294). В частности

$$L_k^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_k(x), \quad (303)$$

где $L_k(x)$ — полином Лагерра, определяемый согласно

$$L_k(x) = \frac{1}{k!} e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x}) \quad \text{либо} \quad e^x \frac{d^k}{dx^k} (x^k e^{-x}). \quad (304)$$

При таком определении многочленов изменятся нормировочные множители

$$\mathcal{N}_{nl} = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \cdot \frac{Z^3}{a_0^3}} \quad \text{или} \quad -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3} \cdot \frac{Z^3}{a_0^3}} \quad (305)$$

и поменяются индексы в обозначениях L_k^s , так что решение запишется в виде:

$$R_{nl}(\xi) = \mathcal{N}_{nl} e^{-\xi/2} \xi^\ell L_{n+l}^{2\ell+1}(\xi). \quad (306)$$

Волновые функции стационарных состояний относительного движения водородоподобного атома есть

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (307)$$

где $R_{nl}(r)$ определяется (302) и (297), а $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — согласно (228), (224), (227) и (229).

Энергия состояния E_n , как следует из (291), зависит только от главного квантового числа n . Если оно задано, то из (292) следует, что орбитальное число ℓ может принимать лишь значения $\ell = 0, 1, \dots, n - 1$. При этом $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell$. Таким образом, квантовому уровню энергии принадлежит

$$g = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2 \quad (308)$$

собственных функций ψ_{nlm} , т.е. каждый уровень энергии n^2 -кратно вырожден.

- 1 Проверьте справедливость Замечания 3.
- 2 Опираясь на (302), выпишите в явном виде радиальные функции $R_{n\ell}(r)$ состояний $1s$, $2s$ и $2p$.
- 3 Непосредственным вычислением докажите результат (308).
- 4 Определите уровни энергии и волновые функции частицы в одномерной кулоновской потенциальной яме, задаваемой потенциалом $U(x) = -e^2/|x|$.
- 5 Найдите распределение по импульсам частицы в основном состоянии в кулоновском поле $U(r) = -\beta/r$.
- 6 Исследуйте движение отрицательно заряженного мюона в поле ядра заряда Ze (рассматриваемого как сфера радиуса R , однородно заряженная по объёму; $R = 1.2A^{1/3} \cdot 10^{-13}$ см, $A \approx 2Z$, A — атомный номер ядра). Взаимодействие мюона с ядром имеет чисто электростатический характер. Найдите волновые функции стационарных состояний и уровни энергии мюона в предельных случаях малых и весьма больших значений Z . Оцените энергию γ -квантов, излучаемых при атомных переходах в нижней части энергетического спектра μ -мезоатома.

- 1 Физические основы квантовой теории
 - Кризис классической теории. Фотон — квант ЭМП
 - Теория атома водорода Резерфорда — Бора
 - Волны де Бройля и их статистическая интерпретация
- 2 Основные принципы квантовой теории
 - Основные постулаты квантовой механики
 - Одновременная измеримость физических величин
 - Квантовая динамика. Уравнение Шрёдингера
 - Элементы теории представлений
- 3 Моменты импульса и движение в центральном поле
 - Орбитальный момент импульса в квантовой механике
 - Сферические функции
 - Разделение переменных в задаче двух тел
 - Движение в поле центральной силы
 - Движение в кулоновском поле. Дискретный спектр
 - Спектр и волновые функции атома водорода

Проанализируем собственные функции $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ квантовых состояний атома водорода. Любое состояние, задаваемое тройкой квантовых чисел $|n, \ell, m\rangle$, представляет собой собственное состояние трёх одновременно измеряемых величин: энергии, момента импульса (точнее — его квадрата) и проекции момента импульса на некоторое направление Oz . Все эти три величины имеют в состоянии $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ определённые значения:

$$\begin{aligned} E_{nlm} &= -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \\ L^2 &= \hbar^2 \ell(\ell + 1), \quad \ell = 0, 1, \dots, (n - 1), \\ L_z &= \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell. \end{aligned} \tag{309}$$

Вероятность обнаружить электрон в элементе объёма $d^3\mathbf{r}$ в окрестности точки \mathbf{r} в состоянии $|n, \ell, m\rangle$ равна

$$d\omega_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \rho_{nlm}(r, \theta, \varphi) d^3\mathbf{r}, \quad (310)$$

где плотность вероятности

$$\rho_{nlm}(r, \theta, \varphi) = |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 = R_{nl}^2(r) |Y_{\ell m}(\theta, \varphi)|^2, \quad (311)$$

а элемент объёма в сферических координатах

$$d^3\mathbf{r} = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = r^2 dr d\Omega \quad (312)$$

и элементарный телесный угол

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (313)$$

Плотность вероятности (311) удобно рассматривать в виде произведения

$$\rho_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \rho_{nl}(r) \rho_{lm}(\theta, \varphi). \quad (314)$$

Тогда элементарная вероятность найти электрон между двумя сферами с радиусами r и $r + dr$

$$d\omega_{nl}(r) = \rho_{nl}(r)r^2 dr = R_{nl}^2(r)r^2 dr. \quad (315)$$

Элементарная вероятность обнаружить электрон в телесном угле $d\Omega$ около луча (θ, φ) при этом равна

$$d\omega_{lm}(\theta, \varphi) = \rho_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (316)$$

Спектр и волновые функции атома водорода

Радиальное распределение

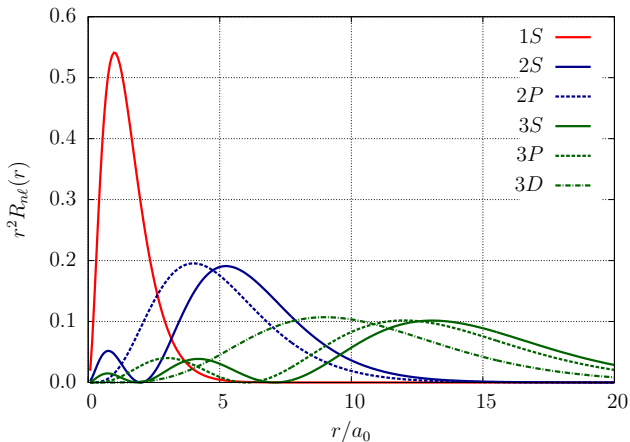


Рис. 16 : Радиальные распределения для некоторых состояний атома водорода, рассчитанные по формуле (315)

Спектр и волновые функции атома водорода

Угловое распределение, рассчитанное в соответствии с (316)










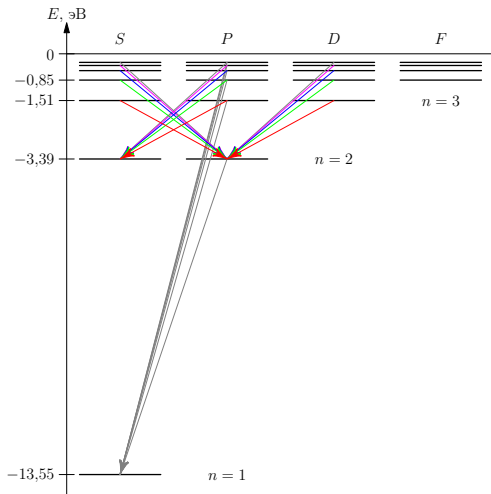
m_ℓ	-2	-1	0	+1	+2
S					
P					
D					

Таблица 1 : Полярные диаграммы $(\rho_{\ell m}(\theta, 0), \theta)$

Спектр и волновые функции атома водорода

Энергетический спектр атома водорода



$$E_{nlm} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2}.$$

Энергия ионизации водородоподобного атома

$$I = -E_1 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} Z^2.$$

Рис. 17 : Энергетическая диаграмма

Спектр и волновые функции атома водорода

Комбинационный принцип Ритца

Правило частот Бора

$$\hbar\omega = E_{nlm} - E_{n'\ell'm'}. \quad (317)$$

Спектральные термы в единицах круговой частоты

$$T_{nlm} = -\frac{E_{nlm}}{\hbar} \stackrel{(291)}{=} \frac{\mu e^4}{2\hbar^3} \cdot \frac{Z^2}{n^2} = \mathcal{R}_\omega \cdot \frac{Z^2}{n^2}, \quad (318)$$

$$\mathcal{R}_\omega = \frac{\mu e^4}{2\hbar^3} = 2.062 \cdot 10^{16} \text{ рад/с}. \quad (319)$$

Принцип Ритца

$$\omega = T_{n'\ell'm'} - T_{nlm}. \quad (320)$$

Спектр и волновые функции атома водорода

Спектральные серии водородоподобного атома

Спектроскопическое волновое число

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\omega}{2\pi c} \quad (321)$$

$$\mathcal{R}_\lambda = \frac{\mu e^4}{4\pi\hbar^3 c} = 1.09737 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}. \quad (322)$$

Обобщённая формула Бальмера

$$\frac{1}{\lambda} = \mathcal{R}_\lambda Z^2 \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n' < n. \quad (323)$$

Серию можно получить, зафиксировав значение n' .

Эксперимент показывает, что рис. 17 не вполне адекватно описывает спектр испускания атома водорода. Для более полного соответствия следует учитывать:

- спин электрона, играющий важную роль в отклике атома на магнитное поле;
- релятивистские поправки, определяющие тонкую структуру спектра;
- конечность размеров ядра (отклонение поля ядра от кулонова поля);
- ненулевой магнитный момент ядра, создающий сверхтонкую структуру спектра;
- ненулевые высшие мультипольные моменты распределения заряда ядра, меняющие сверхтонкую структуру;
- радиационные поправки, создающие поляризацию вакуума и приводящие к лэмбовскому сдвигу.

Спектр и волновые функции атома водорода

Контрольные вопросы и задания

- 1 Сравните (309) с основным результатом боровской теории водородоподобного атома (23). Чем квантомеханическая теория принципиально отличается от теории Бора?
- 2 Найдите наиболее вероятные, средние и средние квадратичные расстояния электрона от ядра в трёх низших состояниях ($1s$, $2s$, $2p$) атома водорода.
- 3 Определите волновые функции трёх низших уровней ($1s$, $2s$, $2p$) атома водорода в импульсном представлении.
- 4 Покажите, что во всяком стационарном состоянии водородоподобного атома среднее значение кинетической энергии равно с обратным знаком собственному значению энергии

$$\left\langle \frac{p^2}{2\mu} \right\rangle_{n\ell m} = -E_n.$$

- 5 Вычислите среднее электрическое поле атома водорода в $2p$ -состоянии с определённым значением проекции момента электрона на ось Oz $m = 0$ на больших расстояниях от атома.

Учебное издание

Павел Андреевич Макаров

**КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ. ВВОДНЫЙ КУРС:
ДЕМОНСТРАЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ**

Учебно-методическое пособие

Выполнено с использованием \LaTeX Beamer

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

Редактор *Л. Н. Руденко*

Вёрстка и компьютерный макет *П. А. Макаров*

Выпускающий редактор *Л. В. Гудырева*

1.7 Мб. 1 компакт-диск, пластиковый бокс, вкладыш.

Подписано к использованию 28.05.2021 г. Тираж 100 экз. Заказ № 63.

Адрес типографии:

167023. Сыктывкар, ул. Коммунистическая, 23Б

Издательский центр ФГБОУ ВО «СГУ им. Питирима Сорокина»

Тел. (8212) 390-472, 390-473.

E-mail: ipo@syktsu.ru, mkrvpa@gmail.com

<http://www.syktsu.ru/>