

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Елецкий государственный университет им. И.А.Бунина»

С. В. Бровко, О. В. Кондаков

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

Елец – 2016

УДК 530.1
ББК 22.314
Б 88

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Елецкого государственного университета имени И.А. Бунина
от 29.01. 2016, протокол № 1

Рецензенты:

*доктор физико-математических наук, профессор К.Г. Иванов
(Санкт-Петербургский государственный университет промышленных
технологий и дизайна);*

*кандидат физико-математических наук, доцент А.В. Сидоров
(Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина)*

Бровко С. В., Кондаков О. В.

Б 88 Квантовая механика: учебное пособие. – Елец: Елецкий государственный университет им. И. А. Бунина, 2016. – 186 с.
ISBN 978-5-94809-894-4

Учебное пособие содержит систематическое изложение раздела «Квантовая механика» курса теоретической физики. Изучаемый материал представлен таким образом, чтобы читатель мог разобраться не только в физических основах, но и овладеть математическим аппаратом квантовой механики.

Книга написана в соответствии с требованием государственного стандарта и адресована студентам физических, инженерно-физических и педагогических направлений подготовки, изучающим курс теоретической физики.

УДК 530.1
ББК 22.314

ISBN 978-5-94809-894-4

© Елецкий государственный
университет им. И.А. Бунина, 2016

*От всех приобретенных знаний
в памяти у нас остается только то,
что мы применили на практике.*

(И. Эккерман)

ВВЕДЕНИЕ

ПРЕДМЕТ ИЗУЧЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Микро и макрообъекты. В основном, предметом изучения квантовой механики являются атомы, молекулы, атомные ядра, элементарные частицы. Однако, теория твёрдого тела, также как и физика звёзд основывается на квантовой теории. К элементарным частицам относятся кванты электромагнитного поля (фотоны) и две группы частиц: **лептоны** и **адроны**. Для адронов характерно сильное (ядерное) взаимодействие, тогда как лептоны взаимодействуют посредством слабого взаимодействия. К лептонам относятся электрон, мюон, таон и их нейтрино. К более многочисленным адронам относятся нуклоны (протон и нейтрон), мезоны (группа частиц, масса которых меньше массы протона) и гипероны (группа частиц, масса которых больше массы нейтрона). Соответствующие античастицы относятся к тем же группам элементарных частиц.

Масса и заряд. Микрообъекты, прежде всего, характеризуются **массой** и электрическим **зарядом**. К примеру, масса электрона $m_e = 9,1 \cdot 10^{-28}$ г, нейтрона $m_n = 1839 m_e$, протона $m_p = 1836 m_e$, заряд протона равен $1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл, а заряд электрона $-1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл. Величина электрического заряда любого микрообъекта кратна величине элементарного заряда. Наряду с заряженными существуют нейтральные микрообъекты (например, фотон, нейтрино, нейтрон).

Спин. Одной из важнейших специфических характеристик микрообъекта является **спин**. Спин – это момент импульса микрообъекта, не связанный с движением микрообъекта как целого. Спин s фотона равен 1, спин электрона (как и спин любого лептона) равен $1/2$, спин нуклона тоже равен $1/2$. Спин не имеет классического аналога и, безусловно, указывает на наличие внутренней структуры микрообъекта.

Нестабильность микрообъектов. Все элементарные частицы, за исключением фотона, электрона, протона и нейтрино, нестабильны. Это означает, что они самопроизвольно, без каких-либо внешних воздействий распадаются, превращаясь в другие частицы. Например, нейтрон самопроизвольно распадается на протон, электрон и электронное антинейтрино $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$.

Нестабильные элементарные частицы характеризуются своими временами жизни. С уменьшением времени жизни, увеличивается вероятность распада частицы. Например, время жизни нейтрона в свободном состоянии составляет $880,0 \pm 0,9$ с.

Нестабильность присуща и другим микрообъектам. Для некоторых атомных ядер наблюдается явление радиоактивности (самопроизвольное превращение изотопов одного химического элемента в изотопы другого, сопровождающееся испусканием частиц). Это показывает, что нестабильными могут быть и атомные ядра. Возбужденные состояния атомов и молекул также оказываются нестабильными. Наблюдается самопроизвольный переход в основное или менее возбужденное состояние.

Характерно, что наряду с нестабильными существует много стабильных микрообъектов. Фотон, электрон, протон, нейтрино, стабильные атомные ядра, а также атомы и молекулы в основном состоянии существуют неопределенно долго.

Взаимопревращения микрообъектов. Приведённая схема распада нейтрона ($n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$), совершенно не утверждает, что нейтрон состоит из связанных друг с другом протона, электрона и электронного антинейтрино. Распад элементарной частицы – это акт превращения исходной частицы в некую совокупность новых частиц. Исходная частица уничтожается, а новые частицы рождаются. Более того, многие частицы имеют несколько способов распада.

Если рассматривать частицы не только в свободном, но и в связанном состоянии, то картина взаимодействий элементарных частиц оказывается существенно богаче и сложнее. Свободный нейтрон распадается по приведенной выше схеме, а свободный протон стабилен.

Распады и взаимодействия элементарных частиц происходят и при столкновениях частиц. В качестве примера приведем некоторые схемы взаимодействий при столкновении фотонов с протонами и нейтронами: $\gamma + p \rightarrow n + \pi^+$.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

1. ГИПОТЕЗА ПЛАНКА.

Планк в 1900 г. сформулировал постулат, согласно которому вещество может испускать и поглощать энергию излучения только конечными порциями (элементарное возбуждение), пропорциональными частоте этого излучения. Данная концепция привела к изменению традиционных положений, лежащих в основе классической физики. Энергия каждой порции определяется по формуле $E = \hbar\omega$, где \hbar - постоянная Планка $\hbar = 1.0545726663 \cdot 10^{-34}$ Дж·с.

2. ФОТОЭФФЕКТ.

Открытие и изучение явления фотоэффекта принесло физикам много неожиданного. Сущность эффекта состоит в испускании веществом фотоэлектронов под воздействием электромагнитного излучения, падающего на это вещество. Оказалось, что энергия испускаемых электронов не зависит от интенсивности поглощаемого излучения, а определяется только его частотой и свойствами самого вещества. От интенсивности излучения при заданной частоте зависит только полное число испускаемых электронов.

Эйнштейн высказал мысль о том, что фотоэффект указывает на дискретное строение света. Эйнштейн предположил, что электромагнитное излучение состоит из совокупности квантов, причем энергия каждого кванта пропорциональна частоте, а коэффициент пропорциональности равен постоянной Планка $E = \hbar\omega$. Когда вещество поглощает квант света, то энергия этого кванта расходуется на то, чтобы выбить электрон и сообщить ему кинетическую энергию $\hbar\omega = A + T$.

Эйнштейн (1905): "Согласно принятой здесь точке зрения, при распространении светового луча, вышедшего из какой-либо точки, энергия распространяется не непрерывно на все более и более возрастающее пространство, но состоит из конечного числа локализованных в пространственных точках квантов энергии, которые движутся без разделения и могут поглощаться и испускаться как целое".

Следует отметить, что к моменту написания Эйнштейном в 1905г. статьи относительно фотоэффекта было известно немного. В 1902 г. Ленард обнаружил, что энергия вылетающих электронов не зависит от интенсивности падающего света. Что касается зависимости энергии фотоэлектронов от частоты, то она была исследована только в 1912г. Ричардсоном и Комптоном.

Проблемы, связанные с дуализмом фотонов.

Непоследовательность в определении фотона заключается в использовании понятия частоты фотона, в свою очередь связанное с представлением о некотором непрерывном периодическом процессе. Корпускулярные представления об излучении как о совокупности фотонов не позволяют определить какую-либо периодичность, заимствованную у волновой теории. Поэтому, определение энергии фотона как произведения частоты на постоянную Планка с корпускулярной точки зрения непоследовательно.

Фотон заданной частоты нелокализован. Можно было бы представить, что фотон представляет собой некоторое образование наподобие куска синусоиды. Однако в этом случае его нельзя характеризовать одной частотой. Более того, чем большую локализацию фотона мы производим посредством измерения, тем большее количество частот в нем должно присутствовать. Фотон же одной частоты, если его представлять как волну, должен иметь бесконечную протяженность, но тогда фотон трудно назвать частицей.

Интерференция. Можно было бы предположить, что явления интерференции связаны с взаимодействием большого числа фотонов, одновременно участвующих в процессе. Но тогда интерференционные явления должны были бы зависеть от интенсивности света и в случае достаточно малой интенсивности, когда в интерференционный прибор попадает одновременно не более одного фотона, вовсе бы отсутствовали. Такой эксперимент впервые был поставлен Тейлором и привел к отрицательному результату. Опыт показал, что какова бы ни была интенсивность падающего света, интерференционная картина остается одной и той же при условии, конечно, что время экспозиции будет достаточно велико. Это указывает на то, что каждый фотон, взятый в отдельности, участвует в явлении интерференции – факт чрезвычайно странный, если считать фотоны локализованными в пространстве.

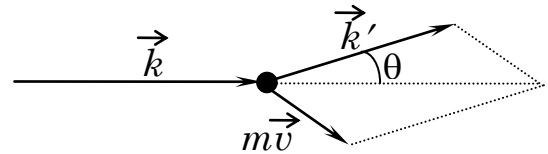
3. ЭФФЕКТ КОМПТОНА.

Хотя гипотеза фотонов была высказана Эйнштейном еще в 1905 г., на протяжении долгого времени физики с большим подозрением относились к этой теории. Только открытие в 1922 г. эффекта Комптона дало прямое доказательство существования фотонов.

Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом характеризуется появлением рассеянного излучения. Волновая теория объясняла это явление следующим образом. Электрическое поле падающей волны приводит в колебательное движение электроны, вхо-

дящие в состав материальных тел. В результате они оказываются элементарными источниками вторичных сферических волн. Это приводит к пространственному перераспределению энергии падающей волны. В представляемой картине, в случае, если первичная волна была монохроматической, то и рассеянное излучение должно быть монохроматическим и обладать той же частотой. Так как рентгеновские лучи представляют собой электромагнитное излучение высокой частоты, то в течение весьма длительного времени казалось, что электромагнитная теория удовлетворительно объясняет рассеяние рентгеновских лучей веществом. Однако более тщательное изучение этого вопроса показало, что в опытах по рассеянию излучения наряду с рентгеновскими лучами той же частоты имеется также компонента излучения с частотой, меньшей, чем частота падающего излучения. Этот факт совершенно необъясним классической точки зрения.

Это явление было исследовано в 1922 г. Комптоном. Он установил зависимость частоты рассеянного излучения от угла рассеяния и неза-



висимость ее от природы рассеивающего тела. Позже Комптон и Дебай показали, что основные особенности этого явления могут быть объяснены, если рассматривать взаимодействие между электроном и электромагнитной волной как упругое соударение электрона с фотоном. Электрон и фотон обмениваются энергией и импульсом в момент соударения, а поскольку электрон почти всегда можно считать неподвижным по сравнению с фотоном, то в результате такого соударения электрон приобретает, а фотон теряет энергию. Так как частота фотона пропорциональна его энергии, то после соударения он должен обладать меньшей частотой, чем до соударения.

Теория эффекта Комптона, согласующаяся с экспериментальными данными, позволяет, используя законы сохранения импульса и энергии, точно определить зависимость частоты рассеянного фотона от угла рассеяния. Используя законы сохранения энергии и импульса можно получить

$$\lambda' - \lambda = 2\lambda_C \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

где $\lambda_C = \frac{2\pi\hbar}{mc} = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ м}$ - **комптоновская длина волны** (здесь вычислена для электрона).

Из полученной формулы можно сделать следующие выводы. Во-первых, так как справа стоит положительная величина, то длина волны рассеянного фотона больше его первоначальной длины. Во-

вторых, с увеличением угла рассеяния длина рассеянного излучения увеличивается.

Оценим степень изменения длины волны

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\lambda' - \lambda}{\lambda} = 2 \frac{\lambda_C}{\lambda} = 2 \frac{2,43 \cdot 10^{-12}}{\lambda} \approx \frac{5 \cdot 10^{-12}}{\lambda} = \frac{5 \cdot 10^{-10}}{\lambda} \%.$$

Видимый свет простирается в диапазоне 390-770 нм. Пусть для видимого света $\lambda = 500 \text{ нм} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ м}$.

Следовательно $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{5 \cdot 10^{-10}}{5 \cdot 10^{-4}} \% = 10^{-6} \%$. Рентгеновские лучи про-

стираются в диапазоне 0,05-100 Å. Для жестких рентгеновских лучей

$\lambda < 0,2 \text{ Å}$. Пусть $\lambda = 1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ м}$. Тогда $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{5 \cdot 10^{-10}}{10^{-10}} \% = 5 \%$.

Замечание. Независимость частоты рассеянного излучения от природы рассеивающего тела объясняется тем, что в акте рассеяния участвуют лишь фотоны и электроны внутренних оболочек атомов, свойства которых совершенно не зависят от вещества, в состав которого они входят.

4. ПОСТУЛАТЫ БОРА.

Согласно модели Резерфорда, положительный заряд атома находится в ядре, занимающем небольшую часть атома. Оставить электроны неподвижными вокруг ядра нельзя, т.к. статическая конфигурация электрических зарядов неустойчива, поэтому Резерфорд предположил, что электроны движутся по круговым или эллиптическим орбитам. Такая модель атома очень похожа на Солнечную систему, поэтому её стали называть планетарной моделью атома. Модель атома, предложенная Резерфордом, находится в противоречии с законами классической физики. С классических позиций, электрон, движущийся по орбите, обладает ускорением и должен испускать электромагнитные волны. Эти волны уносят с собой часть энергии электрона. Теряя энергию, электрон движется по скручивающейся спирали и падает на ядро. Атом перестаёт существовать. Спасая ситуацию, датский физик Нильс Бор в 1913 г. сформулировал постулаты, находящиеся в противоречии с классической физикой.

Бор высказал два постулата.

1. Существуют состояния, находясь в которых атом не излучает (*стационарные состояния*); энергия этих состояний образует *дискретный спектр*: $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ т.е. $E_n = \hbar\omega_n$.
2. Атом излучает (поглощает), переходя из одного стационарного состояния в другое; при этом он излучает или поглощает энергию рав-

ную разности энергий соответствующих стационарных состояний.

$$\Delta E_{nm} = E_n - E_m.$$

Поскольку, в соответствии с первым постулатом, энергия кратна частоте, то $\Delta E_{nm} = \hbar\omega_{nm}$. Так, при переходе из состояния с энергией E_n в состояние с меньшей энергией E_m испускается квант излучения с энергией $(E_n - E_m)$, при этом в спектре атома появляется линия с частотой

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}.$$

Теория Бора была предназначена для спасения модели атома, но ни на каких физических принципах она не основывалась. Она является переходной теорией от классических моделей атома к квантово-механическим моделям.

Эйнштейн в 1949 г. писал: "Мне всегда казалось чудом, что этой колеблющейся и полной противоречий основы (имеется в виду физика в начале века) оказалось достаточно, чтобы позволить Бору – человеку с гениальной интуицией и тонким чутьем – найти главные законы спектральных линий и электронных оболочек атомов, включая их значение для химии. Это кажется мне чудом и теперь".

Эренфест лето 1913 г. Писал: "Работа Бора ... приводит меня в отчаяние: если формулу Бальмера можно получить таким образом, то я должен выбросить всю физику на свалку и сам отправиться туда же".

Штерн, лето 1913 г.: "Если этот абсурд, который только что опубликовал Бор, верен, я брошу карьеру физика".

5. ГИПОТЕЗА ДЕ-БРОЙЛЯ.

Согласно Эйнштейну, свет состоит из частиц фотонов. Другими словами, свету присущи свойства, как волны, так и свойства частиц. В 1924 г. де Бройль распространил идею дуализма не только на излучение, но и вообще на все микрообъекты. Он предложил с каждым микрообъектом связывать, с одной стороны, **корпускулярные характеристики** (энергию E и импульс p), а с другой, **волновые характеристики** (частоту ω и длину волны λ). Взаимосвязь между волновыми и корпускулярными свойствами объектов осуществляется через постоянную Планка \hbar следующим образом:

$$E = \hbar\omega, \quad p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$

Второе из этих соотношений известно как *формула де Бройля*. Для фотонов эти соотношения выполняются автоматически, если в формуле $p = \hbar\omega/c$ подставить $\omega = 2\pi c/\lambda$.

Смелость гипотезы де Бройля состояла в том, что приведенные соотношения предполагались выполняющимися для всех объектов, в частности для таких, у которых есть масса покоя и которые до этого ассоциировались с корпускулами.

Волна де Бройля

$$\psi(x, t) = \alpha_0 e^{i(kx - \omega t)}.$$

Когда де Бройль вводил представление о частице, как о волне, он отчетливо осознавал странность и неполноту такого подхода. Он писал "Я нарочно дал довольно неотчетливые определения фазовой волны и периодического явления, которое она, так же как и квант света, некоторым образом выражает. Настоящую теорию нужно, таким образом, рассматривать скорее как форму, физическое содержание которой не волне установлено, чем как окончательно разработанную стройную теорию".

В 1927 г. исследуя прохождение электронов сквозь тонкие пластинки, Дэвиссон и Джермер (а также Гартаковский) обнаружили на экране-детекторе характерные дифракционные кольца. Оказалось, что кристаллическая решетка мишени сыграла роль дифракционной решетки для «электронных» волн. Измерение расстояний между дифракционными кольцами для электронов заданной энергии подтвердили формулу де Бройля.

В 1949 г. Фабрикант пропустил через дифракционное устройство крайне слабый электронный пучок – промежуток времени между последовательным прохождением электронов через щель более чем в 10000 раз превышал время, необходимое для прохождения электрона через устройство. Опыт показал, что при длительной экспозиции, позволяющей зарегистрировать на экране-детекторе достаточно большое число электронов, возникала такая же дифракционная картина, как и в случае обычных электронных пучков. Таким образом, было экспериментально доказано, что волновые свойства электронов нельзя объяснить как некий эффект коллектива электронов; волновыми свойствами обладает каждый отдельно взятый электрон.

ОСНОВНЫЕ ИСТОРИЧЕСКИЕ ДАТЫ.

1900 Гипотеза **Планка**.

1905 Объяснение фотоэффекта **Эйнштейном**.

1911 Атом **Резерфорда**.

1913 Постулаты **Бора**.

1922 Подтверждение корпускулярных свойств света. Эффект **Комптона**.

1923 Гипотеза де **Бройля**.

1925 Матричная механика **Гейзенберга**.

1926 Волновая механика **Шредингера**.

1927 Дифракции электронов (**Дэвиссон и Джермер**).

ЗАДАЧИ.**КОРПУСКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ.**

1. Длина волны фотона равна $\lambda=0,65$ мкм (т.е. соответствует излучению лазерной указки, т.е. красный свет). Вычислить энергию и импульс фотона. Энергию фотона выразить в эВ.

Решение. Согласно Эйнштейну энергия фотона

$$E = \hbar\omega = 2\pi\nu\hbar = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} c,$$

$$E = \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 1,055 \cdot 10^{-34} (\text{Дж} \cdot \text{с}) \cdot 2,997 \cdot 10^8 (\text{м/с})}{0,65 \cdot 10^{-6} (\text{м})} = 3,056 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

$$E = 3,056 \cdot 10^{-19} (\text{Дж}) / 1,6 \cdot 10^{-19} (\text{Дж}) = 1,907 \text{ эВ},$$

$$\boxed{p = \frac{E}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}},$$

$$p = \frac{3,056 \cdot 10^{-19} (\text{Дж})}{2,998 \cdot 10^8 (\text{м/с})} = 1,019 \cdot 10^{-27} \frac{\text{кг} \cdot \text{м}}{\text{с}}.$$

2. При каком значении скорости электрона его импульс равен импульсу фотона с длиной волны $\lambda=0,65$ мкм.

Решение. Согласно условию должно выполняться равенство

$$p_e = p_\phi.$$

$$\frac{mv}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \Rightarrow \frac{m^2 v^2}{1-\frac{v^2}{c^2}} = \left(\frac{2\pi\hbar}{\lambda}\right)^2 \Rightarrow m^2 v^2 = \left(\frac{2\pi\hbar}{\lambda}\right)^2 \left(1-\frac{v^2}{c^2}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow m^2 v^2 + \left(\frac{2\pi\hbar}{\lambda}\right)^2 \frac{v^2}{c^2} = \left(\frac{2\pi\hbar}{\lambda}\right)^2 \Rightarrow v = \frac{\frac{2\pi\hbar}{\lambda}}{\sqrt{m^2 + \left(\frac{2\pi\hbar}{c\lambda}\right)^2}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{v = \frac{c}{\sqrt{1 + \left(\frac{mc\lambda}{2\pi\hbar}\right)^2}}}.$$

$$v = \frac{2,99 \cdot 10^8}{\sqrt{1 + \left(\frac{0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 2,99 \cdot 10^8 \cdot 0,65 \cdot 10^{-6}}{2 \cdot 3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}} \right)^2}} = 1130 \text{ м/с}$$

ФОТОЭФФЕКТ.

1. Длина волны света, соответствующая красной границе фотоэффекта, для некоторого металла $\lambda_0 = 275$ нм. Пусть поверхность металла освещается светом с длиной волны $\lambda = 180$ нм. Найти работу выхода A электронов из металла, скорость фотоэлектронов и их кинетическую энергию. Выразить энергию в эВ.

Решение. Согласно Эйнштейну $\hbar\omega = A + T$.

а) При красной границе $\hbar\omega = A$ или

$$\boxed{\frac{\hbar 2\pi c}{\lambda_0} = A}$$

Отсюда

$$A = \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 1,055 \cdot 10^{-34} (\text{Дж} \cdot \text{с}) \cdot 2,997 \cdot 10^8 (\text{м/с})}{0,275 \cdot 10^{-6} (\text{м})} = 7,17 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

б) Найдем скорость фотоэлектронов

$$\frac{mv^2}{2} = \hbar\omega - A \Rightarrow \frac{mv^2}{2} = \hbar \frac{2\pi c}{\lambda} - A \Rightarrow \boxed{v = \sqrt{\frac{2}{m} \left(\frac{2\hbar\pi c}{\lambda} - A \right)}}$$

$$v = \sqrt{\frac{2}{0,9 \cdot 10^{-30} (\text{кг})} \left(\frac{2 \cdot 3,14 \cdot 1,055 \cdot 10^{-34} (\text{Дж} \cdot \text{с}) \cdot 2,997 \cdot 10^8 (\text{м/с})}{0,180 \cdot 10^{-6} (\text{м})} - 7,17 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \right)} =$$

$$= 920 \cdot 10^3 \text{ м/с}$$

в) Найдем энергию вырванных электронов

$$\boxed{E = \frac{mv^2}{2}}$$

$$E = \frac{0,9 \cdot 10^{-30} (\text{кг}) \cdot 920 \cdot 10^3 \text{ м/с}}{2} = 3,78 \cdot 10^{-19} \text{ Дж},$$

$$E = \frac{3,78 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}} = 2,36 \text{ эВ}$$

2. Пусть на катод из платины падают фотоны с неизвестной длиной волны λ . Фототок прекращается, если между катодом и анодом приложить задерживающую разность потенциалов в $\Delta\varphi = 0,8$ В. Найти

длину волны применяемого излучения. Найти длину волны, соответствующую красной границе фотоэффекта. Работа выхода с платиновой поверхности 5,3 эВ.

Решение:

а) Прежде всего, рассмотрим вопрос о том, что такое задерживающая разность потенциалов и как распределен потенциал между электродами. По определению разность потенциалов между точками 1 и 2 есть

$$\varphi_2 - \varphi_1 = -\int_1^2 \vec{E} d\vec{r}. \quad (1)$$

Направим ось x от точки 1 к точке 2, т.е. по ходу движения электронов. Теперь определим направление вектора напряженности электрического поля. По условию задачи электроны при движении к аноду тормозятся и останавливаются. Следовательно на них действует тормозящая сила, направленная противоположно направлению оси x . Сила и напряженность связаны соотношением

$$\vec{F} = q_e \vec{E} \text{ или } \vec{F} = -e\vec{E}.$$

Здесь положили, что e - абсолютное значение заряда электрона ($q_e = -e$). Отсюда видно, что вектор напряженности направлен вдоль движения, т.е. вдоль оси x . Теперь перепишем (1) в скалярном виде

$$\varphi_2 - \varphi_1 = -\int_1^2 E dx.$$

Поскольку справа стоит величина отрицательная, то делаем вывод, что $\varphi_2 < \varphi_1$.

Изобразим распределение потенциала графически. Для этого примем, что поле между катодом и анодом является однородным. Тогда

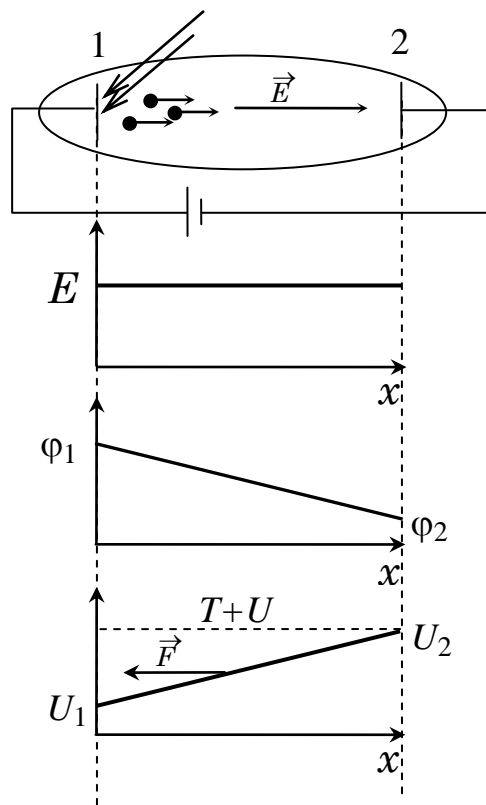
$$\varphi_2 - \varphi_1 = -\int_1^2 E dx = -E \int_1^2 dx = -E(x_2 - x_1) = -E\Delta x,$$

или

$$\varphi(x) = \varphi_1 - Ex,$$

т.е. потенциал зависит от x линейно.

б) Поскольку формула фотоэффекта является энергетическим соот-



ношением, то рассмотрим энергию электрона. Поскольку электроны движутся в поле электростатической силы, т.е. консервативной силы, то выполняется закон сохранения энергии

$$T_1 + U_1 = T_2 + U_2$$

или

$$T_2 - T_1 = U_1 - U_2.$$

Поскольку электроны останавливаются вблизи анода, то конечная кинетическая энергия у анода равна нулю и закон сохранения принимает вид

$$T_1 = -(U_1 - U_2).$$

Теперь учтем, что $U = q\phi$. Тогда

$$U_1 - U_2 = q_e(\phi_1 - \phi_2) = -e(\phi_1 - \phi_2) = e(\phi_2 - \phi_1).$$

Отсюда

$$T_1 = -(U_1 - U_2) = e(\phi_1 - \phi_2) > 0.$$

Введем обозначение $\Delta\phi = \phi_1 - \phi_2$. Тогда закон сохранения энергии примет вид

$$T_1 = e\Delta\phi. \quad (2)$$

Построим график потенциальной энергии. Во-первых, заметим, что поскольку $\phi_2 < \phi_1$, то $U_1 < U_2$.

Пусть поле между катодом и анодом является однородным. Тогда

$$U_1 - U_2 = e(\phi_2 - \phi_1) = -eEx_2$$

или

$$U(x) = U_1 + eEx.$$

в) Теперь перейдем непосредственно к фотоэффекту. Согласно формуле Эйнштейна имеем

$$\hbar\omega = A + T_1.$$

Учитывая (2) получим

$$\hbar\omega = A + e\Delta\phi$$

или

$$\hbar \frac{2\pi c}{\lambda} = A + e\Delta\phi.$$

Отсюда

$$\lambda = \frac{2\pi c \hbar}{A + e\Delta\phi},$$

$$\lambda = \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{5,3 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} + 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 0,8} = 2,04 \cdot 10^{-9} \text{ м.}$$

Что касается красной границы фотоэффекта, то она находится совсем просто

$$\hbar \frac{2\pi c}{\lambda_0} = A.$$

Отсюда

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar c}{A},$$

$$\lambda_0 = \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 1,055 \cdot 10^{-34} (\text{Дж} \cdot \text{с}) \cdot 2,997 \cdot 10^8 (\text{м/с})}{5,3 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} (\text{Дж})} = 234 \cdot 10^{-9} \text{ м}.$$

ЭФФЕКТ КОМПТОНА.

1. Рентгеновские лучи с длиной волны $\lambda=70$ пм испытывают комптоновское рассеяние на парафине. Найти длину волны λ рентгеновских лучей, рассеянных в направлении а) $\theta=\pi/2$, б) $\theta=\pi$.

Решение. $\lambda' = \lambda + 2\lambda_C \sin^2 \frac{\theta}{2}.$

Ответ: а) $\lambda = 72,4 \cdot 10^{-12} \text{ м}$, б) $\lambda = 74,9 \cdot 10^{-12} \text{ м}$.

2. Какова длина волны рентгеновского излучения, если при комптоновском рассеянии на графите под углом $\theta=60^\circ$ длина волны рассеянного излучения оказалась равной $\lambda=25$ пм?

Решение. $\lambda = \lambda' - 2\lambda_C \sin^2 \frac{\theta}{2}.$

Ответ: $\lambda = 23,8 \cdot 10^{-12} \text{ м}$.

ВОЛНА ДЕ БРОЙЛЯ.

1. Какова длина волны де Бройля для электрона, движущегося со скоростью $v=2 \cdot 10^8$ м/с, шарика массой 10 г, движущегося со скоростью $v=10$ м/с?

Решение. Запишем соотношения де Бройля

$$E = \hbar\omega, \quad p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$

Отсюда следует, что длину волны следует искать из соотношения

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Релятивистский импульс

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Для длины волны де Бройля имеем

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = 2\pi\hbar \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{mv}.$$

Для электрона со скоростью $v=2 \cdot 10^8$ м/с

$$\lambda = 2 \cdot 3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{2 \cdot 10^8}{3 \cdot 10^8}\right)^2}}{0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 2 \cdot 10^8} = 2,7 \cdot 10^{-12} \text{ м.}$$

Для электрона со скоростью $v=10$ м/с

$$\lambda = 2 \cdot 3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{10}{3 \cdot 10^8}\right)^2}}{0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 10} = 7,3 \cdot 10^{-5} \text{ м.}$$

Для шарика массой 10 г со скоростью $v=10$ м/с

$$\lambda = 2 \cdot 3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{10}{3 \cdot 10^8}\right)^2}}{10 \cdot 10^{-3} \cdot 10} = 6,6 \cdot 10^{-33} \text{ м.}$$

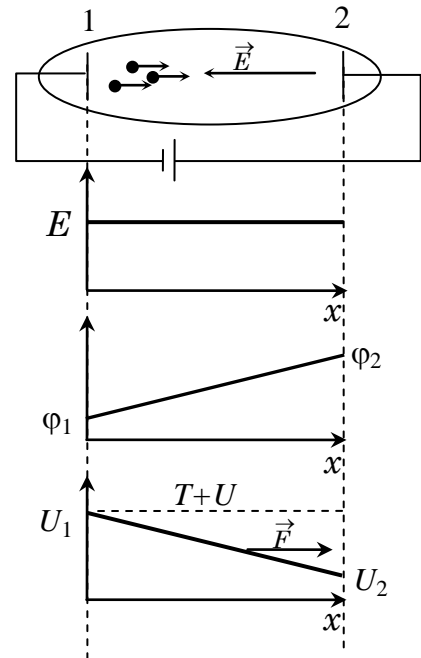
2. Какова длина волны де Бройля для электронов, прошедших ускоряющую разность потенциалов $\Delta\varphi=10$ В?

Решение.

а) Прежде всего, рассмотрим вопрос о том, что такое ускоряющая разность потенциалов. По определению разность потенциалов между точками 1 и 2 есть

$$\varphi_2 - \varphi_1 = - \int_1^2 \vec{E} d\vec{r}. \quad (1)$$

Направим ось x от точки 1 к точке 2, т.е. по ходу движения электронов. Теперь определим направление вектора напряженности электрического поля. По условию задачи электроны вначале покоились, а затем приобрели скорость, двигаясь в ускоряющем электростатическом поле. Следовательно, на них действует ускоряющая сила, направленная по движению, т.е. в направлении оси x . Сила и напряженность связаны соотношением



$$\vec{F} = q_e \vec{E} \text{ или } \vec{F} = -e\vec{E}.$$

Здесь $q_e = -e$. Отсюда видно, что вектор напряженности направлен противоположно движению, т.е. против оси x . Теперь перепишем (1) в скалярном виде

$$\varphi_2 - \varphi_1 = \int_1^2 E dx.$$

Поскольку справа стоит величина положительная, то делаем вывод, что $\varphi_2 > \varphi_1$

б) Теперь запишем соотношения де Бройля

$$E = \hbar\omega, \quad p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$

Отсюда следует, что длину волны следует искать из соотношения

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Теперь надо искать импульс. Для этого воспользуемся нерелятивистским выражением для импульса $p = mv$. Тогда

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}.$$

В этом выражении неизвестна скорость. Найдем ее из закона сохранения энергии, поскольку электрон находится в поле действия электростатической, т.е. консервативной силы. Закон сохранения энергии

$$T_1 + U_1 = T_2 + U_2$$

или

$$T_2 - T_1 = U_1 - U_2.$$

Поскольку электроны, как мы полагаем вначале покоились, то начальная кинетическая энергия равна нулю и закон сохранения принимает вид

$$T_2 = U_1 - U_2.$$

Теперь учтем, что $U = q_e\varphi$. Тогда

$$U_1 - U_2 = q_e(\varphi_1 - \varphi_2) = -e(\varphi_1 - \varphi_2) = e(\varphi_2 - \varphi_1).$$

Поэтому

$$T_2 = U_1 - U_2 = e(\varphi_2 - \varphi_1) > 0.$$

Введем обозначение $\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$. Тогда закон сохранения энергии примет вид

$$T_2 = e\Delta\varphi. \quad (2)$$

Нерелятивистское выражение для кинетической энергии

$$T = \frac{mv^2}{2}.$$

Тогда

$$\frac{mv^2}{2} = e\Delta\varphi.$$

Отсюда получаем выражение для скорости

$$v = \sqrt{\frac{2e\Delta\varphi}{m}}.$$

Теперь выражение для длины волны нерелятивистских электронов примет вид

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m} \sqrt{\frac{m}{2e\Delta\varphi}} = \pi\hbar \sqrt{\frac{2}{em\Delta\varphi}}$$

$$\lambda = 3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \sqrt{\frac{2}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 10}} = 3,88 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Скорость при этом равна

$$v = \sqrt{\frac{2 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10}{0,9 \cdot 10^{-30}}} = 1,89 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

2а. Решить предыдущую задачу для релятивистского электрона.

Решение. Релятивистская энергия

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - mc^2.$$

Из закона сохранения имеем

$$e\Delta\varphi = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - mc^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{e\Delta\varphi + mc^2}{mc^2} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \Rightarrow$$

$$\frac{e\Delta\varphi}{mc^2} + 1 = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow 1 - \frac{v^2}{c^2} = \frac{1}{\left(\frac{e\Delta\varphi}{mc^2} + 1\right)^2} \Rightarrow v = c \sqrt{1 - \frac{1}{\left(\frac{e\Delta\varphi}{mc^2} + 1\right)^2}}.$$

Релятивистский импульс

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{mc}{\sqrt{\left(\frac{e\Delta\varphi}{mc^2} + 1\right)^2}} \sqrt{1 - \frac{1}{\left(\frac{e\Delta\varphi}{mc^2} + 1\right)^2}} = mc \sqrt{\left(\frac{e\Delta\varphi}{mc^2} + 1\right)^2 - 1}.$$

Для длины волны де Бройля имеем

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mc \sqrt{\left(\frac{e\Delta\varphi}{mc^2} + 1\right)^2 - 1}}.$$

Замечание. Расчет показывает, что отличие между классической и релятивистской формулой начинает превосходить 1%, начиная с разности потенциалов 20 киловольт.

ЧАСТЬ 1. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.

1.1. ЛИНЕЙНОЕ ПРОСТРАНСТВО.

1.1.1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ.

Пространством называется логически мыслимая структура, служащая средой, в которой существуют объекты и отношения между ними.

Линейным пространством называется множество элементов любой природы, называемых **векторами**, причем выполняются три требования:

1. Имеется правило, посредством которого любым двум векторам Ψ_1 и Ψ_2 ставится в соответствие третий вектор этого же пространства, называемый суммой элементов Ψ_1 и Ψ_2 и обозначаемый $\Psi_1 + \Psi_2$.
2. Имеется правило, посредством которого любому вектору Ψ и любому комплексному числу c ставится в соответствие вектор этого же пространства, называемый произведением вектора Ψ на число c и обозначаемый как $c\Psi$.
3. Указанные правила подчинены восьми аксиомам (см. III).

При введении понятия линейного пространства абстрагируются как от природы элементов этого пространства, так и от конкретных правил суммирования элементов и умножения их на число.

Линейной комбинацией векторов Ψ_1, Ψ_2, \dots называется сумма произведений этих векторов на произвольные комплексные числа, т.е. выражение вида $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \dots$.

Полной системой векторов или **базисом** называется такая система векторов Ψ_1, Ψ_2, \dots (**базисных векторов**), с помощью которой произвольный вектор Ψ можно представить в виде линейной комбинации $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \dots$, которая называется **разложением вектора по базису**. Коэффициенты разложения c_n , которые являются, в общем случае, комплексными числами, называются **компонентами вектора** (**координатами вектора** или **амплитудами разложения**). Совокупность $\{c_n\}$ (или $\{c_A\}$) коэффициентов разложения вектора Ψ называется **представителем вектора Ψ** .

Размерностью пространства называется максимальное число базисных векторов. **Конечномерным (N -мерным)** называется линейное пространство, если в нем существует N базисных векторов.

В конечномерном пространстве, разложение вектора по базису можно записать в виде $\Psi = \sum_{n=1}^N c_n \Psi_n$.

Бесконечномерным называется линейное пространство, если в нем существует любое количество базисных векторов. В бесконечномерном пространстве, разложение вектора по базису имеет вид

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n .$$

В обоих случаях (конечномерном и бесконечномерном) индекс суммирования принимает дискретные значения из натурального ряда чисел.

Возможны случаи, когда индекс суммирования пробегает непрерывный (континуальный) ряд значений. Обозначим такой индекс символом A . В этом случае обобщением разложения вектора в бесконечный ряд будет интеграл

$$\Psi = \int_{A_{\min}}^{A_{\max}} c_A \Psi_A dA .$$

Интегрирование здесь ведется по всей области определения переменной A ; эта область может быть ограниченной или неограниченной. В последнем случае пределы интегрирования становятся бесконечными.

Векторы Ψ_n будем называть **дискретными базисными векторами**, а векторы Ψ_A - **непрерывными базисными векторами**.

Обычно, в разложении вектора по базису, мы не будем указывать пределы суммирования и интегрирования, полагая, что они известны. Итак, произвольный вектор Ψ имеет разложение

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n \quad \text{в дискретном базисе } \Psi_n,$$

$$\Psi = \int c_A \Psi_A dA \quad \text{в непрерывном базисе } \Psi_A.$$

Условимся о следующих обозначениях. Компоненты разложения c_A вектора Ψ по **непрерывным** базисным векторам Ψ_A обозначать как $\psi_A \equiv \psi(A)$. Разложения для векторов Ψ и Φ тогда примет вид

$$\Psi = \int \psi_A \Psi_A dA, \quad \Phi = \int \varphi_A \Psi_A dA .$$

Компоненты разложения c_n вектора Ψ по **дискретным** базисным векторам будем обозначать как c_n или d_n :

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n, \quad \Phi = \sum_n d_n \Psi_n .$$

Евклидовым называется N -мерное линейное пространство любой природы, если в нем имеется правило посредством которого лю-

бым двум векторам Ψ и Φ ставится в соответствие (конечное) комплексное число, называемое **скалярным произведением**, обозначаемое символом (Ψ, Φ) причем выполнены требования:

1. $(\Psi, \Phi)^* = (\Phi, \Psi)$ (симметричность),
2. $(\Psi + \Phi, X) = (\Psi, X) + (\Phi, X)$ (линейность),
3. $(\Psi, c\Phi) = c(\Psi, \Phi)$ (однородность),
4. $(\Psi, \Psi) \geq 0$; $(\Psi, \Psi) = 0$, если $\Psi = 0$ (положительная определенность).

Гильбертовым (в честь немецкого математика Д.Гильберта (1862–1943)) называется линейное бесконечномерное пространство в котором определено скалярное произведение векторов и имеется полная система базисных векторов.

Нормой вектора называется величина $|\Psi| = \sqrt{(\Psi, \Psi)}$. Выражение $|\Psi|^2 = (\Psi, \Psi)$ называется **скалярным квадратом**. **Нормируемым** называется вектор норма которого конечна, т.е. для него выполняется условие $(\Psi, \Psi) < \infty$. Все векторы эвклидова или гильбертова пространства - нормируемые векторы.

Нормированным (нормированным на единицу, единичным вектором) называется вектор для которого выполняется условие нормировки $(\Psi, \Psi) = 1$.

Если норма вектора Ψ равна не единице, а некоторому числу, то всегда можно приготовить другой вектор Ψ' нормированный на единицу $\Psi' = \Psi / |\Psi|$.

Ортогональными называются два вектора для которых выполняется условие ортогональности $(\Psi, \Phi) = 0$.

Ортонормированной системой векторов называется множество попарно ортогональных единичных векторов, т.е. такая система для любых двух векторов Ψ_n и $\Psi_{n'}$ которой выполняется **условие ортонормированности**

$$(\Psi_n, \Psi_{n'}) = \delta_{nn'}, \text{ где } \delta_{nn'} = \begin{cases} 1, & n = n' \\ 0, & n \neq n' \end{cases}$$

Пусть базис представляет собой ортонормированную систему векторов. Тогда скалярное произведение двух векторов в этом базисе можно записать через компоненты разложения этих векторов

$$\begin{aligned} (\Psi, \Phi) &= \left(\sum_n c_n \Psi_n, \sum_{n'} d_{n'} \Psi_{n'} \right) = \sum_{n, n'} c_n^* d_{n'} (\Psi_n, \Psi_{n'}) = \\ &= \sum_{n, m} c_n^* d_{n'} \delta_{nn'} = \sum_n c_n^* d_n. \end{aligned}$$

Итак

$$(\Psi, \Phi) = \sum_n c_n^* d_n.$$

Отсюда, в частности следует, что

$$(\Psi, \Psi) = \sum_n |c_n|^2. \quad (1)$$

Это соотношение называется равенством Парсеваля. Очевидно, что это равенство есть не что иное как теорема Пифагора обобщенная на бесконечномерный случай. В случае непрерывного базиса обобщением равенства Парсеваля будет выражение

$$(\Psi, \Psi) = \int_{-\infty}^{\infty} |c_A|^2 dA. \quad (2)$$

Норма любого вектора в гильбертовом пространстве конечна, поэтому из (1) и (2) следует, что для коэффициентов разложения справедливы соотношения

$$\sum_n |c_n|^2 < \infty, \quad (3)$$

$$\int |c_A|^2 dA < \infty. \quad (4)$$

Дискретная последовательность коэффициентов $\{c_n\}$, которая удовлетворяет равенству (3) называется *квадратично суммируемой*. Из таких последовательностей можно образовать конкретное гильбертово пространство, которое обозначается как l_2 . Непрерывная последовательность коэффициентов $\{c_A\}$ которая удовлетворяет равенству (4) называется *квадратично интегрируемой*. Из таких последовательностей можно образовать конкретное гильбертово пространство, которое обозначается как L_2 . Соотношения (3) и (4) не что иное как требование конечной нормы для элементов этого пространства.

1.1.2. КОНКРЕТНЫЕ РЕАЛИЗАЦИИ ЛИНЕЙНЫХ ПРОСТРАНСТВ.

1.1.2.1. Пространство конечных числовых последовательностей.

Определение. Пусть векторами пространства являются конечные последовательности из N комплексных чисел. Для двух произвольных векторов $\Psi = \{c_i\}_N \equiv \{c_1, c_2, \dots, c_N\}$

и $\Phi = \{d_i\}_N \equiv \{d_1, d_2, \dots, d_N\}$ из этого пространства операции сложения и умножения на число определены правилами:

$$\Psi + \Phi = \{c_i + d_i\}_N \equiv \{c_1 + d_1, c_2 + d_2, \dots, c_N + d_N\};$$

$$a\Psi = \{ac_i\}_N \equiv \{ac_1, ac_2, \dots, ac_N\}.$$

Скалярное произведение. Операция скалярного произведения в пространстве числовых последовательностей определена следующим образом

$$(\Psi, \Phi) = \sum_{n=1}^N c_n^* d_n$$

Матричная запись числовых последовательностей. Числовые последовательности принято записывать в виде матриц-строк или матриц-столбцов. Мы будем пользоваться вторым способом. Например, для двух произвольных векторов можем записать

$$\Psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ \dots \\ c_N \end{pmatrix}, \quad \Phi = \begin{pmatrix} d_1 \\ \dots \\ d_N \end{pmatrix}.$$

Поэтому вместо термина "пространство числовых последовательностей" можно пользоваться термином – *пространство числовых столбцов*.

Сопряженной называют матрицу комплексно сопряженную исходной и затем еще и транспонированную. Для матрицы столбца операция сопряжения приводит к строке

$$\Psi^+ \equiv \Psi^{*T} = (c_1^* \quad \dots \quad c_N^*).$$

Используя правило умножения матриц можем записать скалярное произведение числовых последовательностей как произведение строки на столбец

$$(\Psi, \Phi) = \sum_{n=1}^N c_n^* d_n = (c_1^* \quad \dots \quad c_N^*) \begin{pmatrix} d_1 \\ \dots \\ d_N \end{pmatrix} = \Psi^+ \Phi.$$

1.1.2.2. Пространство квадратично суммируемых бесконечных последовательностей.

Пусть векторами пространства являются бесконечные последовательности комплексных чисел $\Psi = \{c_n\}_\infty \equiv \{c_1, c_2, \dots\}$. Операции сложения, умножения на комплексное число и скалярное произведение определяются так же как и для конечных последовательностей. Таким образом все соотношения, которые были записаны для конечных последовательностей остаются здесь в силе. Пусть, кроме того,

векторы имеют конечный скалярный квадрат т.е.

$$(\Psi, \Psi) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* c_n = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 < \infty.$$

Пространство из таким образом определенных векторов, является гильбертовым, обозначается как l_2 и называется *пространством бесконечных квадратично суммируемых (с конечной нормой, с суммируемым квадратом) последовательностей*.

1.1.2.3. Пространство квадратично интегрируемых функций.

Пространство $L_2(a,b)$. Пусть векторами пространства являются комплексные функции от действительной переменной $x \in (a,b)$. Обозначим элемент этого пространства как $\psi(x)$. Это обозначение понимается как бесконечное непрерывное (несчетное) множество чисел $\psi(x)$, а переменная x как непрерывный индекс. Таким образом функцию $\psi_x \equiv \psi(x)$ можно рассматривать как непрерывный аналог дискретной бесконечной последовательности $\{\psi_i\}_{\infty}$.

Скалярным произведением любых двух функций $\psi(x)$ и $\varphi(x)$ из этого пространства называется число

$$(\psi(x), \varphi(x)) = \int_a^b \psi^*(x) \varphi(x) dx.$$

Это скалярное произведение будет конечно не для любых двух функций, а только для *квадратично интегрируемых функций*, т.е. функций для которых скалярный квадрат конечен

$$(\psi(x), \psi(x)) = \int_a^b \psi^*(x) \psi(x) dx = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx < \infty.$$

Требование квадратичной интегрируемости равносильно требованию конечной нормы $|\psi(x)| = \sqrt{(\psi(x), \psi(x))} < \infty$.

Пространство $L_2(-\infty, +\infty)$. Особую роль в квантовой механике играет пространство $L_2(-\infty, +\infty)$ - *пространство квадратично интегрируемых комплексных функций на интервале $x \in (-\infty, +\infty)$* . Скалярным произведением любых двух функций $\psi(x)$ и $\varphi(x)$ из этого пространства называется число

$$(\psi, \varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \varphi(x) dx < \infty.$$

1.2. ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ.

Линейным оператором \hat{A} называется правило, по которому каждому вектору Ψ линейного пространства ставится в соответствие другой вектор Φ этого же пространства, т.е. $\hat{A}\Psi = \Phi$, причем, для любых векторов Ψ_1, Ψ_2 и любых комплексных чисел c_1, c_2 выполняются равенства: 1) $\hat{A}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{A}\Psi_1 + \hat{A}\Psi_2$; 2) $\hat{A}(c\Psi) = c\hat{A}\Psi$.

Обычно выражение $\Phi = \hat{A}\Psi$ читается следующим образом: «При действии на вектор Ψ оператора \hat{A} получается вектор Φ ». В этой формулировке оператор не есть нечто конкретное – это абстрактный оператор, который действует на абстрактные векторы. В лучшем случае действие оператора можно описать словами, например «действие оператора заключается в удлинении вектора» или «действие оператора заключается в повороте вектора». В конкретных пространствах оператор получает свою конкретную реализацию, например, это может быть матрица, ядро интегрального оператора или дифференциальный оператор.

Все операторы квантовой механики являются линейными; поэтому в дальнейшем, говоря об операторах, мы будем иметь в виду только линейные операторы.

Определим основные алгебраические действия над операторами.

Суммой операторов \hat{A} и \hat{B} называется оператор $\hat{A} + \hat{B}$, действие которого определяется правилом: $(\hat{A} + \hat{B})\Psi = \hat{A}\Psi + \hat{B}\Psi$.

Произведением оператора \hat{A} на число называется оператор $\hat{A}c$ или $c\hat{A}$, действие которого определяется правилом: $(\hat{A}c)\Psi = (c\hat{A})\Psi = c(\hat{A}\Psi)$.

Произведением операторов \hat{A} и \hat{B} называется оператор $\hat{A}\hat{B}$, действие которого определяется последовательным применением операторов-сомножителей: $(\hat{A}\hat{B})\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi)$.

Произведение операторов \hat{A} и \hat{B} коммутативно, если для него выполняется условие $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Коммутирующими называются операторы, для которых их произведение коммутативно.

В общем случае, произведение операторов не коммутативно, т.е. $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Поэтому в записи произведения операторов существенен их порядок. Алгебра, в которой нельзя менять порядок следования множителей называется *некоммутативной алгеброй*, а сами величины *некоммутирующими*.

Коммутатором операторов \hat{A} и \hat{B} называется оператор $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Коммутатор коммутирующих операторов равен нулю $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Произведение операторов \hat{A} и \hat{B} **антикоммутирует**, если выполняется условие $\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A}$. Это означает, что в результате применения оператора $\hat{A}\hat{B}$ получается тот же вектор, что и в результате применения оператора $\hat{B}\hat{A}$, но с обратным знаком. **Антикоммутирующими** называются операторы, для которых их произведение антикоммутирует, Коммутатор антикоммутирующих операторов не равен нулю $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$.

Возведением оператора в степень n называется последовательное повторение n раз действия одного и того же оператора \hat{A} : $\hat{A}^n = \hat{A}\hat{A}\dots\hat{A}$.

Например: $\hat{A}^2\psi = \hat{A}(\hat{A}\psi)$, $\hat{A}^3\psi = \hat{A}[\hat{A}(\hat{A}\psi)]$.

Линейный оператор \hat{A}^+ называется **сопряженным** линейному оператору \hat{A} если для любых векторов Ψ и Φ выполняется условие $(\hat{A}^+\Psi, \Phi) = (\Psi, \hat{A}\Phi)$.

Свойства операции сопряжения:

1. $\hat{I}^+ = \hat{I}$
2. $(\hat{A} + \hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+$
3. $(c\hat{A})^+ = c^* \hat{A}^+$
4. $(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$
5. $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$

Линейный оператор \hat{A} называется **самосопряженным** если выполняется условие $(\hat{A}\Psi, \Phi) = (\Psi, \hat{A}\Phi)$ или, кратко, $\hat{A}^+ = \hat{A}$.

Теорема 1. Для того, чтобы произведение $\hat{A}\hat{B}$ двух самосопряженных операторов \hat{A} и \hat{B} было самосопряженным оператором необходимо и достаточно, чтобы эти операторы коммутировали.

▼ **Доказательство.**

1. Достаточность. Требуется доказать, если операторы коммутируют $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, то $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{A}\hat{B}$. Действительно, согласно свойству 5 и условию коммутативности имеем $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+ = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$

2. Необходимость. Требуется доказать, если произведение является самосопряженным оператором, т.е. если $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{A}\hat{B}$, то операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют. Действительно, с одной стороны $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{A}\hat{B}$. С другой стороны $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+ = \hat{B}\hat{A}$. Сравнивая пра-

вые части видим, что выполняется равенство $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, т.е. операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют ▲

Следствие. Из того, что любой оператор коммутирует сам с собой следует, что для любого самосопряженного оператора \hat{A} его степень, т.е. \hat{A}^n также является самосопряженным оператором.

1.3. УРАВНЕНИЕ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ.

Оператор \hat{A} ставит в соответствие вектору Ψ вектор Φ этого же пространства $\hat{A}\Psi = \Phi$. Может оказаться, что действие оператора \hat{A} на некоторый вектор Ψ сводится просто к умножению этого вектора на число, т.е. может оказаться, что для некоторого вектора Ψ справедливо уравнение

$$\hat{A}\Psi = A\Psi, \quad (1)$$

где A - вообще говоря комплексное число. Если вектор, удовлетворяющий уравнению (1) существует, то он называется **собственным вектором** (СВ) оператора \hat{A} , а соответствующее этому вектору значение числа A называется **собственным значением** (СЗ). Говорят, что собственный вектор Ψ **принадлежит** собственному значению A . Количество собственных векторов может быть конечным или даже бесконечным. При этом различным собственным векторам соответствуют, вообще говоря, различные собственные значения. Множество всех СЗ называется **спектром** оператора. Задача отыскания всех СЗ оператора и принадлежащих им собственных векторов называется **задачей на собственные значения**. Решение этой задачи состоит в решении уравнения (1), которое называется **уравнением на собственные значения** (УСЗ). УСЗ играет фундаментальную роль в квантовой механике.

В результате решения УСЗ может оказаться, что множество СЗ является дискретным. Другими словами векторы Ψ существуют только при некоторых избранных значениях числа A . В этом случае СЗ нумеруются дискретными индексами из натурального ряда: A_1, A_2, A_3, \dots , а спектр оператора называется **дискретным**. СВ нумеруются индексами в соответствии с номерами тех СЗ, которым они принадлежат т.е. Ψ_1, Ψ_2, \dots . УСЗ в случае дискретного спектра принимает вид $\hat{A}\Psi_n = A_n\Psi_n$.

В некоторых случаях одному СЗ оператора соответствует несколько СВ. Про такой спектр говорят, что он **вырожден**. Количество СВ принадлежащих одному СЗ называется **кратностью вырожде-**

ния этого СЗ. УСЗ в случае вырожденного спектра принимает вид:

$$\hat{A}\Psi_{nk} = \hat{A}_n\Psi_{nk}.$$

СЗ могут пробегать и непрерывный ряд значений A на отрезке $-\infty \leq A_{min} \leq A \leq A_{max} \leq +\infty$. Тогда спектр оператора называется **непрерывным**. СВ непрерывного спектра нельзя пронумеровать числами из натурального ряда В этом случае векторы зависят от собственного значения A как от параметра, пробегающего непрерывное множество значений. СВ в этом случае называются **обобщенными собственными векторами** и нумеруются индексом из символа СЗ - Ψ_A . Эти СВ удовлетворяют уравнению $\hat{A}\Psi_A = A\Psi_A$.

СЗ произвольного оператора могут быть, вообще говоря, комплексными. В квантовой механике особую роль играют только такие операторы, которые приводят к вещественным СЗ. Такими операторами являются самосопряженные операторы. Важное значение самосопряженных операторов в квантовой механике основано на существовании следующих теорем.

Теорема 2. *Собственные значения самосопряженного оператора вещественны.*

▼ *Доказательство.* Пусть Φ - какой-либо вектор из собственных векторов самосопряженного оператора, т.е. этот вектор удовлетворяет уравнению $\hat{A}\Phi = A\Phi$. Используем определение самосопряженного оператора $(\hat{A}\Psi, \Phi) = (\Psi, \hat{A}\Phi)$. Полагая в этом уравнении, что $\Psi = \Phi$ перепишем его левую часть $(\hat{A}\Psi, \Psi) = A^*(\Psi, \Psi)$. Теперь рассмотрим правую часть. Для нее имеем

$$(\Psi, \hat{A}\Psi) = (\Psi, A\Psi) = A(\Psi, \Psi) = A(\Psi, \Psi).$$

Левые части этих равенств по определению совпадают, а значит, $A = A^*$. Но это может быть только в том случае, когда A - число вещественное. ▲

Теорема 3. *Если \hat{A} - самосопряженный оператор, то собственные векторы, отвечающие различным собственным значениям этого оператора ортогональны, т.е. удовлетворяют соотношению.*

$$(\Psi_n, \Psi_{n'}) = 0, \quad n \neq n' \text{ - дискретный спектр,}$$

$$(\Psi_A, \Psi_{A'}) = 0, \quad A \neq A' \text{ - непрерывный спектр.}$$

▼ *Доказательство.* Докажем эту теорему полагая, что спектр оператора дискретный. Для каких либо двух различных с.в. имеем $\hat{A}\Psi_n = A_n\Psi_n$ и $\hat{A}\Psi_{n'} = A_{n'}\Psi_{n'}$.

Умножим первое уравнение скалярно на $\Psi_{n'}$:

$$(\Psi_{n'}, \hat{A}\Psi_n) = A_n(\Psi_{n'}, \Psi_n), \quad (1)$$

а второе на Ψ_n :

$$(\Psi_n, \hat{A}\Psi_{n'}) = A_{n'}(\Psi_n, \Psi_{n'}). \quad (2)$$

Сделаем комплексное сопряжение уравнения (2)

$$(\hat{A}\Psi_{n'}, \Psi_n) = A_{n'}^*(\Psi_{n'}, \Psi_n) \quad (3)$$

или, учитывая, что оператор самосопряженный и что собственные значения самосопряженного оператора вещественны

$$(\Psi_{n'}, \hat{A}\Psi_n) = A_{n'}(\Psi_{n'}, \Psi_n). \quad (4)$$

Вычтем уравнение (4) из (1)

$$(A_{n'} - A_n)(\Psi_{n'}, \Psi_n) = 0. \quad (5)$$

Поскольку по условию теоремы с.в. принадлежат различным с.з., т.е. $A_{n'} \neq A_n$, то из (5) следует, что $(\Psi_{n'}, \Psi_n) = 0$.

Заметим, что свойство дискретности спектра практически не использовалось. Поэтому это решение остается в силе и для непрерывного спектра. (У Мессиа стр.185 говорится, что нельзя таким же образом записать и условие ортогональности, хотя у Левича говорится, что условие ортогональности для непрерывного спектра ничем не отличается от дискретного спектра)▲

Собственные векторы дискретного спектра принято нормировать на единицу, т.е. полагают, что $(\Psi_n, \Psi_n) = 1$. Объединяя свойство ортогональности с условием нормировки, получим, что собственные векторы самосопряженного оператора удовлетворяют условию ортонормированности $(\Psi_n, \Psi_{n'}) = \delta_{nn'}$.

Собственные векторы непрерывного спектра нельзя нормировать таким образом. В этом случае применяется правило нормировки, которое называется **нормировкой на δ -функцию** $(\Psi_A, \Psi_{A'}) = \delta(A - A')$.

δ -функция - это функция, удовлетворяющая условиям:

$$1) \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - c) dx = f(c) \quad \text{или} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0), \quad 2) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1.$$

Свойства δ -функции

$$1) \delta(-x) = \delta(x); \quad 3) \delta(cx) = \delta(x) / c;$$

$$2) x\delta(x) = 0; \quad 4) \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk, \quad \delta(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{k}$$

$$\int \delta(x' - x'') \frac{\partial^2}{\partial x''^2} \delta(x'' - x) dx'' = \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \delta(x' - x), \quad \frac{d}{dx} \delta(x) = -\frac{d}{dx} \delta(-x).$$

Аппроксимация непрерывно дифференцируемыми функциями.

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{\pi} \frac{1}{\alpha^2 x^2 + 1}, \quad \delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2}, \quad \delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\alpha}{\pi} \frac{1}{\alpha^2 + x^2},$$

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\alpha \sin \alpha x}{\pi \alpha x}, \quad \delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\alpha \sin^2 \alpha x}{\pi \alpha^2 x^2},$$

$$\int \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x) \psi_{x'} dx' = - \frac{\partial \psi_{x'}}{\partial x'} \Big|_{x'=x} = - \frac{\partial \psi_x}{\partial x},$$

$$\int \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \psi_{x'} dx' = \frac{\partial \psi_x}{\partial x}, \quad \int \frac{d^n}{dx^n} \delta(x - x') \psi_{x'} dx' = \frac{d^n \psi_x}{dx^n}.$$

Дискретный вырожденный спектр. Пусть спектр оператора дискретный и вырожденный. Следовательно, его собственные векторы удовлетворяют уравнению $\hat{A} \Psi_{nk} = A_n \Psi_{nk}$ ($k=1 \dots s$). Векторы, относящиеся к одному собственному значению, вообще говоря, не будут ортогональны. Однако, поскольку эти s векторов линейно независимы, то с их помощью и процедуры ортогонализации их можно заменить на другие s векторы, которые уже будут ортогональны. После, кроме того, процедуры нормирования для этих новых векторов будет справедливо соотношение $(\Psi_{nk}, \Psi_{nk'}) = \delta_{kk'}$. Заметим, что решением уравнения на собственные значения, отвечающим данному F_n , в случае вырождения является не только каждый вектор Ψ_{nk} , но и линейная

комбинация $\Psi_n = \sum_k^s c_k \Psi_{nk}$. Учтем, что векторы, относящиеся к разным собственным значениям, всегда ортогональны. Учитывая это обстоятельство, мы можем общее условие ортонормированности для дискретного спектра записать в виде $(\Psi_{nk}, \Psi_{n'k'}) = \delta_{nn'} \delta_{kk'}$.

Теорема 4 (Спектральная теорема). У самосопряженных операторов, используемых в квантовой механике, существуют полные системы собственных векторов, т.е. системы, которые обеспечивают для любого вектора Ψ из гильбертова пространства разложение

$$\Psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n \text{ - дискретный спектр,}$$

$$\Psi = \int_{A_{\min}}^{A_{\max}} c_A \Psi_A dA \text{ - непрерывный спектр.}$$

Это означает, что из всех собственных векторов полного набора можно образовать базис данного пространства.

Заметим, что векторы Ψ_n принадлежат гильбертову пространству, а векторы Ψ_A ему не принадлежат, хотя и образуют базис.

Вычисление коэффициентов разложения. Пусть Ψ_n – ортонормированный базис. Умножим разложение произвольного вектора Ψ скалярно на Ψ_n

$$(\Psi_n, \Psi) = \sum_{n'} c_{n'} (\Psi_n, \Psi_{n'}) = \sum_n c_n \delta_{nn'} = c_n.$$

Итак

$$\boxed{c_n = (\Psi_n, \Psi)}. \quad (\text{M1})$$

В непрерывном случае поступаем аналогично

$$(\Psi_A, \Psi) = \int c_{A'} (\Psi_A, \Psi_{A'}) dA' = \int c_{A'} \delta(A - A') dA' = c_A$$

или

$$\boxed{c_A = (\Psi_A, \Psi)}. \quad (\text{M1}')$$

Таким образом, разложению вектора Ψ можно придать вид

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n = \sum_n (\Psi_n, \Psi) \Psi_n \quad \text{в дискретном базисе}$$

$$\Psi = \int c_A \Psi_A dA = \int (\Psi_A, \Psi) \Psi_A dA \quad \text{в непрерывном базисе.}$$

1.4. МАТРИЦА ОПЕРАТОРА.

Дискретный спектр. Пусть \hat{A} – произвольный линейный оператор $\Phi = \hat{A}\Psi$. Разложим векторы Ψ и Φ по собственным векторам Ψ_m некоторого другого оператора \hat{B} .

$$\Psi = \sum_m c_m \Psi_m \quad \text{и} \quad \Phi = \sum_m d_m \Psi_m.$$

Тогда

$$\Phi = \hat{A}\Psi = \hat{A} \sum_m c_m \Psi_m = \sum_m c_m \hat{A}\Psi_m.$$

Умножая скалярно на Ψ_n , получим

$$(\Psi_m, \Phi) = \sum_{m'} c_{m'} (\Psi_m, \hat{A}\Psi_{m'}) = \sum_{m'} A_{mm'} c_{m'}.$$

Учитывая, что $d_m = (\Psi_m, \Phi)$ получим

$$d_m = \sum_{m'} A_{mm'} c_{m'}. \quad (\text{M2})$$

Совокупность чисел $A_{mm'} = (\Psi_m, \hat{A}\Psi_{m'})$ называется *матрицей линейного оператора*.

Матрица оператора в собственном базисе. Если базисные векторы являются СВ данного оператора, тогда

$$A_{nn'} = (\Psi_n, \hat{A}\Psi_{n'}) = (\Psi_n, A_{n'}\Psi_{n'}) = A_{n'}(\Psi_n, \Psi_{n'}) = A_{n'}\delta_{nn'}.$$

Таким образом, матричные элементы в этом случае не равны нулю, только если они расположены на главной диагонали матрицы, т.е. если эта матрица является *диагональной*.

Свойства матрицы самосопряженного оператора. Пусть оператор самосопряженный $(\hat{A}\Psi, \Phi) = (\Psi, \hat{A}\Phi)$. Запишем это соотношение в форме $(\Phi, \hat{A}\Psi)^* = (\Psi, \hat{A}\Phi)$. Если теперь в качестве векторов взять два базисных вектора, то $(\Psi_n, \hat{A}\Psi_{n'})^* = (\Psi_{n'}, \hat{A}\Psi_n)$. Следовательно, $A_{nn'}^* = A_{n'n}$ или $A^+ = A$. Матрица, удовлетворяющая такому условию называется *самосопряженной*. Таким образом, матрица самосопряженного оператора в ортонормированном базисе из собственных векторов самосопряженного оператора является самосопряженной матрицей. Если все матричные элементы действительны, то $A_{nn'} = A_{n'n}$, и матрица в этом случае называется *симметричной*.

Непрерывный спектр. Пусть разложение вектора по базису имеет вид

$$\Psi = \int \psi_B \Psi_B dB \quad \text{и} \quad \Phi = \int \varphi_B \Psi_B dB.$$

Тогда действие оператора на вектор запишется в виде $\Phi = \hat{A}\Psi = \int \psi_{B'} \hat{A}\Psi_{B'} dB'$. Умножая это выражение скалярно на произвольный вектор Ψ_B , получим

$$(\Psi_B, \Phi) = \int (\Psi_B, \hat{A}\Psi_{B'}) \psi_{B'} dB' \equiv \boxed{\varphi_B = \int A_{BB'} \psi_{B'} dB'} \quad (\text{M2}')$$

Это выражение есть *матричное представление оператора в случае непрерывного спектра*. Функция $A_{BB'} \equiv A(B, B')$ является аналогом матрицы оператора и называется *ядром интегрального преобразования*.

1.5. ЗАМЕНА БАЗИСА.

Пусть в векторном пространстве имеется два разных дискретных ортонормированных базиса: Ψ_n из собственных векторов оператора \hat{A} и Ψ_m из собственных векторов оператора \hat{B} . Произвольный вектор Ψ имеет разложение $\Psi = \sum_m c_m \Psi_m$ в базисе Ψ_m и разложение

$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$ в базисе Ψ_n . Базисные векторы нового базиса Ψ_n разложим по базисным векторам Ψ_m .

$$\Psi_n = \sum_m U_{mn} \Psi_m. \quad (1)$$

Про это выражение говорят, что оно осуществляет преобразование от одного базиса к другому.

$$\begin{aligned} (\Psi_m, \Psi_n) &= (\Psi_m, \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'}) = \\ &= \sum_{m'} U_{m'n} (\Psi_m, \Psi_{m'}) = \sum_{m'} U_{m'n} \delta_{mm'} = U_{mn} \\ U_{mn} &= (\Psi_m, \Psi_n). \end{aligned}$$

Совокупность чисел $U_{mn} = (\Psi_m, \Psi_n)$ называется **матрицей преобразования**.

$$\Psi_n = \sum_m (\Psi_m, \Psi_n) \Psi_m. \quad (2)$$

Определим связь между компонентами разложения в разных базисах

$$c_m = (\Psi_m, \Psi) = (\Psi_m, \sum_n c_n \Psi_n) = \sum_n (\Psi_m, \Psi_n) c_n$$

или

$$\boxed{c_m = \sum_n U_{mn} c_n = \sum_n (\Psi_m, \Psi_n) c_n.} \quad (3)$$

Пусть спектр оператора \hat{A} - дискретный, а \hat{B} - непрерывный. Тогда формулы (2) и (3) примут вид

$$\begin{aligned} \Psi_n &= \int (\Psi_B, \Psi_n) \Psi_B dB, \\ \Psi_B &= \sum_n (\Psi_B, \Psi_n) c_n. \end{aligned}$$

Введем обозначения

$$\begin{aligned} (\Psi_B, \Psi_n) &\equiv \psi_n(B), \\ \Psi(B) &= \sum_n c_n \psi_n(B). \end{aligned}$$

Перепишем это выражение в более привычном для математики и квантовой механике виде, полагая $B=x$:

$$\boxed{\Psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x).} \quad (M3)$$

В математике это выражение называется разложением функции из пространства $L_2(-\infty, +\infty)$ по базису из системы ортонормированных

функций $\psi_n(x)$ ($n=1,2,\dots$). Покажем, что функции $\psi_n(x)$ являются квадратично интегрируемыми

$$\begin{aligned} (\psi_n(x), \psi_{n'}(x)) &= \int \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) dx = \int (\Psi_B, \Psi_n)^* (\Psi_B, \Psi_{n'}) dx = \\ &= \int ((\Psi_x, \Psi_n) \Psi_x, \Psi_{n'}) dx = (\int (\Psi_x, \Psi_n) \Psi_x dB, \Psi_{n'}) = (\Psi_n, \Psi_{n'}) = \delta_{nn'}. \end{aligned}$$

1.6. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ УСЗ.

Покажем, что если базисные векторы Ψ_m являются собственными векторами некоторого оператора \hat{A} , то столбцы матрицы U_{mn} являются собственными векторами оператора, записанного в матричной форме.

Рассмотрим УСЗ для оператора имеющего дискретный спектр $\hat{A}\Psi_n = A_n\Psi_n$. Разложим вектор Ψ_n по собственным векторам Ψ_m оператора \hat{B} : $\Psi_n = \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'}$ и подставим это разложение в УСЗ

$$\begin{aligned} \hat{A} \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'} &= A_n \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'}, \\ \sum_{m'} U_{m'n} \hat{A} \Psi_{m'} &= A_n \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'}. \end{aligned}$$

Умножим последнее равенство скалярно на Ψ_m

$$\sum_{m'} U_{m'n} (\Psi_m, \hat{A} \Psi_{m'}) = A_n \sum_{m'} U_{m'n} (\Psi_m, \Psi_{m'})$$

и, учитывая свойство ортонормированности векторов Ψ_m

$$\begin{aligned} \sum_{m'} U_{m'n} A_{mm'} &= A_n \sum_{m'} U_{m'n} \delta_{mm'}, \\ \sum_{m'} A_{mm'} U_{m'n} &= A_n U_{mn}, \end{aligned}$$

$$\sum_{m'} (\Psi_m, \hat{A} \Psi_{m'}) (\Psi_{m'}, \Psi_n) = A_n (\Psi_m, \Psi_n).$$

Для квантовой механики важен случай, когда спектр оператора \hat{A} дискретный, а оператора \hat{B} непрерывный. Тогда последнее выражение примет вид

$$\int A_{BB'} \psi_n(B') dB' = A \psi_n(B).$$

Положим $B=x$

$$\boxed{\int A_{xx'} \psi_n(x') dx' = A \psi_n(x).} \quad (\text{M4})$$

ПРИЛОЖЕНИЕ.

ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ – I.

1. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ БАЗИСА.

Пусть в гильбертовом пространстве имеется два разных дискретных ортонормированных базиса: Ψ_n из собственных векторов оператора \hat{A} и Ψ_m из собственных векторов оператора \hat{B} . Условно назовем базис Ψ_m старым, а базис Ψ_n новым. Базисные векторы нового базиса Ψ_n разложим по базисным векторам старого базиса Ψ_m .

$$\Psi'_n = \sum_m U_{mn} \Psi_m. \quad (1)$$

Про это выражение говорят, что оно осуществляет преобразование от одного базиса к другому.

$$(\Psi_m, \Psi'_n) = (\Psi_m, \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'}) = \sum_{m'} U_{m'n} (\Psi_m, \Psi_{m'}) = \sum_{m'} U_{m'n} \delta_{mm'} = U_{mn},$$

$$U_{mn} = (\Psi_m, \Psi'_n),$$

$$\Psi'_n = \sum_m (\Psi_m, \Psi'_n) \Psi_m,$$

$$U_{mn} = \begin{pmatrix} (\Psi_1, \Psi'_1) & (\Psi_1, \Psi'_2) & (\Psi_1, \Psi'_3) & \dots \\ (\Psi_2, \Psi'_1) & (\Psi_2, \Psi'_2) & (\Psi_2, \Psi'_3) & \dots \\ (\Psi_3, \Psi'_1) & (\Psi_3, \Psi'_2) & (\Psi_3, \Psi'_3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Совокупность чисел $U_{mn} = (\Psi_m, \Psi'_n)$ называется *матрицей преобразования*.

$$U_{nm}^{-1} = \begin{pmatrix} (\Psi'_1, \Psi_1) & (\Psi'_1, \Psi_2) & (\Psi'_1, \Psi_3) & \dots \\ (\Psi'_2, \Psi_1) & (\Psi'_2, \Psi_2) & (\Psi'_2, \Psi_3) & \dots \\ (\Psi'_3, \Psi_1) & (\Psi'_3, \Psi_2) & (\Psi'_3, \Psi_3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Найдем матрицу обратного преобразования

$$\Psi_m = \sum_n U_{nm}^{-1} \Psi'_n.$$

$$(\Psi'_n, \Psi_m) = (\Psi'_n, \sum_{n'} U_{n'm}^{-1} \Psi'_{n'}) = \sum_{n'} U_{n'm}^{-1} (\Psi'_n, \Psi'_{n'}) = \sum_{n'} U_{n'm}^{-1} \delta_{nn'} = U_{nm}^{-1}.$$

Отсюда следует, что

$$U_{nm}^{-1} = (\Psi'_n, \Psi_m).$$

Теперь учтем, что

$$U_{mn}^* = (\Psi_m, \Psi'_n)^* = (\Psi'_n, \Psi_m).$$

Сравнивая левые и правые части двух последних выражений приходим к выводу, что

$$U^{-1} = U_{nm}^*.$$

Символически это можно записать так

$$U^{-1} = U^{*T} \text{ или } U^{-1} = U^+.$$

Матрица, обладающая таким свойством, называется **унитарной**, таким образом, *матрица преобразования ортонормированных базисов является унитарной*.

$$U^{-1} = U^{*T} = (U_{mn}^*) = \begin{pmatrix} (\Psi_1, \Psi'_1) & (\Psi_1, \Psi'_2) & (\Psi_1, \Psi'_3) & \dots \\ (\Psi_2, \Psi'_1) & (\Psi_2, \Psi'_2) & (\Psi_2, \Psi'_3) & \dots \\ (\Psi_3, \Psi'_1) & (\Psi_3, \Psi'_2) & (\Psi_3, \Psi'_3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix},$$

$$U_{nm} = \begin{pmatrix} (\Psi'_1, \Psi_1) & (\Psi'_1, \Psi_2) & (\Psi'_1, \Psi_3) & \dots \\ (\Psi'_2, \Psi_1) & (\Psi'_2, \Psi_2) & (\Psi'_2, \Psi_3) & \dots \\ (\Psi'_3, \Psi_1) & (\Psi'_3, \Psi_2) & (\Psi'_3, \Psi_3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

2. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ КОМПОНЕНТ ВЕКТОРА ПРИ СМЕНЕ БАЗИСА.

2.1. Преобразование от дискретного спектра к дискретному.

Произвольный вектор Ψ имеет разложение

$$\Psi = \sum_m c_m \Psi_m \quad (2)$$

в базисе Ψ_m и разложение

$$\Psi = \sum_n c'_n \Psi'_n \quad (3)$$

в базисе Ψ_n .

Определим связь между компонентами разложения в разных базисах

$$c_m = (\Psi_m, \Psi) = (\Psi_m, \sum_n c'_n \Psi'_n) = \sum_n (\Psi_m, \Psi'_n) c'_n$$

или

$$\boxed{c_m = \sum_n U_{mn} c'_n}. \quad (4)$$

Обратное преобразование

$$c'_n = \sum_m U_{nm}^{-1} c_m = \sum_m (\Psi'_n, \Psi_m) c_m. \quad (5)$$

Замечание. Столбцы матрицы преобразования как базисные столбцы.

Выражения (4) и (4') есть преобразование компонент одного и того же вектора при смене базиса. Но можно дать и другую интерпретацию - как разложение по базису вектора из пространства числовых столбцов. Основанием для этого является то, что, во-первых, матрица $U_{nm} = (\Psi'_n, \Psi_m)$ является унитарной и поэтому ее столбцы попарно ортогональны, во-вторых, эта матрица имеет обратную, т.е. она невырожденная и, следовательно, ее столбцы линейно-независимы. Поэтому из столбцов этой матрицы можно образовать базис, в котором разложение вектора

$$\vec{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix},$$

т.е. выражение $c_m = \sum_n U_{mn} c'_n$ примет вид

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} c_{m=1} \\ c_{m=2} \\ c_{m=3} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_{n=1} \\ c'_{n=2} \\ c'_{n=3} \end{pmatrix} = \\ &= c'_{n=1} \begin{pmatrix} U_{11} \\ U_{21} \\ U_{31} \end{pmatrix} + c'_{n=2} \begin{pmatrix} U_{12} \\ U_{22} \\ U_{32} \end{pmatrix} + c'_{n=3} \begin{pmatrix} U_{13} \\ U_{23} \\ U_{33} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6)$$

Введя для базисных векторов обозначение

$$\vec{e}_n = \begin{pmatrix} U_{1n} \\ U_{2n} \\ U_{3n} \end{pmatrix},$$

можем придать разложению (6) вид

$$\vec{c} = \sum_n c_n \vec{e}_n. \quad (6)$$

Из сравнения с (2) видно, что *одни и те же числа c_m являются коэффициентами разложения*

- вектора Ψ в пространстве абстрактных векторов,
- вектора $\{c_m\}$ пространстве числовых последовательностей при условии, что базис в пространстве числовых последовательностей образован из столбцов матрицы перехода $U_{mn} = (\Psi_m, \Psi'_n)$.

2.2. Преобразование от непрерывного спектра к непрерывному.

$$\psi_B = \int (\Psi_B, \Psi_A) \psi_A dA = \int U_{BA} \psi_A dA.$$

Поскольку коэффициенты разложения ψ_A , являются квадратично-интегрируемыми функциями, то такое разложение возможно.

Доказательство. ▼ Пусть имеется два базиса Ψ_A и Ψ_B . Разложение произвольного вектора примет в этих базисах вид $\Psi = \int \psi_A \Psi_A dA$ и $\Psi = \int \psi_B \Psi_B dB$.

Поэтому получим

$$\psi_B = (\Psi_B, \Psi) = (\Psi_B, \int \psi_A \Psi_A dA) = \int \psi_A (\Psi_B, \Psi_A) dA. \blacktriangle$$

Обратное преобразование

$$\psi_A = \int (\Psi_A, \Psi_B) \psi_B dB = \int U_{AB}^{-1} \psi_B dA.$$

Введем обозначения

$$U_{BA} = (\Psi_B, \Psi_A) \equiv \psi_A(B),$$

$$U_{AB}^{-1} = (\Psi_A, \Psi_B) \equiv \psi_B(A).$$

Отсюда видим, что, поскольку $(\Psi_A, \Psi_B) = (\Psi_B, \Psi_A)^*$, то

$$\psi_B(A) = \psi_A^*(B).$$

С учетом введенных обозначений

$$\psi_A = \int \psi_B(A) \psi_B dB \quad \text{и} \quad \psi_B = \int \psi_A(B) \psi_A dA.$$

2.3. Преобразование от непрерывного спектра к дискретному.

Пусть спектр оператора \hat{A} - непрерывный, а \hat{B} - дискретный. Тогда

$$\psi_B = \sum_n (\Psi_B, \Psi_n) c_n = \sum_n c_n \psi_n(B),$$

$$\Psi_n = \int (\Psi_B, \Psi_n) \Psi_B, \Psi_n dB$$

2.4. Преобразование от дискретного спектра к непрерывному.

Пусть спектр оператора \hat{A} - дискретный, а \hat{B} - непрерывный. Тогда

$$\psi_B = \sum_n (\Psi_B, \Psi_n) c_n = \sum_n c_n \psi_n(B).$$

Перепишем это выражение в более привычном для математики и квантовой механике виде. Для этого положим $B=x$. Тогда это выражение примет вид

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x).$$

В математике это выражение называется разложением произвольной функции из пространства $L_2(-\infty, +\infty)$ по базису из системы ортонормированных функций $\psi_n(x)$ ($n=1,2,\dots$). Покажем, что функции $\psi_n(x)$ являются квадратично интегрируемыми

$$\begin{aligned} (\psi_n(x), \psi_{n'}(x)) &= \int \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) dx = \int (\Psi_B, \Psi_n)^* (\Psi_B, \Psi_{n'}) dx = \\ &= \int ((\Psi_x, \Psi_n) \Psi_x, \Psi_{n'}) dx = \left(\int (\Psi_x, \Psi_n) \Psi_x dB, \Psi_{n'} \right) = (\Psi_n, \Psi_{n'}) = \delta_{nn'}. \end{aligned}$$

Здесь использована формула преобразования от непрерывного базиса к дискретному

$$\Psi_n' = \int (\Psi_x, \Psi_n') \Psi_x dx.$$

3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ УСЗ.

3.1. УСЗ для операторов с дискретным спектром.

Покажем, что если базисные векторы Ψ_m являются собственными векторами некоторого оператора \hat{A} , то *столбцы матрицы U_{mn} являются собственными векторами оператора*, записанного в матричной форме.

Рассмотрим УСЗ для оператора имеющего дискретный спектр $\hat{A}\Psi_n = A_n\Psi_n$. Разложим вектор Ψ_n по собственным векторам Ψ_m оператора \hat{B} : $\Psi_n = \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'}$ (нет смысла говорить просто о некотором

базисе Ψ_m , т.к. нет другого способа образования базиса кроме как из собственных векторов некоторого оператора. см. тж. Зам. 4) и подставим это разложение в УСЗ

$$\begin{aligned} \hat{A} \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'} &= A_n \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'}, \\ \sum_{m'} U_{m'n} \hat{A} \Psi_{m'} &= A_n \sum_{m'} U_{m'n} \Psi_{m'}. \end{aligned}$$

Умножим скалярно на Ψ_m

$$\sum_{m'} U_{m'n} (\Psi_m, \hat{A} \Psi_{m'}) = A_n \sum_{m'} U_{m'n} (\Psi_m, \Psi_{m'})$$

и, учитывая свойство ортонормированности векторов Ψ_m

$$\begin{aligned}\sum_{m'} U_{m'n} A_{mm'} &= A_n \sum_{m'} U_{m'n} \delta_{mm'}, \\ \sum_{m'} A_{mm'} U_{m'n} &= A_n U_{mn}, \\ \sum_{m'} (\Psi_m, \hat{A} \Psi_{m'}) (\Psi_{m'}, \Psi_n) &= A_n (\Psi_m, \Psi_n).\end{aligned}$$

3.2. УСЗ для операторов с непрерывным спектром.

$$\int (\Psi_B, \hat{A} \Psi_{B'}) (\Psi_{B'}, \Psi_A) dB' = A (\Psi_B, \Psi_A).$$

Это выражение является формулировкой задачи на собственные значения в пространстве непрерывных числовых последовательностей. Векторы (Ψ_B, Ψ_A) являются собственными векторами интегрального оператора с ядром $(\Psi_B, \hat{A} \Psi_{B'})$.

Можно записать это выражение также в виде

$$\boxed{\int A_{BB'} \psi_A(B') dB' = A \psi_A(B).}$$

Функция $\psi_A(B)$ называется *собственной функцией оператора \hat{A} в B -представлении*.

Воспользуемся последним соотношением и найдем собственную функцию оператора \hat{A} в своем собственном, т.е. A -представлении.

УСЗ в этом случае примет вид $\int A_{A'A''} \psi_A(A'') dA'' = A \psi_A(A')$.

Ответ можно записать сразу $\psi_A(A') = (\Psi_{A'}, \Psi_A) = \delta(A - A')$. Тем не менее, вычислим левую часть

$$\begin{aligned}\int A_{A'A''} \psi_A(A'') dA'' &= \int (\Psi_{A'}, \hat{A} \Psi_{A''}) \psi_A(A'') dA'' = \\ &= \int (\hat{A} \Psi_{A'}, \Psi_{A''}) \psi_A(A'') dA'' = \int A' (\Psi_{A'}, \Psi_{A''}) (\Psi_{A''}, \Psi_A) dA'' = \\ &= A' \int \delta(A' - A'') \delta(A'' - A) dA'' = A' \delta(A' - A) = A \delta(A' - A), \\ A \delta(A' - A) &= A \psi_A(A') \Rightarrow \psi_A(A') = \delta(A - A').\end{aligned}$$

3.3. УСЗ для случая, когда спектр одного оператора непрерывный, а другого дискретный.

Для квантовой механики важен случай, когда спектр оператора \hat{A} дискретный, а оператора \hat{B} непрерывный. Тогда последнее выражение примет вид

$$\boxed{\int A_{BB'} \psi_n(B') dB' = A_n \psi_n(B).}$$

Положим $B=x$

$$\boxed{\int A_{xx'} \psi_n(x') dx' = A_n \psi_n(x)}. \quad (\text{M3})$$

ЗАДАЧИ

1. Доказать, что система комплексных функций

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ix}, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i2x}, \dots, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{inx}, \dots \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

является ортогональной и нормированной системой векторов в пространстве $L_2(0, 2\pi)$.

Решение. В интервале от 0 до 2π

для $m \neq n$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{imx} dx &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-n)x} dx = \frac{1}{2\pi i(m-n)} e^{i(m-n)x} \Big|_0^{2\pi} = \\ &= \frac{e^{i(m-n)2\pi} - 1}{2\pi i(m-n)} = \frac{\cos((m-n)2\pi) - 1}{2\pi i(m-n)} = 0, \end{aligned}$$

для $m=n$

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{inx} dx = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dx = \frac{1}{2\pi} x \Big|_0^{2\pi} = 1.$$

2. Доказать, что система комплексных функций

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ix}, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i2x}, \dots, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{inx}, \dots, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

является ортогональной и нормированной в пространстве $L_2(-\pi, \pi)$.

Решение. В интервале от $-\pi$ до π

для $m \neq n$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-inx} e^{imx} dx &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(m-n)x} dx = \frac{1}{2\pi i(m-n)} e^{i(m-n)x} \Big|_{-\pi}^{\pi} = \\ &= \frac{e^{i(m-n)\pi} - e^{-i(m-n)\pi}}{2\pi i(m-n)} = \frac{\sin((m-n)\pi)}{\pi(m-n)} = 0, \end{aligned}$$

для $m=n$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-inx} e^{inx} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx = \frac{1}{2\pi} x \Big|_{-\pi}^{\pi} = 1.$$

3. Доказать, что система комплексных функций

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i2\pi x}, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i4\pi x}, \dots, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i2\pi n x}, \dots, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

является ортогональной и нормированной в пространстве $L_2(0,1)$.

4. Доказать, что система функций

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{\cos x}{\sqrt{\pi}}, \frac{\sin x}{\sqrt{\pi}}, \frac{\cos 2x}{\sqrt{\pi}}, \frac{\sin 2x}{\sqrt{\pi}}, \dots, \frac{\cos nx}{\sqrt{\pi}}, \frac{\sin nx}{\sqrt{\pi}}, \dots$$

является ортогональной и нормированной в пространстве $L_2(-\pi, \pi)$.

Решение. В интервале от $-\pi$ до π

$$(\psi_{n'}, \psi_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos n'x \cos nxdx = \begin{cases} 1, & n' = n \\ 0, & n' \neq n \end{cases}$$

$$(\psi_{n'}, \psi_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin n'x \sin nxdx = \begin{cases} 1, & n' = n \\ 0, & n' \neq n \end{cases}$$

$$(\psi_{n'}, \psi_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos n'x \sin nxdx = 0.$$

5. Доказать, что система функций

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}, \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos x, \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos 3x, \dots, \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos nx, \dots$$

является ортогональной и нормированной в пространстве $L_2(0, \pi)$.

Решение. В интервале от 0 до π

$$\frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \cos n'x \cos nxdx = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos n'x \cos nxdx = \begin{cases} 1, & n' = n \\ 0, & n' \neq n \end{cases}$$

6. Доказать, что система функций

$$\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin x, \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin 2x, \dots, \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin nx, \dots$$

является ортогональной и нормированной в пространстве $L_2(0, \pi)$.

Решение. В интервале от 0 до π

$$\frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \sin n'x \sin nxdx = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin n'x \sin nxdx = \begin{cases} 1, & n' = n \\ 0, & n' \neq n \end{cases}$$

7. Произвольную квадратично-интегрируемую функцию можно разложить в интервале от 0 до 2π в ряд Фурье

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{inx}, \text{ где}$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \psi(x) e^{-inx} dx.$$

Показать, что $(\psi_n(x), \psi(x)) = c_n$,

$$\begin{aligned} (\psi_n(x), \psi(x)) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi_n^*(x) \psi(x) dx = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} \left(\sum_{n'=-\infty}^{\infty} c_{n'} e^{in'x} \right) dx = \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} c_{n'} \int_0^{2\pi} e^{i(n'-n)x} dx = \sum_{n'=-\infty}^{\infty} c_{n'} \delta_{nn'} = c_n. \end{aligned}$$

8. Оператор дифференцирования. Пусть вектором Ψ будет функция $\psi(x)$ из пространства $L_2(-\infty, +\infty)$. Пусть функция $\varphi(x)$ получается из $\psi(x)$ путем дифференцирования $\varphi(x) = \frac{d}{dx} \psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$. Эта запись означает, что функции $\psi(x)$ правило действия $\frac{d}{dx}$ сопоставляет функцию $\varphi(x) = \psi'(x)$. Следовательно, оператор дифференцирования имеет вид $\hat{A} = \frac{d}{dx}$. Линейность этого оператора следует из свойства производной $\frac{d}{dx} (c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)) = c_1 \frac{d}{dx} \psi_1(x) + c_2 \frac{d}{dx} \psi_2(x)$.

9. Оператор умножение функции $\psi(x)$ на независимую переменную. Пусть вектором Ψ будет функция $\psi(x)$ из пространства $L_2(-\infty, +\infty)$. Пусть функция $\varphi(x)$ получается из $\psi(x)$ путем умножения на независимую переменную x . Тогда это можно записать так:

$$\varphi(x) = \hat{x}\psi(x) \equiv x\psi(x).$$

В этом случае каждой функции $\psi(x)$ независимая переменная сопоставляет другую функцию $\varphi(x) = x\psi(x)$. Поэтому независимую переменную можно также рассматривать как оператор, который мы обозначаем через \hat{x} . Линейность этого оператора очевидна.

10. Сумма операторов. Пусть операторами будут $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$ и $\hat{B} = \frac{\partial}{\partial y}$, а вектором, на которую они действуют - функция $\psi(x, y)$. Тогда, по определению суммы операторов $\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y}$.

11. Сумма операторов. Пусть $\hat{A} = x$, $\hat{B} = \frac{d}{dx}$. Тогда

$$\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi = x\psi + \frac{d\psi}{dx}.$$

12. Произведение операторов. Из операторов \hat{x} и $\frac{d}{dx}$ можно составить оператор-произведение $\hat{x} \frac{d}{dx}$, имеющий следующий смысл:

$$\left(\hat{x} \frac{d}{dx}\right)\psi = x \frac{d\psi}{dx}.$$

13. Коммутирующие операторы. Операторы \hat{x} и \hat{y} или операторы $\frac{\partial}{\partial x}$ и $\frac{\partial}{\partial y}$, действующие на функции вида $\psi(x, y)$ являются операторами, которые коммутируют между собой. Действительно

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y}\right)\psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y}, \quad \left(\frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y}.$$

14. Возведение оператора в степень.

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^2 \psi = \frac{d}{dx} \left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \frac{d^2 \psi}{dx^2}.$$

15. Доказать, что если $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 1$, то $\hat{A}\hat{B}^2 - \hat{B}^2\hat{A} = 2\hat{B}$.

Решение. Для доказательства умножаем первое выражение на \hat{B} слева $\hat{B}\hat{A}\hat{B} - \hat{B}^2\hat{A} = \hat{B}$ и справа $\hat{A}\hat{B}^2 - \hat{B}\hat{A}\hat{B} = \hat{B}$. Складывая эти результаты, получим доказательство.

16. В каких случаях для операторов справедлива формула элементарной алгебры

$$(\hat{A} - \hat{B})(\hat{A} + \hat{B}) = (\hat{A} + \hat{B})(\hat{A} - \hat{B}) = \hat{A}^2 - \hat{B}^2.$$

Решение.

$$\begin{aligned} (\hat{A} + \hat{B})(\hat{A} - \hat{B}) &= (\hat{A}^2 - \hat{B}^2) - (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}), \\ (\hat{A} - \hat{B})(\hat{A} + \hat{B}) &= (\hat{A}^2 - \hat{B}^2) - (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}). \end{aligned}$$

Ответ: формула имеет место в тех случаях, когда операторы коммутируют.

17. Определить действие операторов $\left(\frac{d}{dx}x\right)^2$ и $\left(x\frac{d}{dx}\right)^2$ на функцию $\sin x$.

Решение.

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dx}x\right)^2 \sin x &= \left(\frac{d}{dx}x\right)\left(\frac{d}{dx}(x \sin x)\right) = \left(\frac{d}{dx}x\right)(\sin x + x \cos x) = \\ &= \frac{d}{dx}(x \sin x + x^2 \cos x) = \sin x + x \cos x + 2x \cos x - x^2 \sin x = \\ &= \sin x + 3x \cos x - x^2 \sin x. \\ \left(x \frac{d}{dx}\right)^2 \sin x &= \left(x \frac{d}{dx}\right)\left(x \frac{d}{dx} \sin x\right) = x \frac{d}{dx}(x \cos x) = \\ &= x(\cos x - x \sin x) = x \cos x - x^2 \sin x. \end{aligned}$$

- 18.** Определить результаты возведения операторов в степень а)

$$\left(\frac{d}{dx} + 1\right)^2.$$

Решение.

$$\left(\frac{d}{dx} + 1\right)^2 \psi = \left(\frac{d}{dx} + 1\right)\left(\frac{d\psi}{dx} + \psi\right) = \frac{d^2\psi}{dx^2} + 2\frac{d\psi}{dx} + \psi = \left(\frac{d^2}{dx^2} + 2\frac{d}{dx} + 1\right)\psi.$$

- 19.** Записать оператор $\hat{A} = \left(\frac{d}{dx} + \hat{x}\right)^2$ без скобок.

Решение. Вычисляем последовательно, применяя оператор к произвольной функции:

$$\begin{aligned} \hat{A} \psi &= \left(\frac{d}{dx} + x\right)^2 \psi = \left(\frac{d}{dx} + x\right)\left(\frac{d\psi}{dx} + x\psi\right) = \frac{d}{dx}\left(\frac{d\psi}{dx} + x\psi\right) + x\left(\frac{d\psi}{dx} + x\psi\right) = \\ &= \frac{d^2\psi}{dx^2} + \psi + x\frac{d\psi}{dx} + x\frac{d\psi}{dx} + x^2\psi = \left(\frac{d^2}{dx^2} + 2x\frac{d}{dx} + x^2 + 1\right)\psi, \end{aligned}$$

т.е.
$$\hat{A} = \left(\frac{d}{dx} + x\right)^2 = \left(\frac{d}{dx}\right)^2 + 2x\frac{d}{dx} + x^2 + 1 \neq \left(\frac{d}{dx}\right)^2 + 2x\frac{d}{dx} + x^2.$$

- 20.** Доказать, что $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$.
- 21.** Доказать, что $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$. Указание: раскрыть левую и правую части и убедиться в их равенстве. Следствие $[\hat{A}, \hat{B}^2] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}]$.
- 22.** Доказать, что $[\hat{C}\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{C}, \hat{B}]\hat{A}$. Следствие $[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}$.

Решение:

$$[\hat{C}\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{C}\hat{A},$$

$$\hat{C}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{C}, \hat{B}]\hat{A} = \hat{C}\hat{A}\hat{B} - \hat{C}\hat{B}\hat{A} + \hat{C}\hat{B}\hat{A} - \hat{B}\hat{C}\hat{A}.$$

23. Найти коммутатор операторов \hat{x} и $\frac{\hat{d}}{dx}$.

Решение. С одной стороны $\left(\hat{x} \frac{d}{dx}\right)\psi(x) = \hat{x} \left(\frac{d\psi(x)}{dx}\right) = x \frac{d\psi(x)}{dx}$. С дру-

гой стороны $\left(\frac{d}{dx} \hat{x}\right)\psi(x) = \frac{d}{dx} x\psi(x) = \psi + x \frac{d\psi(x)}{dx}$. Вычитая из пер-

вого уравнения второе, получим: $\left(\frac{\hat{d}}{dx} \hat{x} - \hat{x} \frac{\hat{d}}{dx}\right)\psi(x) = \psi(x) \neq 0$. Та-

ким образом, оператор $\frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx}$ будучи применен к произволь-

ной функции ψ , не меняет ее, т. е. $\frac{d}{dx} x - x \frac{d}{dx} = 1$. Следовательно

коммутатор равен $\left[\hat{x}, \frac{d}{dx}\right] = 1$.

24. Записать условие, которому должен удовлетворять в пространстве $L_2(-\infty, +\infty)$ сопряженный оператор.

Ответ. $\int (\hat{A}^+ \psi(x))^* \varphi(x) dx = \int \psi^*(x) \hat{A} \varphi(x) dx$.

25. Записать условие, которому должен удовлетворять в пространстве $L_2(-\infty, +\infty)$ самосопряженный оператор.

Ответ. $\int (\hat{A} \psi(x))^* \varphi(x) dx = \int \psi^*(x) \hat{A} \varphi(x) dx$.

26. Доказать, что если операторы \hat{A} и \hat{B} - самосопряженные, то оператор $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ - также самосопряженный.

Решение. $(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})^+ = (\hat{A}\hat{B})^+ + (\hat{B}\hat{A})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+ + \hat{A}^+ \hat{B}^+ = \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$.

27. Доказать, что если операторы \hat{A} и \hat{B} - самосопряженные, но не коммутирующие, то оператор $[\hat{A}\hat{B}]$ не обладает свойством самосопряженности, но оператор $i[\hat{A}\hat{B}]$ - самосопряженный.

Решение. $[\hat{A}\hat{B}]^+ = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+ - \hat{A}^+ \hat{B}^+ =$

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

$$(i[\hat{A}\hat{B}])^+ = (i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}))^+ = -i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^+ =$$

$$= -i\hat{B}^+ \hat{A}^+ + i\hat{A}^+ \hat{B}^+ = i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}).$$

28. Доказать, что если операторы \hat{A} и \hat{B} - самосопряженные, то их коммутатор можно представить в виде $[\hat{A}\hat{B}] = i\hat{C}$, где \hat{C} - самосопряженный оператор.

Решение. Имеем (см. предыдущую задачу) $[\hat{A}\hat{B}]^+ = -[\hat{A}\hat{B}]$. Введем обозначение $\hat{F} = [\hat{A}\hat{B}]$. Тогда имеем $\hat{F}^+ = -\hat{F}$. Умножим это равенство на мнимую единицу $i\hat{F}^+ = -i\hat{F}$ и, с учетом свойств операции сопряжения, перепишем это равенство в виде $(-i\hat{F})^+ = -i\hat{F}$. Введем обозначение $\hat{C} = -i\hat{F}$. Тогда имеем $\hat{C} = \hat{C}^+$, т.е. оператор \hat{C} самосопряженный. Учитывая, что $\hat{F} = i\hat{C}$ и определение оператора \hat{F} , получим $[\hat{A}\hat{B}] = i\hat{C}$.

29. Доказать, что в пространстве $L_2(-\infty, +\infty)$ справедливы **правила переброса производной**

$$\left(\frac{d\psi}{dx}, \varphi \right) = - \left(\psi, \frac{d\varphi}{dx} \right), \quad \left(\frac{d^2\psi}{dx^2}, \varphi \right) = \left(\psi, \frac{d^2\varphi}{dx^2} \right).$$

Решение. Производя интегрирование по частям и учитывая, что функции ψ и φ обращаются в нуль на пределах интегрирования получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\psi}{dx}, \varphi \right) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*(x)}{dx} \varphi(x) dx = \\ &= \psi^*(x)\varphi(x) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} dx. \end{aligned}$$

Правило переброса второй производной найдем, применяя дважды правило переброса первой производной. При этом нужно иметь ввиду, что производная $d\psi^*(x)/dx$ равна нулю на бесконечности

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2\psi}{dx^2}, \varphi \right) &= \left(\frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \psi, \varphi \right) = - \left(\frac{d}{dx} \psi, \frac{d}{dx} \varphi \right) = \\ &= \left(\psi, \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \varphi \right) = \left(\psi, \frac{d^2\varphi}{dx^2} \right). \end{aligned}$$

В общем случае можно показать (см. Соколов §7):

$$\int \frac{d^n \psi(x)}{dx^n} \varphi(x) dx = (-1)^n \int \psi(x) \frac{d^n \varphi(x)}{dx^n} dx.$$

30. Проверить, является ли оператор $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ самосопряженным.

Решение. Применяем правило переброса производной

$$\left(\frac{d}{dx} \psi, \varphi \right) = \left(\psi, -\frac{d}{dx} \varphi \right).$$

Можем представить полученный результат в виде $(\hat{A}\psi, \varphi) = (\psi, (-\hat{A})\varphi)$. Т.е. операторы $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ и $\hat{A}^+ = -\frac{d}{dx}$ сопряжены друг другу, но они не самосопряженные.

31. Проверить, является ли оператор $\hat{A} = i\frac{d}{dx}$ самосопряженным.

Решение. Применяя правило переброса производной, находим

$$\left(i\frac{d}{dx}\psi, \varphi\right) = -i\left(\frac{d}{dx}\psi, \varphi\right) = i\left(\psi, \frac{d}{dx}\varphi\right) = \left(\psi, i\frac{d}{dx}\varphi\right).$$

Итак, оператор \hat{A} удовлетворяет критерию самосопряженности.

32. Проверить, являются ли оператор $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$ самосопряженным.

Решение. То, что оператор $\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2}$ самосопряженный следует непосредственно из правила переброса второй производной.

33. Проверить, является ли оператор умножения на независимую переменную $\hat{A} = x$ самосопряженным.

Решение. Учитывая, что x есть величина действительная, получим $(x\psi, \varphi) = x(\psi, \varphi) = (\psi, x\varphi)$. Поэтому оператор $\hat{A} = x$ есть оператор самосопряженный.

34. Проверить, является ли собственной функцией оператора

$$\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \text{ функция: а) } e^{-\frac{1}{2}x^2}; \text{ б) } xe^{-\frac{1}{2}x^2}.$$

Ответ: а) Да СЗ=1 ; б) Да. СЗ=3.

Решение.

а)

$$\begin{aligned} \hat{A}e^{-\frac{1}{2}x^2} &= \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right)e^{-\frac{1}{2}x^2} = -\frac{d^2}{dx^2}e^{-\frac{1}{2}x^2} + x^2e^{-\frac{1}{2}x^2} = \\ &= \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}e^{-\frac{1}{2}x^2}\right) + x^2e^{-\frac{1}{2}x^2} = \frac{d}{dx}\left(xe^{-\frac{1}{2}x^2}\right) + x^2e^{-\frac{1}{2}x^2} = \\ &= e^{-\frac{1}{2}x^2} - x^2e^{-\frac{1}{2}x^2} + x^2e^{-\frac{1}{2}x^2} = e^{-\frac{1}{2}x^2}. \end{aligned}$$

35. Получить решение уравнения $-\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi$ (т.е. без граничных условий).

36. Получить решение уравнения $-\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi$ с граничными условиями $\psi(0)=\psi(l)=0$.

Решение. Перепишем ДУ в форме $\psi'' + E\psi = 0$. Это есть однородное линейное дифференциальное уравнение второго порядка относительно неизвестной функции ψ . Кроме того заметим, что оператор является самосопряженным. Введем обозначение $k = \sqrt{E}$ и запишем дифференциальное уравнение в виде $\psi'' + k^2\psi = 0$. Решение этого уравнения известно $\psi = A \sin(kx + \alpha)$. Используем теперь граничные условия. Из условия $\psi(0)=0$ следует $A \sin \alpha = 0$ откуда $\alpha = 0$. Из условия $\psi(l)=0$ получаем $\psi(l) = A \sin(kl) = 0$ откуда следует, что $kl = \pi n$. Найдем k : $k = \frac{\pi}{l}n$, $n=1,2,\dots$ Отсюда для

СЗ. имеем $E_n = \frac{\pi^2 n^2}{l^2}$. Для СФ имеем $\psi(x) = A \sin \frac{\pi n}{l} x$. Постоянную A определим из условия нормировки $(\psi_n(x), \psi_n(x)) = A_n^2 \int_0^l \sin^2 \frac{\pi n}{l} x dx = A_n^2 \frac{l}{2} = 1$. Отсюда $A_n = \sqrt{\frac{2}{l}}$ и $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n}{2l} x$.

Легко проверить, что эти функции образуют ортонормированную систему. Эти функции образуют базис в пространстве $L_2(0,l)$. Любую функцию в этом пространстве можно разложить в ряд Фурье

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin \frac{\pi n}{2l} x, \\ c_n &= (\psi(x), \psi_n(x)) = \int_0^l \psi(x) \psi_n(x) dx = \\ &= \sqrt{\frac{2}{l}} \int_0^l \psi(x) \sin \frac{\pi n}{2l} x dx. \end{aligned}$$

37. Получить решение уравнения $-i \frac{d}{dx} \psi = p\psi$.

ЧАСТЬ 2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.

2.1. ПРИНЦИП СУПЕРПОЗИЦИИ. ПОНЯТИЕ СОСТОЯНИЯ.

Основным понятием для квантовой механики является понятие *состояния*. В классической механике состояние частицы в произвольный момент времени t однозначно определяется заданием одновременно пространственного положения частицы, которое описывается радиус-вектором \vec{r} , и импульса \vec{p} , т.е. комплекта $\{\vec{r}, \vec{p}\}$. Если в пространство внесена система координат, то тогда состояние частицы характеризуется шестью числами $\{x, y, z; p_x, p_y, p_z\}$ три из которых проекции радиус-вектора, т.е. координаты, а три проекции импульса. Внешние силы, действующие на частицу, считаются известными. Поскольку частица движется по определенным законам, то достаточно знать состояние частицы в начальный момент времени и эти законы, чтобы вычислить координаты и импульсы для произвольного момента времени. **Тогда мы сможем предсказать состояние объекта и в произвольный момент времени, т.е. объекта.** Зная координаты и импульсы можно определить другие механические величины, которые через них выражаются. Важнейшими из таких величин являются энергия и момент импульса, поскольку для них справедливы законы сохранения (также как и для импульса). В классической и квантовой механике все перечисленные механические величины – координата, импульс, момент импульса, энергия – называют *динамическими переменными*. Каждую динамическую переменную можно измерить, причем в классической механике полагается, что все динамические переменные можно измерить в принципе сколь угодно точно, причем одновременно.

Явление дифракции электронов явно указывает на то, что микрочастицы обладают волновыми свойствами. Обратимся к оптике. Дифракция световых волн возникает вследствие их интерференции. Интерференция волн, в свою очередь, возникает потому, что для волн справедлив принцип суперпозиции. Пусть \vec{E}_1 и \vec{E}_2 напряженности электрических полей двух световых волн. Принцип суперпозиции утверждает, что наложение этих волн образует результирующее поле с напряженностью $\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2$. Интенсивность результирующей волны есть $I = \vec{E}^2 = (\vec{E}_1 + \vec{E}_2)^2 = I_1 + I_2 + I_{12}$, где последнее слагаемое на-

зывается интерференционным слагаемым. Приведенные соображения подсказывают, что отказавшись от описания состояния частиц классическим образом, мы можем взять самое важное из теории волн, а именно возможность их сложения, т.е. образования из волн линейной суперпозиции. Это заключение лежит в основе квантового *принципа суперпозиции: квантовые состояния должны обладать свойством характерным для всяких волн, а именно допускать участие в линейных операциях или, другими словами, любая линейная комбинация (суперпозиция) возможных квантовых состояний должна являться также возможным квантовым состоянием.* Из принципа суперпозиции, таким образом, следует, что квантовые состояния должны обладать теми же свойствами, что и абстрактные векторы и поэтому могут быть представлены как векторы в некотором векторном пространстве, которое полагается гильбертовым. То, что квантовые состояния описываются именно *абстрактными* векторами, следует из того, что на эти векторы не наложено никаких дополнительных условий кроме необходимости их участия в линейных операциях. Вектор, который поставлен в соответствие квантовому состоянию называется *вектором состояния* и обозначается как Ψ . В общем случае вектор состояния может зависеть от времени, так что полностью следует писать $\Psi(t)$. До тех пор пока исследование зависимости вектора состояния от времени не понадобится, мы аргумент t выписывать не будем. С учетом введенного для вектора состояния обозначения сформулируем принцип суперпозиции в более коротком виде: *Если квантовая система может находиться в состояниях Ψ_n , то она может находиться и в состоянии*
$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n .$$

Для иллюстрации этого принципа рассмотрим следующий мысленный эксперимент. Пусть электроны пролетают один за другим через непроницаемый экран с двумя щелями. Для начала поставим перегородку между щелями вдоль движения. Электрон пройдет либо через первую щель, либо через вторую. Пусть электрон прошел через первую щель. Мы можем сказать, что он перешел в некоторое состояние Ψ_1 . Если электрон прошел через вторую щель, то скажем, что электрон стал находиться в состоянии Ψ_2 . Теперь уберем перегородку. Согласно принципу суперпозиции электрон теперь находится в суперпозиции двух возможных состояний, а именно $\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$. Эта формула интересна вот в каком отношении. Из нее следует, что электрон за экраном находится в таком состоянии, как будто он прошел одновременно через обе щели. Такая картина вполне естественна

для обычных волн. Однако ее невозможно представить для частиц. Ведь достоверно известно, что электрон неделим, т.е. он не может раздвоиться и пройти через обе щели одновременно. Более того на экране детектора мы будем наблюдать типичную дифракционную картину от двух щелей. Ситуация такая как будто электрон не только раздвоился, но превратился в волну и волны от двух щелей интерферируют между собой давая наблюдаемую интерференционную картину. Однако из этого же опыта известно, что электроны дают на экране детектора точечные вспышки, т.е. регистрируются как частицы. В приведенных соображениях явно имеются противоречия, которые показывают, что движение электрона нельзя интерпретировать ни как движение частицы ни как движение волны. Электрон является квантовым объектом принципиально отличающимся от классического объекта, например частицы или волны. Поэтому электрон не допускает никакой наглядной интерпретации и тоже касается суперпозиционного состояния.

Подведем итог сказанному в виде следующего основного постулата.

Постулат 1 (Постулат о состоянии). *Состояния квантовой системы изображаются векторами $\Psi(t)$ абстрактного гильбертова пространства, называемого пространством состояний.*

Заметим, что принцип суперпозиции носил наводящий характер, теперь этот принцип является следствием постулата о состоянии.

2.2. ОПЕРАТОРЫ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН. СВЯЗЬ ОПЕРАТОРОВ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ИЗМЕРЕНИЙ.

Постулат 2 (Постулат об операторе). *В квантовой механике каждой динамической переменной A ставится в соответствие линейный самосопряженный оператор \hat{A} , действующий в гильбертовом пространстве векторов состояний и называемый наблюдаемой или квантовым оператором.*

Символически это сопоставление можно представить в виде:

динамическая переменная A → линейный самосопряженный	оператор \hat{A} .
--	----------------------

Несколько примеров: оператор координаты \hat{x} , оператор импульса \hat{p} , оператор момента импульса \hat{L} , оператор энергии \hat{H} , оператор спина \hat{S} .

В квантовой механике принято говорить не о физических величинах, а о динамических переменных. Связано это с тем, что физики

расходятся во мнении, что считать в квантовой механике физической величиной. В то же время смысл динамической переменной проще - это та физическая величина, которую можно экспериментально измерить. Отсюда и происходит термин "наблюдаемая". В этом курсе понятия физическая величина и динамическая переменная используются как синонимы (хотя лично мое мнение, что следует их различать).

Следующий постулат связывает математический формализм с результатами количественных экспериментов. Каждый такой эксперимент заключается в измерении динамической переменной и получении значения этой переменной.

Постулат 3 (Постулат об измерении). *Единственно возможными результатами измерения данной динамической переменной являются собственные значения оператора этой переменной.*

Чтобы установить какие значения в принципе можно получить при измерении следует решить задачу на собственные значения $\hat{A}\Psi = A\Psi$. Смысл постулата, таким образом, заключается в том, что совокупность всех собственных значений A тождественна с совокупностью всех возможных результатов измерения. Состояния, описываемые собственными векторами оператора \hat{A} , называют *собственными состояниями оператора \hat{A}* .

Постулат 4 (Постулат о коммутационных соотношениях). *Координатам и импульсам квантовой системы соответствуют операторы, удовлетворяющие коммутационным соотношениям.*

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, i, j=1, 2, 3,$$

т.е. оператор координаты и соответствующей проекции импульса не коммутируют, а оператор координаты и другой проекции импульса коммутируют. Заметим, что здесь впервые появляется постоянная Планка.

Строго говоря, конкретный вид всех операторов физических величин постулируется. Во многих случаях, когда квантовая система имеет классический аналог, для получения конкретного вида оператора пользуются таким рецептом. Берут классическое выражение для величины, а затем координаты и импульсы заменяют соответствующими операторами. Следует иметь в виду, что полученный по такому рецепту оператор надо обязательно проверить на самосопряженность. Следует также учитывать, что в квантовой механике есть операторы, которые не имеют классических аналогов, например, оператор спина. Возможность использовать для построения операторов физических величин их классические аналоги называется *принципом соответствия*.

Примеры.

1. Оператор координаты – это такой оператор, у которого собственными значениями являются координаты, т.е. $\hat{x}\Psi_x = x\Psi_x$. Здесь через Ψ_x обозначены собственные векторы оператора координаты. Если оператор действует не на собственный вектор, а на некоторый произвольный вектор Ψ , то имеем $\hat{x}\Psi = \Phi$.

2. Оператор импульса - это такой оператор, у которого собственными значениями являются импульсы, т.е. $\hat{p}_x\Psi_{p_x} = p_x\Psi_{p_x}$. Здесь через Ψ_p обозначены собственные векторы оператора импульса. Если оператор действует не на собственный вектор, а на некоторый произвольный вектор Ψ , то имеем $\hat{p}_x\Psi = \Phi$.

3. Пусть гамильтониан не зависит от времени. Это означает, что квантовая система находится в стационарном силовом поле. В этом случае гамильтониан совпадает с оператором энергии и следовательно собственными значениями этого оператора будут значения энергии. Обозначим значения энергии как E . Тогда задача на собственные значения приобретает вид $\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E$. Это уравнение известно как *стационарное уравнение Шредингера*. В случае дискретного спектра это уравнение, очевидно, можно записать в виде $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$.

Момент импульса. Моментом импульса называется вектор

$\hat{L} = [\vec{r}\vec{p}]$. Учитывая определение векторного произведения можем записать для оператора

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix}.$$

Запишем отдельно проекции

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x.$$

Гамильтониан. Установим вид чрезвычайно важного для квантовой механики оператора Гамильтона. Функция Гамильтона в классической механике есть сумма кинетической и потенциальной энергии

$$H = T + U = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z).$$

Соответствующий оператор в квантовой механике строится по принципу соответствия

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \hat{U}(x, y, z).$$

Первое слагаемое естественно назвать оператором кинетической энергии, т.е

$$\hat{T} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2).$$

Выражение для гамильтониана обобщим на случай, когда квантовая система находится в нестационарном силовом поле $U(x, y, z, t)$. В этом случае

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x, y, z, t).$$

Оператор Гамильтона в случае нестационарного силового поля не является оператором полной энергии.

ЗАДАЧИ

1. Найти коммутатор $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$.

Решение.

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}_x^2] &= \hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{p}_x\hat{x} = \hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_x - \hat{p}_x(\hat{x}\hat{p}_x - i\hbar) = \\ \text{Способ 1.} \quad &= (\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\hat{p}_x + \hat{p}_xi\hbar = 2i\hbar\hat{p}_x. \end{aligned}$$

$$\text{Способ 2. Используем } [\hat{A}, \hat{B}^2] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}].$$

$$\text{Тогда } [\hat{x}, \hat{p}_x^2] = [\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{p}_x + \hat{p}_x[\hat{x}, \hat{p}_x] = 2i\hbar\hat{p}_x.$$

2. Показать, что $[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar\hat{x}_k$, $i, j=1,2,3$ (индексы ставятся в циклическом порядке).

Решение.

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{y}] &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)\hat{y} - \hat{y}(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = (\hat{y}\hat{p}_z\hat{y} - \hat{z}\hat{p}_y\hat{y}) - (\hat{y}\hat{y}\hat{p}_z - \hat{y}\hat{z}\hat{p}_y) = \\ &= \hat{y}^2\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\hat{y} - \hat{y}^2\hat{p}_z + \hat{y}\hat{z}\hat{p}_y = \hat{z}(\hat{y}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{y}) = i\hbar\hat{z}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{x}] &= (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)\hat{x} - \hat{x}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = \hat{x}\hat{p}_y\hat{x} - \hat{y}\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{x}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{y}\hat{p}_x = \\ &= \hat{x}\hat{y}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_x\hat{x} = \hat{y}\hat{x}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_x\hat{x} = \hat{y}(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}) = i\hbar\hat{y}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_y, \hat{z}] &= (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)\hat{z} - \hat{z}(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) = \hat{z}\hat{p}_x\hat{z} - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{z}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{x}\hat{p}_z = \\ &= \hat{z}\hat{x}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z} = \hat{x}\hat{z}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z} = \hat{x}(\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z}) = i\hbar\hat{x}. \end{aligned}$$

Если индексы стоят не в циклическом порядке, то значения коммутаторов будут те же, но со знаком "-". Например,

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{z}] &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)\hat{z} - \hat{z}(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = \hat{y}\hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{p}_y\hat{z} - \hat{z}\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{z}\hat{p}_y = \\
&= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{y}\hat{p}_z = \hat{y}\hat{p}_z\hat{z} - \hat{y}\hat{z}\hat{p}_z = \hat{y}(\hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{p}_z) = -i\hbar\hat{y}.
\end{aligned}$$

3. Показать, что $[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\hat{p}_k$, $i, j=1, 2, 3$ (индексы ставятся в циклическом порядке).

4. Показать, что $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\hat{L}_k$, $i, j=1, 2, 3$ (индексы ставятся в циклическом порядке).

5. Показать, что $[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0$, $i, j=1, 2, 3$.

6. Показать, что $[\hat{L}_x, \hat{p}^2] = 0$.

Решение: $[\hat{L}_x, \hat{p}^2] = [\hat{L}_x, \hat{p}_x^2] + [\hat{L}_x, \hat{p}_y^2] + [\hat{L}_x, \hat{p}_z^2] = 0$ поскольку

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_x^2] = [\hat{L}_x, \hat{p}_x]\hat{p}_x + \hat{p}_x[\hat{L}_x, \hat{p}_x] = 0,$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_y^2] = [\hat{L}_x, \hat{p}_y]\hat{p}_y + \hat{p}_y[\hat{L}_x, \hat{p}_y] = 2i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z,$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_z^2] = [\hat{L}_x, \hat{p}_z]\hat{p}_z + \hat{p}_z[\hat{L}_x, \hat{p}_z] = -2i\hbar\hat{p}_y\hat{p}_z,$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}^2] = [\hat{L}_x, \hat{p}_x^2] + [\hat{L}_x, \hat{p}_y^2] + [\hat{L}_x, \hat{p}_z^2] = 0.$$

7. Показать, что $[\hat{L}_y, \hat{p}^2] = 0$.

8. Показать, что $[\hat{L}_z, \hat{p}^2] = 0$.

9. Показать, что $[\hat{L}, \hat{p}^2] = 0$.

Решение: $[\hat{L}, \hat{p}^2] = \vec{i}[\hat{L}_x, \hat{p}^2] + \vec{j}[\hat{L}_y, \hat{p}^2] + \vec{k}[\hat{L}_z, \hat{p}^2] = 0$.

10. Показать, что $[\hat{L}^2, \hat{p}^2] = 0$. $[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}$.

Решение: $[\hat{L}^2, \hat{p}^2] = \hat{L}[\hat{L}, \hat{p}^2] - [\hat{L}, \hat{p}^2]\hat{L} = 0$.

11. Показать, что $[\hat{p}_i, \hat{L}^2] \neq 0$.

Решение: $[\hat{p}_i, \hat{L}^2] = [\hat{p}_i, \hat{L}]\hat{L} + \hat{L}[\hat{p}_i, \hat{L}] \neq 0$.

2.3. ВЕРОЯТНОСТИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЯ.

2.3.1. ПОСТУЛАТ О ВЕРОЯТНОСТЯХ. ПОНЯТИЕ О ПРЕДСТАВЛЕНИИ ВЕКТОРА СОСТОЯНИЯ. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ.

Пусть состояние системы задано некоторым вектором состояния Ψ . Введем некоторый самосопряженный оператор \hat{A} . Произведем теперь многократное измерение величины A . Многократное измерение, по определению, это такое измерение в котором отсчеты значения величины проводятся множество раз в тождественных условиях, при этом результат измерения находят как среднее от всех имеющих-

ся значений отсчетов. Поэтому перед проведением каждого измерения мы будем считать, что квантовая система возвращается всякий раз в одно и то же исходное состояние Ψ .

Пусть спектр оператора, например, дискретный. Решив уравнение $\hat{A}\Psi_n = A_n\Psi_n$, мы получим значения A_n . Согласно постулату об измерении при каждом отчете мы будем получать одно из собственных значений оператора \hat{A} , т.е. одно из значений A_n . При разных отчетах будут появляться разные значения A_n , но все они принадлежат спектру собственных значений оператора \hat{A} . Естественно поставить вопрос о том как часто будут появляться одни и те же значения, т.е. каковы вероятности отдельных результатов измерений.

Постулат 5 (Постулат о вероятностях). *В состоянии квантовой системы, описываемом вектором состояния Ψ вероятность W_n получить при измерении динамической переменной A одно из ее возможных значений A_n равна квадрату модуля коэффициента c_n в разложении вектора Ψ по собственным состояниям Ψ_n оператора этой динамической переменной, т.е. эта вероятность определяется формулой*

$$W_n = |c_n|^2.$$

Если оператор динамической переменной имеет непрерывный спектр, то вероятность того, что в состоянии Ψ динамическая переменная примет значение, лежащее в интервале $(A, A+dA)$ определяется формулой

$$dW(A) = |\psi_A|^2 dA.$$

Произвольный вектор Ψ имеет разложение

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n \quad \text{в дискретном базисе } \Psi_n,$$

$$\Psi = \int c_A \Psi_A dA \quad \text{в непрерывном базисе } \Psi_A.$$

Совокупность коэффициентов разложения c_n (или c_A) вектора Ψ по собственным состояниям оператора \hat{A} называется **волновой функцией состояния Ψ в A -представлении**.

Выберем в качестве собственных состояний собственные векторы оператора координаты Ψ_x . Коэффициенты разложения произвольного вектора Ψ по собственным состояниям Ψ_x в этом случае принято обозначать как $\psi_x \equiv \psi(x)$. Т.е. разложение произвольного вектора Ψ по собственным состояниям Ψ_x будем записывать в виде

$$\Psi = \int \psi_x \Psi_x dx \equiv \int \psi(x) \Psi_x dx .$$

Выберем в качестве собственных состояний собственные векторы оператора импульса Ψ_p . Функция $\psi(p)$ является волновой функцией состояния Ψ в импульсном представлении. Коэффициенты разложения произвольного вектора Ψ по собственным состояниям Ψ_p в этом случае принято обозначать как $\psi_p \equiv \psi(p)$. Разложение произвольного вектора Ψ по собственным состояниям Ψ_p будем записывать в виде

$$\Psi = \int \psi_p \Psi_p dp \equiv \int \psi(p) \Psi_p dp .$$

В соответствии с постулатом вероятность обнаружить у частицы импульс в интервале $(p, p+dp)$ равна $dW(p) = |\psi(p)|^2 dp$.

Наконец выберем в качестве собственных состояний собственные векторы оператора Гамильтона, полагая, что спектр дискретный. Собственные векторы обозначим как Ψ_n . Разложение произвольного вектора Ψ по собственным состояниям Ψ_n будем записывать в виде

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n .$$

Собственные векторы нормированы условием $(\Psi_m, \Psi_n) = \delta_{mn}$. Коэффициенты разложения вектора произвольного вектора Ψ по собственным состояниям Ψ_n в этом случае принято обозначать как c_n . Совокупность коэффициентов, т.е. дискретная последовательность чисел c_n , является волновой функцией состояния Ψ в энергетическом представлении. В соответствии с постулатом вероятность обнаружить частицы значение энергии E_n равно $|c_n|^2$.

Комментарии.

1. Содержание постулата можно изобразить в виде схемы

$$\Psi \rightarrow \begin{cases} A_1, & W_1 = |c_1|^2 \\ & \dots \\ A_n, & W_n = |c_n|^2 . \\ & \dots \end{cases}$$

2. Очевидно, что в случае непрерывного спектра величина $|\psi_A|^2$ играет роль плотности вероятности. Коэффициенты разложения являются величинами имеющим размерность $\dim c_A = 1/\sqrt{\dim A}$.

3. Из спектральной теоремы известно, что операторы, используемые в квантовой механике, обладают полными системами собственных векторов. Таким образом, разложения вектора Ψ по собственным векторам квантового оператора, о котором говорится в постулате, возможно.

4. В случае непрерывного спектра задача на собственные значения имеет вид $\hat{A}\Psi_A = A\Psi_A$. Решениями этой задачи являются обобщенные собственные векторы Ψ_A , которые не являются элементами гильбертова пространства. Следовательно, эти собственные векторы, в соответствии с постулатом 1 не изображают физически реализуемые состояния. В то же время значимость этих состояний заключается в том, что из них можно образовать базис в гильбертовом пространстве.

Выводы.

1. Из рассмотренного постулата следует, что экспериментальному определению подлежат только собственные значения квантового оператора, а также вероятности различных наблюдений. Это означает, что ни вектор состояния, ни коэффициенты разложения не имеют самостоятельного физического смысла. Это вспомогательные математические понятия, обеспечивающие адекватность квантового формализма экспериментально наблюдаемым фактам.

Здесь интересно отметить, что хотя вектор состояния и волновые функции являются вспомогательными нефизическими и следовательно ненаблюдаемыми величинами, они в квантовой используются, т.е. имеют какой-то смысл. Это отличает их от понятия траектории, которая имеет физическое содержание, однако также является ненаблюдаемой и в квантовой механике не используется. Такое положение понятие траектории в квантовой механике привело разделению физиков на два лагеря: тех кто считает, что ненаблюдаемость траектории лишает это понятие в квантовой механике физического смысла и тех полагает, что физический смысл у этого понятия остается, только оно в квантовой механике оказалось лишним.

2. Смысл вектора состояния Ψ заключается в том, что он *содержит в себе исчерпывающую информацию о возможных результатах измерения* любой динамической переменной, которая характеризует квантовый объект (подобно тому как радиус-вектор \vec{r} заключает в себе всю информацию о пространственном положении частицы).

2.3.2. НОРМИРОВКА ВЕКТОРА СОСТОЯНИЯ И ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ.

Сумма всех вероятностей должна быть равна единице, т.е. должно выполняться равенство

$$\sum_n W_n = \sum_n |c_n|^2 = 1, \quad (2)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_A|^2 dA = 1. \quad (3)$$

На языке теории вероятностей это равенство означает, что вероятность того, что какое-либо событие произойдет (в нашем случае событием является получение результата измерения) равна единице, т.е., другими словами какой-либо результат измерения будет получен с достоверностью. Поэтому векторы состояния должны быть нормированными на единицу, т.е. должны удовлетворять условию нормировки

$$(\Psi, \Psi) = 1. \quad (4)$$

Отсюда следует, что выражения (2) и (3) являются *условием нормировки волновых функций*.

Выводы.

1. И в случае дискретного и в случае непрерывного спектра нормировка векторов состояния и волновых функций на единицу является следствием постулата о вероятностях, т.е. следствием вероятностной интерпретации коэффициентов разложения вектора состояния по базису из собственных векторов квантового оператора.

2. Из условия нормировки следует, что и вектор состояния и волновая функция определены неоднозначно, а с точностью до *фазового множителя* $e^{i\alpha}$ где α любое действительное число. Действительно, при умножении на такой множитель квадрат модуля вектора состояния и волновой функции не изменится. Отсюда в частности следует продолжение вывода сделанного в конце предыдущего пункта. При экспериментальном исследовании мы получаем значения вероятностей, т.е. квадраты модулей. При этом теряется информация о фазовых множителях волновых функций. Поэтому задача восстановления волновой функции по результатам опыта представляется принципиально невозможной (хотя у Блохинцева указывается, что в некоторых частных случаях это может оказаться возможным).

2.3.3. СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ ФИЗИЧЕСКОЙ ВЕЛИЧИНЫ.

Проведя достаточно большую (в идеале бесконечно большую серию отсчетов) можно получить среднее значение.

Теорема (Теорема о среднем значении). *Среднее значение физической величины A в состоянии Ψ определяется формулой $\bar{A} = (\Psi, \hat{A}\Psi)$.*

▼ *Доказательство.* Будем считать, для определенности, что спектр оператора \hat{A} дискретный и невырожденный $\hat{A}\Psi_n = A_n\Psi_n$.

Произвольный вектор Ψ разложим по собственным векторам этого оператора $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$.

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \sum_n W_n A_n = \sum_n |c_n|^2 A_n = \sum_n c_n^* c_n A_n = \sum_n c_n A_n (\Psi_n, \Psi)^* = \\ &= \sum_n c_n A_n (\Psi, \Psi_n) = \sum_n c_n (\Psi, A_n \Psi_n) = \sum_n c_n (\Psi, \hat{A} \Psi_n) = \\ &= (\Psi, \hat{A} \sum_n c_n \Psi_n) = (\Psi, \hat{A} \Psi). \end{aligned}$$



Среднее значение оператора в своем собственном состоянии.

Пусть система находится в одном из своих собственных состояний, т.е. состоянии, которое описывается одним из собственных векторов Ψ_n оператора \hat{A} . Это означает, что $\Psi = \Psi_n$, т.е. из всего ряда разложения осталось только одно слагаемое, причем $c_n = 1$. Но это означает, что $W_n = 1$, т.е. с достоверностью при каждом повторении измерения будет экспериментально обнаружено собственное значение A_n . Очевидно, что среднее значение физической величины A совпадет в этом случае с собственным значением A_n . Действительно, для среднего значения величины A имеем

$$\bar{A} = (\Psi_n, \hat{A} \Psi_n) = (\Psi_n, A_n \Psi_n) = A_n (\Psi_n, \Psi_n) = A_n.$$

Вывод: если система находится в собственном состоянии Ψ_n оператора \hat{A} , то с достоверностью при каждом отсчете мы будем получать одно и то же значение этой величины, равное ее собственному значению A_n .

В квантовой механике принята следующая терминология. Говорят, что физическая величина имеет в некотором состоянии *определенное значение* или, что она *может быть измерена точно*, если при многократном повторении опыта в тождественных условиях обнаруживается одно и то же значение физической величины. Из сказанного выше следует, что *физическая величина имеет определенное значение только в собственном состоянии оператора этой величины*.

2.3.4. УСЛОВИЯ, ПРИ КОТОРЫХ НЕСКОЛЬКО ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН МОГУТ ИМЕТЬ ОПРЕДЕЛЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ. ПОНЯТИЕ О ПОЛНОМ НАБОРЕ ОДНОВРЕМЕННО ИЗМЕРИМЫХ ВЕЛИЧИН.

В предыдущем параграфе был выяснены условия, при которых одна физическая величина может иметь определенное значение, т.е. быть точно измеренной. Важнейшим вопросом квантовой механики

является вопрос о возможности точно измерить одновременно две разные физические величины. С математической точки зрения эта проблема очевидно формулируется так: при каких условиях квантовая система может находиться в состоянии, которое является общим собственным состоянием для операторов величин A и B ? Ответ на этот вопрос дает следующая теорема.

Теорема 6 (Теорема об одновременной измеримости). *Для того, чтобы две физические величины A и B могли быть одновременно точно измерены, необходимо и достаточно, чтобы их операторы коммутировали.*

▼ *Доказательство.*

Необходимость. Докажем необходимость, т.е. следующее утверждение: если две величины A и B имеют одновременно определенные значения, то их операторы коммутируют.

Пусть квантовая система находится в состоянии Ψ_n , которое является общим собственным состоянием для операторов \hat{A} и \hat{B} . Физическая величина A имеет в нем определенное значение A_n , а физическая величина B имеет в нем определенное значение B_n , т.е.

$$\hat{A}\Psi_n = A_n\Psi_n \text{ и } \hat{B}\Psi_n = B_n\Psi_n.$$

Умножим первое уравнение слева на \hat{B} , а второе на \hat{A}

$$\hat{B}\hat{A}\Psi_n = B_n A_n \Psi_n \text{ и } \hat{A}\hat{B}\Psi_n = A_n B_n \Psi_n,$$

и вычтем из первого второе, т.е.

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})\Psi_n = (B_n A_n - A_n B_n)\Psi_n.$$

Очевидно, что правая часть равна нулю, потому что числа, которые можно переставлять местами. Отсюда следует, что равна нулю и правая часть

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})\Psi_n = 0.$$

Следовательно

$$[\hat{B}\hat{A}] = 0.$$

Достаточность. Докажем достаточность, т.е. следующее утверждение: если операторы двух величины A и B коммутируют, то эти величины могут одновременно иметь определенные значения, т.е. другими словами, что состояние в котором должна находиться квантовая система должно быть общим собственным состоянием для обоих операторов. Используя коммутативность, можем записать

$$\hat{A}\hat{B}\Psi_n = \hat{B}\hat{A}\Psi_n = \hat{B}A_n\Psi_n = A_n\hat{B}\Psi_n.$$

Сравнивая начало и конец выражения, видим, что $\hat{B}\Psi_n$ является собственным состоянием оператора \hat{A} , принадлежащей тому же собст-

венному значению F_n , что и Ψ_n . Это возможно только в том случае, если Ψ_n и $\hat{B}\Psi_n$ отличаются лишь множителем. Обозначив этот множитель через B_n можно записать

$$\hat{B}\Psi_n = B_n \Psi_n.$$

Отсюда следует, что операторы имеют одни и те же собственные состояния. ▲

Динамические переменные A, B, \dots образуют **полный набор одновременно измеримых величин**, если они обладают общей системой базисных функций, т.е. если операторы этих величин коммутируют.

2.3.5. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ.

Рассмотрим две динамические переменные, операторы которых не коммутируют. Это означает, что эти две величины не могут быть одновременно точно измерены. Другими словами при одновременном измерении этих двух величин экспериментально полученные значения каждой величины будут иметь разброс относительно среднего значения. Введем меру разброса этих значений - дисперсию

$$D_A = \overline{(\Delta A)^2} = \overline{(A - \bar{A})^2} = \overline{A^2} - (\bar{A})^2.$$

Теорема. Пусть коммутатор двух квантовых операторов представлен в виде $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, где \hat{C} - самосопряженный оператор. Тогда для дисперсий величин A и B справедливо неравенство

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4} (\bar{C})^2,$$

которое называется **соотношение неопределенностей**.

Пусть $C = \hbar$. Тогда

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

или

$$\sqrt{\overline{(\Delta A)^2}} \sqrt{\overline{(\Delta B)^2}} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Соотношение неопределенностей для координаты и импульса называется **неравенством Гейзенберга**. Для пары величин x и p_x можем записать

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}} \sqrt{\overline{(\Delta p_x)^2}} \geq \frac{\hbar}{2}$$

или

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

ЧАСТЬ 3.

ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ.

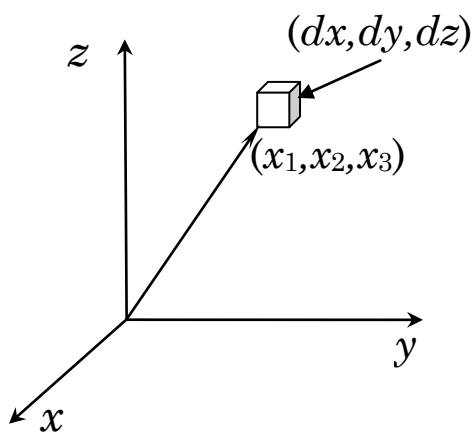
3.1. КООРДИНАТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВЕКТОРА СОСТОЯНИЯ.

Выберем в качестве собственных состояний собственные векторы оператора координаты Ψ_x . Коэффициенты разложения произвольного вектора Ψ по собственным состояниям Ψ_x в этом случае принято обозначать как $\psi_x \equiv \psi(x)$. Т.е. разложение произвольного вектора Ψ по собственным состояниям Ψ_x будем записывать в виде

$$\Psi = \int \psi_x \Psi_x dx \equiv \int \psi(x) \Psi_x dx .$$

В общем случае волновая функция является комплексной функцией трех пространственных переменных (т.е. радиус-вектора) и времени $\psi(x, y, z, t)$. Квадрат ее модуля поэтому, в общем случае, запишется в виде $\psi(x, y, z, t) \psi^*(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2$. В тех случаях, когда отсутствует явная потребность в выписывании всех трех декартовых и времени будем использовать обозначение $x \equiv \vec{r} = \{x, y, z\} = \{x_1, x_2, x_3\}$ и опускать t , т.е. будем записывать $\psi(x) \equiv \psi(\vec{r}) \equiv \psi(x, y, z, t) \equiv \psi(\vec{r}, t)$.

Рассмотрим движение одной частицы в трехмерном пространстве. В окрестности точки с координатами (x, y, z) определим бесконечно малую прямоугольную область (dx, dy, dz) . Очевидно, что произведе-



ние $dxdydz$ есть объем этой бесконечно малой области. Теперь составим произведение

$$dW(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2 dxdydz .$$

Смысл этого выражения состоит в том, что $dW(x, y, z, t)$ есть вероятность обнаружить частицу в момент времени t в элементе объема $dV = dxdydz$ в окрестности точки (x, y, z) . Квадрат модуля $|\psi(x, y, z, t)|^2$ волновой функции очевидно имеет смысл *плотности распре-*

деления вероятностей различных результатов измерения координаты частицы (т.е. обнаружения частицы в элементе объема $dxdydz$ в окрестности точки (x, y, z)). Заметим, что исторически впервые появилась

именно формула $dW(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz$, а рассматриваемый нами постулат о вероятностях явился ее обобщением. Получена она была Максом Борном в 1926г. именно с целью вероятностной интерпретации волновой функции $\psi(x)$.

Введем для квадрата модуля волновой функции обозначение $\rho(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2$. Тогда выражение для вероятности можно записать компактно в виде

$$dW(x, y, z, t) = |\psi(x, y, z, t)|^2 dx = \rho(x, y, z, t) dx.$$

Величина $dW(x, t)$ есть вероятность обнаружить частицу в бесконечно малой области. Очевидно, чтобы определить вероятность обнаружения частицы в конечном объеме V следует найти значение интеграла

$$W(x, y, z, t) = \int_V |\psi(x, y, z, t)|^2 dV.$$

Если в этом интеграле произвести интегрирование по всему бесконечному пространству, то получим не что иное как условие нормировки волновой функции

$$W = \int_{\infty} |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1.$$

Физический смысл этого равенства состоит в том, что поскольку частица существует, то вероятность ее обнаружить где-нибудь, равна единице, т.е. это событие достоверно.

Функция, которая удовлетворяет такому условию, как мы знаем, называется квадратично интегрируемой. Следовательно из того физического соображения, что частица существует и находится где-то в пространстве, следует что волновая функция должна быть квадратично интегрируемой.

Из условия нормировки следует, что волновая функция, так же как и вектор состояния определена неоднозначно, а с точностью до так называемого *фазового множителя* $e^{i\alpha}$ где α любое действительное число.

3.2. КООРДИНАТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ОПЕРАТОРОВ.

3.2.1. ОПЕРАТОР КООРДИНАТЫ.

Учитывая, что оператор координаты самосопряженный и что его собственные значения действительны, найдем матрицу оператора координаты в своем собственном представлении

$$x_{xx'} = (\Psi_x, \hat{x}\Psi_{x'}) = (\hat{x}\Psi_x, \Psi_{x'}) = x(\Psi_x, \Psi_{x'}) = x\delta(x - x').$$

или

$$\boxed{x_{xx'} = x\delta(x' - x)}.$$

Пусть $U(\hat{x})$ - произвольная функция координат. Тогда матричные элементы от нее

$$\boxed{U_{xx'} = (\Psi_x, \hat{U}(\hat{x})\Psi_{x'}) = U(x)\delta(x' - x)}.$$

Рассмотрим действие оператора координаты в координатном представлении. Для случая базисных векторов, состоящих из собственных векторов оператора координаты, выражение $\varphi_A = \int A_{BB'}\psi_{B'}dB'$ запишется в виде

$$\varphi_x = \int x_{xx'}\psi_{x'}dx' = \int x\delta(x - x')\psi_{x'}dx' = x\psi_x,$$

т.е. $\varphi_x = x\psi_x$.

3.2.2. ОПЕРАТОР ИМПУЛЬСА.

Прежде всего, учтем соотношение

$$(\Psi_x, \hat{x}\hat{p}_x\Psi_{x'}) = (\hat{x}\Psi_x, \hat{p}_x\Psi_{x'}) = x(\Psi_x, \hat{p}_x\Psi_{x'})$$

Далее, из коммутационного соотношения следует, что

$$\begin{aligned} (\Psi_x, [\hat{x}\hat{p}] \Psi_{x'}) &= x(\Psi_x, \hat{p}_x\Psi_{x'}) - x'(\Psi_x, \hat{p}_x\Psi_{x'}) = \\ &= (x - x')(\Psi_x, \hat{p}_x\Psi_{x'}) = (x - x')(p_x)_{xx'} \\ (\Psi_x, [\hat{x}\hat{p}_x] \Psi_{x'}) &= i\hbar(\Psi_x, \Psi_{x'}) = i\hbar\delta(x - x') \end{aligned}$$

Сравнивая правые части двух последних выражений, получаем

$$(x - x')(p_x)_{xx'} = i\hbar\delta(x - x')$$

Из свойства δ -функции $x \frac{d}{dx} \delta(x) = -\delta(x)$ следует

$(x - x') \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') = -\delta(x - x')$. Сравнивая это выражение с предыдущим получим

$$\boxed{(p_x)_{xx'} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x')}.$$

Рассмотрим в матричном представлении действие оператора импульса

$$\begin{aligned} \varphi_x &= \int (p_x)_{xx'}\psi_{x'}dx' = -i\hbar \int \frac{\partial \delta(x - x')}{\partial x} \psi_{x'}dx' = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \int \delta(x - x')\psi_{x'}dx' = \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_x. \end{aligned}$$

Таким образом, в координатном представлении действие оператора импульса эквивалентно действию дифференциального оператора

$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, который и принимается за оператор импульса в координатном представлении. Итак, полагают, что

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

В трехмерном случае надо различать операторы проекций импульса. Для этого их указывают в виде индекса

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

Эти три выражения для проекций можно объединить одним векторным выражением

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

где ∇ - оператор градиента (набла).

Заметим, наконец, что поскольку оператор физической величины, имеющей классический аналог, выражается через операторы координаты и импульса, то в координатном представлении он будет иметь

вид $\hat{A}\left(x_i, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}\right)$, где $i=1,2,3$.

$$A_{xx'} = \hat{A}\left(x_i, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}\right) \delta(x - x').$$

Учитывая свойство

$$\int \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \psi_{x'} dx' = \frac{\partial \psi_x}{\partial x},$$

можем записать

$$\int A_{xx'} \psi_{x'} dx' = \int \hat{A}\left(x_i, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}\right) \delta(x - x') \psi_{x'} dx' = \hat{A}\left(x_i, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}\right) \psi_x.$$

ЗАДАЧИ.

1. Записать формулу для нахождения среднего значения в пространстве квадратично-интегрируемых функций.

$$\begin{aligned} \bar{A} &= (\Psi, \hat{A}\Psi) = \left(\int \psi(x) \Psi_x dx, \hat{A} \int \psi(x') \Psi_{x'} dx' \right) = \\ &= \int \psi^*(x) dx \int \psi(x') (\Psi_{x'}, \hat{A}\Psi_{x'}) dx' = \int \psi^*(x) dx \int \psi(x') A_{xx'} dx' = \\ &= \int \psi^*(x) dx \int \psi(x') \hat{A} \delta(x - x') dx' = \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx = (\psi(x), \hat{A} \psi(x)). \end{aligned}$$

3.2.3. ОПЕРАТОР ГАМИЛЬТОНА.

Чтобы записать оператор Гамильтона в координатном представлении, получим сначала координатное представление оператора квад-

рата импульса. Рассмотрим сначала одномерный случай, т.е. найдем матрицу оператора проекции импульса \hat{p}_x^2 . Для матричного элемента этого оператора можем записать

$$\begin{aligned} (p_x)_{xx'}^2 &= (\Psi_x, (\hat{p}_x)^2 \Psi_{x'}) = \int (p_x)_{xx''} (p_x)_{x''x'} dx'' = \\ &= -\hbar^2 \int \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x'') \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x''-x') dx'' = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \int \delta(x-x'') \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x''-x') dx'' = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x') = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x-x'). \end{aligned}$$

Действие этого оператора на произвольную функцию

$$\begin{aligned} \varphi_x &= \int (p_x)_{xx'}^2 \psi_{x'} dx' = -\hbar^2 \int \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x-x') \psi_{x'} dx' = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int \delta(x-x') \psi_{x'} dx' = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_x. \end{aligned}$$

Поэтому полагаем, что в координатном представлении оператор импульса имеет вид дифференциального оператора

$$\hat{p}_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Обобщая на трехмерный случай получим

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2 \nabla^2.$$

Рассмотрим оператор Гамильтона для одной частицы, находящейся в стационарном силовом поле

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}).$$

Рассмотрим для начала одномерный случай

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

Теперь запишем матрицу оператора Гамильтона

$$\begin{aligned} H_{xx'} &= (\Psi_x, \hat{H} \Psi_{x'}) = (\Psi_x, \left\{ \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + U(\hat{x}) \right\} \Psi_{x'}) = \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \delta(x-x'). \end{aligned}$$

Введем обозначение

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

и будем называть это выражение гамильтонианом в координатном представлении. Тогда матрицу оператора Гамильтона можно представить в виде

$$H_{xx'} = \hat{H} \delta(x - x'),$$

$$\begin{aligned} \varphi_x &= \int H_{xx'} \psi_{x'} dx' = \\ &= \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + U(x) \right) \delta(x - x') \psi_{x'} dx' = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi_x. \end{aligned}$$

Обобщая на трехмерный случай получим

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, y, z).$$

Оператор кинетической энергии имеет вид $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$.

3.2.4. ОПЕРАТОР УГЛОВОГО МОМЕНТА

Учитывая определение момента импульса и используя для представления радиус-вектора декартовый ортонормированный базис можем записать

$$\hat{\vec{L}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix},$$

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar \left[\vec{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) + \vec{j} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) + \vec{k} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right].$$

Запишем отдельно проекции:

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right);$$

$$\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right);$$

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

ПРИЛОЖЕНИЕ.

ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ – II.

1. КООРДИНАТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ УСЗ.

1.1. УСЗ ДЛЯ ОПЕРАТОРА КООРДИНАТЫ.

Собственная функция оператора координаты в координатном представлении (или другими словами состояние в котором координата имеет определенное значение).

За основу (см. Зам.2) примем матричное представление УСЗ

$$\int A_{B'B''} \psi_{A'}(B'') dB'' = A' \psi_{A'}(B').$$

Для рассматриваемого случая оператора координаты это соотношение примет вид

$$\int x_{x'x''} \psi_{x''}(x'') dx'' = x''' \psi_{x''}(x').$$

Учитывая явный вид матричных элементов оператора координаты, получим

$$\int x' \delta(x' - x'') \psi_{x''}(x'') dx'' = x''' \psi_{x''}(x').$$

По определению $\psi_{x''}(x'') = (\Psi_{x''}, \Psi_{x''})$. Учитывая, что собственные векторы операторов, обладающих непрерывным спектром, нормируются на δ -функцию, получаем, что с.ф. оператора координаты в координатном, т.е. своем собственном, представлении имеют вид

$$\psi_{x''}(x'') = \delta(x'' - x''')$$

или убирая лишние индексы

$$\psi_x(x') = \delta(x - x').$$

Проверим, что эти функции действительно являются решениями задачи на с.з.

$$x' \int \delta(x' - x'') \delta(x'' - x''') dx'' = x''' \delta(x' - x'''),$$

$$x' \delta(x' - x''') = x''' \delta(x' - x'''),$$

$$(x' - x''') \delta(x' - x''') = 0.$$

т.е. пришли к известному соотношению для δ -функции.

1.2. УСЗ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ИМПУЛЬСА.

$$\int A_{BB'} \psi_{A'}(B') dB' = A \psi_A(B),$$

$$\int p_{xx'} \psi_p(x') dx' = p \psi_p(x).$$

2. ИМПУЛЬСНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ОПЕРАТОРОВ.

2.1. ОПЕРАТОР ИМПУЛЬСА.

Поскольку матрица оператора в своем собственном представлении должна быть диагональной, то сразу заключаем

$$(\Psi_p, \hat{p}\Psi_{p'}) = p_{pp'} = p\delta(p-p'),$$

$$\varphi_p = \int p_{pp'}\psi_{p'} dp' = \int p\delta(p-p')\psi_{p'} dp' = p \int \delta(p-p')\psi_{p'} dp' = p\psi_p.$$

2.2. ОПЕРАТОР КООРДИНАТЫ.

Результат, который будет ниже получен можно получить тремя способами: 1) формально, если в полученных выше формулах сделать замену $x \leftrightarrow p$, $x' \leftrightarrow p'$, $i \leftrightarrow -i$; 2) из коммутационного соотношения между координатой и импульсом, как это было проделано для координатного представления; 3) используя преобразование подобия с помощью унитарной матрицы U . Разберем последний способ.

Пусть p -базис - новый, а x -базис - старый. Из курса линейной алгебры известно, что преобразование матрицы оператора при переходе к новому базису задается выражением

$$A^p = U^{-1}A^xU.$$

Учтем правило перемножения непрерывных матриц

$$A_{AD} = \int U_{AB}^{-1}A_{BC}U_{CD} dBdC.$$

Поэтому для матрицы оператора в импульсном представлении имеем

$$\begin{aligned} x_{pp'} &= \int U_{px}^{-1}x_{xx'}U_{x'p'} dx dx' = \int U_{xp}^* x_{xx'} U_{x'p'} dx dx' = \\ &= \int \psi_p^*(x) x_{xx'} \psi_{p'}(x') dx dx'. \end{aligned}$$

Учитывая явный вид этой матрицы преобразования базисов

$$U_{xp} = \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

получим

$$\begin{aligned} x_{pp'} &= \frac{1}{2\pi\hbar} \iint e^{-\frac{i}{\hbar}px} x \delta(x-x') e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} dx dx' = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{i}{\hbar}px'} x' e^{\frac{i}{\hbar}p'x'} dx' = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x'} x' dx' = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \int e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x'} dx' = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar}{i} 2\pi\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p'-p) = \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p'-p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(p-p'). \end{aligned}$$

Полезно сравнить это выражение с матрицей оператора импульса в координатном представлении $p_{xx'} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x')$.

Рассмотрим действие оператора координаты в импульсном представлении

$$\begin{aligned} \varphi_p &= \int x_{pp'} \psi_{p'} dp' = i\hbar \int \frac{\partial}{\partial p} \delta(p - p') \psi_{p'} dp' = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int \delta(p - p') \psi_{p'} dp' = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \psi_p. \end{aligned}$$

Отсюда заключаем, что в импульсном представлении оператор координаты можно записать в виде

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}.$$

2.3. СФ ОПЕРАТОРА ИМПУЛЬСА.

Спектр чисто непрерывный и вид СФ оператора импульса непосредственно следует из условия нормировки и имеет вид

$$\psi_p(p') = \delta(p - p').$$

2.4. СФ ОПЕРАТОРА КООРДИНАТЫ.

Из общего правила $\psi_A^*(B) = \psi_B(A)$ делаем вывод, что $\psi_p^*(x) = \psi_x(p)$ и следовательно имеем

$$\psi_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} px}.$$

3. СВЯЗЬ ИМПУЛЬСНОГО И КООРДИНАТНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЙ.

В соответствии с общей формулой $\psi_B = \int \psi_A(B) \psi_A dA$ перехода от одного непрерывного представления к другому имеем и учитывая явный вид матрицы перехода имеем

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int \psi(p) \psi_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(p) e^{\frac{i}{\hbar} px} dp, \\ \psi(p) &= \int \psi(x) \psi_x(p) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx. \end{aligned}$$

Если сделать формально замену $k = p/\hbar$, то этим двум выражениям можно придать вид обратного преобразования Фурье (интеграла Фурье)

$$\psi(x) = \int \psi(p) \psi_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(k) e^{ikx} dk$$

и прямого преобразования Фурье

$$\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(x) e^{-ikx} dx.$$

На этом основании можно заключить, что *координатное и импульсное представления связаны преобразованием Фурье.*

ЧАСТЬ 4.

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

4.1. СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ.

Рассмотрим квантовую систему, которая является замкнутой или движется в некотором постоянном потенциальном поле $U(x)$, т.е. силовая функция не зависит от времени и, следовательно, является потенциальной энергией. Другими словами пусть система не находится в переменном внешнем поле. В классической механике функция Гамильтона такой системы называется энергией. По аналогии с классической механикой, в квантовой механике по принципу соответствия, вводится оператор Гамильтона, соответствующий классической функции Гамильтона и называемый гамильтонианом. Следовательно, собственными значениями гамильтониана являются значения энергии $\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E$. Пусть спектр гамильтониана дискретный, тогда УСЗ запишется в виде $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$, которое называется **стационарным уравнением Шредингера**. Собственные состояния гамильтониана называются **стационарными состояниями**. В стационарном состоянии квантовая система обладает определенным значением энергии. Поскольку гамильтониан не зависит от времени, то и собственные векторы Ψ_n от времени не зависят. Поэтому справедливо свойство: *в стационарных состояниях среднее значение любой величины не зависит от времени, если оператор этой величины не зависит от времени* $\bar{A} = (\Psi_n, \hat{A}\Psi_n) = const$.

Собственные векторы гамильтониана часто используются в качестве базиса. Произвольный, зависящий от времени, вектор состояния можно представить в виде разложения по этим собственным векторам $\Psi(t) = \sum_n c_n(t)\Psi_n$. Об этом разложении говорят как о разложении по стационарным состояниям. Коэффициенты $c_n(t)$ в этом разложении, в отличие от базисных векторов Ψ_n , являются функциями времени.

Найдем теперь, как выглядит СУШ в координатном представлении

$$\int H_{xx}\psi_n(x')dx' = E_n\psi_n(x),$$

$$\int \hat{H}\delta(x-x')\psi_n(x')dx' = E_n\psi_n(x),$$

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x).$$

Собственная функция гамильтониана в координатном представлении $\psi_n(x)$ называется *волновой функцией стационарного состояния*.

4.2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА.

4.2.1. ПОСТУЛАТ ОБ ЭВОЛЮЦИИ.

До сих пор мы интересовались только тем как описать или изобразить состояние. Это описание относилось к некоторому произвольному моменту времени. Теперь мы будем интересоваться тем как состояние квантовой системы изменяется во времени. Об изменении состояния во времени говорят как об *эволюции состояния*.

Постулат 6 (Постулат об эволюции). *Квантовая система может находиться только в тех состояниях, для которых временная эволюция векторов состояния удовлетворяет уравнению Шредингера*

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi(t), \quad (1)$$

где оператор \hat{H} - гамильтониан рассматриваемой системы, в общем случае зависящий от времени. Уравнение (1) называется также *нестационарным уравнением Шредингера*.

Поскольку для квантовых состояний должен выполняться принцип суперпозиции, то следовательно и уравнение Шредингера, которое определяет возможные состояния должно удовлетворять этому принципу. Действительно, пусть $\Psi_1(t)$ и $\Psi_2(t)$ два произвольных состояния, удовлетворяющие уравнению Шредингера. Составим линейную комбинацию $\Psi(t) = c_1\Psi_1(t) + c_2\Psi_2(t)$. Уравнение Шредингера является линейным и однородным. Из теории дифференциальных уравнений известно, что линейная комбинация решений линейного однородного уравнения также является его решением. Следовательно вектор $\Psi(t)$ является решением уравнения Шредингера, или, другими словами, описывает одно из возможных состояний системы, наряду с $\Psi_1(t)$ и $\Psi_2(t)$. Это утверждение и доказывает, что УШ удовлетворяет принципу суперпозиции.

4.2.2. УШ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ.

4.2.2.1. Гамильтониан зависит от времени.

Рассмотрим уравнение Шредингера в предположении, что гамильтониан в общем случае зависит явно от времени

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi(t).$$

Введем теперь гамильтониан \hat{H}_0 , который не зависит явно от времени, полагая, что спектр у него дискретный

$$\hat{H}_0 \Psi_n = E_n \Psi_n.$$

Разложим произвольный вектор состояния по собственным векторам не зависящего от времени оператора Гамильтона (т.е. по стационарным состояниям)

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n.$$

Волновая функция $c_n(t)$ является *волновой функцией состояния* $\Psi(t)$ в энергетическом представлении.

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\Psi_n, \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) &= (\Psi_n, \hat{H}(t)\Psi), \\ i\hbar \left(\Psi_n, \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{n'} c_{n'}(t) \Psi_{n'} \right) \right) &= (\Psi_n, \hat{H}(t) \sum_{n'} c_{n'}(t) \Psi_{n'}), \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{n'} c_{n'}(t) (\Psi_n, \Psi_{n'}) \right) &= \sum_{n'} c_{n'}(t) (\Psi_n, \hat{H}(t) \Psi_{n'}), \\ \boxed{i\hbar \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} = \sum_{n'} c_{n'}(t) H_{nn'}(t)}. \end{aligned}$$

Это есть УШ в энергетическом представлении.

4.2.2.2. Гамильтониан не зависит от времени.

Пусть $\hat{H}(t) = \hat{H}_0$, т.е. рассмотрим случай гамильтониана, не зависящего от времени, т.е. рассмотрим решение задачи $i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi(t)$. Тогда уравнение Шредингера окажется записанным не только в энергетическом представлении, но еще и в собственном базисе рассматриваемого гамильтониана

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} &= \sum_{n'} c_{n'}(t) E_{n'} \delta_{nn'}, \\ i\hbar \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} &= E_n c_n(t). \end{aligned}$$

Решение этого уравнения, очевидно, имеет вид

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}},$$

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n = \sum_n c_n(0) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n.$$

Таким образом, мы нашли решение в виде разложения вектора состояния по стационарным состояниям. Очевидно, что состояние $\Psi(t)$, в отличие от Ψ_n , не обладает определенной энергией и поэтому не является стационарным состоянием. При измерении энергии у системы, находящейся в таком состоянии будут обнаруживаться разные энергии с разными вероятностями. Интересно, что эти вероятности не меняются с течением времени. Действительно, для вероятности обнаружения значения энергии E_n в произвольный момент времени имеем

$$|c_n(t)|^2 = c_n^*(0) e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = c_n^*(0) c_n(0) = |c_n(0)|^2.$$

ЗАДАЧИ.

1. Найти решение уравнения $i\hbar \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} = E_n c_n(t)$.

Решение:

$$\begin{aligned} \frac{dc_n(t)}{c_n(t)} &= -\frac{i}{\hbar} E_n dt \Rightarrow \ln c_n(t) + C_1 = \\ &= -\frac{i}{\hbar} E_n t + C_2 \Rightarrow \ln c_n(t) = -\frac{i}{\hbar} E_n t + C_3 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \ln c_n(t) = -\frac{i}{\hbar} E_n t + C_3 \Rightarrow c_n(t) = \\ &= e^{C_3} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \Rightarrow c_n(t) = C e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \Rightarrow c_n(t) = c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \end{aligned}$$

4.2.3. УШ В КООРДИНАТНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ.

4.2.3.1. Гамильтониан зависит от времени.

Пусть гамильтониан, в общем случае, зависит от времени $\hat{H} = \hat{H}(t)$. Найдем выражение для УШ в координатном представлении. Для этого разложим вектор состояния по собственным состояниям оператора координаты

$$\Psi(t) = \int \psi(x', t) \Psi_{x'} dx',$$

и подставим это разложение в УШ $i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \psi(x', t) \Psi_{x'} dx' = \hat{H} \int \psi(x', t) \Psi_{x'} dx'.$$

Умножим это соотношение скалярно на Ψ_x :

$$i\hbar \int \frac{\partial}{\partial t} \psi(x', t) (\Psi_x, \Psi_{x'}) dx' = \int (\Psi_x, \hat{H} \Psi_{x'}) \psi(x', t) dx'.$$

Учитывая нормировку собственных векторов непрерывного спектра, получим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \psi(x', t) \delta(x - x') dx' = \int H_{xx'} \psi(x', t) dx'.$$

Принимая во внимание явный вид матричного элемента гамильтониана, т.е. переписывая последнее выражение в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int \psi(x', t) \delta(x - x') dx' = \int \hat{H} \delta(x - x') \psi(x', t) dx',$$

окончательно запишем

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t). \quad (2)$$

Это уравнение есть линейное однородное дифференциальное уравнение относительно волновой функции $\psi(x, t)$.

Уравнение (2) – это уравнение Шредингера в общем виде. Конкретный вид этого уравнения полностью определяется конкретным видом гамильтониана. Рассмотрим, к примеру, квантовую систему, состоящую из одной частицы массы m , которая движется в некотором потенциальном поле $U(x)$. Тогда гамильтониан этой системы в координатном представлении

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x)$$

и, следовательно, уравнение Шредингера принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x) \right) \psi(x, t).$$

4.2.3.2. Гамильтониан не зависит от времени.

Найдем теперь решение УШ, записанного в координатном представлении,

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

Можно непосредственно проинтегрировать это уравнение. Легче, однако, найти решение, используя формулу преобразования компонент вектора состояния от дискретного спектра к непрерывному

$\psi(x) = \sum_n (\Psi_x, \Psi_n) c_n = \sum_n c_n \Psi_n(x)$. Принимая во внимание зависимость от времени перепишем это преобразование в виде $\psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n(x)$. Поэтому решение УШ в координатном представлении принимает вид

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n(0) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n(x).$$

Замечание. Часто волновой функцией стационарного состояния называют функцию $\Psi_n(x, t) = \Psi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$. Тогда решение УШ можно представить в виде $\psi(x, t) = \sum_n c_n(0) \Psi_n(x, t)$.

ЗАДАЧИ.

1. Доказать, на примере координатного и энергетического представлений, что вектор состояния не зависит от выбора представления.

Решение. Необходимо доказать, что $\Psi(t) = \int \psi(x, t) \Psi_x dx = \sum_n c_n(t) \Psi_n$.

Действительно

$$\begin{aligned} \Psi(t) &= \int \psi(x, t) \Psi_x dx = \int \left\{ \sum_n c_n(0) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n(x) \right\} \Psi_x dx = \\ &= \sum_n c_n(0) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \int \Psi_n(x) \Psi_x dx = \sum_n c_n(t) \Psi_n. \end{aligned}$$

2. Доказать, что нормировка вектора состояния не зависит от времени.

Решение.

$$\begin{aligned} (\Psi(t), \Psi(t)) &= \left(\sum_n c_n(0) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n, \sum_{n'} c_{n'}(0) e^{-i \frac{E_{n'} t}{\hbar}} \Psi_{n'} \right) = \\ &= \sum_{n, n'} c_n^*(0) c_{n'}(0) e^{i \frac{E_n - E_{n'} t}{\hbar}} (\Psi_n, \Psi_{n'}) = \sum_{n, n'} c_n^*(0) c_{n'}(0) e^{i \frac{E_n - E_{n'} t}{\hbar}} \delta_{nn'} = \\ &= \sum_n |c_n(0)|^2 = (\Psi(0), \Psi(0)). \end{aligned}$$

4.3. УРАВНЕНИЕ НЕПРЕРЫВНОСТИ.

Рассмотрим уравнение Шредингера для одной частицы, движущейся в одном измерении в поле потенциальных сил

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi(x,t). \quad (1)$$

Возьмем уравнение комплексно сопряженное (1)

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \psi^*(x,t). \quad (2)$$

Умножим (1) на $\psi^*(x,t)$, а (2) на $\psi(x,t)$ и вычтем из первого результата второй

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right)$$

или

$$\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \right\}. \quad (3)$$

Введем величину

$$j_x(x,t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$$

и учтем, что

$$\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \frac{\partial \psi \psi^*}{\partial t} = \frac{\partial |\psi(x,t)|^2}{\partial t}.$$

Тогда уравнение (3) можно записать в виде

$$\frac{\partial |\psi(x,t)|^2}{\partial t} + \frac{\partial j_x(x,t)}{\partial x} = 0$$

или

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

В трехмерном случае обобщением этого уравнения будет

$$\boxed{\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}(x,t) = 0}.$$

Полученное выражение называется **уравнением непрерывности**.

Полученное выражение в точности совпадает с уравнением непрерывности, которое можно встретить в электродинамике и гидродинамике. Аналогии с этими разделами физики помогают нам дать физическую интерпретацию этого соотношения и в частности формально введенного вектора $\vec{j}(x,t)$.

величина	гидродинамика	электродинамика	квантовая механика
$\rho(x,t)$	плотность жидкости	плотность заряда	плотность вероятности
$\vec{j}(x,t)$	плотность потока жидкости	плотность электрического тока	плотность тока вероятности

Следовательно, вектор $\vec{j}(x,t)$ имеет смысл плотности потока вероятности. Подобно тому, как в гидродинамике ρ есть плотность жидкости, в квантовой механике можно представить ρ как плотность некоторой фиктивной жидкости из вероятности разлитой во всем пространстве. Роль плотности этой фиктивной жидкости играет величина $\rho(x,t) \equiv |\psi(x,t)|^2$.

Дадим наглядную интерпретацию. Пусть N частиц в момент времени t находятся в одном и том же состоянии, т.е. описываются одной и той же волновой функцией $\psi(x,t)$. Вероятность нахождения одной частицы в заданной точке пространства определяется плотностью вероятности и равна $dW(x,t) = \rho(x,t)dV$. Число частиц в объеме dV будет пропорционально этой вероятности

$$dN = NdW(x,t) = N\rho(x,t)dV.$$

Следовательно, плотность частиц в данной точке пространства

$$\rho_N(x,t) = \frac{dN}{dV} = N\rho(x,t).$$

Далее заметим, что плотность потока можно выразить в виде $\vec{j} = \rho\vec{v}$ и следовательно, уравнение непрерывности можно записать в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \rho\vec{v} = 0.$$

Умножая плотность вероятности на N , получим уравнение непрерывности в виде

$$\frac{\partial \rho_N}{\partial t} + \text{div} \vec{j}_N = 0.$$

Тогда $\vec{j}_N(x,t) = \rho_N\vec{v}$ есть просто плотность потока частиц. В этом случае уравнение непрерывности выражает закон сохранения частиц.

Если частицы несут заряд, то плотность заряженных частиц $\rho_e(x,t) = e \frac{dN}{dV} = eN\rho(x,t)$. Соответственно уравнение непрерывности

примет форму $\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \text{div} \vec{j}_e = 0$. В этом случае уравнение непрерывности выражает закон сохранения заряда. Если частицы несут массу,

то их плотность $\rho_m(x,t) = m_0 \frac{dN}{dV} = m_0 N \rho(x,t)$. Соответственно

уравнение непрерывности примет форму $\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \text{div} \vec{j}_m = 0$. В этом случае уравнение непрерывности выражает закон сохранения массы.

Задача. Используя уравнение непрерывности доказать, что нормировка волновой функции не меняется со временем.

Решение. Запишем уравнение непрерывности в интегральной форме

$\oint_S \vec{j} d\vec{S} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV$ и распространим интегрирование по всему про-

странству. На бесконечности волновые функции должны убывать в силу требования квадратичной интегрируемости. Следовательно, на бесконечно удаленной поверхности волновая функция равна нулю и,

следовательно, токи отсутствуют. Поэтому $\frac{\partial}{\partial t} \int_{V=\infty} \rho dV = 0$. Интеграл

здесь не что иное как нормировка волновой функции. Следовательно, из уравнения непрерывности следует, что нормировка волновой функции со временем не меняется. Поскольку нормировка равна вероятности обнаружить частицу где-либо в пространстве, то, следовательно, это выражение представляет собой **закон сохранения вероятности**.

Вывод уравнения непрерывности в трехмерном случае.

Возьмем УШ и комплексно сопряженное УШ

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

Умножим первое ур-е на $\psi^*(x,t)$, а второе на $\psi(x,t)$ и вычтем из первого результата второй

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*). \quad (1)$$

Учтем тождество $\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* = \text{div}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$ и введем

вектор $\vec{j}(x,t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$. Тогда уравнение (1) запишется

в виде $\frac{\partial |\psi(x,t)|^2}{\partial t} + \text{div} \vec{j}(x,t) = 0$.

4.4. ЭВОЛЮЦИЯ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ. ИНТЕГРАЛЫ ДВИЖЕНИЯ.

Пусть $\bar{A}(t)$ - среднее значение некоторой физической величины A в состоянии $\Psi(t)$:

$$F(t) = (\Psi(t), \hat{F}(t)\Psi(t)).$$

Эта величина может зависеть от времени по двум причинам: 1) состояние $\Psi(t)$ в общем случае изменяется со временем; 2) оператор $\hat{A}(t)$ может явно зависеть от времени. Найдем производную

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{A}(t)}{dt} &= \frac{\partial}{\partial t}(\Psi, \hat{A}\Psi) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi, \hat{A}\Psi\right) + \left(\Psi, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi\right) + \left(\Psi, \hat{A}\frac{\partial}{\partial t}\Psi\right) = \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi, \hat{A}\Psi\right) + \left(\Psi, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi\right) + \left(\Psi, -\frac{i}{\hbar}\hat{A}\hat{H}\Psi\right) = \\ &= \frac{i}{\hbar}(\Psi, \hat{H}\hat{A}\Psi) + \left(\Psi, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi\right) - \frac{i}{\hbar}(\Psi, \hat{A}\hat{H}\Psi) = \\ &= \frac{i}{\hbar}(\Psi, \{\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}\}\Psi) + \left(\Psi, \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\Psi\right) = \left(\Psi, \left\{\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{A}]\right\}\Psi\right). \end{aligned}$$

Отсюда видно, что скорость изменения среднего есть среднее от некоторого операторного выражения

$$\boxed{\frac{d\bar{A}(t)}{dt} = \left(\Psi, \left\{\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{A}]\right\}\Psi\right)}.$$

Пусть оператор \hat{A} не зависит от времени, т.е. $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$ и коммутирует с гамильтонианом, т.е. $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$. Тогда $\frac{d\bar{A}(t)}{dt} = 0$ и, следовательно, среднее значение величины сохраняется во времени. Такие величины называются *сохраняющимися*, или *интегралами движения*. Большинство операторов, с которыми имеет дело квантовая механика, не зависят явно от времени. Поэтому для величин, которые представлены такими операторами условием того, что эти величины будут интегралами движения, является требование коммутативности оператора этой величины с гамильтонианом.

ПРИЛОЖЕНИЕ.

1. ТЕОРЕМЫ ЭРЕНФЕСТА.

Пусть система описывается гамильтонианом

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

Найдем производную от среднего координаты

$$\frac{dx(t)}{dt} = (\Psi, \frac{i}{\hbar} [\hat{H}\hat{x}]\Psi).$$

Учтем, что коммутатор равен

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} [\hat{H}\hat{x}] &= \frac{i}{2\hbar m} [\hat{p}_x^2 \hat{x}] = \frac{i}{2\hbar m} (\hat{p}_x [\hat{p}_x \hat{x}] + [\hat{p}_x \hat{x}] \hat{p}_x) = \\ &= -\frac{i}{2\hbar m} 2i\hbar \hat{p}_x = \frac{1}{m} \hat{p}_x. \end{aligned} \quad (1)$$

Этот вывод можно было бы проделать и в координатном представлении:

$$\begin{aligned} [\hat{H}\hat{x}]\psi(x,t) &= (\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H})\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} x - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} x \psi - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} x \psi \right) - x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{im} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi = \frac{\hbar}{im} \hat{p}_x \psi, \end{aligned}$$

получим

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{1}{m} (\Psi, \hat{p}_x \Psi) = \frac{p_x}{m}. \quad (2)$$

Интегрируя (2) получим

$$x(t) = x_{t=0} + \frac{1}{m} p_x \cdot t. \quad (3)$$

Для производной от среднего импульса частицы имеем

$$\frac{dp(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\Psi, [\hat{H}\hat{p}_x]\Psi). \quad (4)$$

Найдем коммутатор $[\hat{H}\hat{p}_x]$. Поскольку импульс коммутирует с собой, то имеем

$$[\hat{H}\hat{p}_x] = [\hat{U}(\hat{x})\hat{p}_x].$$

Разложим потенциальную энергию в ряд

$$\hat{U}(\hat{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \hat{x}^n. \quad (5)$$

Воспользуемся алгебраическим соотношением (Мессиа т.1, с.206)

$$[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [AB] B^{n-s-1}.$$

Для координат и импульсов отсюда имеем

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \hat{x}^n] &= \sum_{s=0}^{n-1} \hat{x}^s [\hat{p}\hat{x}] \hat{x}^{n-s-1} = \\ &= -i\hbar \sum_{s=0}^{n-1} \hat{x}^s \hat{x}^{n-s-1} = -i\hbar n \hat{x}^{n-1}. \end{aligned} \quad (6)$$

Отсюда следует

$$\begin{aligned} [\hat{U}(\hat{x}), \hat{p}_x] &= -[\hat{p}_x, \hat{U}(\hat{x})] = -[\hat{p}_x, \sum_{n=0}^{\infty} C_n \hat{x}^n] = -\sum_{n=0}^{\infty} C_n [\hat{p}_x, \hat{x}^n] = \\ &= i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} C_n n \hat{x}^{n-1} = \\ &= i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} C_n \frac{\partial \hat{x}^n}{\partial \hat{x}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \sum_{n=0}^{\infty} C_n \hat{x}^n = i\hbar \frac{\partial \hat{U}(\hat{x})}{\partial \hat{x}}. \end{aligned}$$

Отсюда

$$[\hat{H}\hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial U(\hat{x})}{\partial \hat{x}}$$

или, в координатном представлении

$$[\hat{H}\hat{p}_x] = i\hbar \frac{\partial U(x)}{\partial x}. \quad (5)$$

Поэтому

$$\frac{d\bar{p}(t)}{dt} = -(\Psi, \frac{\partial \hat{U}(\hat{x})}{\partial \hat{x}} \Psi) = -\overline{\left(\frac{\partial \hat{U}(\hat{x})}{\partial \hat{x}} \right)} \quad (6)$$

или, в координатном представлении

$$\frac{dp(t)}{dt} = -(\Psi, \frac{\partial U(x,t)}{\partial x} \Psi) = -\overline{\left(\frac{\partial U(x)}{\partial x} \right)}. \quad (7)$$

Этот вывод можно было бы проделать и в координатном представлении:

$$\begin{aligned}
 [\hat{H}\hat{p}_x]\psi &= (\hat{H}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{H})\psi = \\
 &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U\right)\psi = \\
 &= \left(\frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} - i\hbar U\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - \left(\frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} - i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(U\psi)\right) = \\
 &= \left(-i\hbar U\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar U\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}\psi\right) = i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}\psi.
 \end{aligned}$$

Полученные соотношения (2) и (7) называются теоремами Эренфеста. Смысл этих соотношений в том, что они устанавливают связь между физическими величинами в форме аналогичной классической механики Ньютона

Беря производную от $d\bar{x}(t)/dt$, получим уравнение движения в форме аналогичной Ньютоновской

$$m\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\frac{\partial U(x,t)}{\partial x}.$$

Замечания.

1. Можем записать

$$\begin{aligned}
 \frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{x}] &= \frac{1}{m}\hat{p}_x = \frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_x}, \\
 \frac{dx(t)}{dt} &= (\Psi, \frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_x}\Psi) = \overline{\left(\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_x}\right)}.
 \end{aligned}$$

2. Вычислим матричные элементы от обеих частей выражения

$$\frac{i}{\hbar}[\hat{H}\hat{x}] = \frac{1}{m}\hat{p}_x,$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{m}(\Psi_n, \hat{p}_x \Psi_{n'}) &= (\Psi_n, \frac{i}{\hbar} [\hat{H}\hat{x}] \Psi_{n'}) = \\
&= \frac{i}{\hbar}(\Psi_n, \hat{H}\hat{x}\Psi_{n'}) - \frac{i}{\hbar}(\Psi_n, \hat{x}\hat{H}\Psi_{n'}) = \\
&= \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\Psi_n, \hat{x}\Psi_{n'}) - \frac{i}{\hbar}E_{n'}(\Psi_n, \hat{x}\Psi_{n'}) = \\
&= \frac{i}{\hbar}E_n(\Psi_n, \hat{x}\Psi_{n'}) - \frac{i}{\hbar}E_{n'}(\Psi_n, \hat{x}\Psi_{n'}) = \\
&\frac{i}{\hbar}(E_n - E_{n'}) (\Psi_n, \hat{x}\Psi_{n'})
\end{aligned}$$

или

$$\frac{1}{m}(p_x)_{nn'} = \frac{i}{\hbar}(E_n - E_{n'})x_{nn'}.$$

2. ОПЕРАТОР ЭВОЛЮЦИИ.

Пусть гамильтониан \hat{H} не зависит от времени. Тогда решение задачи

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(t).$$

имеет вид разложения по собственным векторам Ψ_n , этого гамильтониана

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n = \sum_n c_n(0) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n. \quad (1)$$

Введем теперь унитарный оператор

$$U(t) = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}. \quad (2)$$

Действие этого оператора понимается в смысле разложения экспоненты в степенной ряд. Поскольку разложение экспоненты имеет вид

$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$, то можем записать

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar} \right)^n.$$

Подействуем этим оператором на $\Psi(0) = \sum_n c_n(0) \Psi_n$:

$$\begin{aligned}\Psi(t) &= \hat{U}(t)\Psi(0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-i \frac{\hat{H}}{\hbar} t\right)^k \sum_n c_n(0) \Psi_n = \\ &= \sum_n \left(c_n(t) \Psi_n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right)^k \right) = \sum_n c_n(0) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \Psi_n,\end{aligned}$$

т.е. получаем то же выражение, что и (1). Поэтому зависимость вектора состояния от времени (в стационарном поле) можно представить в виде действия оператора на вектор состояния в начальный момент времени

$$\Psi(t) = \hat{U}(t)\Psi(0). \quad (3)$$

Для волновых функций получаем аналогично

$$\psi(x,t) = \hat{U}(t)\psi(x,0).$$

О зависимости вектора состояния от времени в виде (3) говорят как об *унитарной эволюции*. Сам унитарный оператор $\hat{U}(t)$ называется *оператором эволюции*.

Подставляя (3) в УШ получим

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t). \quad (4)$$

Ввести оператор эволюции можно было бы из следующих соображений. Пусть мы хотим описывать эволюцию оператором, т.е. представить ее в виде $\Psi(t) = \hat{U}(t)\Psi(0)$. Нормировка вектора состояния не должна меняться со временем. Оператор, действие которого не меняет нормировку, должен быть унитарным оператором. Подставляя теперь (3) в (1) получаем (4). Теперь полагаем, что *гамильтониан не зависит от времени*. Тогда интегрируем (4) и получаем (2).

3. ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ.

Используя оператор эволюции можно формулу для среднего значения записать в виде

$$\bar{A}(t) = (\Psi(t), \hat{A}\Psi(t)) = (\hat{U}^{-1}\Psi(t), \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{-1}\Psi(t)). \quad (5)$$

Таким образом, среднее значение не изменяется, если подвергнуть все векторы состояния и операторы унитарному преобразованию

$$\Psi(t) \rightarrow \hat{U}^{-1}\Psi(t), \quad (6)$$

$$\hat{A} \rightarrow \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}. \quad (7)$$

Заметим, что (6) есть унитарное вращение всего пространства состояний (вместе с базисом) в направлении противоположном эволюционному вращению вектора состояния. Очевидно, что при таком

преобразовании вектор состояния будет оставаться неизменным. Действительно $\hat{U}^{-1}\Psi(t) = \hat{U}^{-1}\hat{U}\Psi(0) = \Psi(0)$. Можно сказать, что в результате преобразования (6)-(7) временная зависимость оказалась переброшена с векторов состояния на операторы.

Переход к неизменным векторам состояния и зависящим от времени операторам называется переходом к *представлению Гейзенберга*. Случай, когда рассматриваются зависящие от времени векторы состояния, называется *представлением Шредингера*. Для вектора состояния в представлении Шредингера введем обозначение

$$\Psi^S(t) \equiv \Psi(t).$$

Неизменный вектор состояния в представлении Гейзенберга определим так

$$\Psi^H = \Psi^S(0).$$

Тогда (5) можно записать в виде

$$\bar{A}(t) = (\Psi^S(t), \hat{A}\Psi^S(t)) = (\Psi^H, \hat{A}(t)\Psi^H). \quad (8)$$

Используя новые обозначения, перепишем преобразования (6)-(7) в виде

$$\hat{A}^H(t) = \hat{U}^{-1}\hat{A}^S\hat{U}, \quad (9)$$

$$\Psi^H = \hat{U}^{-1}\Psi^S(t) = \Psi^S(0). \quad (10)$$

Очевидно, что результат вычисления значений всех измеримых величин в квантовой механике не должен зависеть от того какой математический способ описания выбирается, т.е. они должны быть одинаковыми в обоих представлениях - как в представлении Шредингера так и в представлении Гейзенберга. Кроме среднего значения к таким величинам относятся собственные значения оператора и квадрат модуля волновой функции. Для того, чтобы обеспечить инвариантность волновых функций необходимо потребовать некоторое преобразование базиса. Действительно, унитарный оператор эволюции в представлении Шредингера описывает вращение вектора состояния $\Psi(t)$ в пространстве состояний. Вследствие этого возникает зависимость волновых функций от времени. Эту же зависимость можно получить, если полагать вектор состояния неизменным, а базисные векторы вращать в обратную сторону. Обозначим как Ψ_A^S неподвижный базис в представлении Шредингера, а через $\Psi_A^H(t)$ вращающийся базис в представлении Гейзенберга. Оба базиса связаны преобразованием

$$\Psi_A^H(t) = U^{-1}(t)\Psi_A^S. \quad (11)$$

Тогда легко показать, что волновые функции в обоих представлениях одинаковы

$$\begin{aligned}\psi^S(A, t) &= (\Psi_A^S, \Psi^S(t)) = (\Psi_A^S, U\Psi^H) = \\ &= (U^{-1}\Psi_A^S, \Psi^H) = (\Psi_A^H(t), \Psi^H) = \psi^H(A, t).\end{aligned}$$

Поэтому и квадрат модуля, т.е. измеряемая величина, также является одинаковой в обоих представлениях.

Собственные значения также одинаковы:

$$\begin{aligned}\hat{A}(t)\Psi_A^H(t) &= \hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{-1}\Psi_A^S = \hat{U}^{-1}\hat{A}\Psi_A^S = \\ &= \hat{U}^{-1}A\Psi_A^S = A\hat{U}^{-1}\Psi_A^S = A\Psi_A^H(t).\end{aligned}$$

Очевидно также, что и матричные элементы остаются одинаковыми

$$\begin{aligned}A_{BB'}^S(t) &= (\Psi_B^S, \hat{A}^S\Psi_{B'}^S) = (\hat{U}(t)\Psi_B^H(t), \hat{A}^S\hat{U}(t)\Psi_{B'}^H(t)) = \\ &= (\Psi_B^H(t), \hat{U}^{-1}(t)\hat{A}^S\hat{U}(t)\Psi_{B'}^H(t)) = (\Psi_B^H(t), \hat{A}^H(t)\Psi_{B'}^H(t)) = A_{BB'}^H(t).\end{aligned}$$

Это вывод можно записать короче

$$A^H = UA^SU^{-1} = U(U^{-1}A^SU)U^{-1} = A^S.$$

Вообще развитый формализм предназначен был для того, чтобы оставить матричные элементы неизменными - для этого действительно следует одновременно с базисом преобразовывать и операторы.

Дифференцируя (9), получим уравнение движения в виде

$$\frac{d}{dt}\hat{A}^H(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}^H(t)]. \quad (12)$$

Это *гейзенбергово уравнение движения*.

Замечания.

1. Полагая в (9) $t=0$, получим

$$\hat{A}^H(0) = \hat{A}^S.$$

Потому (9) можно записать в виде

$$\hat{A}^H(t) = \hat{U}^{-1}\hat{A}^H(0)\hat{U}. \quad (13)$$

Это выражение можно рассматривать как уравнение движения, а (12) считать его дифференциальной формой.

2. Уравнение (12) можно было бы, вообще говоря, постулировать исходя из принципа соответствия с гамильтоновой динамикой. Интегрируя его получили бы затем (13).

3. Исходя из определения среднего значения

$$\bar{A}(t) = (\Psi^H, \hat{A}^H(t)\Psi^H) \quad (14)$$

можно получить

$$\frac{d}{dt}\bar{A}(t) = (\Psi^H, \frac{d}{dt}\hat{A}^H\Psi^H) = \frac{i}{\hbar}(\Psi^H, [\hat{H}, \hat{A}^H]\Psi^H).$$

Это же можно записать в виде

$$\frac{dA(t)}{dt} = \left(\frac{d\hat{A}^H}{dt} \right). \quad (15)$$

Аналогичное выражение в представлении Шредингера

$$\frac{d\bar{A}(t)}{dt} = \left(\frac{d\hat{A}^S}{dt} \right)$$

является чисто формальным.

4. Вычислим матричные элементы в базисе из собственных векторов гамильтониана

$$\begin{aligned} A_{nn'}(t) &= (\Psi_n^H, \hat{A}^H(t) \Psi_{n'}^H) = (\Psi_n^H, \hat{U}^{-1} \hat{A}^H(0) \hat{U} \Psi_{n'}^H) = \\ &= (\hat{U}(t) \Psi_n^S, \hat{A}^H(0) U^{-1}(t) \Psi_{n'}^S) = \\ &= (e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} \Psi_n^S, \hat{A}^H(0) e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}(t) \Psi_{n'}^S) = \\ &= (e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n^S, \hat{A}^H(0) e^{i\frac{E_{n'}}{\hbar}t}(t) \Psi_{n'}^S) = \\ &= e^{i\frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}t} (\Psi_n^S, \hat{A}^H(0) \Psi_{n'}^S) = \\ &= e^{i\frac{E_n - E_{n'}}{\hbar}t} A_{nn'}(0) = e^{i\omega_{nn'}t} A_{nn'}(0). \end{aligned} \quad (16)$$

Отсюда следует, что

$$\frac{dA_{nn'}(t)}{dt} = i\omega_{nn'} A_{nn'}(t). \quad (17)$$

К этому же выводу можно прийти, взяв матричные элементы от обеих частей соотношения

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^H(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}^H(t)]. \quad (18)$$

Действительно, используя инвариантность матричных элементов, получим

$$\begin{aligned}
(\Psi_n^H, \frac{d}{dt} \hat{A}^H(t) \Psi_{n'}^H) &= \frac{i}{\hbar} (\Psi_n^H, [\hat{H} \hat{A}^H](t) \Psi_{n'}^H) = \\
&= \frac{i}{\hbar} (\Psi_n^S, [\hat{H} \hat{A}^S](t) \Psi_{n'}^S) = \frac{i}{\hbar} (\Psi_n^S, \hat{H} \hat{A}^S \Psi_{n'}^S) - \frac{i}{\hbar} (\Psi_n^S, \hat{A}^S \hat{H} \Psi_{n'}^S) = \\
&= \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \Psi_n^S, \hat{A}^S \Psi_{n'}^S) - \frac{i}{\hbar} (\Psi_n^S, \hat{A}^S \hat{H} \Psi_{n'}^S) = \\
&= \frac{i}{\hbar} (E_n - E_{n'}) (\Psi_n^S, \hat{A}^S \Psi_{n'}^S) = \frac{i}{\hbar} (E_n - E_{n'}) (\Psi_n^H, \hat{A}^H \Psi_{n'}^H) = \\
&= i \omega_{nn'} (A^H)_{nn'},
\end{aligned}$$

т.е.

$$\frac{d}{dt} A_{nn'}^H(t) = i \omega_{nn'} A_{nn'}^H(t). \quad (19)$$

Очевидно, что это соотношение не имеет место в представлении Шредингера, поскольку там не определена производная от оператора (точнее, определена формально).

В частности

$$\frac{d}{dt} x_{nn'}^H(t) = i \omega_{nn'} x_{nn'}^H(t). \quad (20)$$

Теперь рассмотрим гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x). \quad (21)$$

В представлении Шредингера для матричных элементов имеем (см. главы Эренфеста)

$$\frac{1}{m} (p_x)_{nn'} = i \omega_{nn'} x_{nn'}. \quad (22)$$

В силу инвариантности в представлении Гейзенберга получим

$$\frac{1}{m} (p_x)_{nn'}^H = i \omega_{nn'} x_{nn'}^H. \quad (23)$$

Объединяя со (20) получим

$$\frac{d}{dt} x_{nn'}^H(t) = \frac{1}{m} (p_x)_{nn'}^H.$$

5. Попробуем перейти от классических гамильтоновых уравнений движения к операторным аналогам

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{d\hat{H}}{d\hat{p}}, \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = -\frac{d\hat{H}}{d\hat{x}}.$$

Такой переход, очевидно, имеет смысл только в гейзенберговом представлении.

Для обычного гамильтониана (21) имеем

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{m} \hat{p}, \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = -\frac{d\hat{U}(\hat{x})}{d\hat{x}}.$$

Поэтому, для средних значений имеем

$$\overline{\left(\frac{d\hat{x}}{dt}\right)} = \frac{1}{m} \overline{(\hat{p})}, \quad \overline{\left(\frac{d\hat{p}}{dt}\right)} = -\overline{\left(\frac{d\hat{U}(\hat{x})}{d\hat{x}}\right)}.$$

В частности, в гейзенберговом координатном представлении

$$\overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)} = \frac{1}{m} \overline{(\hat{p})}, \quad \overline{\left(\frac{d\hat{p}}{dt}\right)} = -\overline{\left(\frac{dU(x)}{dx}\right)}.$$

Используя (15) можем также записать

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \overline{\left(\frac{dx}{dt}\right)} = \frac{1}{m} \overline{(\hat{p})}, \quad \text{и} \quad \frac{d\bar{p}}{dt} = \overline{\left(\frac{d\hat{p}}{dt}\right)} = -\overline{\left(\frac{dU(x)}{dx}\right)}.$$

ЧАСТЬ 5.

ОСНОВНЫЕ ОДНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.

5.1. ДВИЖЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ.

5.1.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ.

Пусть частица движется в отсутствие действия сил. Такое движение называется *свободным движением*. Так силы отсутствуют, то потенциальная энергия $U = \text{const}$ и мы можем принять ее равной нулю. Оператор Гамильтона в этом случае включает только кинетическую энергию

$$\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2.$$

Операторы проекции импульса \hat{p}_i , оператор квадрата момента импульса \hat{L}^2 и все три проекции \hat{L}_i коммутируют с гамильтонианом:

$$[\hat{p}_i, \hat{H}]; [\hat{L}^2, \hat{H}]; [\hat{L}_i, \hat{H}].$$

Следовательно, каждая из этих физических величин сохраняется при свободном движении частицы. Однако не все операторы \hat{p}_x , \hat{L}^2 , $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ коммутируют между собой:

$$[\hat{p}_i, \hat{L}_j] \neq 0, \quad i \neq j; [\hat{p}_i, \hat{L}^2] \neq 0.$$

Таким образом, существуют следующие наборы одновременно коммутирующих операторов:

- 1) $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{H}$,
- 2) $\hat{L}_x, \hat{p}_x, \hat{H}, \hat{L}_y, \hat{p}_y, \hat{H}, \hat{L}_z, \hat{p}_z, \hat{H}$,
- 3) $\hat{L}_x, \hat{L}^2, \hat{H}, \hat{L}_y, \hat{L}^2, \hat{H}, \hat{L}_z, \hat{L}^2, \hat{H}$,

Выберем в качестве полного набора набор \hat{p}, \hat{H} и будем искать решения УСЗ для каждого оператора, входящего в этот набор. Искомые решения должны быть общими собственными состояниями для операторов \hat{p}, \hat{H} .

Свободная частица совершает равномерное прямолинейное движение. Направим ось x вдоль направления этого движения. Такой выбор направления оси позволяет избавиться от проекций \hat{p}_y, \hat{p}_z , т.е. позволяет свести задачу к одномерной. После такого выбора направления полный набор представлен операторами \hat{p}_x, \hat{H} . Гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx}$$

Как известно, если гамильтониан не зависит явно от времени, то существуют стационарные решения УШ. Таким образом, задача заключается в решении двух УСЗ

$$\hat{p}_x \psi_p(x) = p_x \psi_p(x),$$

$$\hat{H} \psi_E(x) = E \psi_E(x).$$

5.1.2. РЕШЕНИЕ УСЗ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ИМПУЛЬСА

Оператор проекции импульса на ось x имеет вид

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

УСЗ принимает вид

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_{p_x}(x) = p_x \psi_{p_x}(x).$$

Это линейное однородное дифференциальное уравнение первого порядка. Такие уравнения допускают решение методом разделения переменных:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi(x)}{\psi(x)} &= -\frac{1}{i\hbar} p_x dx, \\ \ln \psi_p(x) + C_1 &= -\frac{1}{i\hbar} p_x x + C_2, \quad \ln \psi_p = -\frac{1}{i\hbar} p_x x + C_3, \\ \psi_p(x) &= e^{-\frac{1}{i\hbar} p_x x + C_3} = e^{C_3} e^{-\frac{1}{i\hbar} p_x x} = \\ &= C e^{-\frac{1}{i\hbar} p_x x} = C e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} = C e^{ik_x x}. \end{aligned}$$

Замечание. Это же решение можно было бы получить через характеристическое уравнение $-i\hbar \frac{d\psi_p(x)}{dx} = p_x \psi(x) \rightarrow \psi'_p(x) - \frac{i}{\hbar} p_x \psi_p(x) = 0$

$$\rightarrow r - \frac{i}{\hbar} p_x = 0 \rightarrow r = \frac{i}{\hbar} p_x \rightarrow \psi_p(x) = e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}.$$

Решение не накладывает никаких ограничений на значения импульса, поэтому спектр оператора импульса непрерывный и занимает всю действительную ось $-\infty < p_x < \infty$. Обратим внимание на то, что волновые функции конечны, непрерывны и однозначны, однако они не являются квадратично интегрируемыми. Действительно, интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p_x}^*(x) \psi_{p_x}(x) dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p_x x} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \rightarrow \infty$$

расходится. Поэтому найдем нормировочную постоянную C используя нормировку на δ -функцию, т.е. нормированные волновые функции должны удовлетворять условию $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'_x}^*(x) \psi_{p_x}(x) dx = \delta(p'_x - p_x)$. Уч-

тем свойство δ -функции $\int_{-\infty}^{\infty} e^{iyx} dx = 2\pi\delta(y)$. Тогда

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'_x}^*(x) \psi_{p_x}(x) dx &= C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p'_x x} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (p_x - p'_x) x} dx = \\ &= \hbar C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (p_x - p'_x) x} d \frac{x}{\hbar} = 2\pi\hbar C^2 \delta(p_x - p'_x) = 2\pi\hbar C^2 \delta(p'_x - p_x). \end{aligned}$$

Итак $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$. Поэтому окончательно волновая функция принимает вид

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

Мы выбрали ось x в качестве направления распространения частицы. Теперь рассмотрим два случая, когда частица движется вдоль положительного и отрицательного направлений этой оси. Такой выбор соответствует двум случаям: $p_x = p$, $p_x = -p$. Соответствующие решения примут вид

$$p_x = p, \quad \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px}, \quad (2)$$

$$p_x = -p, \quad \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} px}. \quad (3)$$

Проверим, что эти решения действительно соответствуют собственным значениям p и $-p$. Для этого подставим эти решения в УСЗ для оператора импульса:

$$p_x = p, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{\frac{i}{\hbar} px} = p e^{ipx} = p\psi,$$

$$p_x = -p, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{i}{\hbar} px} = -p e^{-ipx} = -p\psi.$$

Наконец обобщим полученное решение (1) на трехмерный случай

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\vec{r}}. \quad (4)$$

5.1.3. РЕШЕНИЕ СУШ.

СУШ запишется в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} = E \psi_E(x). \quad (5)$$

Перепишем его в форме

$$\frac{d^2 \psi_E(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_E(x) = 0.$$

Это есть однородное линейное дифференциальное уравнение второго порядка относительно неизвестной функции $\psi(x)$. Введем обозначение $k = \sqrt{2mE} / \hbar$ и запишем дифференциальное уравнение в виде

$$\psi_E''(x) + k^2 \psi_E(x) = 0. \quad (3)$$

Это уравнение имеет два частных решения:

$$\psi_{1E}(x) = e^{ikx}, \quad \psi_{2E}(x) = e^{-ikx}. \quad (4)$$

Это решение удовлетворяют стандартным условиям конечности и непрерывности во всем пространстве только при любых *положительных* значениях $E > 0$ (т.е. при $k > 0$; в противном случае оба решения неограниченно возрастают: в первом случае при отрицательных значениях x , а во втором случае при положительных x). Поэтому спектр собственных значений энергии в данном случае непрерывный.

Непосредственной проверкой, а именно, подставляя функции ψ_1 и ψ_2 в уравнение (5), убеждаемся, что обеим этим функциям соответствует одно и то же значение энергии E . Это показывает, что мы здесь имеем дело с вырождением, а именно - с двукратным вырождением.

Общее решение УШ (3) является суммой двух частных решений

$$\psi_E(x) = c_1 \psi_{1E}(x) + c_2 \psi_{2E}(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}. \quad (5)$$

5.1.4. ВЫВОДЫ.

Решение (5) не является СФ оператора импульса, в то время как СФ оператора импульса является одновременно и СФ гамильтониана (оператор импульса сам по себе образует полный набор, в то время как гамильтониан этим свойством не обладает, на что указывает двукратное вырождение).

Мы ищем решение, которое должно быть одновременно СФ как гамильтониана так и оператора импульса. Это требование будет удовлетворено, если положить $p_x = \hbar k_x = \pm p = \pm \hbar k$, $k > 0$. Теперь можем записать искомое решение

$$\psi_{p_x, E}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ik_x x}.$$

Можно записать эту функцию также в виде

$$\psi_{\pm p, E}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} px} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\pm ikx}.$$

Каждая из этих функций является СФ как оператора импульса так и гамильтониана и обе эти функции принадлежат одному и тому же вырожденному собственному значению энергии E .

Учитывая, что $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, получим, что связь между энергией и импульсом такая же как и в классической механике

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

ЗАДАЧИ.

1. Плотность тока вероятности. Пусть частица движется вдоль положительного направления оси x , и, следовательно, ее состояние описывается волновой функцией $\psi(x, t) = ae^{ipx/\hbar}$. Найдем плотность тока вероятности в этом состоянии. Учтем, что

$$\psi^* = ae^{-\frac{i}{\hbar} px}, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = a \frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar} px}.$$

Следовательно

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{2mi} \left(|a|^2 \frac{i}{\hbar} p - |a|^2 \frac{i}{\hbar} p \right) = \\ &= \frac{\hbar}{mi} |a|^2 \frac{i}{\hbar} p = \frac{1}{m} |a|^2 p. \end{aligned}$$

Окончательно для плотности тока вероятности можем записать

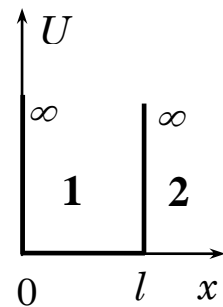
$$j(x, t) = \frac{p}{m} |a|^2.$$

5.2. ЧАСТИЦА В ОДНОМЕРНОЙ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ.

Рассмотрим одномерное движение частицы в потенциальном поле

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < l \\ \infty, & x \leq 0, x \geq l \end{cases}$$

Такое поле называется *бесконечно глубокой потенциальной ямой*. Поскольку на границе ямы на частицу действуют бесконечно большие силы, направленные внутрь ямы, то говорят, что частица заключена в области пространства, ограниченной *идеально отражающими (абсолютно непроницаемыми)* стенками. Поскольку частица не может выйти за



пределы ямы, то о движении частицы в таком ограниченном пространстве говорят как о **финитном** движении.

Ищем решение СУШ в двух областях: вне ямы и внутри нее. Поскольку частица не может находиться вне ямы, то ее волновая функция в области вне промежутка $0 < x < l$ равна нулю. Из условия непрерывности следует, что волновая функция также равна нулю и на границах области, т.е. $\psi(0) = \psi(l) = 0$. Это условие является граничным условием для решения УШ внутри ямы. Внутри ямы запишем УШ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x).$$

Перепишем его в форме

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0.$$

Это есть однородное линейное дифференциальное уравнение второго порядка относительно неизвестной функции $\psi(x)$. Введем обозначение $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ и запишем дифференциальное уравнение в виде

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0.$$

Решение этого уравнения

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha).$$

Используем теперь граничные условия. Из условия $\psi(0) = 0$ следует $0 = A\sin\alpha$ откуда $\alpha = 0$. Из условия $\psi(l) = 0$ следует $\psi(x=l) = A\sin kl = 0$ откуда следует, что $kl = \pi n$ или

$$k = \frac{\pi n}{l}, \quad n=1,2,\dots$$

Значение $n=0$ отбрасываем, иначе получим $\psi(0 < x < l) = 0$, что равносильно отсутствию частицы в яме. Следовательно

$$\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

и

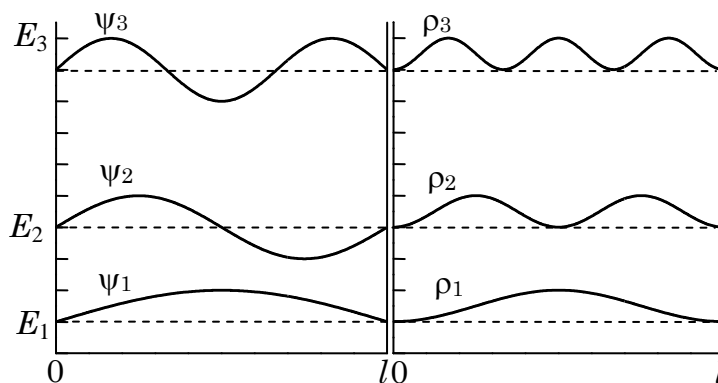
$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2, \quad n=1,2,\dots$$

Таким образом, СУШ имеет решения, удовлетворяющие граничным условиям только при дискретных значениях числа n . Другими словами энергия частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме оказывается дискретной, т.е. квантованной. С математической точки зрения эта дискретность явилась следствием применения к волновой функции граничных условий.

Состояние частицы с наименьшей энергией называется *основным состоянием*, остальные состояния называются *возбужденными состояниями*. Видим, что энергия основного состояния равна

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}.$$

То что минимальная энергия не равна нулю объясняется с физической точки зрения тем, что значение Δx конечно (оно не может быть больше ширины ямы), поэтому неопределенность в импульсе, а следовательно и энергии также конечна.



Рассмотрим теперь волновые функции

$$\psi_n(x) = A_n \sin \frac{\pi n}{l} x.$$

Постоянную A определим из условия нормировки

$$\begin{aligned} (\psi_n(x), \psi_n(x)) &= A_n^2 \int_0^l \sin^2 \frac{\pi n}{l} x dx = \\ &= A_n^2 \left(\frac{1}{2} x - \frac{\pi n}{4l} \sin 2 \frac{\pi n}{l} x \right) \Big|_0^l = A_n^2 \frac{l}{2} = 1. \end{aligned}$$

Отсюда $A_n = \sqrt{\frac{2}{l}}$.

Видим, что значение постоянной не зависит от значения квантового числа n . Итак, окончательное выражение для волновой функции имеет вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n}{l} x.$$

Теперь определим плотность вероятности нахождения частицы в различных точках внутри ямы

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2 \frac{\pi n}{l} x.$$

Из анализа этой функции видно, что при увеличении квантового числа n максимумы в плотности распределения стремятся сблизиться друг с другом. Это означает, что при больших n частица с равной вероятностью будет находиться в любой точке внутри ямы.

1. Энергия частицы, движущейся в потенциальной яме, принимает дискретный ряд значений.

2. Частица не находится в состоянии покоя даже в основном состоянии, т.е. состоянии с минимальной энергией.

В заключение данного параграфа отметим, что можно доказать совершенно общую теорему, согласно которой имеем следующее: если движение квантовой системы финитно (осуществляется в ограниченной области пространства), то энергетический спектр системы всегда дискретен. Поэтому спектры атомов, молекул, твердых тел – дискретны. Наоборот, если квантовая частица совершает инфинитное движение (например, так движется свободный электрон), то энергетический спектр ее всегда непрерывный (энергия частицы может принимать любые значения в пределах от какого-то значения до бесконечности). Поэтому энергетический спектр электрона в атоме водорода дискретный, в то же время энергетический спектр ионизированного атома водорода (электрон оторван от атома) непрерывный. Важно подчеркнуть, что эти положения имеют общий характер.

ЗАДАЧИ.

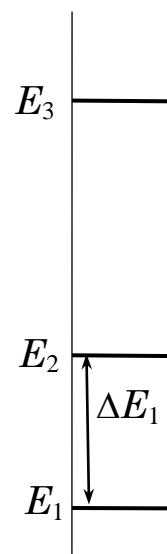
1. Для электрона в одномерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками вычислить энергию основного состояния и расстояние между основным и первым возбужденным уровнями энергии. Ширина ямы: а) 1 см; б) 10^{-8} см.

Решение.

$$\Delta E_1 = E_2 - E_1 = \frac{3}{2m} \left(\frac{\pi \hbar}{l} \right)^2,$$

$$\text{а) } \Delta E_1 = \frac{3}{2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30}} \left(\frac{\pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{0,01} \right)^2 \approx 1,6 \cdot 10^{-33} \text{ Дж} = 10^{-14} \text{ эВ},$$

$$\text{б) } \Delta E_1 = \frac{3}{2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30}} \left(\frac{\pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{10^{-10}} \right)^2 \approx 1,8 \cdot 10^{-17} \text{ Дж} = 113 \text{ эВ}.$$



2. Частица массой m находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с абсолютно непроницаемыми стенками. Найти выражение для плотности энергетических уровней (число энергетических уровней в интервале энергий от E до $E+dE$), полагая, что $n \gg 1$. Вычислить плотность уровней для электрона, если $l=1$ см, $E=1$ эВ.

Решение.

$$\begin{aligned}\Delta E_n &= E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (n+1)^2 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 = \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1).\end{aligned}$$

Относительное расстояние между уровнями

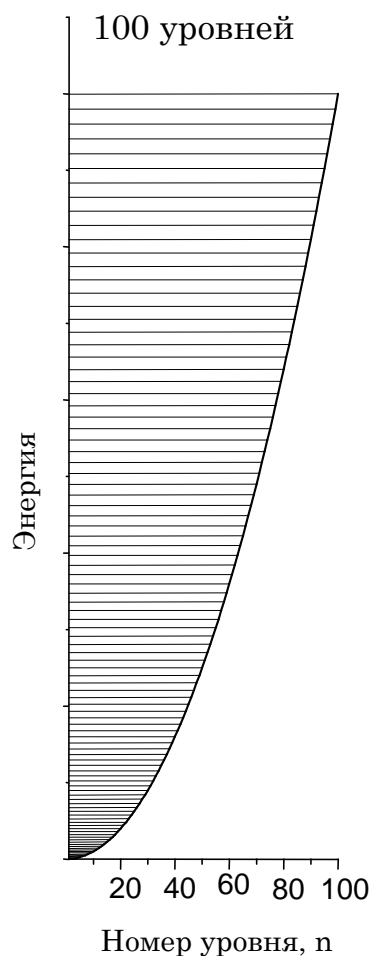
$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{(2n+1)}{n^2} \approx \frac{2}{n},$$

$$dE = \Delta E dn = \frac{2}{n} E dn,$$

$$n = \frac{l}{\pi \hbar} \sqrt{2mE},$$

$$\begin{aligned}\frac{dn}{dE} &= \frac{n}{2E} = \frac{n}{2} \frac{2ml^2}{\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = \frac{ml^2}{\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{n} = \\ &= \frac{ml^2}{\pi^2 \hbar^2} \frac{\pi \hbar}{l} \frac{1}{\sqrt{2mE}} = \frac{l}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dn}{dE} &= \frac{10^{-2}}{\pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{\frac{0,9 \cdot 10^{-30}}{2 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = \\ &= 5,09 \cdot 10^{25} \text{ Дж}^{-1} \approx 8 \cdot 10^6 \text{ эВ}^{-1}.\end{aligned}$$



3. Частица находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Определить а) в каком месте ямы плотность вероятности обнаружения частицы максимальна; б) вычислить вероятность обнаружения частицы в интервале $[l/3, 2l/3]$, в) определить энергию частицы в этом состоянии для электрона, если ширина ямы $l=10^{-8}$ см.

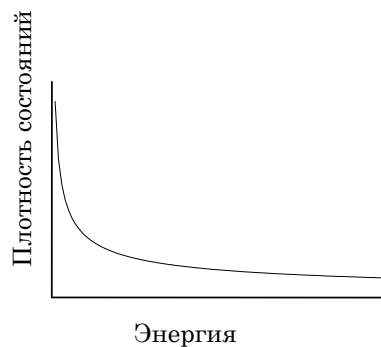
Решение.

а) Основное состояние описывается волновой функцией

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi x}{l}. \text{ Поэтому плотность вероятности имеет вид}$$

$$(\psi_1(x))^2 = \frac{2}{l} \sin^2 \frac{\pi x}{l}. \text{ Исследуем эту функцию на экстремумы}$$

$$\frac{d}{dx} (\psi_1(x))^2 = \frac{2\pi}{l^2} 2 \sin \frac{\pi x}{l} \cos \frac{\pi x}{l} = \frac{2\pi}{l^2} \sin 2 \frac{\pi x}{l} = 0.$$



Из этого выражения видно, что в интервале $x \in (0, l)$ имеется три экстремума в точках $0, l/2, l$, причем, только в точке $x=l/2$ имеет место максимум.

б) Находим вероятность

$$\begin{aligned} P\left(\frac{1}{3}l \leq x \leq \frac{2}{3}l\right) &= \int_{l/3}^{2l/3} \psi_1^2(x) dx = \frac{2}{l} \int_{l/3}^{2l/3} \sin^2 \frac{\pi x}{l} dx = \\ &= \left(\frac{1}{l} x - \frac{1}{2\pi} \sin \frac{2\pi}{l} x \right) \Big|_{l/3}^{2l/3} = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \approx 0,61. \end{aligned}$$

в) Энергию найдем из соотношения $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$.

4. Частица находится в состоянии $\psi(x) = A \sin^2(\pi x/l)$ в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Определить вероятность ее обнаружения в основном состоянии.

Решение. Функция $\psi(x)$ не описывает стационарное состояние, однако она является квадратично-интегрируемой на отрезке. Поэтому можно представить ее в виде разложения по стационарным состояни-

ям $\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$. Вероятность пребывания частицы в основном состоянии $P_1 = |c_1|^2$. Находим коэффициент

$$\begin{aligned} c_1 &= (\psi_1(x), \psi(x)) = \int_0^l \psi_1^*(x) \psi(x) dx = \\ &= A \sqrt{\frac{2}{l}} \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi}{l} x\right) \sin\left(\frac{\pi}{l} x\right) dx = A^2 \int_0^l \sin^3\left(\frac{\pi}{l} x\right) dx = \\ &= A \sqrt{\frac{2}{l}} \left(-\frac{l}{\pi} \cos \frac{\pi}{l} x + \frac{l}{3\pi} \cos^3 \frac{\pi}{l} x \right) \Big|_0^l = 2A \sqrt{\frac{2}{l}} \frac{2l}{3\pi} = A \sqrt{\frac{2}{l}} \frac{4l}{3\pi}, \end{aligned}$$

где учтено $\int \sin^3 ax dx = -\frac{1}{a} \cos ax + \frac{1}{3a} \cos^3 ax$. Теперь вычислим нормировочную постоянную

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^l \psi^*(x) \psi(x) dx = A^2 \int_0^l \sin^4\left(\frac{\pi}{l} x\right) dx = \\ &= A^2 \left(\frac{3}{8} x - \frac{1}{4} \frac{l}{\pi} \sin 2 \frac{\pi}{l} x + \frac{l}{32\pi} \sin 4 \frac{\pi}{l} x \right) \Big|_0^l = A^2 \frac{3}{8} l, \end{aligned}$$

где учтено $\int \sin^4 ax dx = \frac{3}{8} x - \frac{1}{4a} \sin 2ax + \frac{1}{32a} \sin 4ax$. Отсюда имеем

$$A = \sqrt{\frac{8}{3l}} \text{ и } c_1 = A \sqrt{\frac{2}{l}} \frac{4l}{3\pi} = \frac{16}{3\pi} \sqrt{\frac{1}{3}}, \quad P_1 = c_1^2 = \left(\frac{16}{3\pi} \sqrt{\frac{1}{3}} \right)^2 = \frac{256}{27\pi^2} = 0,96.$$

5.3. ЛИНЕЙНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

Пусть квантовая частица совершает малые колебания возле положения равновесия, например это малые колебания атомов в молекуле, тепловые колебания атомов в узлах кристаллической решетки. Потенциальная энергия осциллятора в случае малых колебаний равна

$$U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Заменяем классические величины операторами. Тогда уравнение Шредингера для стационарных состояний примет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E\psi$$

или

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0.$$

Введем в этом уравнении безразмерную переменную ξ

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

С учетом такой замены перепишем первое слагаемое

$$\psi''(x) = \frac{d}{dx} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right),$$

$$\psi'(x) = \frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{d\psi(x(\xi))}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d\psi(x(\xi))}{d\xi} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \psi'(\xi),$$

$$\psi''(x) = \frac{d}{dx} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d\psi'(\xi)}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d\psi'(\xi)}{d\xi} = \frac{m\omega}{\hbar} \psi''(\xi).$$

Теперь перепишем второе слагаемое

$$\frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2} = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \xi^2 \frac{\hbar}{m\omega} = \frac{m\omega}{\hbar} \xi^2.$$

Теперь УШ получим в виде

$$\frac{m\omega}{\hbar} \psi''(\xi) - \frac{m\omega}{\hbar} \xi^2 \psi(\xi) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(\xi) = 0$$

или

$$\psi''(\xi) - \xi^2 \psi(\xi) + \frac{2E}{\omega \hbar} \psi(\xi) = 0.$$

Введем безразмерный параметр λ

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar \omega}$$

или

$$\psi''(\xi) + (\lambda - \xi^2) \psi(\xi) = 0.$$

Таким образом, для нахождения волновой функции мы имеем линейное однородное дифференциальное уравнение, однако это не есть уравнение с постоянными коэффициентами. Нам необходимо найти такое его решение, которое удовлетворяет стандартным условиям и существует в области $-\infty < \xi < +\infty$. Легко видеть, что при $\xi \rightarrow 0$ имеем осциллирующее решение. При $\xi \gg \lambda$ можно опустить слагаемое с λ . При этом имеем

$$\psi''(\xi) - \xi^2 \psi(\xi) = 0.$$

Прямой подстановкой убеждаемся, что решением является линейная комбинация

$$\psi(\xi) = c_1 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + c_2 e^{\frac{1}{2}\xi^2}.$$

Второе слагаемое в сумме бесконечно возрастает с ростом ξ , поэтому его отбрасываем и оставляем. Следовательно, асимптотически при $\xi \rightarrow \infty$ имеем

$$\psi(\xi) = c_1 e^{-\frac{1}{2}\xi^2}.$$

Для всего интервала $-\infty < \xi < +\infty$ будем искать решение в виде

$$\psi(\xi) = f(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}.$$

Тогда дифференциальное уравнение примет вид

$$f''(\xi) - 2\xi f'(\xi) + (\lambda - 1)f(\xi) = 0.$$

Ищем решение в виде ряда

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k,$$

$$f' = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \xi^{k-1};$$

$$f'' = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)(k+2) a_{k+2} \xi^k.$$

Подставляя в УШ, получим

$$\sum_{k=0}^{\infty} (k+1)(k+2)a_{k+2}\xi^k - 2\xi \sum_{k=0}^{\infty} ka_k\xi^{k-1} + (\lambda-1)\sum_{k=0}^{\infty} a_k\xi^k = 0,$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{(k+1)(k+2)a_{k+2} - 2ka_k + (\lambda-1)a_k\}\xi^k = 0,$$

$$(k+1)(k+2)a_{k+2} - 2ka_k + (\lambda-1)a_k = 0,$$

$$a_{k+2} = \frac{2k - (\lambda - 1)}{(k+1)(k+2)} a_k.$$

Ряд с такими коэффициентами ведет себя при $x \rightarrow \infty$ как e^{x^2} . Пусть, начиная с некоторого $k=n$, все коэффициенты $a_{n+2}=0$. Это возможно только если справедливо равенство

$$2n = (\lambda - 1).$$

Тогда ряд обрывается на этом значении n и получаем, что решением является полином

$$H_n(\xi) = \sum_{k=0}^n a_k \xi^k$$

с коэффициентами

$$a_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)} a_k,$$

который называется полиномом Эрмита. Приведем для примера несколько первых полиномов Эрмита

$$H_0(\xi) = 1; H_1(\xi) = 2\xi; H_2(\xi) = -2 + 4\xi^2;$$

$$H_3(\xi) = -12\xi + 8\xi^3; H_4(\xi) = 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4.$$

Итак, решения существуют только при определенных значениях параметра λ , а именно таких, что $\lambda-1=2n$, $n = 0,1,2,\dots$. Учитывая определение параметра λ , имеем

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n,$$

откуда

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0,1,2,\dots$$

В классической механике наименьшая энергия осциллятора есть $E=0$ и соответствует покоящейся частице. Поэтому классическая вероятность всюду равна нулю, кроме точки $x=0$. В квантовой теории наименьшая энергия осциллятора $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Говорят, что это состояние с **нулевой энергией**. Очевидно, что эта энергия не может быть отнята у

осциллятора, ибо по своему существу она есть минимальная энергия, которую он может иметь.

Этими решениями являются функции

$$\psi_n(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi),$$

где $H_n(\xi)$ - полиномы Эрмита n -го порядка

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}.$$

Обратим внимание на то, что волновая функция нормирована на 1.

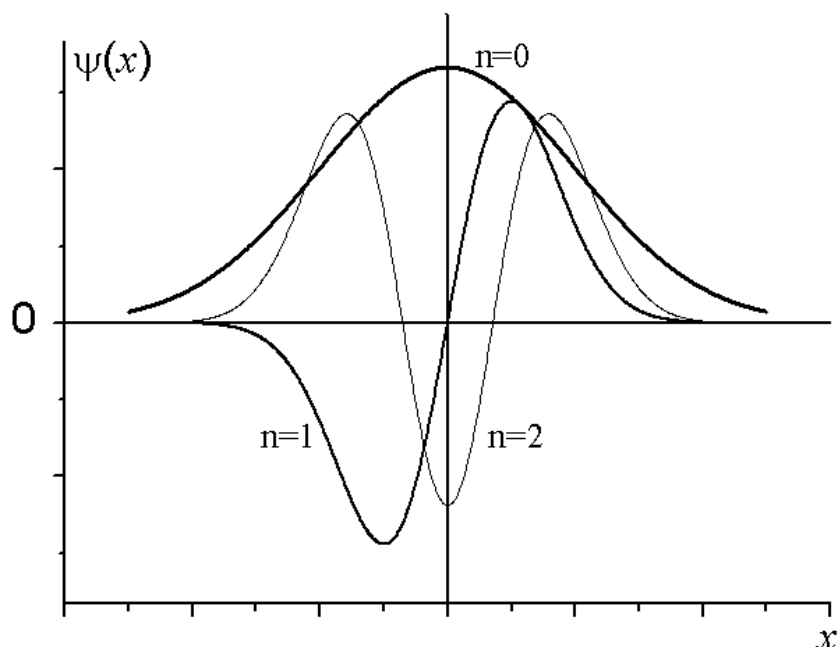
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2(\xi) d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1.$$

Приведем также несколько первых собственных функций

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2(\xi) d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2 \frac{m\omega}{\hbar}} H_n^2\left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) dx = 1,$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \quad \psi_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} 2\xi,$$

$$\psi_2(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^3}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} (4\xi^2 - 2).$$



Обратим внимание на следующее обстоятельство. Движение осциллятора не ограничено какой-либо непроницаемой стенкой. Поэтому в данном случае нет и граничных условий аналогичных тем, которые рассматривались в случае с потенциальной ямой. Единственное требование, которое налагается на волновую функцию - это стандартные

условия. Только их, без дополнительных граничных условий достаточно, чтобы появились дискретные уровни энергии.

Заметим, что число n - называют **главным квантовым числом**. Это число равно числу узлов волновой функции, т.е. количеству точек на оси x , где функция обращается в ноль.

Сравнение квантовой вероятности с классической. Примем за классическую вероятность отношение времени, которое частица пребывает в некоторой области пространства к периоду колебаний $dP = dt/T = dx/(vT)$.

Учтем, что $x = a \sin \omega t$, $v = a\omega \cos \omega t = a\omega \sqrt{1 - \sin^2 \omega t} = a\omega \sqrt{1 - x^2/a^2}$.

Тогда $dP = \frac{dx}{T a \omega \sqrt{1 - x^2/a^2}} = \frac{dx}{2\pi a \sqrt{1 - x^2/a^2}}$.

Нулевые колебания. Существование нулевой энергии является прямым следствием соотношения неопределенностей. Покажем это. Соотношение неопределенностей для координаты и импульса имеет вид $\overline{\Delta p^2 \Delta x^2} \geq \hbar^2 / 4$. Найдем средние значения координаты и импульса. Для координаты имеем $\bar{x} = \int \psi_n x \psi_n dx = 0$, поскольку подинтегральное выражение - нечетная функция. Для импульса имеем

$$p_x = -i\hbar \int \psi_n \frac{\partial}{\partial x} \psi_n dx = -i\hbar \int \psi_n d\psi_n = -\frac{i\hbar}{2} \psi_n^2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0,$$

где учтено, что, согласно граничным условиям, волновая функция обращается в ноль на бесконечности. Поэтому $\overline{\Delta x^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \overline{x^2}$ и $\overline{\Delta p_x^2} = \overline{p_x^2} - \bar{p}_x^2 = \overline{p_x^2}$. Итак соотношение неопределенностей можно переписать в виде

$$\overline{p^2 x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (1)$$

Теперь учтем, что средняя энергия осциллятора равна

$$E = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \overline{x^2}. \quad (2)$$

Сравнивая (1) и (2) видим, что уменьшение потенциальной энергии приводит к увеличению кинетической и наоборот. В частности, состояние с наименьшей потенциальной энергией \bar{U} есть состояние с бесконечно большой кинетической энергией $\bar{T} = \infty$. Объединяя (1) и (2) получаем

$$E \geq \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8\overline{p^2}}.$$

Минимальное значение средней полной энергии из условия $\partial \bar{E} / \partial (\overline{p^2}) = 0$. Получим $\min E = \hbar \omega / 2$. Итак, нулевая энергия есть наименьшая энергия, совместимая с соотношением неопределенностей. В конце заметим, что существование нулевых колебаний экспериментально доказано в опытах по рассеянию рентгеновских лучей кристаллами.

ЗАДАЧИ.

1. Вычислить средние значения кинетической и потенциальной энергии для линейного гармонического осциллятора в основном состоянии.

Решение.

$$\overline{T}_0 = \frac{\overline{p^2}}{2m}, \quad U_0 = \frac{1}{2} k \overline{x^2}.$$

Находим $\overline{x^2}$ и $\overline{p^2}$. Нормированная волновая функция основного состояния известна:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(\xi) d\xi &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_0^2(\xi) d\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2 \frac{m\omega}{\hbar}} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(x) dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} = \sqrt{\pi}, \\ \psi_0 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}, \quad \text{где } \alpha = \frac{m\omega_0}{\hbar}. \end{aligned}$$

При этом вычислении, а также при решении задач к этому параграфу нам придется встретиться с определенными интегралами типа

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}.$$

Пользуясь этим, находим

$$\overline{x^2} = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} = \frac{1}{2a} = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega_0} = \frac{1/2 \hbar \omega_0}{m\omega_0^2} = \frac{E_0}{k}. \quad (4)$$

(где k – постоянная квазиупругой силы). Следовательно

$$U_0 = \frac{1}{2} k \overline{x^2} = \frac{1}{2} k \frac{E_0}{k} = \frac{1}{2} E_0.$$

Далее

$$\begin{aligned}
 \overline{p^2} &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} dx = \\
 &= \hbar^2 \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left(\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx - \alpha^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx \right) \\
 &= \hbar^2 \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left(\alpha \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} - \alpha^2 \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} \right) = \\
 &= \hbar^2 \alpha - \frac{1}{2} \hbar^2 \alpha = \frac{1}{2} \hbar^2 \alpha = \frac{1}{2} \hbar^2 \frac{m \omega^2}{\hbar} = \frac{1}{2} m \hbar \omega = m E_0. \\
 \overline{T_0} &= \frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{E_0 m}{2m} = \frac{1}{2} E_0,
 \end{aligned}$$

т. е. средняя потенциальная энергия равна средней кинетической, как и в классической механике. Наконец,

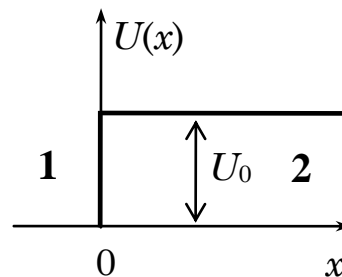
$$\overline{E_0} = \overline{T_0} + \overline{U_0} = E_0$$

как и следовало ожидать, поскольку нулевое состояние есть состояние с определенной энергией.

5.4. ОТРАЖЕНИЕ И ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР.

1. Рассмотрим прямоугольный бесконечно протяженный одномерный потенциальный барьер (ступенчатый барьер)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x \geq 0 \end{cases}$$



В классической механике всякая частица,двигающаяся слева направо с энергией, меньшей высоты барьера U_0 , полностью отражается от потенциальной стенки. Область $x > 0$ является для нее недоступной, так как в этой области полная энергия частицы меньше потенциальной. В противном случае кинетическая энергия частицы была бы отрицательной, что, очевидно, невозможно. Если же $E > U_0$, то по законам классической механики частица беспрепятственно проходит над барьером, двигаясь в области $x > 0$ с меньшей кинетической энергией равной $E - U_0$.

Квантовомеханическая задача сводится к решению одномерного СУШ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U(x) \psi(x) = E \psi(x).$$

В области 1 имеем

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0. \quad (1)$$

Это есть однородное линейное дифференциальное уравнение второго порядка относительно неизвестной функции $\psi(x)$. Введем обозначение

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

и запишем дифференциальное уравнение (1) в виде

$$\psi_1'' + k_1^2\psi_1 = 0.$$

Решение этого уравнения

$$\psi_1 = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}. \quad (2)$$

В области 2 имеем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + U_0 \psi = E\psi$$

или

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0. \quad (3)$$

Введем обозначение

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)}$$

и запишем дифференциальное уравнение (3) в виде

$$\psi'' + k_2^2\psi = 0.$$

Решение этого уравнения

$$\psi_2 = a_2 e^{ik_2 x} + b_2 e^{-ik_2 x}. \quad (4)$$

2. С целью упрощения дальнейшего рассмотрения полезно дать физическую интерпретацию решений (2) и (4). Первое слагаемое в (2) можно рассматривать как волновую функцию, описывающую состояние частицы двигающейся из $x \rightarrow -\infty$ с импульсом $p_x = +p$, т.е. в направлении положительных значений x . Назовем такую частицу частицей падающей на барьер. Второе слагаемое в (4) можно рассматривать как волновую функцию, описывающую состояние частиц двигающихся из $x \rightarrow +\infty$ с импульсом $p_x = -p$, т.е. в направлении отрицательных значений x . Будем считать, что таких частиц, т.е. частиц падающих на барьер справа нет. Для этого положим $b_2 = 0$. Тогда волновая функция в области 2 примет вид

$$\boxed{\psi_2 = a_2 e^{ik_2 x}}. \quad (5)$$

Второе слагаемое в (2) можно рассматривать как волновую функцию, описывающую состояние частицы, двигающейся от барьера в область $x \rightarrow -\infty$ с импульсом $p_x = -p$. Назовем такую частицу частицей отраженной от барьера. Наконец, первое слагаемое в (4), т.е. волновую функцию (5) уместно назвать, волновой функцией частицы прошедшей через барьер.

Определим теперь поток частиц, падающих на барьер

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m} |a_1|^2.$$

Назовем коэффициентом отражения R отношение плотности потока отраженных частиц к плотности потока падающих частиц, т.е.

$$R = \frac{j_R}{j_0}.$$

Назовем коэффициентом прохождения D отношение плотности потока прошедших через барьер частиц к плотности потока падающих частиц, т.е.

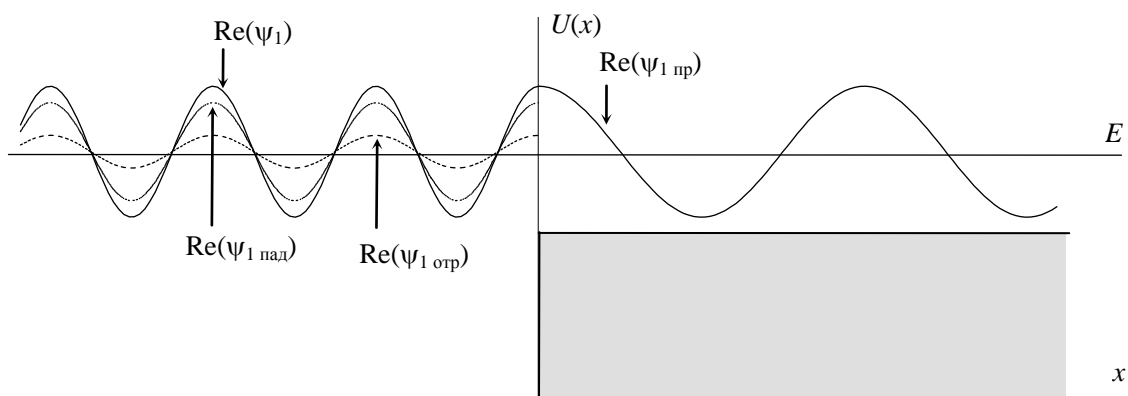
$$D = \frac{j_D}{j_0}. \quad (9)$$

Определим теперь остальные постоянные. Поскольку волновая функция не должна иметь разрывов, т.е. должна быть непрерывной, то должны выполняться равенства

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad (4)$$

$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0). \quad (5)$$

Из этих соотношений можно определить a_2 и b_1 .



Случай $E > U_0$.

Рассмотрим случай $E > U_0$. Из (4) следует

$$a_1 + b_1 = a_2. \quad (6)$$

Из (5) следует

$$k_1(a_1 - b_1) = k_2 a_2. \quad (7)$$

Из (6) и (7) следует

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad \frac{a_2}{a_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}.$$

Учитывая (1) и (2) находим

$$j_R = \frac{\hbar k_1}{m} |b_1|^2, \quad j_D = \frac{\hbar k_2}{m} |a_2|^2.$$

Тогда получаем

$$R = \left| \frac{b_1}{a_1} \right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad D = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{a_2}{a_1} \right|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (10)$$

При этом выполняется соотношение $R+D=1$, которое отражает закон сохранения числа частиц. С другой стороны это соотношение можно рассматривать как сумму вероятностей двух независимых событий.

Основные выводы:

при $E \gg U_0$: $k_2 \rightarrow k_1 \Rightarrow R \rightarrow 0$ и $D \rightarrow 1$;

при $E = U_0$: $k_2 \rightarrow 0 \Rightarrow R \rightarrow 1$ и $D \rightarrow 0$.

Случай $E < U_0$.

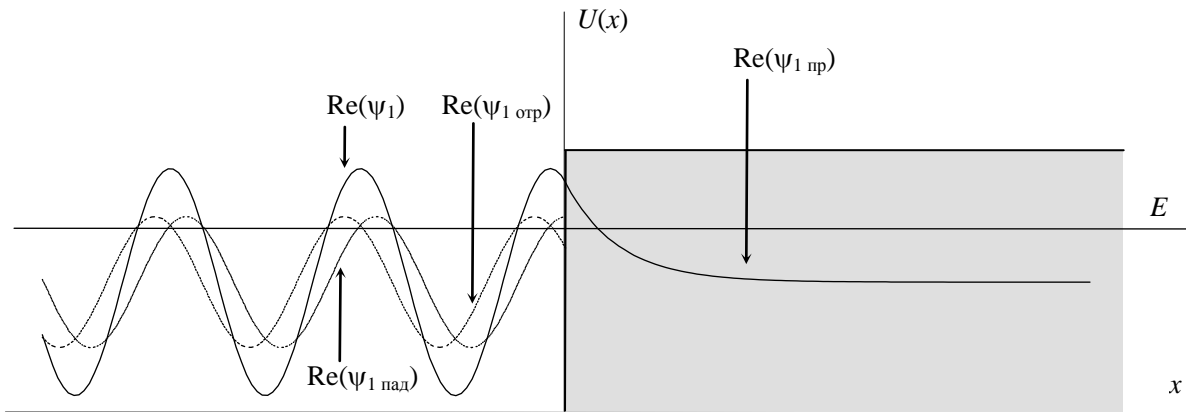
Рассмотрим случай $E < U_0$. Теперь k_2 чисто мнимая величина, которую удобно записать в виде

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)} = i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)} = ik,$$

где

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}.$$

Для коэффициента отражения тогда имеем



$$R = \left| \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \right|^2. \quad (11)$$

Поскольку числитель и знаменатель являются комплексно-сопряженными величинами, то отсюда следует, что $R=1$. Следовательно, отражение будет полным.

Отраженная волна запишется в виде

$$\psi_R = b_1 e^{-ik_1 x} = \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} e^{-ik_1 x} = e^{-i(k_1 x + \delta)}. \quad (12)$$

Значит, отражение приводит к сдвигу фазы волны. Из (12) следует, что этот сдвиг равен

$$\frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \frac{k_1 - ik}{k_1 - ik} = \frac{k_1^2 - 2ik_1 k + k_2^2}{k_1^2 + k_2^2} = 1 - i \frac{2k_1 k}{k_1^2 + k_2^2},$$

$$\delta = \operatorname{arctg} \frac{2k_1 k}{k_1^2 + k_2^2}.$$

Здесь учтено

$$a = \cos \alpha, \quad b = \frac{\sin \alpha}{\cos \alpha} = \operatorname{tg} \alpha \Rightarrow \alpha = \operatorname{arctg} \frac{b}{a}.$$

Хотя отражение является полным, волновая функция в области **II** отлична от нуля и имеет вид

$$\psi_D = a_2 e^{ik_2 x} = a_1 e^{-kx} = \frac{2k_1}{k_1^2 + k_2^2} e^{-kx}.$$

Таким образом, в области **II** решение имеет вид затухающей экспоненты. Это означает, что вероятность обнаружения частицы в этой области отлична от нуля. Проникновение квантовых частиц в области, где движение классических частиц запрещено, представляет специфический квантовый эффект, называемый **туннельным эффектом**.

ЗАДАЧИ.

1. Частица массы m падает слева на прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 . энергия частицы равна E , причем $E < U_0$. Найти эффективную глубину проникновения частицы под барьер, т.е. расстояние от границы барьера до точки, в которой плотность вероятности нахождения частицы уменьшается в e раз. Вычислить $x_{эфф}$ для электрона, если $U_0 - E = 1,0$ эВ.

Решение. Волновая функция под барьером имеет вид $\psi_D = a_2 e^{-kx}$.

Поэтому плотность состояния $\rho_D = |a_2|^2 e^{-2kx}$. Следовательно, глу-

бина проникновения $x = \frac{1}{2k}$. Учтем, что $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$. Тогда

$$\begin{aligned} x_{эфф} &= \sqrt{\frac{\hbar^2}{8m(U_0 - E)}} = \sqrt{\frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = \sqrt{\frac{1,1 \cdot 10^{-68}}{8 \cdot 0,9 \cdot 1,6 \cdot 10^{-49}}} = \\ &= \sqrt{\frac{10^{-68}}{10^{-49}}} = \sqrt{0,095 \cdot \frac{10^{-68}}{10^{-49}}} = \sqrt{0,095 \cdot 10^{-19}} = \sqrt{0,95 \cdot 10^{-18}} = 0,977 \cdot 10^{-9} \text{ м} \approx 1 \text{ нм}. \end{aligned}$$

2. Показать, что при $E < U_0$ коэффициент отражения $R=1$.

Решение. Запишем коэффициент отражения в явном виде

$R = \left| \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \right|^2$. Поскольку числитель и знаменатель являются комплексно-сопряженными величинами, то отсюда следует, что его можно записать в виде

$$R = \left| \frac{e^{i\alpha}}{e^{-i\alpha}} \right|^2 = |e^{2i\alpha}|^2 = |1|^2 = 1.$$

3. Частица массы m падает слева на прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 . энергия частицы равна E , причем $E > U_0$. Найти распределение плотности вероятности нахождения частицы для случая $E = 4/3 U_0$.

Решение. Волновая функция в области I т.е.

до барьера имеет вид $\psi_1 = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}$ и

над барьером имеет вид $\psi_2 = a_2 e^{ik_2 x}$.

Плотность вероятности в области I имеет вид

$$\begin{aligned} |\psi_1|^2 &= \psi_1^* \psi_1 = (a_1^* e^{ik_1 x} + b_1^* e^{-ik_1 x})(a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}) = \\ &= |a_1|^2 + |b_1|^2 + 2a_1 b_1 \cos 2k_1 x. \end{aligned}$$

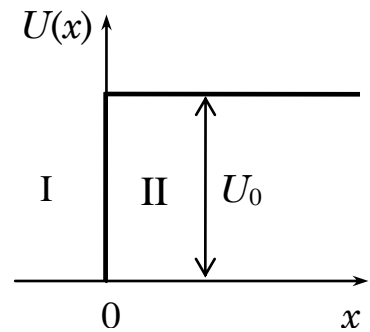
Найдем вначале $|a_1|^2 + |b_1|^2$. При этом учтем, что

$$b_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} a_1, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{8mU_0}{3\hbar^2}},$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)} = \sqrt{\frac{2mU_0}{3\hbar^2}}.$$

Тогда

$$|a_1|^2 + |b_1|^2 = |a_1|^2 + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 |a_1|^2 = 2|a_1|^2 \frac{k_1^2 + k_2^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{10}{9} |a_1|^2,$$



$$a_1 b_1 = a_1^2 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = a_1^2 \frac{(k_1 - k_2)(k_1 - k_2)}{(k_1 + k_2)(k_1 - k_2)} = a_1^2 \frac{(k_1 - k_2)^2}{k_1^2 - k_2^2} = \frac{1}{3} a_1^2,$$

$$|\psi_1(x)|^2 = \frac{10}{9} a_1^2 + \frac{6}{9} a_1^2 \cos 2k_1 x = \frac{2}{9} a_1^2 \left(5 + 3 \cos 4 \sqrt{\frac{2mU_0}{3\hbar^2}} x \right).$$

ЧАСТЬ 6.

ДВИЖЕНИЕ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ.

6.1. УСЗ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ПРОЕКЦИИ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА И КВАДРАТА МОМЕНТА ИМПУЛЬСА.

6.1.1. УСЗ ДЛЯ ОПЕРАТОРА КВАДРАТА МОМЕНТА ИМПУЛЬСА.

Прежде всего, учтем, что *оператор Лапласа* в сферических координатах имеет вид

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\nabla_{\theta, \varphi}^2}{r^2},$$

где

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

Оператор квадрата углового момента и операторы проекций углового момента в сферических координатах имеют вид

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2,$$

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

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

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

УСЗ для квадрата углового момента имеет вид $\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi$. В сферических координатах это уравнение принимает вид

$$\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi(\theta, \varphi) = L^2 \psi(\theta, \varphi).$$

Конечные, непрерывные и однозначные решения этого уравнения существуют только в том случае, если СЗ оператора квадрата углового момента принимают дискретный ряд значений

$$L_l^2 = \hbar^2 l(l+1),$$

где l - целое положительное число: $l = 0, 1, 2, 3, \dots$. Число l называется *азимутальным (орбитальным) квантовым числом*. С учетом этого перепишем УСЗ в виде

$$\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + l(l+1) \right) \psi(\theta, \varphi) = 0.$$

Решениями УСЗ являются **сферические функции** $\psi(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)$, которые можно представить в виде произведения двух функций каждая из которых зависит от своего угла $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi)$. Целое число m принимает значения: $m=0, \pm 1, \dots, \pm l$. Число m называется **магнитным квантовым числом**.

Сферические функции являются ортонормированными

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{l'l} \delta_{m'm},$$

$$\int_0^\pi \Theta_{l'm'}^*(\theta) \Theta_{lm}(\theta) \sin \theta d\theta = \delta_{l'l} \delta_{m'm},$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) d\varphi = \delta_{m'm}.$$

Окончательно УСЗ для оператора квадрата момента импульса можно записать в виде

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Число m принимает $2l+1$ значений. Это означает, что одному СЗ L_l^2 соответствует $2l+1$ СФ $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, т.е. собственные состояния оператора квадрата момента импульса вырождение вырождены с кратностью $2l+1$.

6.1.2. УСЗ ДЛЯ ОПЕРАТОРА Z-ПРОЕКЦИИ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА.

Учтем, что операторы проекции момента импульса и квадрата момента импульса коммутируют. Следовательно, у них одни и те же СФ. Поэтому УСЗ для оператора проекции углового момента имеет вид

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = L_z Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Учитывая, что $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi)$, что оператор \hat{L}_z не зависит от θ и что зависимость от угла φ содержится в функции $\Phi_m(\varphi)$ получим УСЗ

$$\hat{L}_z \Phi_m(\varphi) = L_z \Phi_m(\varphi).$$

Учтем явный вид функции $\Phi_m(\varphi)$

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

и продифференцируем ее по φ

$$-i\hbar \frac{\partial \Phi_m(\varphi)}{\partial \varphi} = \hbar m \Phi_m(\varphi).$$

Следовательно, СЗ равны $L_z = \hbar m$, $m=0, \pm 1, \dots, \pm l$. Поэтому УСЗ для оператора проекции момента импульса можно записать в виде

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

6.2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ.

6.2.1. НУШ ДЛЯ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ.

Волновая функция системы частиц зависит от времени и от координат, число которых равно числу степеней свободы системы. Совокупность значений всех независимых координат в некоторый момент времени кратко будем обозначать одной буквой x . Задание x определяет точку в абстрактном пространстве, которое называют **конфигурационным пространством**. Бесконечно малый элемент объема в конфигурационном пространстве будем обозначать dx . Для системы, состоящей из одной частицы, конфигурационное пространство совпадает с обычным трехмерным пространством. В этом случае $x=(x_1, y_1, z_1)$ и $dx=dx_1 dy_1 dz_1$. Однако уже для системы из двух частиц, конфигурационное пространство обладает шестью степенями свободы, т.е.

$$x = (x_1, y_1, z_1; x_2, y_2, z_2) \quad dx = (dx_1, dy_1, dz_1; dx_2, dy_2, dz_2).$$

Уравнение Шредингера для одной частицы обобщим на случай системы, состоящей из множества частиц.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi + \sum_{i=1}^N U(\vec{r}_i) \psi + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \psi. \quad (1)$$

Здесь $U(\vec{r}_i)$ - потенциальная энергия i -й частицы в поле внешних сил, $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$ - потенциальная энергия взаимодействия частиц. Оператор Лапласа для i -й частицы

$$\nabla_i^2 = \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial y_i} + \frac{\partial}{\partial z_i}.$$

Обобщим также стационарное уравнение Шредингера

$$-\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi + \sum_{i=1}^N U(\vec{r}_i) \psi + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \psi = E \psi.$$

6.2.2. СУШ ДЛЯ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ.

В общем случае стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$-\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \psi + \sum_{i=1}^N U_i(\vec{r}_i) \psi + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \psi = E \psi.$$

Теперь положим, что взаимодействие между частицами отсутствует. Тогда СУШ перепишем в виде

$$\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U_i(\vec{r}_i) \right) \psi = E \psi. \quad (1)$$

Волновую функцию будем искать в виде произведения функций, зависящих от координат отдельных частиц

$$\psi = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \dots \psi_N(\vec{r}_N).$$

После подстановки в СУШ получаем

$$\sum_{i=1}^N \left[\psi_1(\vec{r}_1) \dots \psi_{i-1}(\vec{r}_{i-1}) \dots \psi_{i+1}(\vec{r}_{i+1}) \dots \psi_N(\vec{r}_N) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U_i(\vec{r}_i) \right) \psi_i(\vec{r}_i) \right] = E \psi.$$

Разделим на $\psi = \psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \dots \psi_N(\vec{r}_N)$ и получим

$$\sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{\psi_i(\vec{r}_i)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U_i(\vec{r}_i) \right) \psi_i(\vec{r}_i) \right] = E.$$

В правой части стоит постоянная величина. Левая часть составлена из суммы членов, каждый из которых является функцией своей независимой переменной. Для того, чтобы это равенство имело место при всех значениях независимых переменных, необходимо, чтобы выполнялись условия

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U_i(\vec{r}_i) \right) \psi_i(\vec{r}_i) = E_i \psi_i(\vec{r}_i), \quad \text{где } E = \sum_{i=1}^N E_i.$$

Таким образом, если уравнение Шредингера может быть представлено в виде (1), то волновая функция системы распадается на произведение волновых функций отдельных частиц, а энергия системы является суммой энергий отдельных частиц.

Вероятность обнаружения координат всех частиц записывается в рассматриваемом случае невзаимодействующих частиц виде

$$dW(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = |\psi_1(\vec{r}_1)|^2 |\psi_2(\vec{r}_2)|^2 \dots |\psi_N(\vec{r}_N)|^2 dV.$$

6.2.3. СВЕДЕНИЕ ЗАДАЧИ О ДВИЖЕНИИ ДВУХ ЧАСТИЦ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ К ЗАДАЧЕ О ДВИЖЕНИИ ОДНОЙ ЧАСТИЦЫ.

Теперь рассмотрим систему из двух частиц. Будем считать, что внешние силы на систему не действуют. Будем также считать, что и что силы взаимодействия между частицами являются центральными, т.е. зависят только от расстояния между частицами. *Центральным* называется поле, в котором силы направлены к одной и той же точке, называемой силовым центром и по величине зависят только от расстояния до этого центра. Центральное поле в трехмерном случае называют также *центрально-симметричным полем* или *полем со сферической симметрией*.

Стационарное уравнение Шредингера для двух частиц взаимодействие между которыми является центральным можно записать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2).$$

Теперь сделаем замену координат.

$$\vec{r}_c = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2},$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2.$$

С учетом такой замены СУШ запишется в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{r}_c}^2 \psi(\vec{r}_c, \vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m_{np}} \nabla_{\vec{r}}^2 \psi(\vec{r}_c, \vec{r}) + U(\vec{r}) \psi(\vec{r}_c, \vec{r}) = E \psi(\vec{r}_c, \vec{r}),$$

где полная и приведенная массы системы

$$M = m_1 + m_2, \quad m_{np} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Решение этого уравнения ищем методом разделения переменных

$$\psi(\vec{r}_c, \vec{r}) = \varphi(\vec{r}_c) \psi(\vec{r}).$$

Получим

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2M}\psi(\vec{r})\nabla_{\vec{r}_c}^2\varphi(\vec{r}_c) - \frac{\hbar^2}{2m_{np}}\varphi(\vec{r}_c)\nabla_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\varphi(\vec{r}_c)\psi(\vec{r}) = \\
& = E\varphi(\vec{r}_c)\psi(\vec{r}).
\end{aligned}$$

Разделим это уравнение на $\varphi(\vec{r}_c)\psi(\vec{r})$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\varphi(\vec{r}_c)}\nabla_{\vec{r}_c}^2\varphi(\vec{r}_c) - \frac{\hbar^2}{2m_{np}}\frac{1}{\psi(\vec{r})}\nabla_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) = E.$$

Для того, чтобы это уравнение выполнялось необходимо приравнять к константе слагаемые, зависящие от одной и той же переменной

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\varphi(\vec{r}_c)}\nabla_{\vec{r}_c}^2\varphi(\vec{r}_c) = E_{r_c}, \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_{np}}\frac{1}{\psi(\vec{r})}\nabla_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) = E_r.
\end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\vec{r}_c}^2\varphi(\vec{r}_c) = E_{r_c}\varphi(\vec{r}_c), \\
& -\frac{\hbar^2}{2m_{np}}\nabla_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r}) + U(\vec{r}) = E_r\psi(\vec{r}).
\end{aligned}$$

Первое из этих уравнений, очевидно, есть уравнение для свободной частицы массой M , т.е. для частицы с массой равной массе всей системы.

Его решение $\varphi(\vec{r}_c) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_c\vec{r}_c}$.

Очевидно, что $E_c = \frac{\vec{p}_c^2}{2M}$ есть кинетическая энергия движения центра масс системы.

Второе из этих уравнений описывает относительное движение частиц.

Вывод: задача движения двух частиц потенциальная энергия взаимодействия которых зависит только от расстояния между частицами сводится к задаче движения одной частицы с приведенной массой m_{np} во внешнем поле U .

6.3. СУШ ДЛЯ ЧАСТИЦЫ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ.

Запишем гамильтониан для одной частицы массы m в сферических координатах. С учетом вида оператора Лапласа гамильтониан примет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla_{\theta,\varphi}^2}{r^2} + U(r, \theta, \varphi).$$

Выделим из гамильтониана оператор кинетической энергии

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla_{\theta,\varphi}^2}{r^2}.$$

Учитывая выражение для квадрата момента импульса, можно переписать оператор кинетической энергии в компактном виде

$$\hat{T} = \hat{T}_r - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla_{\theta,\varphi}^2}{r^2}.$$

Здесь

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

- *радиальная часть оператора кинетической энергии*, а

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla_{\theta,\varphi}^2}{r^2}$$

- *угловая часть оператора кинетической энергии*.

С учетом явного вида оператора квадрата углового момента

$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta,\varphi}^2$, оператор кинетической энергии в сферических координатах можно представить в виде

$$\hat{T} = T_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}.$$

Итак, в сферических координатах гамильтониан запишется в виде

$$\hat{H} = T_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r, \theta, \varphi).$$

Задача о движении двух частиц, взаимодействие между которыми является центральным, сводится к задаче о движении одной частицы в центральном поле $U(r)$. Поскольку центральное поле в трехмерном пространстве обладает сферической симметрией, то гамильтониан частицы в поле центральной силы в сферических координатах имеет вид

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r).$$

СУШ для частицы в поле центральной силы в сферической системе координат принимает вид

$$\left(T_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r) \right) \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi). \quad (1)$$

Здесь $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$ - волновая функция в сферических координатах. Решение должно быть однозначным, непрерывным и конечным во всей области определения в области $0 < r < \infty$ от 0 до, $0 < \theta < \pi$ и $0 < \varphi < 2\pi$.

Из двух обстоятельств, а именно, из того что операторы \hat{T}_r и $U(r)$ с одной стороны и оператор \hat{L}^2 действуют на разные переменные и из того что все операторы коммутируют сами с собой следует, что операторы \hat{H} и \hat{L}^2 коммутируют. Кроме того учтем, что \hat{L}^2 коммутирует с \hat{L}_z . Тогда получим, что все три оператора \hat{H} , \hat{L}^2 , \hat{L}_z коммутируют друг с другом. Из этого следует два вывода:

- в поле центральной силы энергия E , квадрат момента L^2 и проекция момента L_z являются интегралами движения;
- собственные состояния оператора Гамильтона являются также собственными состояниями и двух других операторов. Следовательно, в этих состояниях система имеет одновременно энергию E , квадрат момента L^2 и проекцию момента импульса L_z . Следовательно, СФ стационарных состояний необходимо искать в виде функции, которая являлась бы общей СФ для всех трех операторов.

Учтем, что СФ операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z является сферическая функция $Y_{lm}(\theta, \varphi)$:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = L_l^2 Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Следовательно, функцию общую для всех трех операторов будем искать методом разделения переменных

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (2)$$

Вероятность того, что электрон, находящийся в состоянии $\psi(r, \theta, \varphi)$ будет обнаружен в бесконечно малом элементе объема dV в окрестности точки с координатами r, θ, φ , дается формулой

$$dW(r, \theta, \varphi) = |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 dV = |R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Условие нормировки можно записать в виде

$$\begin{aligned} & \int |R(r) \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = \\ & = \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi |\Theta_{lm}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 1. \end{aligned}$$

Нормировку можно проводить отдельно для каждой функции

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1,$$

$$\int_0^{\pi} |\Theta_{lm}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = 1,$$

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 1.$$

Если проинтегрировать это выражение по всем значениям углов θ, φ , то получим вероятность нахождения электрона в сферическом слое между r и dr :

$$dW(r) = |R(r)|^2 r^2 dr.$$

Плотность этой вероятности, очевидно

$$\rho(r) = |R(r)|^2 r^2.$$

Если проинтегрировать это выражение по всем значениям r от 0 до бесконечности, то получим вероятность обнаружить электрон в телесном угле $d\Omega$

$$dW_{lm}(\theta, \varphi) = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega,$$

$$\rho_{lm}(\theta) = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = |\Theta_{lm}(\theta)|^2 |\Phi_m(\varphi)|^2 d\Omega = \frac{1}{2\pi} |\Theta_{lm}(\theta)|^2.$$

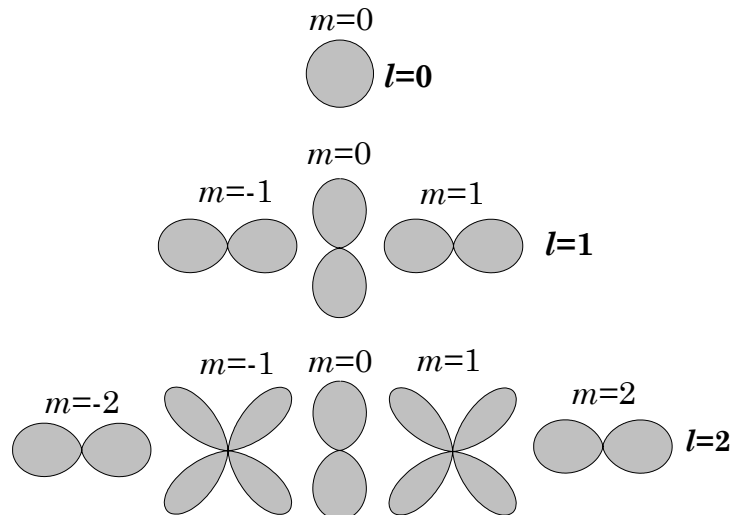
Видим, что плотность вероятности не зависит от угла φ . Другими словами, распределение вероятности обнаружения частицы обладает аксиальной симметрией, т.е. распределение вероятности симметрично относительно оси z .

Пусть $l=0$. Тогда $m=0$

$$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad dW_{00} = \frac{1}{4\pi} d\Omega$$

Пусть $l=1$. Тогда $m = -1, 0, +1$ и

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad dW_{1,0} = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta d\Omega,$$



$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \quad dW_{1,\pm 1} = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta d\Omega.$$

Подставляя в СУШ выражение $\psi(r, \theta, \varphi)$ в виде (2) и учитывая вид СЗ оператора квадрата момента импульса, получим для радиальной части волновой функции

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R(r) + U(r)R(r) = ER(r). \quad (3)$$

Очевидно, что это СУШ является одномерным. Отметим некоторые свойства СУШ (3)

- СУШ (3) зависит от числа l . Следовательно, и решения R также будут от него зависеть. Следовательно, решения R надо снабжать одним индексом l , т.е. $R_l(r)$.
- СУШ (3) не зависит от магнитного квантового числа m . Следовательно, от него не зависят и значения энергии. Поскольку при данном l число m принимает $2l+1$ значений, то каждый уровень энергии будет вырожден с кратностью $2l+1$. С физической точки зрения это вырождение связано со сферической симметрией поля и, следовательно, с равноправностью всех направлений в пространстве. Говорят еще, что уровни энергии вырождены по направлениям момента импульса.

Теперь представим решение в виде

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

и подставим его в УШ. Для этого учтем, что

$$\begin{aligned} \hat{T}_r R &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{u(r)}{r} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \left(-\frac{1}{r^2} u + \frac{1}{r} u' \right) \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (ru' - u) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} (u' + ru'' - u') = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} u''. \end{aligned}$$

Тогда УШ получим в виде

$$\boxed{u'' - \frac{l(l+1)}{r^2} u + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)u = 0.} \quad (4)$$

Рассмотрим асимптотические решения этого уравнения.

I. Случай $r \rightarrow \infty$. В этом случае можно в (4) отбросить слагаемой с $1/r^2$. Учтем также, что во всех реальных физических системах взаи-

модействие на бесконечности бесконечно мало. Поэтому нормируем потенциальную энергию на ноль на бесконечности т.е. положим для потенциальной энергии $U(r \rightarrow \infty) = 0$

$$u'' + \frac{2m}{\hbar^2} E u = 0. \quad (5)$$

Рассмотрим два случая

а) $E > 0$. Введем обозначение

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad E > 0.$$

СУШ примет вид

$$u'' + k^2 u = 0.$$

Его решения

$$u = c_1 e^{ikr} + c_2 e^{-ikr}.$$

Для функции $R(r)$ соответственно имеем

$$R = c_1 \frac{e^{ikr}}{r} + c_2 \frac{e^{-ikr}}{r}.$$

Таким образом, вдали от силового центра решение представляет собой суперпозицию двух сферических волн: одна движется к силовому центру, а другая, наоборот, от него уходит. Интеграл от квадрата R

расходится $\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = \infty$. Следовательно, такому движению со-

ответствует непрерывный спектр энергии.

б) $E < 0$. Введем обозначение

$$k = i\kappa = i \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \text{где } \kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

УШ примет вид

$$u'' - \kappa^2 u = 0,$$

Его решения

$$u = c_1 e^{-\kappa r} + c_2 e^{\kappa r},$$

Для функции R соответственно имеем

$$R = c_1 \frac{e^{-\kappa r}}{r} + c_2 \frac{e^{\kappa r}}{r},$$

Поскольку волновая функция должна быть конечной, то мы должны положить $c_2 = 0$. Тогда

$$R = c_1 \frac{e^{-kr}}{r},$$

Отсюда следует, что вероятность нахождения частицы на бесконечно большом расстоянии равна нулю или, что частица должна находиться в окрестности силового центра. Таким образом в случае $E < 0$ и $r \rightarrow \infty$ R квадратично интегрируема. Поскольку спектр квадратично интегрируемых функций является дискретным, то следовательно уравнение (*) в рассматриваемом приближении приводит к дискретному спектру энергий E . Эти дискретные значения будем нумеровать индексом n , т.е. E_n . Собственные функции R , отвечающие этому СЗ следовательно тоже надо снабжать индексом n , т.е. $R_{nl}(r)$.

II. Случай $r \rightarrow 0$. Положим, что потенциальная энергия взаимодействия имеет вид

$$U(r) = \frac{A}{r}.$$

Такой вид потенциальной энергии означает, что при $r \rightarrow 0$ она возрастает медленнее чем $1/r^2$. В этом случае можно в (*) отбросить слагаемые с E и U .

$$u'' - \frac{l(l+1)}{r^2}u = 0. \quad (6)$$

В этом дифференциальном уравнении коэффициент при u не является постоянной величиной. Поэтому решение ищем в виде

$$u = Ar^\gamma.$$

Подставляя это выражение в уравнение (6) получаем уравнение

$$\gamma(\gamma-1) = l(l+1),$$

которое имеет два корня

$$\gamma_1 = l+1, \quad \gamma_2 = -l.$$

Второй корень отбрасываем, так как ему отвечает функция $R(r)$, которая неограниченно возрастает при $r \rightarrow 0$. Таким образом оставляем

$$u = Ar^{l+1}$$

и поэтому для $R(r)$ имеем

$$R(r) = A \frac{u(r)}{r} = Ar^l.$$

Для вероятности найти частицу на расстоянии r от силового центра получаем формулу

$$dW = |R(r)|^2 r^2 dr = A^2 r^{2l+2} dr.$$

6.4. ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ.

Определим вид потенциальной энергии. Потенциальная энергия электрона в поле ядра с зарядом Z равна

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} + C.$$

Во всех реальных физических системах взаимодействие на бесконечности бесконечно мало. Поэтому нормируем потенциальную энергию на ноль на бесконечности, т.е. положим для потенциальной энергии

$$U(r = \infty) = C = 0.$$

Поэтому окончательно запишем

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (1)$$

Подставляя это выражение в УШ для радиальной волновой функции, получим

$$T_r R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R - \frac{Ze^2}{r} R = ER. \quad (2)$$

Сделаем замену

$$R(r) = \frac{u(r)}{r},$$

и будем искать решение уравнения

$$u'' - \frac{l(l+1)}{r^2} u + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{Ze^2}{r} \right) u = 0. \quad (3)$$

Будем искать дискретные решения этого уравнения, т.е. решения для $E < 0$. Волновые функции должны удовлетворять стандартным условиям. Кроме того, при $E < 0$, они должны быть квадратично-интегрируемыми. Решение рассмотрим для частного случая $l=0$. Тогда уравнение (3) примет вид

$$u'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{Ze^2}{r} \right) u = 0. \quad (4)$$

Введем обозначения

$$\beta = \frac{2m}{\hbar^2} Ze^2, \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Тогда уравнение (4) примет вид

$$u'' - \kappa^2 u + \frac{\beta}{r} u = 0. \quad (5)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде

$$u(r) = f(r)e^{-\kappa r}. \quad (6)$$

С учетом того, что

$$u' = f'e^{-\kappa r} - \kappa fe^{-\kappa r}, \quad u'' = e^{-\kappa r} f'' - 2\kappa e^{-\kappa r} f' + \kappa^2 e^{-\kappa r} f.$$

уравнение (5) примет вид

$$e^{-\kappa r} f'' - 2\kappa e^{-\kappa r} f' + \kappa^2 e^{-\kappa r} f + \frac{\beta}{r} e^{-\kappa r} f - \kappa^2 e^{-\kappa r} f = 0$$

или, после приведения подобных

$$f'' - 2\kappa f' + \frac{\beta}{r} f = 0. \quad (7)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде ряда

$$f(r) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n r^n. \quad (8)$$

Подставляя (8) в (7) получим

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n n(n-1)r^{n-2} - 2\kappa \sum_{n=1}^{\infty} a_n n r^{n-1} + \beta \sum_{n=1}^{\infty} a_n r^{n-1} = 0.$$

Учитывая, что при $n=1$ первое слагаемое равно нулю можно это выражение переписать в виде

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_{n+1} n(n+1)r^{n-1} - 2\kappa \sum_{n=1}^{\infty} a_n n r^{n-1} + \beta \sum_{n=1}^{\infty} a_n r^{n-1} = 0.$$

Так как это выражение должно удовлетворяться тождественно при любых r , то сумма коэффициентов при любой степени и r должна быть равна нулю

$$a_{n+1} n(n+1) - 2\kappa a_n n + \beta a_n = 0.$$

Отсюда следует рекуррентное соотношение для коэффициентов ряда

$$a_{n+1} = a_n \frac{2\kappa n - \beta}{n(n+1)}. \quad (9)$$

Этот ряд может оказаться бесконечным или может оборваться на некотором n -м члене. Если ряд не обрывается, то он расходится. Это видно из того, что при большом n коэффициенты этого ряда связаны тем же рекуррентным соотношением

$$a_{n+1} \approx a_n \frac{2\kappa}{n+1},$$

что и коэффициенты ряда

$$e^{2kr} = \sum_n \frac{1}{n!} (2kr)^n.$$

Для того, чтобы искомое решение являлось конечной функцией необходимо потребовать, чтобы ряд обрывался при некотором n . Это произойдет, если числитель в рекуррентном соотношении при некотором n станет равным нулю. Другим словами, необходимо потребовать, чтобы выполнялось условие

$$2kn - \beta = 0.$$

Отсюда следует, что конечные решения существуют при выполнении условия

$$k = \frac{\beta}{2n}. \quad (10)$$

О волновых функциях. Степенной ряд (8), обрывающийся после некоторого n , следует записать в виде

$$f_n(r) = \sum_{n=1}^n a_n r^n, \quad (11)$$

т.е. этот степенной ряд является полиномом степени n . Коэффициенты в этом ряде связаны соотношением (9).

Если $l=0$, то радиальная волновая функция имеет вид

$$R_{n0}(r) = \frac{u(r)}{r} = \frac{f_n(r)e^{-kr}}{r} = \frac{e^{-kr} \sum_{n=1}^n a_n r^n}{r}.$$

Пример. Волновая функция для основного состояния атома водорода. Для атома водорода $Z=1$. Рассмотрим самое нижнее, основное состояние с $n=1$. Найдем радиальную волновую функцию $R_{10}(r)$ этого состояния.

$$R_{10}(r) = \frac{e^{-kr} \sum_{n=1}^1 a_n r^n}{r} = a_1 e^{-kr}. \quad (12)$$

С учетом (10) $k = \frac{\beta}{2}$.

Учтем, что

$$\beta = \frac{2m}{\hbar^2} e^2.$$

Введем величину

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{1,05 \cdot 10^{-27} (\text{эрг} \cdot \text{с})}{0,91 \cdot 10^{-27} (\text{г}) \cdot 4,8 \cdot 10^{-10} (\text{СГС})} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см.}$$

Тогда

$$\beta = \frac{2}{a}$$

и следовательно

$$\kappa = \frac{1}{a}.$$

Поэтому (12) можем записать в виде

$$R_{10}(r) = a_1 e^{-\frac{1}{a}r}.$$

После нормировки этой функции получим

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}}.$$

Поэтому для плотности вероятности имеем

$$\rho_{10}(r) = R_{10}^2 r^2 = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{2r}{a}} r^2.$$

Вычисление энергии. Условие (10) запишем в виде

$$\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{2m}{2n\hbar^2} Ze^2,$$

откуда следует

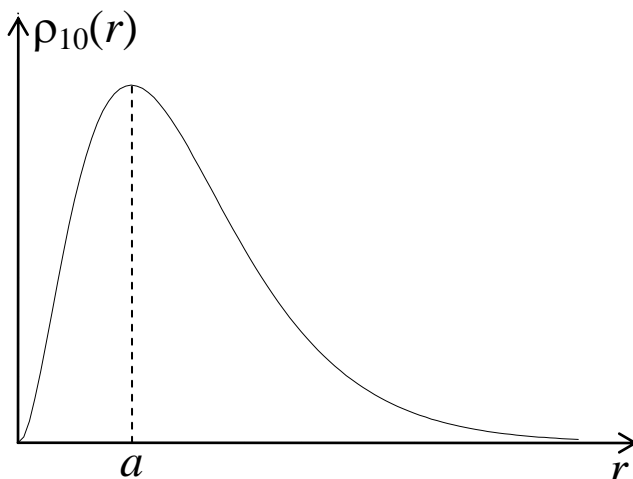
$$E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{2n^2 \hbar^2}.$$

Квантовое число n , нумерующее уровни энергии называется **главным квантовым числом**. В общем случае, т.е. для произвольных значений l , формула для значений энергий оказывается такой же, однако **главное квантовое число** n зависит от l

$$n = n_r + l + 1 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

где n_r – величина, называемая **радиальным квантовым числом**

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$



О кратности вырождению состояний.

Решение СУШ имеет вид

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

Пусть n задано. Тогда

$$l = n - n_r - 1.$$

Учитывая, что

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots; \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

получаем, что при заданном n , азимутальное число l принимает значение

$$l = n - 1, n - 2, \dots, 2, 1, 0.$$

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{1 + 2(n-1) + 1}{2} n = n^2,$$

где учтено, выражение для суммы арифметической прогрессии

$$S_n = n \frac{a_1 + a_n}{2}.$$

Таким образом, каждому квантовому уровню принадлежит n^2 различных состояний.

Приложение.

Используя боровский радиус a и безразмерную величину $\xi = \frac{2Z}{na} r$, можно записать полное выражения для радиальной функции в виде

$$R_{nl}(\xi) = A_{nl} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi), \quad \text{где } A_{nl} \text{ - нормировочный множитель}$$

$$A_{nl} = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}, \quad \text{который выбирается так, чтобы радиальная}$$

функция была нормирована на единицу. Функция $L_{n+l}^{2l+1}(\xi)$ есть про-

изводная вида $L_n^m(\xi) = \frac{d^m}{d\xi^m} L_n(\xi)$, где полином Лагерра $L_n(\xi)$ опре-

деляется соотношением $L_n(\xi) = e^\xi \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi} \xi^n)$.

6.5. ТОКИ В АТОМЕ. МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ. МАГНЕ- ТОН БОРА.

Пусть электрон вращается вокруг ядра. Поскольку движущий электрон – это движущийся электрический заряд, то, следовательно, электрон создает круговой электрический ток. Найдем плотность этого тока.

Выражение для плотности тока вероятности в одномерном случае

$$j_x(x,t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right).$$

В трехмерном случае это выражение примет вид

$$\vec{j}(x,t) = -\frac{e\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*).$$

Теперь перейдем к выражению для плотности электрического тока, для чего, как мы уже рассматривали, следует умножить на величину заряда $q_e = -e$

$$\vec{j}(x,t) = -\frac{e\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*).$$

В полярных координатах

$$\text{grad}f(\vec{r}) = \frac{\partial f}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi.$$

Вектор плотности тока можно представить в сферических координатах в виде

$$\vec{j} = j_r \vec{e}_r + j_\theta \vec{e}_\theta + j_\varphi \vec{e}_\varphi.$$

Учтем, что волновая функция имеет вид

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi).$$

Перейдем теперь к рассмотрению проекций

$$\begin{aligned} j_r &= -\frac{e\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla_r \psi - \psi \nabla_r \psi^*) = -\frac{e\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r} \right) = \\ &= -\frac{e\hbar}{2mi} R_{nl}(r) \Theta_{lm}^2(\theta) \left(\frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r} - \frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r} \right) = 0. \end{aligned}$$

Здесь $e = |q_e| = -e$.

Аналогично

$$j_\theta = -\frac{e\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla_\theta \psi - \psi \nabla_\theta \psi^*) = -\frac{e\hbar}{2mi} \frac{1}{r} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \theta} \right) = 0,$$

$$\begin{aligned}
j_\varphi &= -\frac{e\hbar}{2m_e i}(\psi^* \nabla_\varphi \psi - \psi \nabla_\varphi \psi^*) = -\frac{e\hbar}{2m_e i} \frac{1}{r \sin \theta} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \varphi} \right) = \\
&= -\frac{e\hbar}{2m_e i} \frac{1}{r \sin \theta} R_{nl}^2(r) \Theta_{lm}^2(\theta) \left(\Phi_m^*(\varphi) \frac{\partial \Phi_m(\varphi)}{\partial \varphi} - \Phi_m(\varphi) \frac{\partial \Phi_m^*(\varphi)}{\partial \varphi} \right) = \\
&= -\frac{e\hbar}{2m_e i} \frac{1}{r \sin \theta} R_{nl}^2(r) \Theta_{lm}^2(\theta) \text{im}(\Phi_m^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) + \Phi_m^*(\varphi) \Phi_m(\varphi)) = \\
&= -\frac{e\hbar}{2m_e i} \frac{1}{r \sin \theta} 2\text{im} R_{nl}^2(r) \Theta_{lm}^2(\theta) \Phi_m^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) = -\frac{e\hbar m}{m_e} \frac{1}{r \sin \theta} |\psi_{nlm}|^2.
\end{aligned}$$

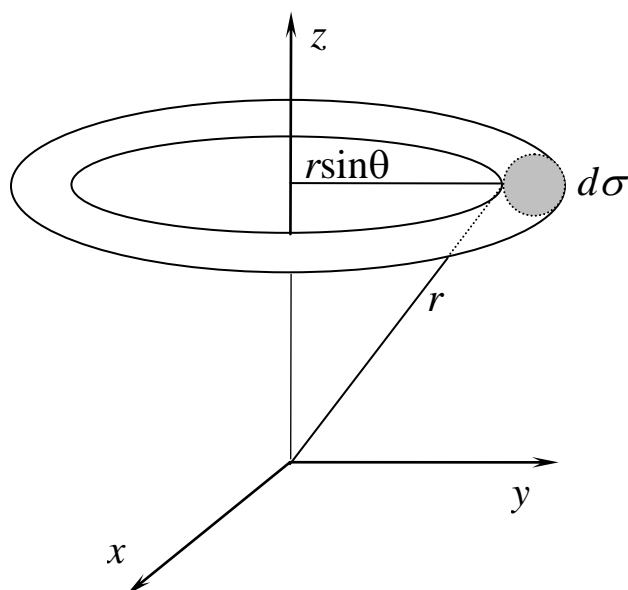
Круговой ток обладает магнитным моментом. Такой момент, связанный с орбитальным движением электрона называют **орбитальным магнитным моментом**. Рассмотрим магнитный момент, создаваемый этим током. По определению магнитный момент кругового тока

$$\vec{\mu} = \frac{1}{c} I \vec{a}, \quad (\text{СГС})$$

$$dI_\varphi = j_\varphi d\sigma,$$

$$S_z = \pi(r \sin \theta)^2,$$

$$\begin{aligned}
d\mu_z &= \frac{1}{c} dI_\varphi S_z = -\frac{1}{c} \frac{e\hbar m}{m_e} \frac{1}{r \sin \theta} |\psi_{nlm}|^2 d\sigma \pi (r \sin \theta)^2 = \\
&= -\frac{1}{c} \frac{e\hbar m}{m_e} |\psi_{nlm}|^2 \pi r \sin \theta d\sigma = -\frac{1}{c} \frac{e\hbar m}{m_e} |\psi_{nlm}|^2 \frac{1}{2} 2\pi r \sin \theta d\sigma = \\
&= -\frac{e\hbar m}{2cm_e} |\psi_{nlm}|^2 dV,
\end{aligned}$$



$$\mu_z = -\frac{e\hbar m}{2cm_e} \int_V |\psi_{nlm}|^2 dV = -\frac{e\hbar}{2m_e c} m.$$

Итак, видим, что орбитальный магнитный момент квантуется. Можно записать

$$\mu_z = -\mu_B m,$$

где

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 9,27 \cdot 10^{-21} \frac{\text{эрг}}{\text{Гс}}.$$

В то же время орбитальный механический момент равен

$$L_z = \hbar m.$$

Очевидно, что отношение магнитного момента к орбитальному моменту равно

$$\frac{\mu_z}{L_z} = -\frac{e}{2m_e c}.$$

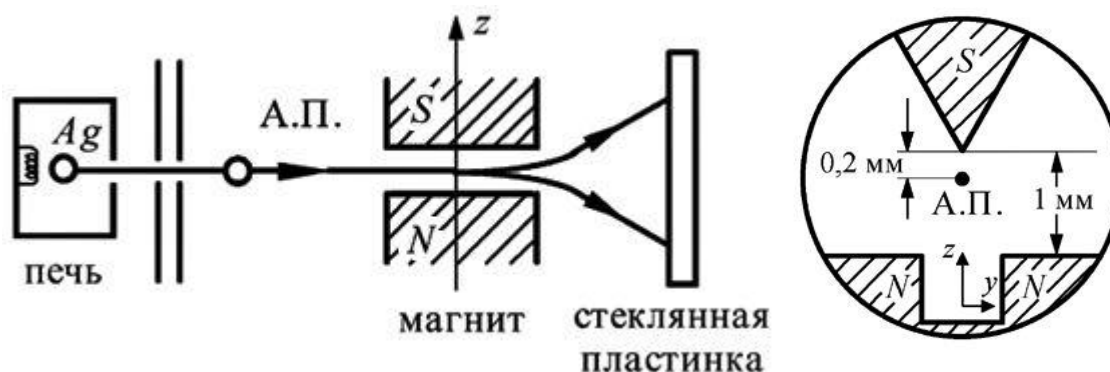
ЧАСТЬ 7.

СПИН И ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ.

7.1. ОПЫТ ШТЕРНА И ГЕРЛАХА. ГИПОТЕЗА СПИНА.

7.1.1. ОПЫТ ШТЕРНА И ГЕРЛАХА.

В 1922 *Штерн* и *Герлах*, исследовали прохождение пучка атомов Ag (а затем и др. элементов) в сильно неоднородном магнитном поле с целью проверки теоретически полученной формулы квантования проекции μ_z . На атом, обладающий магнитным моментом и движущийся в неоднородном вдоль Z магнитном поле B , действует сила $F_z = \mu_z \partial B_z / \partial z$, которая отклоняет его от первоначального направления движения. В опыте было обнаружено расщепление пучка атомов на 2 компоненты, симметрично смещенные относительно первичного направления распространения - на пластинке появлялись две узкие полосы. Это указывало на то, что проекция магнитного момента атома μ_z на направление поля принимает только два отличающиеся знаком значения, т. е. магнитный момент атома ориентируется вдоль B и в противоположном направлении.



7.1.2. ГИПОТЕЗА СПИНА.

Уленбек и Гаудсмит в 1925 предположили, что у электрона имеется так называемое собственное вращательное движение с которым, как с любым вращательным движением, следует связать угловой момент. Этот угловой момент обозначается как \vec{S} и называется **спиновым моментом** или просто **спин**. Теория спинового момента в квантовой механике строится по аналогии с теорией орбитального углового момента с некоторыми изменениями, которые следуют из опыта. В связи с таким подходом говорят, что теория спина в квантовой механике является полуфеноменологической теорией.

Орбитальное движение электрона характеризуется орбитальным угловым моментом \vec{L} и квантовым числом l . В опыте Штерна-Герлаха пучок возбужденных атомов водорода, т.е. атомов в состоянии с $n > 1$ и, следовательно, с $l > 0$ должен расщепиться на $2l+1$ пучков, в соответствии с тем множеством значений, которое может принимать магнитное квантовое число m , и следовательно, проекция орбитального магнитного момента μ_z . В отсутствии возбуждения $l=0$, орбитальный магнитный момент $\mu_z=0$ и, следовательно, пучок не должен расщепиться вообще. Тем не менее, он расщепляется на два пучка. Следовательно, атомы в пучке встречаются с двумя проекциями магнитного момента на направление магнитного поля, т.е. на ось z . Наличие этого магнитного момента обусловлено, в соответствии с гипотезой, собственным вращением электронов, т.е. спином. Назовем такой магнитный момент **спиновым магнитным моментом** $\vec{\mu}_S$. По аналогии с магнитным квантовым числом m введем **спиновое магнитное квантовое число** m_s . Связь его с проекцией спинового момента

$$S_z = \hbar m_s.$$

Подобно орбитальному квантовому числу l , которое характеризует орбитальное движение электрона, введем **спиновое квантовое число** s , характеризующее спиновое движение. Множество значений, которое может принимать **спиновое магнитное квантовое число** m_s равно $2s+1$. В соответствии с опытом этих значений всего два, поскольку $2s+1=2$.

Отсюда следует, что спиновое квантовое число $s=1/2$. Поэтому спиновое магнитное квантовое число m_s принимает только два значения

$$m_s = \pm \frac{1}{2}.$$

Поэтому и проекция спинового момента может принимать только два значения

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}.$$

Гипотезу спина Уленбек и Гаудсмит дополнили предположением о наличии у электрона и собственного магнитного момента, проекция которого может принимать только два значения

$$\mu_{sz} = \pm \mu_B.$$

$$\mu_{sz} = 2m_s \mu_B.$$

Отсюда следует, что отношение проекции спинового магнитного момента к проекции спинового момента

$$\frac{\mu_{sz}}{S_z} = -\frac{e}{m_e c}.$$

т.е. в два раза больше чем для орбитального момента.

Подведем итоги в виде таблицы

орбитальный момент	спиновой момент
$\vec{L}^2 \Psi = L_l^2 \Psi,$	$\hat{S}^2 \Psi = S^2 \Psi,$
$L_l^2 = \hbar^2 l(l+1), l=0, 1, 2, 3,$	$S^2 = \hbar^2 s(s+1), s=1/2$
...	
$\hat{L}_z \Psi = L_z \Psi,$	$\hat{S}_z \Psi = S_z \Psi,$
$L_z = \hbar m, m=0, \pm 1, \pm 2, \dots,$	$S_z = \hbar m_s, m_s = -1/2, 1/2$
$\pm l$	
$\mu_z = -\mu_B m,$	$\mu_{sz} = \pm \mu_B,$
$\frac{\mu_z}{L_z} = -\frac{e}{2m_e c},$	$\frac{\mu_{sz}}{S_z} = -\frac{e}{m_e c}.$

7.1.3. ТЕОРИЯ СПИНА ПАУЛИ.

В соответствии с гипотезой спина проекция спина электрона принимает только два значения.

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (1)$$

Введем обозначения

$$S_{+z} = \frac{\hbar}{2}, \quad S_{-z} = -\frac{\hbar}{2}.$$

Следовательно, у оператора проекции спина существует всего два собственных состояния, отвечающих двум разным проекциям спина.

Обозначим их как

$$\Psi_{S_z=\hbar/2} \equiv \Psi_{+z}, \quad \Psi_{S_z=-\hbar/2} \equiv \Psi_{-z}.$$

Поэтому можем записать

$$\hat{S}_z \Psi_{+z} = \frac{\hbar}{2} \Psi_{+z}, \quad \hat{S}_z \Psi_{-z} = -\frac{\hbar}{2} \Psi_{-z}. \quad (2)$$

Эти два состояния можно принять за базисные векторы двумерного евклидова **пространства спиновых состояний**. Тогда любое спиновое состояние, т.е. любой вектор в пространстве спиновых состояний можно представить в виде разложения

$$\Psi = c_1 \Psi_{+z} + c_2 \Psi_{-z}. \quad (3)$$

Оператор спина подчиним тем же коммутационным соотношениям, которым подчиняется оператор орбитального момента

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \hat{S}_k. \quad (4)$$

Оператора проекции спина \hat{S}_i запишем в виде

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_i. \quad (5)$$

Тогда коммутационные соотношения запишутся в виде

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i \hat{\sigma}_k. \quad (6)$$

УСЗ теперь принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_z \Psi_{+z} &= +\Psi_{+z}, \\ \hat{\sigma}_z \Psi_{-z} &= -\Psi_{-z}. \end{aligned} \quad (7)$$

или

$$\hat{\sigma}_z \Psi_{\pm z} = \pm \Psi_{\pm z}.$$

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СПИНОВОГО ОПЕРАТОРА.

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ УСЗ.

Теперь рассмотрим конкретное представление оператора спина $\hat{\sigma}_z$. В качестве базиса используем два собственных вектора Ψ_{+z} и Ψ_{-z} оператора z -проекции спина. Оператор будет представлен двурядной матрицей, а векторы в этом двумерном евклидовом пространстве столбцами

$\Phi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$. Назовем такой вектор **спиновым столбцом** или **спиновой функцией**. Условие нормировки для такого вектора, очевидно, имеет вид

$$(\Phi, \Phi) = \sum_{n=1}^2 c_n^* c_n = (c_1^* \quad c_2^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

Для матрицы оператора $\hat{\sigma}_i$ введем обозначение

$$\sigma_i = \begin{pmatrix} (\sigma_i)_{11} & (\sigma_i)_{12} \\ (\sigma_i)_{21} & (\sigma_i)_{22} \end{pmatrix}.$$

Здесь $(\sigma_i)_{mm'} = (\Psi_m, \hat{\sigma}_i \Psi_{m'})$, где индекс m пробегает всего два значения. Введем также обозначения для собственных значений

$$(\sigma_i)_1 = 1, \quad (\sigma_i)_2 = -1.$$

УСЗ теперь можно представить в виде

$$\sum_{m'} (\sigma_i)_{mm'} U_{m'n} = (\sigma_i)_n U_{mn}. \quad (8)$$

Для первого собственного значения имеем

$$\sum_{m'} (\sigma_i)_{mm'} U_{m'1} = +U_{m1}$$

или

$$\begin{pmatrix} (\sigma_i)_{11} & (\sigma_i)_{12} \\ (\sigma_i)_{21} & (\sigma_i)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} \\ U_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} \\ U_{21} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Обозначим собственный спиновой столбец как

$$\chi_{+i} = \begin{pmatrix} U_{11} \\ U_{21} \end{pmatrix}.$$

Тогда (9) можно представить в виде

$$\sigma_i \chi_{+i} = \chi_{+i}.$$

Для второго собственного значения имеем

$$\sum_{m'} (\sigma_i)_{mm'} U_{m'2} = -U_{m2}$$

или

$$\begin{pmatrix} (\sigma_i)_{11} & (\sigma_i)_{12} \\ (\sigma_i)_{21} & (\sigma_i)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{12} \\ U_{22} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} U_{12} \\ U_{22} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Обозначим собственный спиновой столбец как

$$\chi_{-i} = \begin{pmatrix} U_{12} \\ U_{22} \end{pmatrix}.$$

Тогда (10) можно представить в виде

$$\sigma_i \chi_{-i} = -\chi_{-i}.$$

Объединяя (9) и (10) получим

$$\begin{pmatrix} (\sigma_i)_{11} & (\sigma_i)_{12} \\ (\sigma_i)_{21} & (\sigma_i)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Выражение (11) очевидно есть частный случай более общего выражения

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}.$$

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ОПЕРАТОРОВ ПРОЕКЦИЙ СПИНА.

Представление оператора z -проекции спина.

Матрица оператора z -проекции спина в своем собственном базисе должна быть диагональной, причем на главной диагонали должны быть расположены собственные значения этого оператора

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Представление оператора x -проекции спина.

Теперь рассмотрим представление оператора спина $\hat{\sigma}_x$ в базисе из собственных векторов Ψ_{+z} и Ψ_{-z} оператора $\hat{\sigma}_z$. УСЗ можно представить в виде

$$\sigma_x \chi_{\pm x} = \pm \chi_{\pm x}.$$

Прежде всего, заметим, что $\sigma_x^2 = I$, поскольку

$$\sigma_x^2 \chi_{\pm x} = \sigma_x \sigma_x \chi_{\pm x} = \sigma_x (\pm \chi_{\pm x}) = \pm \sigma_x \chi_{\pm x} = \chi_{\pm x}.$$

К этому же выводу можно было бы прийти используя такое же рассуждение непосредственно из (7) с учетом во-первых того матрица единичного оператора является единичной матрицей и во-вторых, что единичная матрица остается ею в любом базисе.

Для нахождения матрицы σ_x оператора $\hat{\sigma}_x$ в базисе из собственных состояний z -проекции оператора момента импульса используем коммутационные соотношения

$$\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i \sigma_x,$$

$$\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i \sigma_y.$$

Подставляя второе из них в первое, получим

$$\frac{1}{2i} (\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z) \sigma_z - \frac{1}{2i} \sigma_z (\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z) = 2i \sigma_x$$

или

$$\sigma_z \sigma_x \sigma_z - \sigma_x \sigma_z \sigma_z - \sigma_z \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z \sigma_x = -4 \sigma_x$$

или

$$2 \sigma_z \sigma_x \sigma_z - 2 \sigma_x = -4 \sigma_x.$$

Здесь учтено, что $\sigma_z^2 = I$, и что единичная матрица коммутирует с любой другой. Далее

$$\sigma_z \sigma_x \sigma_z = -\sigma_x.$$

Подставляя вместо σ_x матричные элементы, получим

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sigma_{11} & -\sigma_{12} \\ -\sigma_{21} & -\sigma_{22} \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} & -\sigma_{12} \\ -\sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sigma_{11} & -\sigma_{12} \\ -\sigma_{21} & -\sigma_{22} \end{pmatrix}.$$

Отсюда приходим к равенствам

$$\sigma_{11} = -\sigma_{11}, \quad -\sigma_{12} = -\sigma_{12}, \quad -\sigma_{21} = -\sigma_{21}, \quad \sigma_{22} = -\sigma_{22}.$$

Первое и четвертое равенство выполняются только, если

$\sigma_{11} = 0$, $\sigma_{22} = 0$. Второе и третье равенство выполняются тождественно.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & 0 \end{pmatrix}.$$

Из самосопряженности этой матрицы следует

$$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_{21}^* \\ \sigma_{12}^* & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & 0 \end{pmatrix}.$$

Поэтому

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & 0 \end{pmatrix} = \sigma_{12} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Из условия $\sigma_x^2 = I$ следует, что $|\sigma_{12}|^2 = 1$. Поэтому, с точностью до фазового множителя имеем $\sigma_{12} = 1$. Поэтому окончательно

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Представление оператора у-проекции спина.

Прежде всего, заметим, что $\sigma_y^2 = I$. Для нахождения матрицы σ_y оператора $\hat{\sigma}_y$ в базисе из собственных состояний z-проекции оператора момента импульса используем коммутационное соотношение

$\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\sigma_y$. Подставляя вместо σ_z матричные элементы получим

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ -2 & 0 \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix}.$$

Умножим на $i/2$, получим

$$\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix}.$$

Поэтому окончательно

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Свойства матриц Паули

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

Матрицы Паули обладают следующими свойствами:

1. Они являются эрмитовыми матрицами.
2. Определитель матриц Паули равен -1.
3. Они удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\sigma_k.$$

4. Они антикоммутируют

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x, \quad \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y, \quad \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z.$$

5. Квадрат любой матрицы Паули равен единице $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$.

6. Произведение всех трех матриц Паули есть $\sigma_x \sigma_y \sigma_z = iI$.

СФ оператора z -проекции спина.

Перепишем (11) в виде

$$\begin{pmatrix} (\sigma_z)_{11} & (\sigma_z)_{12} \\ (\sigma_z)_{21} & (\sigma_z)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix}.$$

Подставляя сюда явный вид матрицы Паули, получим

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ -U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix}.$$

Отсюда следует, что

$$U = \begin{pmatrix} U_{11} & 0 \\ 0 & U_{22} \end{pmatrix}.$$

Учтем теперь, что матрица U является унитарной, т.е. для нее должно выполняться

$$U^+ U = I,$$

$$\begin{pmatrix} U_{11}^* & 0 \\ 0 & U_{22}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & 0 \\ 0 & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Отсюда имеем

$$\begin{pmatrix} |U_{11}|^2 & 0 \\ 0 & |U_{22}|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и, следовательно, $|U_{11}|^2 = 1$, $|U_{22}|^2 = 1$. С точностью до фазового множителя отсюда имеем $U_{11} = 1$, $U_{22} = 1$, т.е.

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Поэтому спиновые столбцы имеют вид

$$\chi_{+z} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Введем теперь матрицу (со шляпкой) $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$. В матричном виде УСЗ для этого оператора z -проекции спина принимает вид

$$\sum_{m'} (S_z)_{mm'} U_{m'n} = (S_z)_n U_{mn}, \quad (8)$$

где индекс m пробегает два значения. Введем обозначения

$$(S_z)_1 \equiv S_{+z} = \frac{\hbar}{2}, \quad (S_z)_2 \equiv S_{-z} = -\frac{\hbar}{2}.$$

Тогда УСЗ для этого оператора можно представить в символическом матричном виде.

$$\hat{S}_z \chi_{+z} = S_{+z} \chi_{+z} \quad \text{или} \quad \hat{S}_z \chi_{+z} = \frac{\hbar}{2} \chi_{+z},$$

$$\hat{S}_z \chi_{-z} = S_{-z} \chi_{-z} \quad \text{или} \quad \hat{S}_z \chi_{-z} = -\frac{\hbar}{2} \chi_{-z}.$$

СФ оператора x -проекции спина.

Перепишем (11)

$$\begin{pmatrix} (\sigma_x)_{11} & (\sigma_x)_{12} \\ (\sigma_x)_{21} & (\sigma_x)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix}.$$

Подставляя сюда явный вид матрицы Паули, получим

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{pmatrix} U_{21} & U_{22} \\ U_{11} & U_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix},$$

$$U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{11} & -U_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ a & -b \end{pmatrix}.$$

Из унитарности следует

$$\begin{pmatrix} a^* & a^* \\ b^* & -b^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ a & -b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2|a|^2 & 0 \\ 0 & 2|b|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Отсюда

$$|a|^2 = \frac{1}{2}, \quad |b|^2 = \frac{1}{2}.$$

С точностью до фазового множителя отсюда имеем

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Поэтому

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Поэтому спиновые столбцы имеют вид

$$\chi_{+x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

СФ оператора у-проекции спина.

Перепишем (11)

$$\begin{pmatrix} (\sigma_y)_{11} & (\sigma_y)_{12} \\ (\sigma_y)_{21} & (\sigma_y)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix}.$$

Подставляя сюда явный вид матрицы Паули, получим

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{pmatrix} -iU_{21} & -iU_{22} \\ iU_{11} & iU_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & -U_{12} \\ U_{21} & -U_{22} \end{pmatrix},$$

$$U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ iU_{11} & -iU_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ ia & -ib \end{pmatrix}.$$

Из унитарности следует

$$\begin{pmatrix} a^* & -ia^* \\ b^* & ib^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ ia & -ib \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2|a|^2 & 0 \\ 0 & 2|b|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Отсюда

$$|a|^2 = \frac{1}{2}, \quad |b|^2 = \frac{1}{2}.$$

С точностью до фазового множителя отсюда имеем

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Поэтому

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}.$$

Поэтому спиновые столбцы имеют вид

$$\chi_{+x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad \chi_{-x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Найдем решения задачи

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

ИЛИ

$$\sigma_z \chi_{+z} = \chi_{+z},$$

$$\sigma_z \chi_{-z} = -\chi_{-z},$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix},$$

$$c_+ = c_+,$$

$$c_- = -c_-,$$

Поэтому $c_- = 0$, а $c_+ = 1$, что следует из условия нормировки

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1.$$

Для другого собственного вектора имеем

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix},$$

$$c_+ = -c_+,$$

$$c_- = c_-.$$

Поэтому $c_- = 1$, а $c_+ = 0$, что следует из условия нормировки

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1.$$

$$\text{Поэтому } \chi_{+z} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

ЗАДАЧИ

1. Найти собственные векторы оператора σ_x в представлении собственных векторов оператора σ_x .

$$\sigma_x \chi_{+x} = \chi_{+x},$$

$$\sigma_x \chi_{-x} = -\chi_{-x}.$$

Тогда в матричном виде уравнение на с.з. принимает вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}.$$

Найдем решения задачи

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix},$$

$$c_- = c_+ \equiv c,$$

$$c_+ = c_- \equiv c.$$

Из условия нормировки следует

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = |c|^2 = 1.$$

Поэтому

$$c = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$\chi_{+x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Для другого собственного вектора имеем

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix},$$

$$c_- = -c_+,$$

$$c_+ = -c_-.$$

Из условия нормировки следует

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 2|c_+|^2 = 1.$$

Поэтому

$$c_+ = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$\chi_{-x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Поэтому

$$\chi_{+x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{+z} + \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{-z},$$

$$\chi_{-x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{+z} - \frac{1}{\sqrt{2}} \chi_{-z}.$$

2. Найти собственные векторы оператора σ_y в представлении собственных векторов оператора σ_z .

Аналогичным предыдущей задаче находим

$$\chi_{+y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad \chi_{-y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Проверим

$$\sigma_y \chi_{+y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \chi_{+y},$$

$$\sigma_y \chi_{-y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \chi_{-y}.$$

3. Найти результат действия операторов σ_x , σ_y , σ_z на собственные векторы оператора σ_z .

Решение.

$$\sigma_z \chi_{+z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \chi_{+z},$$

$$\sigma_z \chi_{-z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \chi_{-z},$$

$$\sigma_x \chi_{+z} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \chi_{-z},$$

$$\sigma_x \chi_{-z} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \chi_{+z},$$

$$\sigma_y \chi_{+z} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = i \chi_{-z},$$

$$\sigma_y \chi_{-z} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -i \chi_{+z}.$$

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ.

Волновая функция электрона со спином должна зависеть не только от пространственных координат, но и от четвертой координаты, характеризующей внутреннее состояние частицы. В качестве такой координаты можно взять величину проекции спина на произвольно ориентированную в пространстве ось z . Тогда волновую функцию можно записать в виде $\psi(x, y, z, S_z, t)$.

Во многих случаях координатную и спиновую части волновой функции можно разделить и представлять, таким образом, в виде произведения $\psi = \psi(x, y, z, t) \varphi(S_z)$.

Поэтому волновая функция электрона со спином представляет собой совокупность двух независимых функций

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi(x, y, z, +\frac{1}{2}\hbar, t) \\ \psi(x, y, z, -\frac{1}{2}\hbar, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

7.2. ПРИНЦИП ТОЖДЕСТВЕННОСТИ. ПРИНЦИП ПАУЛИ.

7.2.1. ПРИНЦИП ТОЖДЕСТВЕННОСТИ ЧАСТИЦ. СИММЕТРИЧНЫЕ И АНТИСИММЕТРИЧНЫЕ ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ.

Тождественными называются частицы, если все физические свойства этих частиц в точности совпадают, что исключает возможность экспериментально различать их.

Принцип тождественности: *в совокупности тождественных частиц реализуются лишь такие состояния, которые не меняются при обмене одинаковых частиц.*

Дадим математическую формулировку этого принципа. Введем волновую функцию, описывающую состояние из N одинаковых частиц

$$\psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N, t).$$

Здесь q_i - совокупность пространственных и спиновых переменных относящихся к i -й частице.

Введем оператор перестановки частиц \hat{P}_{ij} . Под этим оператором будем подразумевать действие, заключающееся в том, что координаты (пространственные или спиновые) i -й и j -й частиц должны быть переставлены.

$$\hat{P}_{ij}\psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, q_N, t).$$

Рассмотрим частный случай, а именно систему двух частиц. Волновую функцию, описывающую состояние этих двух частиц обозначим как $\psi(q_1, q_2, t)$. Обменяем местами 1-ю и 2-ю частицы. Тогда состояние системы будет описываться некоторой новой функцией $\psi(q_2, q_1, t)$. С помощью оператора перестановки это можно выразить так

$$\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2, t) = \psi(q_2, q_1, t).$$

Теперь учтем, что согласно принципу тождественности новая функция $\psi(q_2, q_1, t)$ должна описывать то же состояние, что и функция $\psi(q_1, q_2, t)$. Следовательно, функция $\psi(q_2, q_1, t)$ может отличаться от функции $\psi(q_1, q_2, t)$ лишь постоянным фазовым множителем c :

$$\psi(q_2, q_1, t) = c\psi(q_1, q_2, t),$$

где через c обозначен фазовый множитель $c = e^{i\alpha}$. Поэтому можем записать

$$\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2, t) = \psi'(q_2, q_1, t) = c\psi(q_1, q_2, t)$$

или

$$\boxed{\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2, t) = c\psi(q_1, q_2, t)}.$$

Очевидно, что это уравнение есть уравнение на собственные значения оператора перестановки \hat{P}_{12} . Вывод: *принцип тождественности выражается в том, что возможными состояниями системы могут быть только собственные состояния оператора перестановки.*

Чтобы найти собственные значения, применим оператор перестановки дважды. Очевидно, что в результате двукратного применения оператора перестановки должна получиться исходная функция.

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}^2\psi(q_1, q_2, t) &= \hat{P}_{12}\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2, t) = \\ &= c\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2, t) = c^2\psi(q_1, q_2, t) = \psi(q_1, q_2, t). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что $c^2=1$ и следовательно $c=\pm 1$.

$$\psi'(q_2, q_1, t) = \pm\psi(q_1, q_2, t).$$

Таким образом, принцип тождественности ведет к утверждению, что совокупность тождественных частиц может находиться в состояниях с определенным типом симметрии волновой функции, а именно при перестановке частиц волновая функция системы должна либо не менять знак, либо менять знак на противоположный. Волновая функция, которая не меняет знак при перестановке двух частиц называется *симметричной*, а волновая функция, которая меняет знак, называется *антисимметричной*. Введем обозначения

ψ_s - симметричная функция

ψ_a - антисимметричная функция

Тогда можем окончательно записать

$$\hat{P}_{ij}\psi_s(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \psi_s(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N, t),$$

$$\hat{P}_{ij}\psi_a(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = -\psi_a(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N, t).$$

Замечание свойство функции быть симметричной или антисимметричной распространяется на все пары частиц, то есть не может быть, что при перестановке одной пары функция оказывается симметричной, а для другой пары антисимметричной.

Итак, квантовая механика ведет к двум типам состояний симметричным и антисимметричным. Выбор того или иного типа состояния для описания системы частиц может быть продиктован только природой частиц, образующих систему.

Опытным путем установлено, что в природе существуют частицы, принадлежащие обоим типам. При этом наблюдается следующее правило: частицы обладающие спином равным целому числу описываются симметричными волновыми функциями. Такие частицы называют **бозонами**. Частицы, обладающие спином равным полуцелому числу постоянных Планка описываются антисимметричными волновыми функциями. Такие частицы называют **фермионами**.

Частицы могут быть простейшими, т.е. элементарными или составными. Элементарные частицы имеют спин 0, 1/2, 1.

Принадлежность составной частицы, например атома или ядра к тому или иному типу определяется числом и типом составляющих его более простых частиц. Например, атом водорода состоит в основном состоянии из протона со спином $\pm 1/2$ и электрона со спином $\pm 1/2$. Составная частица - атом может иметь поэтому суммарный спин или 0 или ± 1 . Следовательно, система из атомов водорода в основном состоянии представляет собой систему бозонов.

7.2.2. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ДЛЯ СИСТЕМЫ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ. ПРИНЦИП ПАУЛИ.

Рассмотрим систему из N невзаимодействующих между собой тождественных частиц. СУШ для такой системы имеет вид

$$\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U_i(x_i) \right) \psi = E\psi, \quad (1)$$

где мы положили массы всех частиц одинаковыми. Волновая функция такой системы частиц

$$\psi = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\dots\psi_N(x_N). \quad (2)$$

Каждая из функций является решением уравнением Шредингера для одной частицы

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U_i(x_i) \right) \psi_i(x_i) = E_i \psi_i(x_i).$$

Заметим, что эта функция не удовлетворяет требованиям симметрии. Т.е. она не принадлежит ни к симметричным, ни к антисимметричным функциям. Так как уравнение (1) линейно, то суперпозиция решений типа (2) будет также его решением. Необходимо выбрать такую суперпозицию, которая будет обладать требуемой симметрией

$$\psi = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\dots\psi_{n_N}(x_N).$$

Для упрощения рассмотрим систему только из двух невзаимодействующих частиц. Тогда волновая функция примет вид

$$\psi_1(q_1, q_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2). \quad (1)$$

Это решение соответствует состоянию, в котором частицы с координатами x_1 и x_2 находятся в состояниях характеризуемых квантовыми числами n_1 и n_2 . В силу тождественности частиц состояние системы не меняется при перестановке частиц местами, т.е. наряду с рассмотренной функцией решением будет также и функция

$$\psi_2(q_1, q_2) = \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1). \quad (2)$$

Обе функции (1) и (2) описывают одно и то же физическое состояние системы из двух частиц. Согласно принципу суперпозиции любая линейная комбинация этих функций будет также описывать то же состояние системы. Задача заключается в том, чтобы составить такие линейные комбинации, которые удовлетворяли бы требованию симметрии волновой функции. Именно из этих функций можно составить, с учетом нормировки, две симметризованные волновые функции:

а) симметричную относительно перестановки пространственных и спиновых переменных

$$\psi_s(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)];$$

б) антисимметричную относительно перестановки пространственных и спиновых переменных

$$\psi_a(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)].$$

Обобщая на случай N частиц симметричную волновую функцию можно записать в виде

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} [\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\dots\psi_{n_{N1}}(x_N) + \psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_1}(x_2)\dots\psi_{n_{N1}}(x_N) + \dots].$$

Рассмотрим более внимательно систему ферми-частиц. Для начала заметим, что антисимметричную волновую функцию можно представить в виде

$$\psi_a(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) \end{vmatrix}.$$

Обобщением на случай N частиц будет определитель

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \dots & \psi_{n_1}(x_N) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \dots & \psi_{n_2}(x_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{n_N}(x_1) & \psi_{n_N}(x_2) & \dots & \psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix}.$$

Эти выражения для волновых функций позволяют сделать важные выводы. Пусть две частицы в системе находятся в одном и том же квантовом состоянии, т.е. $n_1=n_2$. Это означает, что две частицы имеют один и тот же набор квантовых чисел, например n, l, m, s_z . Тогда, в определителе две строки оказываются одинаковыми, и волновая функция обращается в ноль. Этот вывод составляет содержание принципа Паули.

Принцип Паули: в системе тождественных фермионов не может быть обнаружено две или более частиц в одном состоянии.

В применении к атому принцип Паули означает, что **в одном состоянии не может находиться более одного электрона.**

7.3. ОПИСАНИЕ СОСТОЯНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМАХ. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА МЕНДЕЛЕЕВА.

Вообще говоря, атом является многочастичной системой, и поэтому, говоря о состоянии атома, следовало бы говорить именно о состоянии этой системы. Учитывая сложность подобного описания, был предложен другой метод, который сводит многочастичную задачу к одночастичной. Это так называемый *метод самосогласованного поля*. Введение представления о самосогласованном поле позволяет рассматривать электроны как независимые частицы, находящиеся во внешнем поле. Каждый из электронов движется в самосогласованном сферически-симметричном поле ядра и других электронов.

При движении в центрально-симметричном поле сохраняющимися величинами являются энергия, момент импульса и его проекция. Поэтому состояние электрона характеризуется квантовыми числами n, l, m . Для описания состояния всего атома следует указать состояние каждого атомного электрона.

Вводятся следующие правила:

1. Состояния со значениями орбитального квантового числа $l=0, 1, 2, 3, \dots$, обозначаются как s, p, d, f, \dots

2. Главное квантовое число n указывается в виде цифры стоящей перед символом, обозначающим значение l . Совокупность электронов с одним значением главного квантового числа n называется *электронной оболочкой*. Оболочки имеют свои обозначения

$n=1$ К-оболочка

$n=2$ L-оболочка

$n=3$ M-оболочка

3. Количество электронов одновременно находящихся в состоянии, характеризуемым числами n и l указывается в виде индекса справа вверху

Пример: $2s^2$.

Распределение электронов по состояниям называется *электронной конфигурацией*.

Современное объяснение периодической системы Менделеева основано на трех принципах.

Принцип первый: состояние атомной оболочки характеризуется состояниями ее отдельных электронов, которые полностью определяются четырьмя квантовыми числами:

n - главное квантовое число $= 1, 2, 3, \dots$

l - орбитальное квантовое число $= 0, 1, 2, \dots, n-1,$

m - магнитное квантовое число $= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l,$

m_s - магнитное спиновое квантовое число $= \pm 1/2.$

ПРИЛОЖЕНИЕ 1.

ЛИНЕЙНОЕ ПРОСТРАНСТВО.
Аксиомы линейного пространства.

Аксиомы сложения:

1. $\Psi + \Phi = \Phi + \Psi$;
2. $(\Psi + \Phi) + X = \Phi + (\Psi + X)$;
3. существует нулевой элемент такой, что $\Psi + 0 = \Psi$ для любого Ψ ;
4. для каждого вектора Ψ существует противоположный вектор Ψ' такой, что $\Psi + \Psi' = 0$.

Аксиомы умножения:

5. $1 \cdot \Psi = \Psi$;
6. $\alpha(\beta\Psi) = (\alpha\beta)\Psi$;

Аксиомы сложения и умножения:

7. $(\alpha + \beta)\Psi = \alpha\Psi + \beta\Psi$;
8. $\alpha(\Psi + \Phi) = \alpha\Psi + \alpha\Phi$.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2.

СОПРЯЖЕННОЕ ПРОСТРАНСТВО ИЛИ
О СМЫСЛЕ ВЕКТОРОВ БРА И КЕТ.

Пусть векторное пространство есть множество $\{\bar{\xi}\}$ элементов $\bar{\xi}$. Выберем в этом пространстве один из элементов \bar{f} и построим скалярное произведение $(\bar{f}, \bar{\xi})$, в котором вектор \bar{f} фиксирован нашим выбором, а $\bar{\xi}$ - это любой вектор из того же пространства. Очевидно, что такое скалярное произведение есть функция, которая ставит в соответствие вектору $\bar{\xi}$ число $(\bar{f}, \bar{\xi})$. Обозначим эту функцию как f : $(\bar{f}, \bar{\xi}) \equiv f(\bar{\xi})$. Определенная таким образом функция f является линейной и называется **линейным функционалом (линейной формой)**. Фиксируя поочередно различные векторы \bar{f} , которые обозначим как \bar{f}_i , можно образовывать различные функции $(\bar{f}_i, \bar{\xi}) \equiv f_i(\bar{\xi})$. Очевидно, что совокупность $\{f_i(\bar{\xi})\}$, составленная из всевозможных линейных функционалов $f_i(\bar{\xi})$, образует линейное пространство, поскольку операции сложения двух функционалов и умножения функционала на комплексное число определены в свойствах 2 и 3 скалярного произведения.

Пространство линейных функционалов $\{f_i(\bar{\xi})\}$, построенное на векторном пространстве $\{\bar{\xi}\}$, называется пространством, **сопряженным** к пространству $\{\bar{\xi}\}$.

В дираковских обозначениях линейный функционал запишется в виде $f_i(\bar{\xi}) \equiv \langle \bar{f}_i | \bar{\xi} \rangle$.

Линейный функционал есть функция, а не ее значение. Другими сло-

вами - это правило, которое определяет соответствие между множеством векторов $\{\vec{\xi}\}$ и множеством чисел $\{f_i(\vec{\xi})\}$. Этому пониманию соответствует запись функционала в виде $f_i(\vec{\xi}) \equiv f_i(\cdot) \equiv (\vec{f}_i, \cdot)$ или в дираковских обозначениях $f_i(\vec{\xi}) \equiv \langle \vec{f}_i | \cdot \rangle$. В дираковском формализме эта запись упрощается до $\langle \vec{f}_i | \equiv \langle i |$, но, по прежнему, следует рассматривать $\langle \vec{f}_i | \equiv \langle i |$ как вектор из пространства функционалов - пространства сопряженного пространству векторов $|\xi\rangle$. Запись $\langle i | \xi \rangle$ - есть скалярное произведение вектора $|i\rangle$ из множества $\{|\xi\rangle\}$ на вектор $|\xi\rangle$, т.е. это есть числовое значение функционала.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3.

МЕТОД ДИРАКА ЗАПИСИ ВЫРАЖЕНИЙ.

1. Проекционный оператор, тождественный оператор, разложение единицы и спектральное разложение.

Пусть $|\Psi_n\rangle$ - ортонормированный базис из собственных значений какого-либо самосопряженного оператора. Введем *оператор проектирования* по правилу

$$\hat{P}_n |\Psi\rangle \equiv c_n |\Psi_n\rangle = \langle \Psi_n | \Psi \rangle |\Psi_n\rangle = |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle.$$

Этот оператор является линейным самосопряженным оператором, что следует непосредственно из свойств скалярного произведения.

Сравнивая левую и правую части и разрывая скобки, можем записать этот оператор в дираковских обозначениях

$$\boxed{\hat{P}_n \equiv |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|}, \quad (1)$$

$$\hat{P}_n \equiv \int |\Psi_F\rangle \langle \Psi_F| dF, \quad (1)$$

$$|\Psi\rangle = \hat{I} |\Psi\rangle = \int |\Psi_F\rangle \langle \Psi_F | \Psi \rangle dF,$$

$$\hat{I} \equiv \int |\Psi_F\rangle \langle \Psi_F| dF = \int \hat{P}_n dF.$$

Используя проекционный оператор, можно представить вероятность

$$W_n = |c_n|^2 = |\langle \Psi | \Psi_n \rangle|^2 = \langle \Psi | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{P}_n | \Psi \rangle$$

и среднее значение

$$\bar{F} = \sum W_n F_n = \sum |c_n|^2 F_n = \sum \langle \Psi | \hat{P}_n | \Psi \rangle F_n.$$

С помощью оператора проектирования любой вектор можно представить в виде

$$|\Psi\rangle = \sum_n \hat{P}_n |\Psi\rangle.$$

Отсюда следует, что оператор $\sum_n \hat{P}_n$ является тождественным, т.е.

$$\hat{I} = \sum_n \hat{P}_n \equiv \sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|. \quad (2)$$

Это тождество называется *спектральным разложением тождественного оператора* или *разложением единицы*.

Поддействуем на обе части равенства $|\Psi\rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle$ самосопряженным оператором

$$\hat{F}|\Psi\rangle = \sum_n \hat{F}|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle = \sum_n F_n|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Psi\rangle = \sum_n F_n\hat{P}_n|\Psi\rangle.$$

Это выражение называется *спектральным разложением самосопряженного оператора с дискретным спектром*. Опуская в левой и правой частях этого выражения обозначение вектора $|\Psi\rangle$, формально получим

$$\hat{F} \equiv \sum_n F_n \hat{P}_n. \quad (3)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Проекционный оператор, тождественный оператор и их свойства, а также разложение единицы можно было бы получить непосредственно из (3).

2. Метод Дирака записи выражений.

Дираком введены удобные правила манипулирования с алгебраическими выражениями.

Запись скалярного произведения $(\Psi, \Phi) \equiv \langle\Psi|\Phi\rangle$.

Вводится символ $\langle|$ который называется "бра", а запись $\langle\Psi|$ называется "бра-вектор".

Для кет-вектора вводится операция сопряжения $|\Psi\rangle^+ \equiv \langle\Psi|$. Предполагается, что оператор действует на кет-вектор слева, а на бра-вектор справа $\hat{F}|\Psi\rangle, \langle\Psi|\hat{F}$. При этих обозначениях операция сопряжения для $\hat{F}|\Psi\rangle$ выглядит также как и для двух операторов, т.е.

$$(\hat{F}|\Psi\rangle)^+ = |\Psi\rangle^+ \hat{F}^+ = \langle\Psi|\hat{F}^+,$$

$$(\langle\Psi|\hat{F})^+ = \hat{F}^+ \langle\Psi|^+ = \hat{F}^+|\Psi\rangle.$$

Скалярное произведение записывается в виде

$$\langle\Psi|\hat{F}\Phi\rangle \equiv \langle\Psi|\hat{F}|\Phi\rangle.$$

Запишем теперь определение сопряженного и самосопряженного операторов.

Для сопряженного оператора по определению имеем

$$(\hat{F}^+|\Psi\rangle, |\Phi\rangle) = (|\Psi\rangle, \hat{F}|\Phi\rangle)$$

или

$$(|\Phi\rangle, \hat{F}^+ |\Psi\rangle)^* = (|\Psi\rangle, \hat{F} |\Phi\rangle).$$

В соответствии с новым правилом это есть

$$\langle \Phi | \hat{F}^+ | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{F} | \Phi \rangle$$

или

$$\boxed{\langle \Phi | \hat{F}^+ | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Phi \rangle^*}.$$

Отсюда заключаем, что определение самосопряженного оператора имеет вид

$$\boxed{\langle \Phi | \hat{F} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Phi \rangle^*}.$$

В качестве иллюстрации рассмотрим знакомую задачу

$$|\Psi\rangle \equiv \sum_n c_n |\Psi_n\rangle,$$

$$|\Psi\rangle = I |\Psi\rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle = \sum_n c_n |\Psi_n\rangle = \langle \Psi_n | \Psi \rangle |\Psi_n\rangle = |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle.$$

Пример

1. В качестве иллюстрации приведем последний вывод формулы для среднего значения используя формализм Дирака и формулу для спектрального разложения оператора

$$\begin{aligned} F &= \sum_n |c_n|^2 F_n = \sum_n |\langle F_n | \Psi \rangle|^2 F_n = \sum_n \langle \Psi | F_n \rangle \langle F_n | \Psi \rangle F_n = \\ &= \langle \Psi | \left\{ \sum_n F_n \langle F_n | F_n \rangle \right\} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle. \end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 4.

УСЛОВИЕ ПОЛНОТЫ.

В общем случае нельзя сказать, что у ЛЮБОГО самосопряженного оператора имеется ПОЛНАЯ система собственных векторов

Спектральную теорему надо понимать так: у самосопряженных операторов, используемых в физике, существуют полные системы собственных векторов, обеспечивающих для любого вектора, принадлежащего гильбертовому пространству, разложение

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n, \\ \Psi &= \int_{\xi_{\min}}^{\xi_{\max}} c_{\xi} \psi_{\xi} d\xi. \end{aligned}$$

Свойства коэффициентов разложения.

Используя, найденное выше выражение для коэффициентов разложения можем получить

$$\int c_F^* c_F dF = \int c_F^* \langle \Psi_F | \Psi \rangle dF = \left\langle \int c_F^* \Psi_F^* dF \middle| \Psi \right\rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

или то же в пространстве функций

$$\begin{aligned} \int c_F^* c_F dF &= \int c_F^* dF \int \psi_F^*(x) \psi(x) dx = \\ &= \int \psi(x) dV \int c_F^* \psi_F^*(x) dF = \int \psi(x) \psi^*(x) dx = 1. \end{aligned}$$

Таким образом, имеем

$$\boxed{\int |c_F|^2 dF = 1}.$$

Это выражение есть обобщение условия полноты на случай непрерывного спектра.

Дискретный случай.

Пусть разложение вектора по базису имеет вид $\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n$. Тогда для скалярного квадрата этого вектора можно получить соотношение

$$\boxed{\langle \Psi | \Psi \rangle = |\Psi|^2 = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2}.$$

Это выражение (равенство Парсеваля) называется *соотношением полноты*. Очевидно, что это соотношение есть не что иное как теорема Пифагора обобщенная на бесконечномерный случай.

В квантовой механике особую роль играют векторы, которые имеют единичную норму. В этом случае соотношение полноты принимает вид

$$\boxed{|\Psi|^2 = \sum_n |c_n|^2 = 1}.$$

Подставим $c_i = \langle \Psi_i | \Psi \rangle$ в разложение $\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i$ и получим

$$\psi(x) = \sum_n \psi_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x') \psi(x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) \right) \psi(x') dx'.$$

Чтобы это выражение было справедливым для произвольной функции ψ необходимо, чтобы выполнялось равенство

$$\boxed{\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) = \delta(x' - x)}. \quad (1)$$

Для непрерывного спектра аналогично получим

$$\boxed{\int \Psi_F^*(x') \Psi_F(x) dF = \delta(x' - x)}. \quad (2)$$

Обсудим соотношения (1) и (2). Эти соотношения также называются **условием полноты** системы собственных функций для соответственно дискретного и непрерывного спектров. Под условием полноты для дискретного спектра рассматривается выражение

$$\int |\psi(x)|^2 dV = \sum_n |a_n|^2, \quad (3)$$

которое эквивалентно (1). При этом как (1) так и (3) являются необходимыми и достаточными условиями полноты. Введем представление о линейном операторе как интегральном линейном операторе. Используем выражение для среднего значения

$$\begin{aligned} F &= \sum_n |c_n|^2 F_n = \sum_n c_n^* c_n F_n = \sum_n c_n F_n \int \psi_n \psi^* dV = \\ &= \sum_n c_n \int \psi^* F_n \psi_n dV = \int \psi^* \sum_n c_n F_n \psi_n dV. \end{aligned}$$

Сравним это выражение с $\bar{F} = \int \psi^*(x) \hat{F} \psi(x) dV$. Отсюда можно сделать вывод о справедливости выражения $\hat{F} \psi = \sum_n c_n F_n \psi_n$. Подставим

сюда $c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dV$. Тогда получим

$$\hat{F} \psi = \sum_n \left(F_n \psi_n(x) \int \psi_n^*(x') \psi(x') dx' \right) = \int \left(\sum_n F_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') \right) \psi(x') dx'$$

или $\hat{F} \psi = \int K(x, x') \psi(x') dx'$, где ядро оператора имеет вид $K(x, x') = \sum_n F_n \psi_n(x) \psi_n^*(x')$.

Отсюда, сравнивая с (1) легко сделать вывод, что у единичного оператора ($F_n = I$) ядром является дельта-функция.

ПРИЛОЖЕНИЕ 5.

ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ИЗ ТЕОРИИ ВОЛН.

Волновой поверхностью называется геометрическое место всех частиц, колеблющихся в одной фазе. Волновая поверхность перпендикулярна лучу.

Волновым фронтом называется волновая поверхность, которая разграничивает область, где есть колебания от области, где колебаний нет.

Длина волны λ - расстояние между соседними волновыми фронтами. Важнейшим случаем волнового движения является так называемая

плоская монохроматическая волна. Плоские волны возникают от плоского или удаленного источника. Их лучи параллельны, а волновые фронты представляют собой плоскости. **Уравнение плоской волны** в одномерном случае имеет вид

$$\psi(x, t) = a \cos(\omega t - kx).$$

Здесь $k = 2\pi/\lambda$ - **волновое число**, $\omega = 2\pi\nu$ - **циклическая частота**
Зафиксируем фазу

$$\omega t - kx = \text{const}$$

и найдем скорость ее движения для чего продифференцируем это выражение по времени

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}.$$

Эта производная дает скорость волны, которая называется **фазовой скоростью**. Т.е. $v = \frac{\omega}{k}$.

Если плоская волна распространяется вдоль произвольного направления, то ее уравнение будет иметь вид

$$\psi(r, t) = a \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r}).$$

Здесь \vec{r} - радиус-вектор точки пространства в которой рассматривается волновое движение, \vec{k} - **волновой вектор**. Волновой вектор связан с волновым числом соотношением $\vec{k} = k\vec{n}$, где \vec{n} - вектор нормали к волновой поверхности.

Уравнение плоской волны обычно записывают в комплексном виде

$$\psi(r, t) = ae^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}.$$

Такая запись удобна при теоретических выкладках. При этом, однако, не забывают, что смысл имеет только действительная часть комплексной функции.

Если волна порождается точечным источником, то такая волна будет иметь сферическую волновую поверхность. **Уравнение сферической волны** имеет вид (для поверхностной волны для одного направления x)

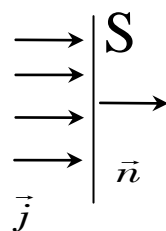
$$\psi = \frac{a}{x} \cos(\omega t - kx).$$

Заметим, что хотя амплитуда убывает, поглощения энергии здесь нет. Для случая произвольного направления перепишем это уравнение в

комплексном виде $\psi(r, t) = \frac{a}{r} e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$.

УРАВНЕНИЕ НЕПРЕРЫВНОСТИ В КЛАССИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

1. В различных областях физики – гидродинамике, электродинамике и квантовой механике – важное теоретическое значение имеет так называемое уравнение непрерывности. Рассмотрим его. Пусть, в геометрическом пространстве, имеется некоторое векторное поле, т.е. с каждой точкой некоторой области геометрического пространства связываем вектор некоторой физической величины. Обозначим этот вектор как \vec{j} , а конкретный физический смысл придадим позже. Выделим в рассматриваемом пространстве площадку в виде плоской поверхности с площадью S и установим к ней вектор нормали \vec{n} . Таким образом наша площадка стала ориентированной. Эту ориентированную площадку обозначим как вектор



$$\vec{S} = S\vec{n}.$$

Назовем произведение $I = \vec{j}\vec{S} = j_n S$ *потоком вектора \vec{j}* через площадку S , а сам вектор \vec{j} назовем *плотностью потока*. В приведенном определении потока предполагается, что вектор \vec{j} входящий в площадку, остается одинаковым в каждой точке плоскости площадки. На самом деле векторное поле может сложным образом изменяться в пространстве от одной точки к другой. Однако в бесконечно малой окрестности любой точки можно считать, что этот вектор не меняется и тогда введенное выше определение сохранит свой смысл. Итак, отнесем введенное выше определение потока к бесконечно малой площадке.

$$dI = \vec{j}d\vec{S} = j_n dS.$$

Чтобы найти теперь поток через конечную поверхность надо взять интеграл

$$I = \int_S \vec{j}d\vec{S} = \int_S j_n dS.$$

Наконец, если поверхность замкнутая, то поток выразится формулой

$$I = \oint_S \vec{j}d\vec{S} = \oint_S j_n dS.$$

Придадим потоку конкретный физический смысл. Рассмотрим, к примеру, движение частиц. Если мы рассматриваем движение заря-

женных частиц, тогда поток I – электрический ток, а \vec{j} – плотность этого тока. Если мы рассматриваем движение частиц жидкости, тогда поток I – поток жидкости, а \vec{j} – плотность этого потока.

2. Плотность частиц, например плотность частиц жидкости, или плотность заряженных частиц в общем случае зависит от точки пространства, в которой эта плотность рассматривается и от времени, т.е.

$$\rho = \rho(x, y, z, t).$$

Другими словами, когда мы говорим "плотность", то имеем ввиду плотность в *точке* пространства.

Плотность частиц (*концентрация*) определяется по формуле

$$\rho = \frac{dN}{dV}.$$

Зная плотность можно определить количество частиц в рассматриваемом объеме

$$N = \int_V \rho dV.$$

Плотность жидкости и плотность заряда определяются по формулам

$$\rho_m = \frac{dm}{dV}, \quad \rho_q = \frac{dq}{dV}.$$

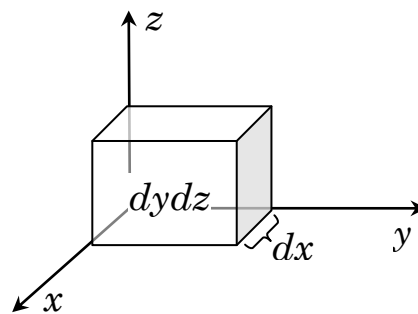
Массе жидкости или заряд можно связать с количеством частиц N по формулам: $m = m_0 N$, $q = eN$, где m_0 , e – масса и заряд одной частицы. Тогда

$$\rho_m = m_0 \frac{dN}{dV} = m_0 \rho, \quad \rho_q = e \frac{dN}{dV} = e\rho.$$

Зная плотность можно определить массу жидкости или заряда в рассматриваемом объеме

$$m = \int_V \rho_m dV, \quad q = \int_V \rho_q dV.$$

3. Рассмотрим поток частиц, к примеру, поток жидкости. Найдем количество частиц dN , протекающих через объем в виде бесконечно малого параллелепипеда за время dt . Пусть частицы жидкости движутся со скоростью v вдоль оси x . Очевидно, что за время dt они пройдут путь равный $dx = v_x dt$. Это означает, что через площадку $dydz$ пройдут только те частицы, которые заключены в объеме $dV = dx dy dz$. Количество прошедших частиц $dN = \rho dV = \rho dx dy dz = \rho S dx = \rho v_x S dt$. Тогда отношение



$$dI = \frac{dN}{dt} = \rho v_x dS$$

можно рассматривать как поток через бесконечно малую площадку величины

$$\frac{dN}{dSdt} = \rho v_x,$$

которую естественно назвать плотностью потока. Таким образом, если рассматривается поток частиц, то *плотность потока - это количество частиц, проходящих в единицу времени через поверхность единичной площади*. В трехмерном случае плотность потока частиц в каждой точке пространства определяется по формуле

$$\vec{j} = \rho \vec{v}.$$

Если проинтегрировать по всей поверхности, то получим суммарный поток, т.е. *количество частиц, проходящих в единицу времени через всю поверхность*

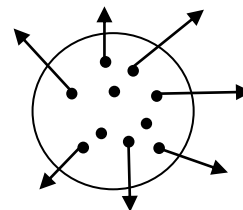
$$I = \frac{dN}{dt} = \oint_S \vec{j} d\vec{S},$$

где ρ - плотность частиц (плотность заряда, плотность массы) в данной точке, а v - скорость частиц в данной точке.

4. Будем рассматривать пространство, в котором находятся частицы. Ограничим некоторый объем этого пространства замкнутой поверхностью S . Пусть количество частиц в этом объеме изменяется с течением времени. Изменение частиц в единицу времени, очевидно, есть

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV.$$

Пусть, для определенности количество частиц уменьшается. Что может являться причиной этого уменьшения? Можно было бы, например, предположить, что частицы исчезают внутри объема. Однако такое предположение находится в противоречии с постулатом классической физики о неучтожимости частиц, т.е. с законом сохранения частиц. Другими словами частицы не могут самопроизвольно исчезнуть или появиться. Это закон находит свое место в механике в виде закона сохранения массы или в электродинамике в виде закона сохранения заряда. Таким образом, приходим к выводу, что единственной причиной уменьшения числа частиц может быть только истечение частиц из рассматриваемого объема. Количество частиц, вытекающих из объема в единицу времени, есть поток этих частиц через поверх-



ность, ограничивающую объем. Следовательно, наш вывод можно оформить в виде соотношения

$$\oint_S \vec{j} d\vec{S} = - \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV. \quad (1)$$

Знак минус здесь поставлен из следующих соображений. Как мы уже сказали, площадка является ориентированной. Ориентируем ее так, чтобы вектор нормали к каждой элементарной площадке dS выходил из объема наружу. В таком случае говорят, что площадка ориентирована по внешней нормали к поверхности. Отсюда следует, что поток наружу будет положительным, а поток внутрь объема отрицательным.

Но поток наружу сопровождается уменьшением числа частиц, т.е. $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ будет отрицательным. Чтобы в левой и правой частях были выражения одного знака, и ставится знак минус.

Уравнение (1) является **уравнением непрерывности в интегральной форме**. Его можно прочесть так: **изменение числа частиц в некотором объеме происходит только в результате втекания или вытекания частиц в этот объем, если же втекания или вытекания нет, то число частиц внутри объема не изменяется**. Таким образом уравнение непрерывности является математическим выражением **закона сохранения числа частиц**. Заметим, что в приведенной формулировке слово *частица* можно заменить на *заряд* или *масса*.

Уравнение непрерывности можно записать и в дифференциальном виде. Для этого учтем, что согласно теореме Гаусса

$$\oint_S \vec{j} d\vec{S} = \int_V \text{div} \vec{j} dV. \quad (2)$$

Следовательно, интеграл по поверхности можно преобразовать в интеграл по объему. Приравнявая правые части (1) и (2) получим

$$\int_V \text{div} \vec{j} dV = - \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV.$$

Отсюда следует, что

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0.$$

Уравнение (1) есть **уравнение непрерывности в дифференциальной форме**.

5. К уравнению непрерывности в дифференциальной форме можно прийти не используя теорему Гаусса, а используя наглядное представление. Покажем это на



следующем примере. Пусть в некоторый конечный объем в виде параллелепипеда входит поток I_1 , а поток I_2 исходит из него. Ориентируем поверхность по внешней нормали и пусть $S_1=S_2=S$. Учтем, что

$$\vec{j}d\vec{S} = \vec{j}\vec{n}dS = j_x n_x dS = -j_x dS.$$

Тогда суммарный поток

$$\begin{aligned} I &= I_1 + I_2 = \int_{S_1} \vec{j}_1 d\vec{S} + \int_{S_2} \vec{j}_2 d\vec{S} = \\ &= -\int_{S_1} j_{x1} dS + \int_{S_2} j_{x2} dS = \int_{S=S_1=S_2} (j_{x2} - j_{x1}) dS \end{aligned}$$

и уравнение непрерывности примет вид

$$\int_S (j_{x2} - j_{x1}) dS = -\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV.$$

Теперь выделим в рассматриваемом объеме некоторую бесконечно малую область. Для нее имеем $j_{x2}-j_{x1}=dj_x$. Полагая

$$dj_x = \frac{\partial j_x}{\partial x} dx,$$

получим уравнение непрерывности в виде

$$\int_S \frac{\partial j_x}{\partial x} dx dS = -\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV,$$

откуда

$$\frac{\partial j_x}{\partial x} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

Итак, если в пространстве плотность потока изменяется, то в этом же пространстве со временем изменяется плотность частиц. Пусть для определенности $I_2 > I_1$. Тогда можно сказать, что изменение плотности частиц со временем является следствием истечения частиц из объема (или притока частиц в объем).

6. Пусть распределение частиц не зависит от времени. Тогда говорят, что распределение частиц стационарно. В этом случае

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0.$$

Отсюда следует, что

$$\frac{\partial j_x}{\partial x} = 0,$$

т.е. изменение плотности потока в пространстве отсутствует. В трехмерном случае это утверждение выражается соотношением

$$\operatorname{div} \vec{j} = 0.$$

Такой поток называют **стационарным**. При стационарном потоке отсутствует изменение плотности частиц и, следовательно, отсутствует изменение количества частиц в объеме. Т.е. нет истока частиц - число частиц в объеме все время одно и то же. Наоборот, при нестационарном потоке существует исток частиц из объема и следствием этого истока является изменение плотности потока частиц в пространстве объема.

7. Рассмотрим следующий опыт. Пусть имеется вакуумный диод с плоскими катодом и анодом. Если нагреть катод и приложить разность потенциалов, то между катодом и анодом возникнет поток электронов, т.е. электрический ток. Поддерживая разность потенциалов и температуру катода постоянными, мы будем иметь стационарный, т.е. не зависящий от времени, поток электронов или, другими словами, постоянный ток. Резко охладим катод. Тогда, в течение короткого промежутка времени можно будет наблюдать, что поток электронов вблизи катода уменьшился, в то время поток непосредственно у анода остался еще прежним. Если температура катода не будет более меняться, то в течение короткого промежутка времени поток в пространстве между катодом и анодом будет выравниваться. В течение этого промежутка времени поток не является стационарным, однако, по прошествии этого промежутка, поток вновь станет стационарным, т.е. ток станет вновь постоянным, хотя и будет иметь меньшее значение. При этом мы скажем, что уменьшилась сила тока.

ПРИЛОЖЕНИЕ 7.

ДОПОЛНЕНИЯ К ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ.

Замечание 1.

$$\begin{aligned} \varphi_x &= \int p_{xx'} \psi_{x'} dx' = -i\hbar \int \frac{\partial \delta(x-x')}{\partial x} \psi_{x'} dx' = i\hbar \int \frac{\partial \delta(x-x')}{\partial x'} \psi_{x'} dx' = \\ &= i\hbar \delta(x-x') \psi_{x'} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - i\hbar \int \delta(x-x') \frac{\partial \psi_{x'}}{\partial x'} dx' = \\ &= -i\hbar \int \delta(x-x') \frac{\partial}{\partial x'} \psi_{x'} dx' = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_x. \end{aligned}$$

При выводе учтено свойство нечетности производной от δ -функции

$$\frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x') = -\frac{\partial}{\partial x} \delta(x'-x). \text{ Меняя в правой части обозначения, по-}$$

лучим запись этого свойства в виде $\frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') = -\frac{\partial}{\partial x'} \delta(x - x')$. То, что такая запись справедлива, можно проверить на примере $\frac{\partial}{\partial x} (x - x')^2 = -\frac{\partial}{\partial x'} (x - x')^2$, где под знаком производной стоит также четная функция.

Здесь полезно также отметить свойство

$$\int \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x) \psi_{x'} dx' = -\frac{\partial \psi_{x'}}{\partial x'} \Big|_{x'=x} = -\frac{\partial \psi_x}{\partial x},$$

которое можно было бы использовать при выводе. В этом случае не понадобилось бы интегрирование по частям.

Замечание 2.

1. В некоторых книгах встречается выражение $\psi_x = \int (\Psi_x, \Psi_{x'}) \psi_{x'} dx'$, из которого следует вывод, что для того, чтобы $(\Psi_x, \Psi_{x'})$ отображала $\psi_{x'}$ в ее значение в точке x необходимо, чтобы было $(\Psi_x, \Psi_{x'}) = \delta(x - x')$. Такой подход аналогичен представлению $c_n = \sum c_m \delta_{nm}$ для случай дискретного спектра.

2. В некоторых книгах используется другой вывод. Используя свойство $x\delta(x) = 0$, получаем $(x - \lambda)\delta(x - \lambda) = 0$ или $x\delta(x - \lambda) = \lambda\delta(x - \lambda)$. Поэтому $\delta(x - \lambda)$ есть собственная функция оператора координаты в координатном представлении. Эти собственные функции ортонормированны $\int \delta(x - a)\delta(x - b)dx = \delta(a - b)$ и образуют полную систему. Последнее утверждение следует из того, что любую функцию можно представить в виде $\psi(\lambda) = \int \psi(x)\delta(\lambda - x)dx$ (эта формула есть не что иное как разложение $\psi(x) = \int c_\lambda \psi_{x\lambda} d\lambda = \int \psi(\lambda)\delta(x - \lambda)d\lambda$).

Замечание 4. Казалось бы, можно было бы изначально сделать такой вывод.

$$\begin{aligned} \hat{A} \sum_{m'} c_{m'} \Psi_{m'} &= A_n \sum_{m'} c_{m'} \Psi_{m'} \Rightarrow \sum_{m'} c_{m'} \hat{A} \Psi_{m'} = A_n \sum_{m'} c_{m'} \Psi_{m'} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \sum_{m'} c_{m'} (\Psi_m, \hat{A} \Psi_{m'}) = A_n \sum_{m'} c_{m'} (\Psi_m, \Psi_{m'}) \Rightarrow \sum_{m', n} c_{m'} A_{mm'} = \\ &= A_n \sum_m c_m \delta_{mm'} \Rightarrow \sum_{m'} A_{mm'} c_{m'} = A_n c_m. \end{aligned}$$

Однако, по всей видимости, получается, что коэффициентами c могут быть только элементы матрицы S .

Замечание 5.

$$\begin{aligned}
(\Psi_x, \hat{p}^2 \Psi_{x'}) &= \int p_{xx''} p_{x''x'} dx'' = -\hbar^2 \int \frac{\partial \delta(x-x'')}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x''-x') dx'' = \\
&= -\hbar^2 \delta(x''-x') \frac{\partial \delta(x-x'')}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \hbar^2 \int \delta(x''-x') \frac{\partial}{\partial x''} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x'') dx'' = \\
&= -\hbar^2 \int \delta(x''-x') \frac{\partial}{\partial x''} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x'') dx'' = -\hbar^2 \int \delta(x''-x') \frac{\partial^2}{\partial x''^2} \delta(x-x'') dx'' = \\
&= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \delta(x-x') = -\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x'} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x') \right) = +\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x'} \delta(x-x') \right) = \\
&= +\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x') \right) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x-x'), \\
\varphi_x &= \int p_{xx'}^2 \psi_x dx' = -\hbar^2 \int \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \delta(x-x') \psi_x dx' = -\hbar^2 \int \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \delta(x-x') \psi_x dx' = \\
&= -\hbar^2 \int \delta(x-x') \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \psi_x dx' = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_x, \\
\int \frac{\partial \delta(x-x')}{\partial x} f_x dx' &= \frac{\partial f_x}{\partial x}.
\end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 8.**РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ $\psi'' + k^2 \psi = 0$.**

Определение: Дифференциальное уравнение вида:

$$\psi''(x) + a_1 \psi'(x) + a_2 \psi(x) = 0, \quad (1)$$

где a_i ($i=1, 2, \dots, n$) – постоянные коэффициенты (действительные числа) называется **линейным однородным дифференциальным уравнением с постоянными коэффициентами**.

Решение этого уравнения находится с помощью характеристического

уравнения $r^2 + a_1 r + a_2 = 0$.

Если все корни характеристического уравнения различны, то уравнение будет иметь 2 частных линейно независимых решений:

$$\psi_1 = e^{r_1 x}, \quad \psi_2 = e^{r_2 x}.$$

Общее решение тогда представится в виде

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 = c_1 e^{r_1 x} + c_2 e^{r_2 x}.$$

Пусть $a_1=0$, $a_2=k^2$, т.е.

$$\boxed{\psi'' + k^2 \psi = 0}.$$

Его характеристическое уравнение $r^2 + k^2 = 0$ или $r^2 = -k^2$.

Корни этого уравнения – два комплексных числа $r = \pm ik$.

Следовательно, общее решение представится в виде суммы частных решений $\psi = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$ или

$$\begin{aligned}\psi &= c_1 (\cos kx + i \sin kx) + c_2 (\cos kx - i \sin kx) = \\ &= (c_1 + c_2) \cos kx + i(c_1 - c_2) \sin kx = a_1 \cos kx + a_2 \sin kx.\end{aligned}$$

Далее возможно два варианта

1. Либо полагаем

$$a_1 = A \cos \alpha; \quad a_2 = -A \sin \alpha; \quad A = \sqrt{a_1^2 + a_2^2}; \quad \alpha = -\operatorname{tg} \frac{a_2}{a_1}.$$

Тогда

$$\psi = a_1 \cos kx + a_2 \sin kx = A(\cos \alpha \cos kx - \sin \alpha \sin kx) = A \cos(kx + \alpha).$$

2. Либо полагаем

$$a_1 = A \sin \alpha; \quad a_2 = A \cos \alpha; \quad A = \sqrt{a_1^2 + a_2^2}; \quad \alpha = \operatorname{tg} \frac{a_1}{a_2}.$$

Тогда

$$\psi = a_1 \cos kx + a_2 \sin kx = A(\sin \alpha \cos kx + \cos \alpha \sin kx) = A \sin(kx + \alpha).$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 9.

СФЕРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ

Полином Лежандра состоит из функций, которые можно выразить формулой Родригеса

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l, \quad (1)$$

где $x = \cos \theta$. Эти функции являются ортогональными, но не нормированными. Их квадрат нормы

$$\int_{-1}^1 P_n^2(x) dx = \frac{2}{2n+1}. \quad (2)$$

Присоединенный полином Лежандра состоит из функций, которые можно выразить формулой

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad m=0, 1, 2, \dots, l \quad (3)$$

где полином Лежандра определен формулой (1). Присоединенные полиномы Лежандра являются решениями дифференциального уравнения

$$\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) P_l^m(\cos \theta) = 0. \quad (4)$$

Присоединенные полиномы являются ортогональными, но не нормированными. Их квадрат нормы

$$\int_{-1}^1 (P_l^m(x))^2 dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}, \quad m=0, 1, 2, \dots, l.$$

Присоединенный полином Лежандра можно записать в виде (подставив (1) в (3)):

$$P_l^m(x) = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l. \quad (5)$$

Присоединенный полином Лежандра обладает следующим свойством

$$P_l^m(x) = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!} P_l^{-m}(x), \quad (6)$$

т.е., наряду с (5) его также можно представить в виде

$$P_l^m(x) = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}} (x^2-1)^l, \quad m=0, 1, 2, \dots, l. \quad (7)$$

Ортонормированный присоединенный полином Лежандра состоит функций, которые можно выразить формулой

$$\Theta_{lm}(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(x), \quad m=0, 1, 2, \dots, l. \quad (8)$$

Присоединенный полином Лежандра необходимо определить для отрицательных m . Для начала учтем, что при отрицательных m можно записать

$$P_l^m(x) = P_l^{-|m|}(x) = (-1)^{-|m|} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l \quad m < 0$$

и для нормированной функции

$$\begin{aligned} \Theta_{lm}(x) &= \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (-1)^{-|m|} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l = \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}} (-1)^{-|m|} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l = \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} (-1)^{-|m|} \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l = \quad m < 0 \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} (-1)^{-|m|} P_l^{|m|}(x) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что

$$\Theta_{l,-|m|}(x) = (-1)^m \Theta_{l|m|}(x). \quad (9)$$

Сравнивая (8) с

$$\Theta_{lm}(x) = (-1)^{|m|} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x) \quad m=-1, -2, \dots, -l \quad (10)$$

можем записать в общем случае

$$\Theta_{lm}(x) = (-1)^{\frac{|m|-m}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x) \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (11)$$

В большинстве книг множитель $(-1)^m$ переносят в функцию

$$\Theta_{lm}(x) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x), \quad m=0, 1, 2, \dots, l \quad (12)$$

и именно ее, т.е. ортонормированный присоединенный полином Лежандра в виде (13), считают нормированным решением дифференциального уравнения (4). Тогда, для отрицательных m

$$\Theta_{lm}(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x), \quad m=-1, -2, \dots, -l \quad (13)$$

Очевидно, что соотношение (9) при таком перенесении множителя не меняется. В общем случае, объединяя (12) и (13), можем записать

$$\Theta_{lm}(x) = (-1)^{\frac{|m|+m}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x) \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (14)$$

У Ландау и Кривченкова (в отличие, к примеру, от Зара) формулы (13) и (14) умножены дополнительно на i^l , что делает формулы более удобными, по их мнению, в алгебре углового момента.

Сферические функции.

Сферические функции являются решениями дифференциального уравнения

$$\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{l(l+1)}{\hbar^2} \right) \psi = 0.$$

Решениями являются сферическими функциями $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, которые можно представить в виде произведения двух функций каждая из которых зависит от своего угла

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

где

$$\Theta_{lm}(x) = (-1)^{\frac{|m|+m}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(x), \quad \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

$l=0, 1, 2, 3, \dots$; $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

Таким образом

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

$$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}},$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta,$$

$$Y_{2,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2\theta e^{\pm i\varphi}, \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos\theta \sin\theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,0} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3\cos^2\theta - 1).$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 10.

НЕКОТОРЫЕ СФЕРИЧЕСКИЕ И РАДИАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ.

n=1		
$l=0,$ $m=0$	$R_{10}(r) = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}}$	$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
n=2		
$l=0,$ $m=0$	$R_{20}(r) = \frac{1}{(2a)^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$	$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$l=1,$ $m=0$	$R_{21}(r) = \frac{1}{(2a)^{3/2}} \frac{r}{a\sqrt{3}} e^{-\frac{r}{2a}}$	$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$
$l=1,$ $m=\pm 1$	$R_{21}(r) = \frac{1}{(2a)^{3/2}} \frac{r}{a\sqrt{3}} e^{-\frac{r}{2a}}$	$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$
n=3		
$l=0,$ $m=0$	$R_{30}(r) = \frac{2}{(3a)^{3/2}} e^{-\frac{r}{3a}} \left[1 - 2\frac{r}{3a} + \frac{2}{3}\left(\frac{r}{3a}\right)^2\right]$	$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$l=1,$ $m=0$	$R_{31}(r) = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2}{(3a)^3}} e^{-\frac{r}{3a}} \frac{r}{3a} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{r}{3a}\right]$	$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$
$l=1,$ $m=\pm 1$	$R_{31}(r) = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2}{(3a)^3}} e^{-\frac{r}{3a}} \frac{r}{3a} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{r}{3a}\right]$	$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$
$l=2,$ $m=0$	$R_{32}(r) = \frac{4}{3\sqrt{10}(3a)^3} e^{-\frac{r}{3a}} \left(\frac{r}{3a}\right)^2$	$Y_{2,0} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$

$l=2,$ $m=\pm 1$	$R_{32}(r) = \frac{4}{3\sqrt{10}(3a)^3} e^{-\frac{r}{3a}} \left(\frac{r}{3a}\right)^2$	$Y_{2,\pm 1} = \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos\theta \sin\theta e^{\pm i\varphi}$
$l=2,$ $m=\pm 2$	$R_{32}(r) = \frac{4}{3\sqrt{10}(3a)^3} e^{-\frac{r}{3a}} \left(\frac{r}{3a}\right)^2$	$Y_{2,\pm 2} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2\theta e^{\pm i\varphi}$

ПРИЛОЖЕНИЕ 11.**ПРИМЕРЫ ЦЕНТРАЛЬНЫХ ПОЛЕЙ**

Здесь приведены примеры полей, которые возрастают в начале координат не быстрее чем $1/r^2$, т.е. поля, которые удовлетворяют условию

$$\lim_{r \rightarrow 0} U(r)r^2 = 0.$$

1) Прямоугольная яма

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & 0 \leq r < a \\ 0, & a > r \end{cases}.$$

2) Гармонический изотропный осциллятор

$$U(r) = \frac{\mu\omega^2 r^2}{2}.$$

3) Кулоновское поле

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

4) Экранированное кулоновское поле

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-\frac{r}{a}}.$$

4) Потенциал Вудса-Саксона (взаимодействие нейтронов с ядрами)

$$U(r) = -\frac{U_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}}.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 12.**НЕКОТОРЫЕ ИНТЕГРАЛЫ**

- 1) $\int \sin^2 ax dx = \frac{1}{2}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax,$
- $\int \sin^3 ax dx = -\frac{1}{a} \cos ax + \frac{1}{3a} \cos^3 ax,$
- $\int \sin^4 ax dx = \frac{3}{8}x - \frac{1}{4a} \sin 2ax + \frac{1}{32a} \sin 4ax,$

2) В общем случае

$$I_{2k} = \int_0^{+\infty} x^n e^{-ax^2} dx = \begin{cases} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2k-1)\sqrt{\pi}}{2^{k+1} a^{k+\frac{1}{2}}} = \frac{(2k-1)!!}{2(2a)^k} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, & n = 2k \\ \frac{k!}{2a^{k+1}}, & n = 2k+1 \end{cases} \quad a > 0, n > -1.$$

Отсюда следует

$$I_{2k} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-ax^2} dx = \begin{cases} 2 \int_0^{+\infty} x^n e^{-ax^2} dx, & n = 2k \\ 0, & n = 2k+1 \end{cases} \quad a > 0, n > -1.$$

В частности

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a^5}}.$$

$$3) \int_0^{+\infty} e^{-\frac{x}{a}} x^n dx = n! a^{n+1} \quad \text{или} \quad \int_0^{+\infty} e^{-ax} x^n dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad a > 0, n > 0.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 13.

УНИВЕРСАЛЬНЫЕ ПОСТОЯННЫЕ

	СИ	СГС
Скорость света c	$3 \cdot 10^8$ м/с	$3 \cdot 10^{10}$ см/с
Постоянная Планка \hbar	$1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с	$1,05 \cdot 10^{-27}$ эрг·с
Масса электро- на m_e	$0,9 \cdot 10^{-30}$ кг	$0,9 \cdot 10^{-27}$ г
Заряд электро- на e	$6 \cdot 10^{-19}$ Кл	$4,8 \cdot 10^{-10}$ СГС

Переводной коэффициент $1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абрамовский В.А., Трошев М.Ю. Квантовая теория. – Режим доступа: www.soros.novgorod.ru
2. Арфкен Г. Математические методы в физике. – М.: Атомиздат, 1970. – 712 с.
3. Балашов В.В., Долинов В.К. Курс квантовой механики. – Ижевск, 2001. – 336 с.
4. Беклемишев Д.В. Курс аналитической геометрии и линейной алгебры. – М.: Наука, 1984.
5. Березин Ф.А., Шубин М.А. Уравнение Шредингера. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983.
6. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. – М.: Наука, 1976. – 664 с.
7. Боум А. Квантовая механика Основы и приложения. – М.: Мир, 1990.
8. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику. – М.: Наука, 1988. – 328 с.
9. Гольдман И.И., Кривченков В.Д. Сборник задач по квантовой механике. – М., 1957.
10. Давыдов А.С. Квантовая механика. – М.: Наука, 1968.
11. Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики. – М., 1960.
12. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика. – М.: Наука, 1976. – 334 с.
13. Ильин В.А., Позняк Э.Г. Линейная алгебра. – М.: Наука, 1984.
14. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике. – М.: Физматлит, 1991.
15. Иродов И.Е. Квантовая физика. Основные законы. – М.: Физматлит, 2001.
16. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. – М.: Наука. – 1973.
17. Л. де Бройль. Революция в физике. – М.: Атомиздат, 1965.
18. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1989. – Т. III.
19. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики. – М., 1971. – Т.2.
20. Липкин Г. Квантовая механика. – М.: Мир, 1977. – 592 с.
21. Мессиа А. Квантовая механика. – М.: Наука, 1978. – Т.1, 2.
22. Соколов А.А., Тернов И.М., Жуковский В.Ч. Квантовая механика. – М.: Наука, 1979.
23. Тарасов Л.В. Основы квантовой механики: учебное пособие для вузов. – М.: Высш. школа, 1978. – 287 с.

24. Фаддеев Л.Д., Якубовский О.А. Лекции по квантовой механике для студентов-математиков. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1980.
25. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. – М.: Мир, 1974. – Т. 1, 2.
26. Шпольский Э.В. Атомная физика. – М.: Наука, 1974. – Т.1, 2.
27. www.mibif.ru

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
Предмет изучения квантовой механики.....	3
Экспериментальные основы квантовой теории.....	5
Задачи.....	12
Часть 1. Математический аппарат квантовой механики.	21
1.1. Линейное пространство.....	21
1.1.1. Основные понятия.....	21
1.1.2. Конкретные реализации линейных пространств.....	24
1.1.2.1. Пространство конечных числовых последовательностей	24
1.1.2.2. Пространство квадратично суммируемых бесконечных последовательностей	25
1.1.2.3. Пространство квадратично интегрируемых функций	26
1.2. Линейные операторы.....	27
1.3. Уравнение на собственные значения.....	29
1.4. Матрица оператора.....	33
1.5. Замена базиса.....	34
1.6. Представление УСЗ.....	36
Приложение. Теория представлений -1.....	37
1. Преобразование базиса.....	37
2. Преобразование компонент вектора при смене базиса.....	38
2.1. Преобразование от дискретного спектра к дискретному	38
2.2. Преобразование от непрерывного спектра к непрерывному	40
2.3. Преобразование от непрерывного спектра к дискретному	40
2.4. Преобразование от дискретного спектра к непрерывному	40
3. Представление УСЗ.....	41
3.1. УСЗ для операторов с дискретным спектром.....	41
3.2. УСЗ для операторов с непрерывным спектром.....	42
3.3. УСЗ для случая, когда спектр одного оператора непрерывный, а другого дискретный	42
Задачи.....	43
Часть 2. Основные положения квантовой механики	52
2.1. Принцип суперпозиции. Понятие состояния.....	52
2.2. Операторы физических величин. Связь операторов с результатами измерений.....	54

Задачи.....	57
2.3. Вероятности результатов измерения.....	58
2.3.1. Постулат о вероятностях. Понятие о представлении вектора состояния. Волновая функция	58
2.3.2. Нормировка вектора состояния и волновых функций.....	61
2.3.3. Среднее значение физической величины	62
2.3.4. Условия, при которых несколько физических величин могут иметь определенные значения. Понятие о полном наборе одновременно измеримых величин	63
2.3.5. Соотношение неопределенностей.....	65
Часть 3. Элементы теории представлений.....	66
3.1. Координатное представление вектора состояния.....	66
3.2. Координатное представление операторов.....	67
3.2.1. Оператор координаты.....	67
3.2.2. Оператор импульса.....	68
Задачи.....	69
3.2.3. Оператор Гамильтона.....	69
3.2.4. Оператор углового момента.....	71
Приложение. Теория представлений –II.....	72
1. Координатное представление УСЗ.....	72
1.1. УСЗ для оператора координаты.....	72
1.2. УСЗ для оператора импульса.....	72
2. Импульсное представление операторов.....	73
2.1. Оператор импульса.....	73
2.2. Оператор координаты.....	73
2.3. СФ оператора импульса.....	74
2.4. СФ оператора координаты.....	74
3. Связь импульсного и координатного представлений	74
Часть 4. Уравнение Шредингера.....	76
4.1. Стационарное уравнение Шредингера. Стационарные состояния.....	76
4.2. Уравнение Шредингера.....	77
4.2.1. Постулат об эволюции.....	77
4.2.2. УШ в энергетическом представлении.....	77
4.2.2.1. Гамильтониан зависит от времени.....	78
4.2.2.2. Гамильтониан не зависит от времени.....	77
Задачи.....	79
4.2.3. УШ в координатном представлении.....	79
4.2.3.1. Гамильтониан зависит от времени.....	79
4.2.3.2. Гамильтониан не зависит от времени.....	80
Задачи.....	81

4.3. Уравнение непрерывности.....	81
4.4. Эволюция средних значений. Интегралы движения.....	85
Приложение.....	86
1. Теоремы Эренфеста.....	86
2. Оператор эволюции.....	89
3. Гейзенберговское представление.....	90
Часть 5. Основные одномерные задачи квантовой механики	96
5.1. Движение свободной частицы.....	96
5.1.1 Постановка задачи.....	96
5.1.2 Решение УСЗ для оператора импульса.....	97
5.1.3 Решение СУШ.....	99
5.1.4 Выводы.....	99
Задачи.....	100
5.2. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме.....	100
Задачи.....	103
5.3. Линейный гармонический осциллятор.....	106
Задачи.....	111
5.4. Отражение и прохождение частиц через потенциальный барьер.....	112
Задачи.....	116
Часть 6. Движение в центральном поле	119
6.1. УСЗ для оператора проекции момента импульса и квадрата момента импульса.....	119
6.1.1. УСЗ для оператора квадрата момента импульса.....	119
6.1.2. УСЗ для оператора z-проекции момента импульса...	120
6.2. Уравнение Шредингера для системы частиц.....	121
6.2.1. НУШ для системы частиц.....	121
6.2.2. СУШ для невзаимодействующих частиц.....	122
6.2.3. Сведение задачи о движении двух частиц в центральном поле к задаче о движении одной частицы.....	123
6.3. СУШ для частицы в центральном поле.....	124
6.4. Движение частицы в кулоновском поле.....	131
6.5. Токи в атоме. Магнитный момент. Магнетон бора.....	135
Часть 7. Спин и тождественность	139
7.1. Опыт Штерна и Герлаха. Гипотеза спина.....	139
7.1.1. Опыт Штерна и Герлаха.....	139
7.1.2. Гипотеза спина.....	139
7.1.3. Теория спина Паули.....	141
Задачи.....	151

7.2. Принцип тождественности. Принцип Паули.....	153
7.2.1. Принцип тождественности частиц. Симметричные и антисимметричные волновые функции	153
7.2.2. Волновые функции для системы невзаимодействующих частиц. Принцип Паули.....	156
7.3. Описание состояний электронов в атомах. Периодическая система Менделеева.....	158
Приложение 1. Линейное пространство.....	160
Приложение 2. Сопряжённое пространство или о смысле векторов бра и кет.....	160
Приложение 3. Метод Дирака записи выражений.....	161
Приложение 4. Условие полноты.....	163
Приложение 5. Основные понятия из теории волн.....	165
Приложение 6. Уравнение непрерывности в классической физике.....	167
Приложение 7. Дополнения к теории представлений.....	172
Приложение 8. Решение уравнения $\psi'' + k^2\psi = 0$	174
Приложение 9. Сферические функции.....	175
Приложение 10. Некоторые сферические и радиальные функции.....	178
Приложение 11. Примеры центральных полей.....	179
Приложение 12. Некоторые интегралы.....	179
Приложение 13. Универсальные постоянные.....	180
Список литературы.....	181

Учебное издание

**Сергей Владиславович Бровко,
Олег Викторович Кондаков**

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

*Технический редактор – О.А. Ядыкина
Компьютерный набор – С.В. Бровко, О.В. Кондаков
Компьютерная верстка – О.В. Кондаков
Печатается в авторской редакции*

Лицензия на издательскую деятельность
ИД № 06146. Дата выдачи 26.10.01

Формат 60 x 84 1/16. Гарнитура Times. Печать трафаретная
Печ.л. 11,6 Уч.-изд.л. 10,8
Тираж 300 экз. (1-й завод 1-35 экз.). Заказ 187

Отпечатано с готового оригинал-макета на участке оперативной полиграфии
ФГБОУ ВО «Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина»

Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина
399770, г. Елец, ул. Коммунаров, 28,1