Тема 1. Физические основы квантовой теории
Основные формулы

• Спектральная плотность равновесного излучения (формула Планка)

$$u_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}. \tag{1.1}$$

Произведение $u_\omega d\omega$ есть энергия электроиагнитных волн с частотами в интервале от ω до $\omega + d\omega$ в единице объема.

• Энергия и импульс фотона

$$E = \hbar\omega, \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \qquad p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \tag{1.2}$$

• Формула Эйнштейна для фотоэффекта

$$\hbar\omega = A + \frac{mv_{max}^2}{2}, \tag{1.3}$$

где A - работа выхода электрона из металла, v_{max} - максимальная скорость фотоэлектронов.

• Эффект Комптона

$$\triangle\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos\vartheta), \tag{1.4}$$

где λ - длина волны падающего излучения, λ' - длина волны рассеянного излучения, ϑ - угол рассеяния. Комптоновская длина волны

$$\lambda_C = \frac{2\pi\hbar}{mc}, \tag{1.5}$$

для электрона $\lambda_C = 0,0243 \cdot 10^{-8}$см.

Задачи

1.1. Получить с помощью формулы Планка приближенные выражения для спектральной плотности равновесного излучения:

а) в области низких частот, где $\hbar\omega \ll k_B T$ (формула Рэлея-Джинса);

б) в области высоких частот, где $\hbar\omega \gg k_B T$ (формула Вина).

Ответ: а)$u_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^2} kT$; б) $u_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\hbar\omega/kT}$.

1.2. Точечный изотропный источник испускает свет с длиной волны $\lambda = 589$ нм. Световая мощность источника $P = 10$ Вт. Найти среднюю плотность фотонов на расстоянии $r = 2$ м от источника.

Ответ: $n = \frac{1}{c}\frac{P\lambda}{8\pi^2\hbar c r^2} \simeq 4 \cdot 10^9 \text{м}^{-3}$.

1.3. Найти максимальную кинетическую энергию электронов, вырываемых с поверхности лития ($A = 2,39$ эВ) электромагнитным излучением, напряженность электрического поля которого изменяется со временем по закону $\mathcal{E}(t) = a[1+\cos\omega t]\cos\omega_0 t$, где a - некоторая постоянная, $\omega = 6,0 \cdot 10^{14}\text{с}^{-1}$ и $\omega_0 = 3,6 \cdot 10^{15}\text{с}^{-1}$.

Ответ: $K^{(max)} = \hbar(\omega + \omega_0) - A = 0,38$ эВ.

1.4. Показать с помощью законов сохранения, что свободный электрон не может поглотить фотон.

Указание: Использовать законы сохранения $\hbar\omega + mc^2 = \sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}$; $\hbar k = p$.

1.5. Фотон с энергией $\hbar\omega = 1,0$ МэВ рассеялся на свободном покоившемся электроне. Найти кинетическую энергию электрона отдачи, если в результате рассеяния длина волны фотона изменилась на $\eta = 25\%$

Ответ: $K = \hbar\omega\frac{\eta}{1+\eta} = 0,2$ МэВ.

1.6. Найти с помощью формулы Планка выражение, определяющее число фотонов в 1см^3 полости при температуре T в спектральном интервале $(\omega, \omega + d\omega)$.

Ответ: $n_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}$.

1.7. Составить выражение для величины, имеющей размерность длины, используя скорость света c, массу частицы m и постоянную Планка $\hbar$. Что это за величина?

Ответ: $x = \frac{\hbar}{mc}$.

1.8. При поочередном освещении поверхности некоторого металла светом с длиной волны $\lambda_1 = 0,35$ мкм и $\lambda_2 = 0,54$ мкм было обнаружено, что соответствующие максимальные скорости фотоэлектронов отличаются друг от друга в $\eta = 2$ раза. Найти работу выхода с поверхности этого металла.

Ответ: $A = 2\pi\hbar c\frac{\eta^2 - \lambda_2/\lambda_1}{\lambda_2(\eta^2-1)} \simeq 1,9$ эВ (цезий)

1.9. Фотон с длиной волны $\lambda = 6,0$ пм рассеялся под прямым углом на покоившемся свободном электроне. Найти частоту рассеянного фотона и кинетическую энергию электрона отдачи.

Ответ: $\omega^{'} = \frac{2\pi c}{\lambda+\lambda_C} \simeq 2,2\cdot 10^{20} c^{-1}$, $K = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}\frac{1}{1+\lambda/\lambda_C} = 60$ кэВ.

1,10. Фотон с импульсом $p = 1,02$ МэВ$/c$, где c - скорость света, рассеялся на свободном покоящемся электроне, в результате чего импульс фотона стал $p' = 0,255$ МэВ$/c$. Под каким углом рассеялся фотон?

Ответ: $\cos\vartheta = 1 - mc^2\left(1/(p^{'}c) - 1/(pc)\right)$, $\vartheta = 120°$

1.11. Фотон рассеялся под углом $\vartheta = 120°$ на покоящемся свободном электроне, в результате чего электрон получил кинетическую энергию $T = 0,45$ МэВ. Найти энергию фотона до рассеяния.

Ответ:$E = \frac{T}{2}\left[1 + \sqrt{1 + \frac{2mc^2}{T\sin^2\vartheta/2}}\right] = 0,68$ МэВ.

1.12. Фотон с энергией $\hbar\omega = 0,15$ МэВ рассеялся на покоящемся свободном электроне, в результате чего его длина волны изменилась на $\triangle\lambda = 3$ пм. Найти угол, под которым вылетел комптоновский электрон.

Ответ: $\tan\varphi = \frac{1}{1+\hbar\omega/mc^2}\sqrt{\frac{4\pi\hbar}{mc\triangle\lambda} - 1}$, $\varphi \simeq 31°$.

1.13*. Определить с помощью формулы Планка числовое значение:

- постоянной b в законе смещения Вина;
- постоянной σ Стефана - Больцмана.

1.14*. Показать, что число фотонов теплового излучения, падающих в единицу времени на единичную площадку стенки полости, равно $\frac{nc}{4}$, где c - скорость света, n - концентрация фотонов. Убедиться, что произведение этой величины на среднюю энергию фотона равно энергетической светимости M.

Указание: Учесть, что энергетическая светимость $M = \frac{1}{4}n\langle\hbar\omega\rangle c = \frac{uc}{4}$.

1.15*. При облучении вещества рентгеновским излучением с длиной волны λ обнаружено, что максимальная кинетическая энергия комптоновских электронов $K_{max} = 0,44$ МэВ. Определить λ.

Ответ: $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc}\left(\sqrt{1 + \frac{2mc^2}{K_{max}}} - 1\right) = 2,0$ пм.

1.16*. Фотон с энергией $\hbar\omega$ испытал столкновение с электроном, который двигался ему навстречу. В результате столкновения направление движения фотона изменилось на противоположное, а его энергия оказалась прежней. Найти скорость электрона до и после столкновения.

Ответ: $v = v^{'} = \frac{c\varepsilon}{\sqrt{1+\varepsilon^2}}$, где $\varepsilon = \frac{\hbar\omega}{mc^2}$.

Тема 2. Квантование энергии атома. Волновые свойства микрочастиц

Основные формулы

• Обобщенная формула Бальмера

$$\omega = RZ^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \qquad n_1 = 1, 2, ..., \qquad n_2 > n_1, \tag{2.1}$$

где Z - порядковый номер водородоподобного атома. Постоянная Ридберга:

$$R = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{m}{2\hbar^3} = 2,067 \cdot 10^{16} c^{-1}. \tag{2.2}$$

• Уровни энергии водородоподобного атома

$$E_n = -\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{m}{2\hbar^2}\frac{Z^2}{n^2}, \qquad n = 1, 2, ... \tag{2.3}$$

• Радиусы разрешенных орбит

$$r_n = r_B\frac{n^2}{Z}, \qquad n = 1, 2, ... \qquad r_B = 4\pi\epsilon_0\frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-10}\text{м}. \tag{2.4}$$

• Правило квантования Бора - Зоммерфельда

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n, \qquad n = 1, 2, ..., \tag{2.5}$$

где q - обобщенная координата, p - обобщенный импульс.

• Соотношения де Бройля для энергии и импульса частицы

$$E = \hbar\omega, \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \tag{2.6}$$

Задачи

2.1. Покоившийся атом водорода испустил фотон, соответствующий головной линии серии Лаймана. Какую скорость приобрел атом?

Ответ: $v \simeq \frac{3R\hbar}{4mc} \simeq 3,25$ м/с.

2.2. Какому элементу принадлежит водородоподобный спектр, длины волн которого в 4 раза короче, чем длины волн линий атома водорода?

Ответ: Ион гелия He^+.

2.3. Используя правило квантования Бора - Зоммерфельда, найти разрешенные значения энергии микрочастицы массы m, движущейся в одномерном потенциальном поле $U(x) = ax^2/2$.

Ответ: $E_n = n\hbar\sqrt{a/m}$.

2.4. Показать, что электрон в атоме водорода может двигаться только по тем круговым орбитам, на которых укладывается целое число волн де Бройля.

Указание: Длина волны де Бройля $\lambda = 2\pi\hbar/p$, правило квантования момента импульса при круговом движении по орбите $L = pr = n\hbar$.

2.5. Получить выражение для дебройлевской длины волны λ релятивистской частицы, движущейся с кинетической энергией T. При каких значениях T ошибка в определении λ по нерелятивистской формуле не превышает 1% для электрона?

Ответ: $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mT(1+T/2mc^2)}}$; $T \leq 10$ кэВ.

2.6.Сколько спектральных линий будет испускать атомарный водород, который возбуждают на n -ый энергетический уровень?

Ответ: $\frac{(n-1)n}{2}$.

2.7. Вычислить постоянную Ридберга R, если известно, что для ионов He^+ разность длин волн между головными линиями серий Бальмера и Лаймана $\triangle\lambda = 133,7$ нм.

Ответ: $R = \frac{2\pi c}{Z^2\triangle\lambda}\left(\frac{36}{5} - \frac{4}{3}\right) = 2,07 \cdot 10^{16} c^{-1}$.

2.8. Энергия связи электрона в основном состоянии атома He равна $E_0 = 24,6$ эВ. Найти энергию, необходимую для удаления обоих электронов из этого атома.

Ответ: $E = E_0 + 4\hbar R = 79$ эВ.

2.9. Найти дебройлевскую длину волны релятивистских электронов, подлетающих к антикатоду рентгеновской трубки, если длина волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра $\lambda_k = 10,0$ пм.

Ответ: $\lambda = \frac{\lambda_k}{\sqrt{1+mc\lambda_k/\pi\hbar}} = 3,3$ пм.

2.10. Частица массы m движется по круговой орбите в центральном силовом поле, где ее потенциальная энергия зависит от расстояния r до центра поля как $U(r) = kr^2/2$, где k - постоянная. Найти с помощью условия квантования Бора - Зоммерфельда возможные значения орбит и значения полной энергии частицы в данном поле.

Ответ: $r_n = \sqrt{n\hbar/m\omega}; E_n = n\hbar\omega; n = 1, 2, ...; \omega = \sqrt{k/m}$.

2.11. Определить для иона He^+ энергию связи электрона в основном состоянии, потенциал ионизации и длину волны головной линии серии Лаймана.

Ответ: $E_{\text{СВ}} = Z^2\hbar R = 54,5$эВ$; \varphi_i = E_{\text{СВ}}/e = 54,5B; \lambda = 8\pi c/3Z^2R = 30,4$нм.

2.12. Какую наименьшую энергию надо сообщить иону He^+ , находящемуся в основном состоянии, чтобы он смог испустить фотон, соответствующий головной линии серии Бальмера ?

Ответ: $E = \frac{8}{9}Z^2\hbar R = 48,5$эВ.

2.13. У какого водородоподобного атома разность длин волн между головными линиями серий Бальмера и Лаймана равна 59,3 нм ?

Ответ: Li^{++}.

2.14. Свободная частица массы m находится в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими вертикальными стенками, расположенными при $x = 0$ и $x = a$. Определить уровни энергии частицы, пользуясь постулатом квантования Бора - Зоммерфельда.

Ответ: $E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{a}n\right)^2; n = 1, 2, 3, ...$

2.15. Частица движется слева направо на одномерную потенциальную стенку высотой $U = 15$ эВ. Левее стенки кинетическая энергия частицы равна $T = 20$ эВ. во сколько раз и как изменится дебройлевская длина волны частицы при переходе через потенциальную стенку?

Ответ: Увеличится в $\sqrt{T/(T-U)} = 2$ раза.

2.16. Параллельный поток электронов с одинаковой энергией падает нормально на диафрагму с узкой прямоугольной щелью ширины $b = 1$ мкм. Определить скорость этих электронов, если на экране, отстоящем от щели на расстояние $l = 50$ см, ширина центрального дифракционного максимума равна $\triangle x = 0,36$ мм.

Ответ: $v = 4\pi\hbar l/mb\triangle x = 2,0 \cdot 10^6$м/с.

2.17. Узкий пучок электронов с одинаковой энергией падает под углом скольжения $\vartheta = 30^\circ$ на естественную грань монокристалла алюминия. Расстояние между соседними кристаллическими плоскостями, параллельными этой грани, равно $d = 0,2$ нм. При некотором ускоряющем напряжении U_0 наблюдается максимум зеркального отражения электронов. Найти U_0 , если известно, что следующий максимум зеркального отражения возникает при увеличении ускоряющего напряжения в $\eta = 2,25$ раза.

Ответ: $U_0 = \pi^2\hbar^2/2me(\sqrt{\eta}-1)^2 d^2 \sin^2\vartheta = 0,15$ кэВ.

2.18. Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы l. Найти возможные значения энергии частицы из условия, что реализуются только такие состояния ее движения, для которых в пределах ямы укладывается целое число дебройлевских полуволн. Сравнить полученное выражение для уровней энергии с результатом решения уравнения Шредингера.

Ответ: $E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi\hbar}{l}n\right)^2; n = 1, 2, ...$

2.19. Параллельный пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов $U = 25$ В, падает нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, расстояние между которыми $d = 50$ мкм. Определить расстояние между соседними максимумами дифракционной картины на экране, расположенном на расстоянии $l = 100$ см от щелей.

Ответ: $\triangle x = 2\pi\hbar l/d\sqrt{2meU} = 4{,}9$ мкм.

2.20*. Пользуясь постулатом Бора - Зоммерфельда, проквантовать движение одномерного гармонического осциллятора массы m.

Ответ: $E_n = \hbar\omega n; n = 1, 2, ...$

2.21*. Частица массы m вертикально падает в однородном поле силы тяжести на горизонтальную пластину и упруго отражается от нее. Проквантовать движение частицы, используя постулат Бора - Зоммерфельда и определить уровни энергии частицы и набор допустимых высот.

Ответ: $E_n = \left(\frac{3mg\pi\hbar n}{2\sqrt{2m}}\right)^{2/3}; H_n = \frac{E_n}{mg}$.

2.22*. При каком значении кинетической энергии электрона его дебройлевская длина волны равна комптоновской длине волны? С какой скоростью при этом движется электрон?

Ответ: $E_k = (\sqrt{2}-1)mc^2 = 0,21$МэВ; $v = c/\sqrt{2}$.

Тема 3. Квантовая механика одной частицы

Основные формулы

• Волновая функция свободной частицы

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left\{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t\right)\right\}, \qquad \text{или}$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{r} - E(p)t\right)\right\}, \tag{3.1}$$

где $\quad \omega = E(p)/\hbar, \qquad \vec{k} = \vec{p}/\hbar, \qquad E(p) = p^2/2m.$

• Условие нормировки в "ящике"

$$\int\limits_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 \, dV = 1. \tag{3.2}$$

• Временное уравнение Шредингера

$$\hat{H}(t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \qquad \hat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(\vec{r},t). \tag{3.3}$$

• Волновая функция стационарного состояния

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right). \tag{3.4}$$

• Стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}\psi = E\psi, \qquad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(\vec{r}). \tag{3.5}$$

Задачи

3.1. Проверить, что волновая функция свободной частицы нормирована на единицу в объеме V и удовлетворяет уравнению Шредингера при $U = 0$.

3.2. Состояние частицы описывается волновой функцией $\Psi(\vec{r},t) = a_1\Psi_1(\vec{r},t) + a_2\Psi_2(\vec{r},t)$, где $\Psi_1(\vec{r},t)$ и $\Psi_2(\vec{r},t)$ - волновые функции двух стационарных состояний с энергиями E_1 и E_2, a_1 и a_2 - действительные числа. Найти зависимость плотности вероятности от времени в этом состоянии.

Ответ: $\varrho(t) \sim \cos\omega t; \omega = \frac{|E_2 - E_1|}{\hbar}$.

3.3. Частица совершает одномерное движение вдоль оси x. Какой физический смысл имеет $|\Psi(x,t)|^2$? Какую размерность имеет волновая функция $\Psi(x,t)$? Записать условие нормировки для волновой функции, если частица может быть обнаружена лишь на отрезке, координаты концов которого x_1 и $x_2 > x_1$.

Ответ: $dw = |\Psi|^2 dx; \qquad [\Psi] = \text{м}^{-1/2}; \qquad \int\limits_{x_1}^{x_2} |\Psi|^2 dx = 1.$

3.4. Волновая функция частицы, совершающей одномерное движение вдоль оси x, в момент времени $t = 0$ имеет вид $\Psi(x,0) = A\exp(-x^2/2a^2)$, где A и a - постоянные. Найти A. Вычислить вероятность обнаружить частицу в области $-0,01a < x < 0,01a$.

Ответ: $A = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}; \qquad P \simeq \frac{0{,}02}{\sqrt{\pi}}.$

3.5. Волновая функция электрона в основном состоянии атома водорода имеет вид $\psi(r) = A\exp(-r/r_1)$, где A - некоторая постоянная, r_1 - первый боровский радиус. Найти наиболее вероятное расстояние между электроном и ядром.

Ответ: $r_{\text{вер}} = r_1$.

3.6. В момент времени $t = 0$ волновая функция частицы имеет вид $\Psi(x,0) = A\exp(-x^2/4\sigma^2 + ikx)$. Изобразить примерный вид зависимостей: а) действительной части Ψ от x; б) $|\Psi|^2$ от x.

Ответ: $Re\Psi = Ae^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}\cos kx; \qquad |\Psi|^2 = A^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}.$

3.7. Волновая функция частицы массы m для основного состояния в одномерном потенциальном поле $U(x) = kx^2/2$ имеет вид $\psi(x) = A\exp(-ax^2)$, где A и a - некоторые постоянные. Найти с помощью уравнения Шредингера постоянную a и энергию E частицы в этом состоянии.

Ответ: $a = \frac{\sqrt{km}}{2\hbar}$; $\quad E_{min} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}$.

3.8. Частица движется в плоскости (x, y). Записать условие нормировки для волновой функции частицы, если: а) частица может быть обнаружена в любой точке на плоскости, б) частица может быть обнаружена в области $x_1 < x < x_2, y_1 < y < y_2$. Какова размерность волновой функции в данном случае?

Ответ: $[\Psi] = 1/$м.

3.9. Частица находится в сферически-симметричном потенциальном поле в стационарном состоянии $\psi(x) = (1/\sqrt{2\pi a}) \exp(-r/a)/r$, где A и a - постоянные, r расстояние от центра поля. Проверить, что волновая функция нормирована на единицу. Найти наиболее вероятное расстояние частицы от центра поля.

Ответ: $r_{\text{вер}} = 0$.

3.10. Найти решение временного уравнения Шредингера для свободной частицы, движущейся с импульсом p в положительном направлении оси x.

Ответ: $\Psi(x, t) = A \exp\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\}$.

3.11. То же, что в предыдущей задаче, но частица движется с импульсом $\vec{p}$ в произвольном направлении.

Ответ: $\Psi(\vec{r}, t) = A \exp\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\}$.

3.12. Частица массы m находится в квантовом состоянии, которое является суперпозицией двух состояний: свободного состояния с импульсом $\vec{p}$ и свободного состояния с импульсом $-\vec{p}$, причем вероятность значения импульса $\vec{p}$ в два раза больше, чем вероятность значения $-\vec{p}$. Записать выражение для волновой функции $\Psi(\vec{r}, t)$, которая нормирована на единицу в большом объеме V.

3.13. Волновая функция частицы имеет вид

$$\Psi(\vec{r}, t) = A\left\{\cos\left(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \alpha\right) + i \sin\left(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \alpha\right)\right\},$$

где A, α, ω - некоторые действительные постоянные, $\vec{k}$ - постоянный вектор. Коков физический смысл ω и $\vec{k}$? Найти значение постоянной A, если частица находится в заданном объеме V.

3.14. В некоторый момент времени t волновая функция частицы в точке P есть суперпозиция двух волновых функций: $\Psi(P, t) = \Psi_1(P, t) + \Psi_2(P, t)$, где

$$\Psi_1(P, t) = a e^{i(\alpha_1 - \omega t)}, \qquad \Psi_2(P, t) = a e^{i(\alpha_2 - \omega t)}.$$

Величина a - заданная комплексная постоянная, α_1, α_2 и ω - заданные действительные постоянные. Вычислить плотность вероятности нахождения частицы в точке P.

3.15*. Определить распределение плотности вероятности местонахождения частицы и эффективный размер области ее локализации, если состояние частицы в данный момент описывается волновой функцией $\psi(x)$, представляющей собой суперпозицию дебройлевских волн с одинаковыми амплитудами a и мало отличающимися друг от друга волновыми числами в интервале $(k_0 \pm \triangle k)$.

Ответ: $|\psi(x)|^2 = 4a^2(\triangle k)^2 \frac{\sin^2 \xi}{\xi^2}$; $\quad \xi = x \cdot \triangle k$; $\quad \triangle x \approx 2\pi/\triangle k$.

3.16*. Полагая, что волновая функция $\Psi(x,t)$, описывающая одномерное движение частицы, представляет собой суперпозицию дебройлевских волн с одинаковыми амплитудами и мало отличающимися друг от друга волновыми числами в интервале $(k_0 \pm \triangle k)$: а) преобразовать $\Psi(x,t)$ к виду $\Psi(x,t) = A(x,t)\exp[i(\omega_0 t - k_0 x)]$; б) получить выражение для скорости перемещения данной группы волн, т.е. максимума функции $A(x,t)$.

Ответ: $A(x,t) = 2a\frac{\sin[(d\omega/dk)_0 t - x]\triangle k}{(d\omega/dk)_0 t - x}$; $\qquad v = (d\omega/dk)_0$.

3.17*. Отнормировать волновую функцию свободно движущейся частицы на δ -функцию Дирака. Доказать основные свойства δ - функции Дирака.

Тема 4. Алгебра операторов. Средние значения динамических переменных. Соотношение неопределенностей

Основные формулы

• Операторы координат и проекций импульса

$$\hat{x} = x, \qquad \hat{y} = y, \qquad \hat{z} = z, \tag{4.1}$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \qquad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \tag{4.2}$$

Краткая запись: $\hat{\vec{r}} = \vec{r}, \qquad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla, \qquad \nabla = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}.$

• Оператор кинетической энергии

$$\hat{T} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}. \tag{4.3}$$

• Оператор Гамильтона (гамильтониан)

$$\hat{H}(t) = \hat{T} + U(\vec{r},t). \tag{4.4}$$

• Оператор момента импульса частицы

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}. \tag{4.5}$$

• Коммутатор и антикоммутатор двух операторов

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \qquad \{\hat{A},\hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \tag{4.6}$$

• Транспонированный оператор

$$\hat{F} \to \hat{F}^T : \qquad \int \varphi\hat{F}\psi\, dV = \int \psi\hat{F}^T\varphi\, dV. \tag{4.7}$$

• Комплексно сопряженный оператор $\hat{A}^*$ получается заменой $i \to -i$ в операторе $\hat{A}$.

• Эрмитово сопряженный оператор

$$\hat{F} \to \hat{F}^+ : \qquad \int \varphi^*\hat{F}\psi\, dV = \int \psi\left(\hat{F}^+\varphi\right)^*\, dV, \tag{4.8}$$

$$\hat{F}^+ = \hat{F}^{*T} = \hat{F}^{T*}. \tag{4.9}$$

• Самосопряженный (эрмитов) оператор

$$\hat{F} = \hat{F}^{+}: \qquad \int \varphi^* \hat{F} \psi \, dV = \int \psi \hat{F}^* \varphi^* \, dV. \tag{4.10}$$

• Среднее значение динамической переменной

$$\langle A \rangle = \int\limits_V \Psi^* \hat{A} \Psi \, dV. \tag{4.11}$$

• Квантовая неопределенность динамической переменной

$$\triangle A = \sqrt{\left(\int \Psi^* \left(\triangle \hat{A} \right)^2 \Psi \, dV \right)}, \qquad \text{где} \qquad \triangle \hat{A} = \hat{A} - \langle A \rangle. \tag{4.12}$$

Полезная формула $\triangle A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$.

• Соотношение неопределенностей для некоммутирующих операторов

$$[\hat{K}, \hat{F}] = i\hat{M}, \qquad \left\langle (\triangle K)^2 \right\rangle \left\langle (\triangle F)^2 \right\rangle \geq \frac{1}{4} \langle M \rangle^2. \tag{4.13}$$

• Соотношение неопределенностей Гейзенберга для одномерного движения

$$\triangle x \triangle p_x \geq \frac{1}{2} \hbar, \qquad \triangle x \triangle v_x \geq \frac{\hbar}{2m}. \tag{4.14}$$

• Условие квазиклассического приближения $mvl \gg \hbar$, где v – средняя скорость движения частицы, l – размер области движения.

Задачи

4.1. Записать в явном виде выражения для операторов проекций момента импульса $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$.

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

4.2. Найти результат действия оператора $\hat{p}_x$ на волновую функцию $\Psi(x, y, z, t) = \exp[ipx/\hbar] \Phi(y, z, t)$, где Φ - произвольная функция.

Ответ: $p\Psi$.

4.3. Проверить операторное тождество $\frac{d}{dx} x = 1 + x \frac{d}{dx}$.

4.4. Частица совершает одномерное движение и в момент времени $t = 0$ находится в квантовом состоянии $\psi(x) = A \exp(-x^2/a^2 + ikx)$, где k, A, a - некоторые постоянные. Найти $\langle x \rangle, \langle p_x \rangle, \langle T \rangle$.

Ответ: 0; $A^2 \hbar k a \sqrt{\pi/2}$; $A^2 \frac{\hbar^2}{2ma} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1 + k^2 a^2)$.

4.5. Волновая функция электрона в основном состоянии атома водорода имеет вид $\psi(r) = A \exp(-r/r_1)$, где A - некоторая постоянная, r_1 - первый боровский радиус. Найти среднее значение модуля кулоновской силы, действующей на электрон и среднее значение потенциальной энергии электрона в поле ядра.

Ответ:$\langle |F| \rangle = \frac{1}{2\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_1^2}$; $\langle U \rangle = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_1}$.

4.6. Частица совершает одномерное движение на интервале $0 < x < l$ и ее волновая функция имеет вид $\psi(x) = A \sin(\pi x/l)$. Найти: а) постоянную A; б) средние значения $\langle x \rangle$, $\langle p_x \rangle$, $\langle T \rangle$.

Ответ: $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$; $\langle x \rangle = \frac{l}{2}$; $\langle p_x \rangle = 0$: $\langle T \rangle = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$.

4.7. Доказать, что в стационарном состоянии среднее значение любой динамической переменной A не зависит от времени, если оператор этой динамической переменной $\hat{A}$ не зависит от времени.

4.8. Проверить следующие равенства для коммутаторов $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0, [\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$.

4.9.Найти результат действия операторов $\frac{d^2}{dx^2}x^2$ и $(\frac{d}{dx}x)^2$ на функции а) $\cos x$, б) $\exp x$.

Ответ: а) $(2 - x^2)\cos x - 4x\sin x$; $\quad (1 - x^2)\cos x - 3x\sin x$;

б) $(2 + 4x + x^2)e^x$; $\quad (1 + 3x + x^2)e^x$.

4.10. Доказать, что операторы проекций импульса частицы $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ - эрмитовы операторы. Какие физические следствия из этого вытекают?

4.11. Доказать самосопряженность оператора Лапласа (лапласиана).

4.12. Доказать операторное тождество $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$. Является ли произведение двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ эрмитовым оператором? Если да, то при каких условиях?

Ответ: $\hat{A}\hat{B} = (\hat{A}\hat{B})^+$, если $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

4.13. Доказать операторное тождество $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$, записав в явном виде выражения в правой и левой частях. Найти с помощью этого тождества коммутатор $[\hat{x}, \hat{H}]$, где $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + U(x)$ - гамильтониан частицы в одномерном потенциальном поле.

Ответ: $[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$.

4.14. Доказать, что операторы проекций момента импульса частицы $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ - эрмитовы операторы.

4.15. Частица совершает одномерное движение на интервале $0 < x < l$ и ее волновая функция имеет вид $\psi(x) = A\sin(\pi x/l)$. Найти квантовую неопределенность p_x в этом состоянии.

Ответ: $\triangle p_x = \frac{\pi\hbar}{l}$.

4.16. Доказать, что квантовая неопределенность всех трех проекций импульса свободной частицы равна нулю.

Указание: использовать явное выражение для волновой функции свободной частицы.

4.17. Частица массы m движется в одноменром потенциальном поле $U = kx^2/2$ (гармонический осциллятор). Оценить с помощью соотношения неопределенностей энергию основного состояния частицы.

Ответ: $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$; $\quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

4.18. Оценить с помощью соотношения неопределенностей Гейзенберга энергию основного состояния электрона в атоме водорода. Сравнить полученное выражение с точным значением энергии по теории Бора.

Ответ: $E_{min} = -\frac{2me^4}{\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}$.

4.19. Ускоряющее напряжение на электронно-лучевой трубке $U \simeq 10$ кВ. Расстояние от электронной пушки до экрана $l \simeq 20$ см. Оценить неопределенность координаты электрона на экране, если след электронного пучка на экране имеет диаметр $d \simeq 0,5$ мм.

Ответ: $\triangle x \sim \frac{2\hbar l}{\sqrt{2md^2eU}} \approx 16$ нм.

4.20. Оценить наименьшие погрешности, с которыми можно определить скорости электрона и протона, локализованных в области размером 1 мм.

Ответ: $\triangle v_e \sim \frac{\hbar}{m_e\triangle x} \approx 2 \cdot 10^2$м/с; $\quad \triangle v_p \sim \frac{\hbar}{m_p\triangle x} \approx 0,1$м/с.

4.21. Оценить минимальную кинетическую энергию электрона, локализованного в области размером $l \simeq 0,10$ нм.

Ответ: $E_{min} \sim \frac{2\hbar^2}{ml^2} \approx 15$эВ.

4.22. Атом испустил фотон с длиной волны $\lambda = 0,58$ мкм за время $\tau \simeq 10^{-8}$ с. Оценить неопределенность $\triangle x$, с которой можно установить координату фотона в направлении его движения, а также относительную неопределенность его длины волны.

Ответ: $\triangle x \sim c\tau \approx 3$м; $\triangle\lambda/\lambda \sim \lambda/2\pi c\tau \approx 3 \cdot 10^{-8}$.

4.23. Оценить с помощью соотношения неопределенностей квантовую неопределенность скорости электрона в атоме водорода, полагая размер атома $l = 1 \cdot 10^{-8}$ см. Сравнить полученную величину со скоростью электрона на первой боровской орбите. Какой вывод можно сделать из этого сравнения?

Ответ: $\triangle v \sim \hbar/ml = 1 \cdot 10^6$м/с; $v_1 = 2,2 \cdot 10^6$м/с.

4.24. Электрон с кинетической энергией $T = 10$ эВ локализован в области с размером $l = 0,2$ нм. Оценить с помощью соотношения неопределенностей относительную квантовую неопределенность его скорости. Выполняется ли в данном случае условие применимости квазиклассического приближения?

Ответ: $\triangle v/v \sim 2\hbar/\sqrt{2ml^2T}$.

4.25. Электрон находится в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы l. Оценить с помощью соотношения неопределенностей минимально возможное значение энергии электрона в яме. Сравнить это значение с результатом решения уравнения Шредингера.

Ответ: $E_{min} \sim \hbar^2/2ml^2$. $E_1 = \pi^2\hbar^2/2ml^2$.

4.26. Найти явные выражения для транспонорованного оператора $\hat{A}^T$, комплексно сопряженного оператора $\hat{A}^*$ и эрмитово сопряженного оператора $\hat{A}^+$, если:

а) $\hat{A} = \hat{p}_x$ - оператор проекции импульса частицы;

б) $\hat{A} = \hat{L}_x$ - оператор проекции момента импульса частицы;

в) $\hat{A} = \hat{T} \equiv \hat{p}^2/2m$ - оператор кинетической энергии частицы;

г) $\hat{A} = \hat{H} \equiv \hat{T} + U(\vec{r})$ -гамильтониан частицы во внешнем поле;

д) $\hat{A} = \hat{L}_x\hat{L}_y$;

е) $\hat{A} = \hat{p}_x\hat{p}_y$.

Ответ: а) $\hat{p}_x^T = \hat{p}_x^* = -\hat{p}_x; \hat{p}_x^+ = \hat{p}_x$; б)$\hat{L}_x^T = \hat{L}_x^* = -\hat{L}_x; \hat{L}_x^+ = \hat{L}_x$;
в) $\hat{T}^T = \hat{T}^* = \hat{T}^+ = \hat{T}$; г)$\hat{H}^T = \hat{H}^* = \hat{H}^+ = \hat{H}$;
д) $(\hat{L}_x\hat{L}_y)^T = (\hat{L}_x\hat{L}_y)^+ = \hat{L}_y\hat{L}_x; (\hat{L}_x\hat{L}_y)^* = \hat{L}_x\hat{L}_y$;
е) $(\hat{p}_x\hat{p}_y)^T = (\hat{p}_x\hat{p}_y)^+ = \hat{p}_y\hat{p}_x; (\hat{p}_x\hat{p}_y)^* = \hat{p}_x\hat{p}_y$.

4.27. Вычислить коммутаторы операторов:

а) $[\hat{x}, \hat{L}_y]$;

б) $[\hat{p}_x, \hat{L}_z]$;

в) $[\hat{x}^2, \hat{p}_x]$;

г) $[\hat{y}, \hat{T}]$;

д) $[\hat{L}_x, \hat{L}^2]$;

е) $[\hat{x}, \hat{H}]$, где $\hat{H} = \hat{T} + U(\vec{r})$ - гамильтониан частицы.

Ответ: а) $i\hbar z$; б) $-i\hbar\hat{p}_y$; в) $2i\hbar x$; г) $\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_y$; д) 0; е) $\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$.

4.28*. а) Рассмотреть следующие операторы:

- оператор отражения $\hat{I}$: $\hat{I}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$;

- оператор сдвига $\hat{T}_{\vec{a}}$: $\hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a})$;

- оператор комплексного сопряжения $\hat{K}$: $\hat{K}\psi(\vec{r}) = \psi^*(\vec{r})$.

Являются ли эти операторы линейными? Найти вид операторов, которые по отношению к этим операторам являются: транспонированными, комплексно сопряженными, эрмитово сопряженными.

Ответ: $\hat{I}, \hat{T}_{\vec{a}}$ - линейные операторы, $\hat{K}$ - нелинейный оператор. Все операторы являются действительными, т.е. совпадают со своими комплексно сопряженными.

$\hat{I}^+ = \hat{I}^T = \hat{I}, \qquad \hat{T}^T_{\vec{a}} = \hat{T}^+ = \hat{T}_{-\vec{a}}$.

б) Показать,что операторы проекций радиус-вектора $\hat{\vec{r}}$ и импульса $\hat{\vec{p}}$ антикоммутируют с оператором отражения $\hat{I}$, а операторы проекций момента импульса $\hat{\vec{L}}$ коммутируют с $\hat{I}$.

4.29* Как изменится полная волновая функция $\Psi(x,t)$, описывающая стационарное состояние частицы, если изменить начало отсчета потенциальной энергии на некоторую величину $\triangle U$?

Указание: использовать временное уравнение Шредингера.

4.30*. Частица совершает одномерное движение и ее квантовое состояние описывается волновой функцией

$$\Psi(x,t) = \frac{i}{\sqrt{2}}\Psi_1(x,t) + \frac{1}{2}\Psi_2(x,t) - \frac{1}{2}\Psi_3(x,t),$$

где Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 - нормированные на единицу полные волновые функции трех стационарных состояний частицы с заданными значениями энергии $E_1 \neq E_2 \neq E_3$. Вычислить среднюю энергию частицы и квантовую неопределенность энергии $\triangle E$ в данном состоянии.

Ответ: $\langle E\rangle = \frac{1}{4}(2E_1 + E_2 + E_3)$;

$\triangle E = \frac{1}{4}\sqrt{2(E_1 - E_2)^2 + 2(E_1 - E_3)^2 + (E_2 - E_3)^2}$.

4.31*. Для частицы, состояние которой описывается функцией

$$\psi(x) = A\exp\left(ik_0x - \frac{x^2}{a^2}\right), \qquad k_0 = const, a = const,$$

вычислить среднее значение координаты $\langle x\rangle$ и импульса $\langle p_x\rangle$. Вычислить также квантовые неопределенности $\triangle x^2, \triangle p_x^2$ и проверить соотношение неопределенностей.

Указание:$\langle x\rangle = 0; \langle p_x\rangle = \hbar k_0$. Вычислить $\langle\triangle x^2\rangle$ и $\langle\triangle p_x^2\rangle$ и убедиться в справедливости соотношения неопределенностей (4.13).

Тема 5. Собственные функции и собственные значения физических величин

Основные формулы

• Задача на собственные функции и собственные значения оператора $\hat{A}$

$$\hat{A}\psi = A\psi. \tag{5.1}$$

• Скалярное произведение функций

$$\langle f_1|f_2\rangle = \int f_1^* f_2\, dV. \tag{5.2}$$

• Нормировка собственных функций эрмитова оператора (дискретный спектр)

$$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}. \tag{5.3}$$

• Разложение волновой функции по собственным функциям динамической переменной A (дискретный спектр)

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t)\psi_n(t), \qquad \sum_n |a_n(t)|^2 = 1. \tag{5.4}$$

• Формула для среднего значения динамической переменной A

$$\langle A \rangle^t = \sum_n A_n |a_n(t)|^2. \tag{5.5}$$

Задачи

5.1. Частица совершает одномерное движение вдоль оси x. Найти собственные функции и собственные значения оператора $\hat{p}_x$, если собственные функции удовлетворяют периодическому граничному условию $\psi(x+L) = \psi(x), L = const$.

Ответ: $\psi_n(x) = \psi_0 \exp(\frac{i}{\hbar} p_n x)$; $\quad p_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n$; $\quad n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$

5.2. Рассматривая стационарное уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$ как уравнение на собственные функции и собственные значения энергии, найти нормированные собственные функции и собственные значения энергии частицы массы m в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками $(0 < x < l)$. Считать,что собственные функции удовлетворяют граничным условиям $\psi(0) = \psi(l) = 0$.

Ответ: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n x}{l}$; $\quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2$.

5.3. Показать, что в сферической системе координат (r, ϑ, φ) оператор $\hat{L}_z$ имеет вид $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$. Найти нормированные собственные функции и собственные значения этого оператора при условии, что $\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$.

Ответ: $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$; $\quad L_z = \hbar m$; $\quad m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$

5.4. Пусть физическая величина A имеет всего два собственных значения $A_1 \neq A_2$. Соответствующие нормированные собственные функции ψ_1 и ψ_2. В некоторый момент времени t_0 частица находится в квантовом состоянии

$$\Psi(t_0) = i\sqrt{\frac{2}{3}}\psi_1 - \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_2.$$

Найти $\langle A \rangle^{t_0}$ и квантовую неопределенность $\triangle A$ в этот момент времени.

Ответ: $\langle A \rangle^{t_0} = \frac{2}{3} A_1 + \frac{1}{3} A_2$; $\quad \triangle A = \frac{\sqrt{2}}{3} |A_1 - A_2|$.

5.5. Найти собственные значения оператора $\hat{A}$, которое соответствует собственной функции $\psi_A(x)$, если

$$\hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2}, \psi_A(x) = \sin 2x; \qquad \hat{A} = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2, \psi_A(x) = \exp(-x^2/2).$$

К каким физическим задачам имеют отношение приведенные выше операторы. Какой смысл имеют в этих случаях собственные значения.

Ответ: $A = 4$; $\quad A = 1$.

5.6. Проверить, что нормированные волновые функции стационарных состояний частицы в одномерной яме с бесконечно высокими стенками $\psi_n(x)$ удовлетворяют соотношению $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$.

5.7. Волновая функция частицы в момент времени $t = 0$ имеет вид

$$\Psi(r,\vartheta,\varphi,t=0) = R(r,\vartheta)\left(-\frac{i}{\sqrt{3}}e^{i\varphi} + \frac{1}{\sqrt{3}}e^{-i\varphi} - \sqrt{\frac{2}{3}}\right).$$

Про функцию $R(r,\vartheta)$ известно лишь то, что она удовлетворяет условию

$$\int\limits_0^\infty dr \int\limits_0^\pi d\vartheta |R(r,\vartheta)|^2 r^2 \sin\vartheta\, dr d\vartheta = \frac{1}{2\pi}.$$

Вычислить среднее значение $\langle L_z\rangle$ и квантовую неопределенность $\triangle L_z$ в этом состоянии.

Ответ: $\langle L_z\rangle = 0$; $\quad \triangle L_z = \sqrt{\frac{2}{3}}\hbar$.

5.8. Доказать, что собственные функции ψ_1 и ψ_2 эрмитова оператора $\hat{A}$, принадлежащие различным собственным значениям A_1 и A_2 дискретного спектра, ортогональны.

5.9. Система находится в состоянии, описываемом нормированной волновой функцией $\psi(x)$, которую можно разложить по собственным функциям $\psi_n(x)$ оператора $\hat{A}$, т.е. $\psi(x) = \sum c_n\psi_n(x)$. Считая функции ψ_n нормированными на единицу:

а) получить выражение, определяющее коэффициенты c_n;

б) показать, что среднее значение физической величины $\langle A\rangle = \sum A_n|c_n|^2$, где A_n - собственные значения оператора $\hat{A}$. Каков физический смысл величин $|c_n|^2$?

Ответ: $c_n = \int \psi_n^*(x)\psi(x)\,dx$.

5.10. Найти собственные функции и собственные значения оператора $\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}$.

Указание: ввести новую функцию $U(x) = x\psi(x)$.

Ответ: $\psi(x) = C\cdot\frac{\sin\beta x}{x}$; $\quad \lambda = -\beta^2$, $\quad \beta$ - любое вещественное число.

5.11. Найти оператор, переводящий $\psi(x)$ в $\psi(x+a)$ и построить для него эрмитово сопряженный оператор.

Ответ: $\hat{T}_a = e^{a\frac{d}{dx}}$; $\quad \hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$.

5.12. Найти собственные функции и собственные значения оператора $\frac{d}{d\varphi}$.

Ответ: $\psi_m(\varphi) = C\cdot e^{im\varphi}$; $\quad \lambda = im$; $\quad m = 0, \pm1, \pm2, ...$

5.13. Пусть ψ_1, ψ_2, ψ_3 - ортонормированные волновые функции, являющиеся собственными функциями оператора $\hat{L}$. Пусть L_1, L_2, L_3 - собственные значения оператора $\hat{L}$ в этих состояниях. Найти:

а) среднее значение величины L в состоянии с волновой функцией

$$\psi = C\left(2\psi_1 + 3\psi_2 + \frac{1}{2}\psi_3\right),$$

б) вероятность при измерении физической величины L получить для не значения L_1, L_2, L_3.

Ответ: а)$\langle L\rangle = \frac{4}{53}(4L_1 + 9L_2 + \frac{1}{4}L_3)$; $\quad$ б)$w_1 = \frac{16}{53}, w_2 = \frac{36}{53}, w_3 = \frac{1}{53}$.

5.14*. Частица находится в некотором квантовом состоянии $\Psi(x,t)$, причем $\Psi(x,t)$ не является собственной функцией оператора $\hat{A}$. Предполагая, что оператор $\hat{A}$ не зависит явно от времени и коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$, показать, что: а) среднее значение величины A сохраняется; б) вероятности определенных значний величины A также не зависят от времени.

5.15*. Частица массы m находится в стационарном однородном внешнем поле. Показать, что ее гамильтониан можно записать в виде $\hat{H} = \hat{p}^2/2m - Fx$. Какой физический смысл имеет постоянная F? Записать в явном виде уравнение движения для среднего значения кинетической энергии частицы $\langle T \rangle$. Объяснить физический смысл полученного уравнения.

Тема 6. Стационарные состояния частицы

Основные формулы

• Частица в одномерной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n x}{l}, \qquad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ml^2}, \qquad n = 1, 2, ... \tag{6.1}$$

• Одномерный гармонический осциллятор массы m:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}; \tag{6.2}$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \qquad n = 0, 1, 2, ...; \tag{6.3}$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) H_n \left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right); \tag{6.4}$$

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2) \tag{6,5}$$

- полиномы Эрмита n- го порядка.

Задачи

6.1. Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме шириной l с потенциальной энергией $U(0) = \infty$ и $U(l) = U_0$.

а) Найти уравнение, определяющее возможные значения энергии частицы в области $E < U_0$; привести это уравнение к виду

$$\sin kl = \pm kl \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ml^2 U_0}}, \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Показать с помощью графического решения этого уравнения, что возможные значения энергии частицы образуют дискретный спектр.

б) Найти минимальное значение величины $l^2 U_0$, при котором появляется первый энергетический уровень в области $E < U_0$.

Ответ: б) $(l^2 U_0)_{min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$.

6.2. Найти возможные значения энергии частицы массы m, находящейся в сферически симметричной потенциальной яме $U(r) = 0$ при $r < r_0$ и $U(r_0) = \infty$ для случая, когда движение частицы описывается волновой функцией $\psi(r)$, зависящей только от радиуса r.

Указание: при решении уравнения Шредингера воспользоваться подстановкой $\psi(r) = \chi(r)/r$.

Ответ: $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mr_0^2}$.

6.3. В условии предыдушей задачи найти нормированные волновые функции частицы в состояниях, где $\psi(r)$ зависит только от r. Для первого возбужденного состояния найти наиболее вероятное значение r_B, а также вероятность нахождения частицы в обдасти $r < r_B$.

Ответ: $\psi_n(r)\frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \cdot \frac{\sin(\pi nr/r_0)}{r}$; $\qquad n = 1, 2, 3, ...$

Для $n = 2$: $r_B = r_0/2, w_2 = 1/2$.

6.4. Частица массы m находится в трехмерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Длины ребер ямы равны a, b, c. Найти возможные значения энергии частицы.

Ответ: $E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right)$.

6.5. Осциллятор находится в стационарном состоянии с $n = 1$. Изобразить примерный вид $\psi_1(x)$ и плотности вероятности $|\psi_1(x)|^2$. В каких точках плотность вероятности максимальна?

Ответ: $x = \pm\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

6.6. Частица массы m находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Найти возможные значения энергии и нормированные волновые функции стационарных состояний, если стороны ямы равны l_1 и l_2. Оценить значение энергии основного состояния с помощью соотношений неопределенностей Гейзенберга и сравнить полученный результат с точным выражением.

Ответ: $E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2}\right)$,

$\psi_{n_1,n_2}(x,y) = \frac{2}{\sqrt{l_1 l_2}}\sin\left(\frac{\pi n_1 x}{l_1}\right)\sin\left(\frac{\pi n_2 y}{l_2}\right)$, $\qquad n_1, n_2 = 1, 2, ...$

6.7. Частица массы m находится в кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Найти разность энергий 3-го и 4-го уровней, если длина ребра ямы равна l. Найти число различных квантовых состояний, соответствующих 6-му уровню энергии.

Ответ: $E_4 - E_3 = \frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2}$, $\qquad$ 6.

6.8. Осциллятор находится в стационарном состоянии с $n = 2$. Изобразить примерный вид $\psi_2(x)$ и плотности вероятности $|\psi_2(x)|^2$. В каких точках плотность вероятности максимальна?

Ответ: $x = 0; \pm\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$.

6.9. Волновая функция частицы массы m для основного состояния в одномерном потенциальном поле $U(x) = kx^2/2$ имеет вид $\psi(x) = A\exp(-ax^2)$, где A и a - некоторые постоянные. Найти с помощью уравнения Шредингера постоянную a и энергию E частицы в этом состоянии.

Ответ: $a = \frac{m}{2\hbar}\sqrt{\frac{k}{m}}$; $\qquad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

6.10. Частица находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками $(0 < x < a, 0 < y < b)$. Определить вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области $0 < x < a/3$.

Ответ: $w = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi}$.

6.11. Воспользовавшись условием и решением задачи 6.4, найти число состояний частицы в интервале энергий $(E, E + dE)$, если уровни расположены весьма густо.

Ответ: $dN = \frac{abcm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}\,dE$.

6.12. Частица находится в основном состоянии в одномерной потенциальной яме ширины l с бесконечно высокими стенками $(0 < x < l)$. Найти вероятность обнаружить частицу в области $l/3 < x < 2l/3$.

Ответ: $w = \frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi}$.

6.13. Нормированные на единицу волновые функции $\Psi_1(\vec{r}, t)$ и $\Psi_2(\vec{r}, t)$ описывают стационарные состояния частицы со значениями энергии E_1 и E_2, причем $E_1 \neq E_2$. Найти среднее значение энергии частицы $\langle E \rangle$ и квантовую неопределенность энергии $\triangle E$ в нестационарном состоянии с волновой функцией $\Psi(\vec{r}, t) = (1/\sqrt{3})\Psi_1(\vec{r}, t) + (\sqrt{2/3})\Psi_2(\vec{r}, t)$.

Ответ: $\langle E \rangle = \frac{1}{3}E_1 + \frac{2}{3}E_2$; $\quad \triangle E = \frac{\sqrt{2}}{3}|E_1 - E_2|$.

6.14. Частица массы m находится в основном состоянии в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы l. Вычислить среднее значение проекции импульса $\langle p_x \rangle$ в этом состоянии и квантовую неопределенность импульса $\triangle p_x$.

Ответ: $\langle p_x \rangle = 0$; $\quad \triangle p_x = \frac{\pi\hbar}{l}$.

6.15. Для условия предыдущей задачи вычислить среднее значение координаты $\langle x \rangle$ в этом состоянии и квантовую неопределенность координаты $\triangle x$.

Ответ: $\langle x \rangle = \frac{l}{2}$; $\quad \triangle x = \sqrt{\frac{l^2}{12}\left(1 - \frac{3}{2\pi^2}\right)}$.

6.16. Волновая функция электрона в основном состоянии атома водорода имеет вид $\psi(r) = A\exp(-r/2r_1)$, где A - нормировочная постоянная, r_1 - боровский радиус. Найти нормировочную постоянную A; вычислить среднее значение кулоновской силы, действующей на электрон в этом состоянии и среднее значение потенциальной энергии электрона в поле ядра.

Ответ: $A = \sqrt{\frac{1}{2r_1^3}}$; $\quad \langle F \rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{r_1^2}$; $\quad \langle U \rangle = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r_1}$.

6.17. Частица в момент времени $t = 0$ находится в состоянии, которое описывается нормированной на единицу волновой функцией $\psi(x) = A\exp(-x^2/2a^2 + ikx)$, где a и k - заданные постоянные. Найти значение A, а также вычислить средние значения $\langle x \rangle$ и $\langle p_x \rangle$.

Ответ: $A^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}$; $\quad \langle x \rangle = 0$; $\quad \langle p_x \rangle = \hbar k$.

6.18*. Частица массы m движется в сферически симметричной потенциальной яме. Найти:

а) энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний в потенциальной яме бесконечной глубины

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

Ответ: $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma}$; $\quad \psi_n(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{\sin kr}{r}$; $\quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; n = 1, 2, 3, ...$

б) энергетические уровни и волновые функции стационарных состояний в потенциальной яме конечной глубины:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ U_0, & r > a, \end{cases}$$

где $U_0 > 0$. Ограничиться случаем стационарных состояний, в которых волновая функция зависит только от радиальной переменной r.

Указание: Использовать подстановку $\psi(r) = \chi(r)/r$ и исследовать графически полученные уравнения.

6.19*. Частица массы m движется в трехмерном потенциальном поле

$$U(x,y,z) = \frac{k}{2}(x^2+y^2+z^2), \qquad k = const.$$

- Найти собственные значения энергии частицы и волновые функции стационарных состояний (используя декартову систему координат). Найти кратность вырождения n-го энергетического уровня.

Ответ: $E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega(n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2})$; $\qquad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, ...; k = m\omega^2$;

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x,y,z) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \left(2^{n_1+n_2+n_3} n_1! n_2! n_3!\right)^{-1/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2+z^2)} \times$$

$$\times H_{n_1}\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) H_{n_2}\left(y\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) H_{n_3}\left(z\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right); \qquad N = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

- Проверить, что в данном случае $\hat{L}^2$ и $\hat{L}_z$ коммутируют с гамильтонианом частицы.

- Записать стационарное уравнение Шредингера в сферической системе координат. Найти значения энергии и волновые функции стационарных состояний частицы, в которых волновая функция зависит только от радиальной переменной r.

6.20*. Найти уровни энергии и волновые функции одномерного гармонического ослиллятора массы m и заряда e, помещенного в постоянное электрическое поле $\vec{\mathcal{E}}$, направленное вдоль оси колебаний.

Указание: Провести замену переменной $z = x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2}$.

Ответ: $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}\frac{e^2\mathcal{E}^2}{m\omega^2}$; $\qquad \psi_n(z) = \psi_n(x - \frac{e\mathcal{E}}{m\omega^2})$ - известные собственные функции гармонического осциллятора.

6.21*. Найти энергетический спектр и нормированные волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора в импульсном представлении, исходя из решения уравнения Шредингера в этом представлении.

Ответ: $\Phi_n(p) = \frac{\exp[-p^2/2m\omega\hbar]}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi m\omega\hbar}}} H_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right)$; $\qquad E_n = \hbar\omega(n+1/2)$; $\qquad n = 0, 1, 2, ...$

Тема 7. Движение частиц через потенциальный барьер

Основные формулы

• Вектор плотности тока вероятности

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right). \tag{7.1}$$

• Коэффициент прохождения (прозрачности)

$$D = \left|\frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}}\right|. \tag{7.2}$$

• Коэффициент отражения

$$R = \left|\frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}}\right|. \tag{7.3}$$

• Связь между коэффициентами прохождения и отражения

$$D + R = 1. \tag{7.4}$$

• Прохождение частиц через потенциальную стенку высотой $U_0 : U(x) = 0$ при $x < 0$ и $U(x) = U_0$ при $x \geq 0$.

а) Случай $E > U_0$: коэффициент прохождения $D = \frac{4kk'}{(k+k')^2}$; коэффициент отражения $R = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2$, где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k' = \sqrt{2m(E-U_0)}/\hbar$.

б) Случай $E < U_0$: коэффициент прохождения $D = 0$, волновая функция частицы в области $x > 0$:

$$\psi(x) = -\frac{2ik}{\beta - ik} A_1 \exp(-\beta x),$$

где A_1 - амплитуда волновой функции частиц, движущихся к стенке, $\beta = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$.

• Коэффициент прозрачности барьера произвольной формы $U(x)$ в квазиклассическом приближении:

$$D \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int\limits_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[U(x)-E]}\,dx\right\}, \qquad U(x_1) = U(x_2) = E. \tag{7.5}$$

Задачи

7.1. Стационарный поток электронов с энергией E падает слева на прямоугольную потенциальную стенку высотой U_0, причем $U_0 - E = 1,0$ эВ. Найти эффективную глубину проникновения $x_{\text{эфф}}$ электронов за стенку, т.е. расстояние от границы стенки до точки, в которой плотность вероятности $w(x)$ нахождения электронов уменьшается в e раз. Показать, что при $E < U_0$ коэффициент отражения R барьера равен единице.

Ответ: $x_{\text{эфф}} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0-E)}} = 0,1$нм.

7.2. Стационарный поток частиц массой m с энергией E падает на абсолютно непроницаемую стенку: $U(x) = 0$ при $x > 0$ и $U(x) = \infty$ при $x \leq 0$. Найти распределение плотности вероятности нахождения частиц $w(x)$ и координаты точек, где $w(x) = max$.

Ответ: $w(x) = 4A^2 \sin^2 kx$; $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$; $x_n = \frac{\pi\hbar n}{\sqrt{8mE}}$; $n = 1, 3, 5, \ldots.$

7.3. Стационарный поток частиц массой m падает на прямоугольную потенциальную яму шириной l и глубиной U_0: $U(x) = 0$ при $x < 0$ и $x > l$, $U(x) = -U_0$ при $0 \leq x \leq l$. Энергия частиц $E > 0$. Найти: а) коэффициент прозрачности ямы D в зависимости от энергии частиц; б) значение D для электронов при $E = U_0 = 1,0$ эВ.

Ответ: $D = \left(1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 l}{4E(E+U_0)}\right)^{-1}$; $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar}$; $D \approx 0,95$.

7.4. Найти вероятность прохождения частицы массы m с энергией E сквозь потенциальный барьер $U(x) = U_0\left(1 - \frac{x^2}{l^2}\right)$.

Ответ: $D = \exp\{-\frac{\pi l}{\hbar}(U_0 - E)\sqrt{\frac{2m}{U_0}}\}$.

7.5. Стационарный поток частиц массой m с энергией E падает на прямоугольную стенку высотой U_0: $U(x) = 0$ при $x < 0$ и $U(x) = U_0$ при $x \geq 0$, причем $E > U_0$. Вывести выражения для R и D. Убедиться, что значения этих коэффициентов не зависят от направления движения падающих частиц (слева направо или справа налево).

Ответ: $R = \frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$; $\qquad D = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$; $\qquad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$.

7.6. Исходя из условия предыдущей задачи, найти распределение плотности вероятности $w(x)$ нахождения частицы для случая $E = 4U_0/3$. Изобразить примерный график зависимости $w(x)$.

Ответ: $w_1(x) = \frac{16}{9}A_1^2\left(1 - \frac{3}{4}\sin^2 k_1 x\right)$; $\qquad w_2(x) = \frac{16}{9}A_1^2$.

7.7. Частица массы m движется слева направо в потенциальном поле, которое в точке $x = 0$ испытывает скачок U_0: $U(x) = 0$ при $x < 0$ и $U(x) = -U_0$ при $x \geq 0$. Энергия частицы $E > 0$. Найти коэффициент отражения R для случаев: а) $E \ll U_0$; б) $E \gg U_0$.

Ответ: а) $R \approx 1 - 4\sqrt{E/U_0}$; $\qquad$ б)$R \approx (U_0/E)^2/16$.

7.8. Найти в квазиклассическом приближении коэффициент прозрачности D барьенра $U(x)$: $U(x) = 0$ при $x < 0$ и $x > l$, и $U(x) = U_0\left(1 - \frac{x}{l}\right)$ при $0 < x < l$. Масса частицы m, энергия $E < U_0$. Вычислить D для электронов, если $l = 1,0$ нм, $U_0 = 1,0$ эВ, $E = U_0/2$.

Ответ: $D = \exp\{-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar}\frac{l}{U_0}(U_0 - E)^{3/2}\}$.

7.9. То же, что и в предыдущей задаче, но потенциальный барьер имеет вид $U(x) = U_0\left(1 - \frac{x^2}{l^2}\right)$.

Ответ: $D = \exp\{-\frac{\pi l}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{U_0}}(U_0 - E)\}$.

7.10. Поток частиц массы m проходит через потенциальную стенку. Энергия частиц E превышает высоту стенки U_0, т.е. $E > U_0$. Вывести выражения для коэффициента отражения R и коэффициента прохождения частиц D:

$$R = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2, \qquad D = \frac{4kk'}{(k + k')^2},$$

где

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}, \qquad k' = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - U_0)}.$$

Проверить, что $R + D = 1$.

7.11. Напряженность электрического поля у поверхности катода равна $\mathcal{E}$. В квазиклассическом приближении вывести формулу для коэффициента прохождения электронами потенциального барьера на поверхности катода:

$$D = \exp\left\{-\frac{4\sqrt{2m}W^{3/2}}{3e\hbar\mathcal{E}}\right\},$$

где W - работа выхода электрона из металла, m, e - масса электрона и его заряд.

Указание: Вывести выражение для потенциальной энергии барьера $U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x$.

7.12*. Считая, что постоянная α - распада λ и коэффициент прозрачности барьера D связаны соотношением $\lambda = nD$, вычислить λ, если модель потенциала задается следующим образом: $U = -U_0$ при $r < r_0$, а при $r \geq r_0$

α - частица взаимодействует с ядром, заряд которого Ze, по закону Кулона. Принять, что $r_0 \ll 2Ze^2/E$.

Ответ: $\lambda = nD_0 \exp\{-\frac{4}{\hbar}\left(\frac{\pi Zq^2}{v_\infty} + \sqrt{2mZq^2 r_0}\right)\}$; $\quad v_\infty = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ - скорость вылетевшей α-частицы, измеряемая вдали от ядра, где $V = 0$.

7.13*. Показать, что для барьера произвольной формы автоматически выполняется соотношение

$$R(E) + D(E) = 1.$$

где R - коэффициент отражения, D - коэффициент прохождения частиц.

7.14*. Частица массы m находится во внешнем поле с потенциальной энергией $U(x)$ (одномерное движение), включающей бесконечно высокий барьер при $x < 0$, а при положительных x имеющей форму

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & 0 < x < a, \\ U_2, & a < x < b, \\ 0, & x > b. \end{cases}$$

Предполагается, что $U_1 < 0 < U_2$. Вычислить коэффициент отражения от барьера для пучка частиц с энергией E. Рассмотреть два случая: а) $0 < E < U_2$; б) $E > U_2$.

Тема 8. Момент импульса микрочастиц

Основные формулы

• Операторы $\hat{\vec{L}}^2$ и $\hat{L}_z$ в сферической системе координат

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2 \triangle_{\vartheta\varphi}, \qquad \hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi, \tag{8.1}$$

где угловая часть оператора Лапласа

$$\triangle_{\vartheta\varphi} = \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{8.2}$$

• Собственные функции и собственные значения оператора $\hat{L}_z$

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \qquad L_z = \hbar m, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{8.3}$$

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi)\psi_n(\varphi)\, d\varphi = \delta_{mn}. \tag{8.4}$$

• Собственные функции и собственные значения оператора $\hat{\vec{L}}^2$

$$\psi_{lm}(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \tag{8.5}$$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \qquad l = 0, 1, 2, ..., \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l. \tag{8.6}$$

• Сферические функции и условие их ортонормировки

$$Y_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{(l+|m|)!4\pi}}P_l^{|m|}(\cos\vartheta)e^{im\varphi}, \tag{8.7}$$

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{l'm'}(\vartheta,\varphi)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\sin\vartheta\, d\vartheta d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \qquad (8.8)$$

• Присоединенные полиномы Лежандра

$$P_l^{|m|}(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}}P_l(\xi), \qquad P_l^{|m|}(\xi) = 0 \qquad \text{при} \qquad |m| > l. \quad (8.9)$$

• Полиномы Лежандра

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{d\xi^l}(\xi^2-1)^l. \qquad (8.10)$$

• Несколько первых сферических функций

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \qquad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta; \qquad Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta e^{\pm i\varphi};$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta - 1); \qquad Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\vartheta\sin\vartheta e^{\pm i\varphi};$$

$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta e^{\pm 2i\varphi}. \qquad (8.11)$$

Задачи

8.1. Непосредственным вычислением определить собственное значение оператора $\hat{\vec{L}}^2$, соответствующее собственной функции $\psi(\vartheta,\varphi) = A\sin\vartheta\cos\varphi$. Является ли эта функция собственной функцией оператора $\hat{L}_z$?

Ответ: $L^2 = 2\hbar^2$.

8.2. Найти возможные собственные значения оператора $\hat{L}_z$ и их вероятности для частицы, находящейся в состоянии $\psi(\vartheta,\varphi) = A(\vartheta)\sin^2\varphi$.

Ответ: $L_{z0} = 0, w_0 = 2/3$; $\quad L_{z,2} = 2\hbar, w_2 = 1/6$; $\quad L_{z,-2} = -2\hbar, w_{-2} = 1/6$.

8.3. Вычислить среднее значение квадрата момента импульса частицы в состоянии с волновой функцией $\psi(\vartheta,\varphi) = A\sin^2\vartheta\exp(2i\varphi)$.

Ответ: $\langle L^2\rangle = 6\hbar^2$.

8.4. В теории момента импульса часто используются операторы $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$. Найти коммутаторы $[\hat{L}_\pm, \hat{L}_z]$ и $[\hat{L}_+, \hat{L}_-]$. Используя выражения для этих коммутаторов, показать, что $\hat{L}_\pm\psi_{lm} = const\cdot\psi_{l,m\pm1}$.

Ответ: $[\hat{L}_\pm, \hat{L}_z] = \mp\hbar\hat{L}_\pm$; $\quad [\hat{l}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z$.

8.5. Непосредственным вычислением получить явный вид операторов $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z, \hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_+, \hat{L}_-$ в сферической системе координат.

Ответ: $\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \operatorname{ctg}\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$;

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \operatorname{ctg}\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right); \qquad \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi};$$

$$\hat{L}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\operatorname{ctg}\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

8.6. Найти возможные значения L_z и их вероятности в состоянии с волновой функцией $\psi(\vartheta,\varphi) = A\sin\vartheta\cos\varphi$. Вычислить средние значения $\langle L^2\rangle$ и $\langle L_z\rangle$ в этом состоянии.

8.7. Частица находится в квантовом состоянии с волновой функцией

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = A\frac{e^{-r/a}}{r}(Y_{0,0}(\vartheta,\varphi) - Y_{1,1}(\vartheta,\varphi)),$$

где a - заданная величина. Найти нормировочную постоянную A. Чему равны средние значения $\langle L^2\rangle$ и $\langle L_z\rangle$ в этом состоянии?

Ответ: $A = 1/\sqrt{a}$; $\langle L_z\rangle = \hbar/2$; $\langle L^2\rangle = \hbar^2$.

8.8. Вычислить возможные собственные значения оператора $\hat{L}_z$ и их вероятности для системы, находящейся в состоянии $\psi(\varphi) = A(1+\sin\varphi)$.

Ответ: $L_{z,0} = 0, w_0 = 2/3$; $L_{z,1} = \hbar, w_1 = 1/6$; $L_{z,-1} = -\hbar, w_{-1} = 1/6$.

8.9. Возможные значения проекции момента импульса на произвольную ось равны $m\hbar$, где $m = l, l-1, ..., -l$. Имея в виду, что эти проекции равновероятны и оси равноправны, показать, что в состоянии с определенным значением l среднее значение квалрата момента импульса $\langle L^2\rangle = \hbar^2 l(l+1)$.

8.10. Частица движется в центральном силовом поле с потенциальной энергией $U(r)$. Доказать, чтооператор квадрата момента импульса $\hat{\vec{L}}^2$ и оператор $\hat{L}_z$ коммутируют с гамильтонианом частицы. Какие отсюда следуют выводы относительно стационарных состояний частицы?

8.11. Нормируемая на единицу волновая функция частицы в сферических координатах имеет вид $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)Y(\vartheta,\varphi)$, где $R(r)$ - некоторая функция. Отнормировать волновую функцию и вычислить средние значения $\langle L^2\rangle$, $\langle L_z\rangle$ в этом состоянии и квантовую неопределенность $\triangle L_z$, если:

а) $Y(\vartheta,\varphi) = \sin\vartheta\cos\varphi$;
б) $Y(\vartheta,\varphi) = \sin\vartheta\cdot e^{i\varphi}$;
в) $Y(\vartheta,\varphi) = (1-3\cos^2\vartheta)\sin\varphi$;
г) $Y(\vartheta,\varphi) = \sin\vartheta\cos\vartheta\cdot e^{-i\varphi}$;
д) $Y(\vartheta,\varphi) = \sin^2\vartheta\cdot e^{-2i\varphi}$;
е) $Y(\vartheta,\varphi) = \sin\vartheta\sin\varphi$.

8.12*. В состоянии частицы, которое характеризуется угловой зависимостью волновой функции вида $\psi = A\cos^n\varphi$, где φ - угол поворота относительно некоторой оси z, n - целое число, найти вероятности различных значений $\hbar m$ проекции момента импульса на ось z.

Ответ: $w(m) = \frac{n!}{2^n(2n-1)!!}\left[C_n^{\frac{n-m}{2}}\right]^2$; $m = n, n-2, ..., -n$.

8.13*. Представить оператор момента импульса системы из двух частиц массами m_1 и m_2 в виде двух слагаемых, описывающих момент импульса частиц в системе центра масс (момент относительного движения) и момент центра масс системы.

Ответ: $\hat{\vec{L}} = -i\left[\vec{r}\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\right] - i\left[\vec{R}\frac{\partial}{\partial\vec{R}}\right], \vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2}$.

Тема 9. Водородоподобный атом

Основные формулы

• Потенциальная энергия электрона в поле ядра с зарядом Ze

$$U(r) = -\frac{Zq_e^2}{r}, \qquad q_e^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}. \tag{9.1}$$

• Стационарное уравнение Шредингера для водородоподобного атома и вид волновых функций

$$\left(\hat{K}_r + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2 + U(r)\right)\psi = E_n\psi, \qquad \hat{K}_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right), \tag{9.2}$$

$$\psi = \psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi), \tag{9.3}$$

$$n = 1,2,...; \qquad l = 0,1,2,...,(n-1); \qquad m = 0,\pm 1,\pm 2,...,\pm l, \tag{9.4}$$

где $\hat{K}_r$ - оператор кинетической энергии радиального движения, n - главное квантовое число, l - орбитальное (азимутальное) квантовое число, m - магнитное квантовое число. (Сферические функции Y_{lm} приведены в предыдущей теме.)

• Радиальная часть волновой функции и условие ее нормировки

$$R_{nl} = C_{nl}e^{-\frac{Zr}{nr_B}}\left(\frac{2Zr}{nr_B}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{nr_B}\right), \qquad \int\limits_0^\infty R_{nl}^2(r)r^2\,dr = 1, \tag{9.5}$$

где $r_B = \frac{\hbar^2}{mq_e^2} = 0,529\cdot 10^{-10}$ м - боровский радиус.

• Полиномы Лагерра

$$L_k^s(x) = \frac{d^s}{dx^s}\left(e^x\frac{d^k}{dx^k}\left(e^{-x}x^k\right)\right). \tag{9.6}$$

• Спектр энергии водородоподобного атома

$$E_n = -\frac{mZ^2q_e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \tag{9.7}$$

• Явный вид первых радиальных волновых функций

$$R_{10} = -2\left(\frac{Z}{r_B}\right)^{3/2}e^{-\frac{Zr}{r_B}}, \qquad R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{r_B}\right)^{3/2}e^{-\frac{Zr}{2r_B}}\left(1-\frac{Zr}{2r_B}\right),$$

$$R_{21} = -\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{r_B}\right)^{5/2}re^{-\frac{Zr}{2r_B}}. \tag{9.8}$$

• Специальные обозначения для состояний с различными значениями l

$$\begin{array}{ccccccccc} l: & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ & s & p & d & f & g & h & i & k \end{array} \tag{9.9}$$

Задачи

9.1. Частица массы m находится в центрально-симметричном потенциальном поле $U(r)$. Вывести стационарное уравнение Шредингера для угловой и радиальной частей волновой функции $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)Y(\vartheta,\varphi)$. Найти зависимость волновой функции от азимутального угла φ.

Ответ: $\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - U - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)R = 0;$

$$-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)Y(\vartheta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)Y(\vartheta,\varphi);$$

$$Y(\vartheta,\varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi); \qquad \Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}; \qquad m = 0, \pm1, \pm2, ...$$

9.2. Используя подстановку $R(r) = \chi(r)/r$ в уравнении для радиальной волновой функции электрона в атоме водорода, показать, что при малых значениях r волновая функция ведет себя как $R(r) = const \cdot r^l$, где l - орбитальное квантовое число.

9.3. Для основного состояния атома водорода $1s$ найти: а) среднее расстояние электрона до ядра атома $\langle r\rangle$; б) среднее значение кинетической энергии электрона; в) наиболее вероятное расстояние электрона до ядра.

Ответ: $\langle r\rangle = \frac{3}{2}r_B;\qquad \langle W_K\rangle = \frac{me^4}{2\hbar^2};\qquad r_{\text{вер}} = r_B$.

9.4. Используя условие предыдущей задачи, найти: а) среднее значение потенциальной энергии электрона; б) среднее значение кулоновской силы, действующей на электрон; в) вероятность нахождения электрона в области $0 < r < r_{\text{вер}}$.

Ответ: $\langle U\rangle = -\frac{me^4}{\hbar^2};\qquad \langle F\rangle = \frac{2e^2}{r_B^2};\qquad W_{[0,r_{\text{вер}}]} = 1 - 5e^{-2} \simeq 0,323.$

9.5. Предполагая, что в состоянии $2p$ радиальная часть волновой функции электрона в ионе He^+ имеет вид $R_{21} = Are^{-r/2r_1}$, где r_1 - боровский радиус для He^+, вычислить постоянную A.

Ответ: $A = (2\sqrt{6}r_1^{5/2})^{-1}$.

9.6. Изобразить примерный вид плотности вероятности $\rho(r)$ для состояния $2s$ водородоподобного атома.

9.7. Для состояния $2p$ атома водорода найти наиболее вероятное расстояние электрона до ядра.

Ответ: $r_{\text{вер}} = 4r_1$.

9.8. Частица находится в центрально-симметричном потенциальном поле в состоянии $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$. Каков физический смысл функции $|Y_{lm}|^2$? Вычислить нормировочные коэффициенты функций: а) Y_{10}; б) Y_{21}.

Ответ: а)$\sqrt{\frac{3}{4\pi}}$; б)$-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}$.

9.9. Привести уравнение, определяющее радиальную часть волновой функции электрона в кулоновском поле ядра Z, к безразмерному виду. В качестве единиц измерения взять атомную единицу длины (первый боровский радиус) и атомную единицу энергии (энергию связи электрона в атоме водорода).

Ответ: $\frac{\partial^2R}{\partial\varrho^2} + \frac{2}{\varrho}\frac{\partial R}{\partial\varrho} + \left(\varepsilon + \frac{2Z}{\varrho} - \frac{l(l+1)}{\varrho^2}\right)R = 0;\qquad \varrho = \frac{r}{r_1};\qquad \varepsilon = \frac{E}{E_1}.$

9.10. Электрон в атоме водорода находится в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi = A(1 + ar)\exp(\alpha r)$, где A, a, α - постоянные. Найти:

а) постоянные a, α и энергию E электрона (с помощью уравнения Шредингера); б) нормировочный коэффициетн A.

Ответ: а)$a = \alpha = -\frac{me^2}{2\hbar^2} = -\frac{1}{2r_1}; E = -\frac{me^4}{8\hbar^2}$; б)$A = (8\pi r_1^3)^{-1/2}$.

9.11. Используя подстановку $R(r) = \chi(r)/r$ в уравнении для радиальной волновой функции электрона в атоме водорода, показать, что при больших значениях r волновая функция ведет себя как $R(r) = A(1/r)\exp(-\kappa r)$, где $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$.

9.12*. Найти средний электростатический потенциал, создаваемый $2s$ - электроном в центре атома водорода.

9.13*. Определить средний электростатический потенциал на расстоянии r от ядра атома водорода, находящегося в основном состоянии.

9.14*. Частица массы m находится в сферически-симметричной потенциальной яме, где $U(r) = 0$ при $r < r_0$ и $U = \infty$ при $r = r_0$, где r_0 - радиус ямы. Найти: а) возможные значения энергии и нормированные собственные функции частицы в s - состояниях, где ψ - функция зависит только от r. При решении уравнения Шредингера воспользоваться подстановкой $\psi = \chi/r$; б) наиболее вероятное значение $r_{\text{вер}}$ и вероятность w нахождения частицы в области $r < r_{\text{вер}}$ в основном состоянии; в) значения $\langle r \rangle$, $\langle r^2 \rangle$ и среднего квадратичного отклонения $\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle$ для частицы, находящейся на n - ом s - уровне.

Ответ:а) $E_{ns} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mr_0^2}n^2; \psi_s(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}}\frac{\sin kr}{r}$; б)$r_{\text{вер}} = \frac{r_0}{2}; w = \frac{1}{2}$.

9.15*. Частица массы m находится в сферически-симметричной потенциальной яме, где $U(r) = 0$ при $r < r_0$ и $U = \infty$ при $r = r_0$, где r_0 - радиус ямы. Найти: а) радиальную часть ψ - функции, $R_1(r)$, описывающей p - состояние частицы; б) энергию первого p - уровня и сравнить ее с энергией основного состояния частицы.

Тема 10. Теория возмущений

Основные формулы

• Постановка задачи

$$\hat{H}\psi = E\psi, \qquad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \tag{10.1}$$

где $\hat{V}$ - оператор возмущения. Решение невозмущенной задачи

$$\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} \tag{10.2}$$

считается известным.

• Поправки к уровням энергии и волновым функциям в отсутствии вырождения

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*}\hat{V}\psi_n^{(0)}\,dV, \qquad E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}\frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \tag{10.3}$$

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n}\frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)}. \tag{10.4}$$

• Секулярное уравнение и "правильные" волновые функции ψ_k для вырожденного уровня энергии $E^{(0)}$

$$|H_{\alpha\alpha'} - E\delta_{\alpha\alpha'}| = 0, \qquad \psi_k = \sum_{\alpha=1}^{s} a_{k\alpha}\psi_\alpha^{(0)}, \tag{10.5}$$

где s - кратность вырождения. Для каждого корня E_k секулярного уравнения коэффициенты $a_{k\alpha}$ находятся из уравнений

$$\sum_{\alpha'=1}^{s} (H_{\alpha\alpha'} - E_k\delta_{\alpha\alpha'})a_{k\alpha'} = 0, \qquad (\alpha = 1, 2, ..., s). \tag{10.6}$$

Задачи

10.1. Частица массы m находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a на третьем энергетическом уровне. На нее наложено возмущение $V(x) = \alpha x^2 + \beta$, где α, β - постоянные. Найти первую поправку по теории возмущений к энергии частицы. Указать условия применимости полученного результата.

Ответ: $\triangle E_n^{(1)} = \frac{2}{a}\left[\alpha\left(\frac{a^3}{6} - \frac{a^3}{(2\pi n)^2}\right) + \beta\frac{a}{2}\right]; \triangle E_3^{(1)} = \frac{\alpha a^2}{3}\left(1 - \frac{1}{6\pi^2}\right) + \beta;$

$$|\triangle E_3^{(2)}| \ll |\triangle E_3^{(1)}|; \qquad |\alpha| \ll \frac{125}{96}\frac{\pi^4\hbar^2}{ma^4}.$$

10.2. Заряженный одномерный осциллятор с частотой ω и зарядом q, первоначально находившийся в основном состоянии, помещен в однородное электрическое поле с напряженностью $\mathcal{E}$ (возмущение $V(x) = -q\mathcal{E}x$). Найти первую и вторую поправки к энергии осциллятора, а также первую поправку к волновой функции. Указание: при использовании теории возмущений учесть вклад лишь первого возбужденного состояния.

Ответ: $V_{00} = 0; \qquad |V_{01}|^2 = q^2\mathcal{E}^2\frac{\hbar}{2m\omega}; \qquad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2};$

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\left[1 + \frac{q\mathcal{E}}{\hbar\omega}x\right].$$

10.3. Уровень энергии $E^{(0)}$ двукратно вырожден. Задан оператор возмущения $\hat{V}$. Взаимно ортогональные и нормированные волновые функции нулевого приближения $\psi_1^{(0)}$ и $\psi_2^{(0)}$. Показать, что "расщепленные" уровни энергии даются форiулами

$$E_{1,2} = E^{(0)} + \frac{1}{2}\left[(V_{11} + V_{22}) \pm \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}\right].$$

10.4. Частица массы m находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a в основном состоянии. На нее наложено возмущение $V(x) = \epsilon\cos(\pi x/a)$, где ϵ - постоянная. Найти первую поправку по теории возмущений к энергии частицы и к волновой функции. Указать условие применимости полученного результата.

Ответ: $\triangle E_1^{(1)} = 0; \qquad |\triangle E_1^{(2)}| \ll |\triangle E_1^{(1)}|; \qquad |\epsilon| \ll \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2};$

$$\triangle\psi_1^{(1)} = \frac{\epsilon ma^2}{3\pi^2\hbar^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}.$$

10.5. Заряженный одномерный осциллятор (см. задачу 2) первоначально находился в первом возбужденном состоянии ($n = 1$)

$$\psi_1^{(0)}(x) = 2\left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}x_0}\right)^{1/2}\frac{x}{x_0}e^{-x^2/2x_0^2}, \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Найти первую и вторую поправки к энергии осциллятора в однородном электрическом поле с напряженностью $\mathcal{E}$.

Указание: при использовании теории возмущений пренебречь вкладом всех возбужденных состояний с $n \geq 2$.

Ответ: $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}$; $\qquad \psi_1 = (2x_0\sqrt{\pi})^{-1/2}\left[\frac{2x}{x_0} - \frac{q\mathcal{E}}{\hbar\omega}x_0\right]e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$.

10.6. Уровень энергии частицы двукратно вырожден (см. задачу 3). Для случая $V_{11} = V_{22} = 0$ показать, что нормированные "правильные" волновые функции имеют вид

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1^{(0)} + \frac{V_{21}}{|V_{21}|}\psi_2^{(0)}\right), \qquad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1^{(0)} - \frac{V_{21}}{|V_{21}|}\psi_2^{(0)}\right).$$

Указание: учесть, что $V_{12} = V_{21}^*$.

10.7. Найти первую поправку к энергии n -го стационарного состояния гармонического осциллятора массы m и частоты ω под влиянием возмущения $V(x)$: а) $V(x) = \alpha x^2 + \beta$; б) $V(x) = \gamma x^3$; в) $V(x) = \epsilon x^4$.

Ответ: а)$\triangle E_n^{(1)} = \frac{\alpha\hbar}{m\omega}(n + \frac{1}{2}) + \beta$; б)$\triangle E_n^{(1)} = 0$; в)$\triangle E_n^{(1)} = \epsilon\frac{3}{2}(\frac{\hbar}{m\omega})^2(n^2 + n + \frac{1}{2})$.

10.8. Определить поправку 2-го приближения $\psi_n^{(2)}$ к собственным функциям.

Отьвет:

$$\sum_k{}' \sum_l{}' \frac{V_{ln}V_{kl}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})}\psi_k^{(0)} - \sum_k{}' \frac{V_{nn}V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}\psi_k^{(0)} - \psi_n^{(0)}\sum_k{}' \frac{|V_{nk}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2}.$$

10.9. Определить поправку 3-го приближения к собственным значениям энергии.

Ответ: $\triangle E_n^{(3)} = \sum_k' \sum_l' \frac{V_{nl}V_{lk}V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} - V_{nn}\sum_l' \frac{|V_{nl}|^2}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})^2}$.

10.10. Уровень энергии E^0 для невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0$ трехкратно вырожден и $\psi_1^{(0)}$, $\psi_2^{(0)}$, $\psi_3^{(0)}$ - взаимно ортогональные и нормированные на 1 собственные функции $\hat{H}_0$, которые соответствуют этому уровню. Матричные элементы оператора возмущений $\hat{V}$:

$$V_{ij} = \left\langle \psi_i^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| \psi_j^{(0)} \right\rangle, \qquad i, j = 1, 2, 3$$

считать известными, причем все матричные элементы с $i \neq j$ равны нулю. Вывести из секулярного уравнения выражения для "расщепленных" уровней энергии.

10.11*. Рассчитать расщепление второго квантового уровня ($n = 2$) атома водорода при наложении внешнего электрического поля.

10.12*. Невозмущенная система имеет два близких уровня энергии, расстояние между которыми сравнимо с матричными элементами возмущающей энергии между этими состояниями. Найти поправку к энергии в первом приближении.

10.13*. Найти волновые функции стационарных состояний и уровни энергии плоского ротатора с моментом инерции I. Какова кратность вырождения уровней?

10.14*. Найти расщепление первого возбужденного уровня энергии плоского осциллятора (плоскость x, y - плоскость колебаний) под действием возмущения вида $V(x,y) = \alpha xy$ ($\alpha = const$) в первом порядке теории возмущений. Указать правильные волновые функции нулевого приближения.

10.15*. То же, что и в предыдущей задаче, для второго возбужденного уровня энергии осциллятора.

10.16*. На частицу в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a ($0 < x < a$) наложено возмущение вида $V(x) = V_0 \cos^2(\pi x/a)$. Рассчитать изменение энергетических уровней частицы в первых двух порядках теории возмущений.

Тема 11. Спин

Основные формулы

• Оператор спина ($s = 1/2$)

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}. \tag{11.1}$$

Матрицы Паули

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{11.2}$$

• Собственные значения оператора квадрата спина и его проекции на ось квантования

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1), \qquad S_z = \hbar m_s, \qquad m_s = -s, -s+1, ..., s-1, s. \tag{11.3}$$

• Волновая функция частицы со спином $s = 1/2$: $\Psi(q,t) \equiv \Psi_\alpha(\vec{r},t)$, $\alpha = 1, 2$ - спиновая переменная (определяет значение проекции спина). В матричной форме

$$\Psi(\vec{r},t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r},t) & 0 \\ \psi_2(\vec{r},t) & 0 \end{pmatrix}, \qquad \Psi^+(\vec{r},t) = \begin{pmatrix} \psi_1^*(\vec{r},t) & \psi_2^*(\vec{r},t) \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{11.4}$$

Другое (спинорное) представление для волновой функции

$$\Psi(\vec{r},t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r},t) \\ \psi_2(\vec{r},t) \end{pmatrix} = \psi_1(\vec{r},t)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(\vec{r},t)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{11.5}$$

$$\Psi^+(\vec{r},t) = \begin{pmatrix} \psi_1^*(\vec{r},t) & \psi_2^*(\vec{r},t) \end{pmatrix} = \psi_1^*(\vec{r},t)\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + \psi_2^*(\vec{r},t)\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{11.6}$$

• Правило вычисления средних

$$\langle A \rangle^t = \sum_{\alpha\alpha'} \int \psi_\alpha^*(\vec{r},t)\hat{A}_{\alpha\alpha'}\psi_{\alpha'}(\vec{r},t)\,dV \equiv \int \Psi^+(\vec{r},t)\hat{A}\Psi(\vec{r},t)\,dV. \tag{11.7}$$

• Коммутаторы операторов спина

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \qquad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y, \qquad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x. \tag{11.8}$$

• Оператор квадрата спина

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2. \tag{11.9}$$

• Оператор полного момента частицы

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}. \tag{11.10}$$

• Оператор квадрата полного момента частицы

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2. \tag{11.11}$$

• Гамильтониан водородоподобного атома

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + W(r) + \hat{W}_{sp-orb}. \tag{11.12}$$

• Оператор спин-орбитального взаимодействия

$$\hat{W}_{sp-orb} = \frac{Zq_e^2}{2m^2c^2r^3}(\hat{\vec{S}}\hat{\vec{L}}) = \frac{Zq_e^2}{4m^2c^2r^3}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2). \tag{11.13}$$

Задачи

11.1. Пусть для частицы со спином $s = 1/2$ каждая из волновых функций $\Psi_1(\vec{r}, t)$ и $\Psi_2(\vec{r}, t)$ нормирована на единицу. Доказать, что для матричной и спинорной волновой функции выполняется условие нормировки

$$\int \Psi^+(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)\, dV = 1.$$

11.2. Доказать следующие свойства матриц Паули:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \hat{1}, \qquad \hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

11.3. Используя результат предыдущей задачи, доказать, что если спин частицы равен $s = 1/2$, то $\hat{S}^2 = (3/4)\hbar^2\hat{1}$. Какой вывод можно сделать отсюда относительно собственных значений оператора $\hat{S}^2$?

11.4. Проверить, что

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z, \qquad \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \qquad \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y.$$

11.5. Используя равенства из предыдущей задачи, убедиться, что операторы проекций спина $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ удовлетворяют точно таким же коммутационным соотношениям, что и операторы проекций орбитального момента импульса $\hat{\vec{L}}$.

11.6. Проверить, что волновые функции $\psi_\uparrow(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\psi_\downarrow(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ являются собственными функциями оператора $\hat{S}_z$. Найти соответствующие собственные значения. Здесь $\varphi(\vec{r})$ - произвольная функция.

11.7. Найти собственные функции и собственные значения для оператора проекции спина на ось X: $\hat{S}_x$.

Ответ: $s_x = \frac{\hbar}{2}, \varphi_{x,\hbar/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_1} \binom{1}{1}$; $\qquad s_x = -\frac{\hbar}{2}, \varphi_{x,-\hbar/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_2} \binom{1}{-1}$.

11.8. То же, что и в предыдущей задаче, но для оператора $\hat{S}_y$.

Ответ: $s_y = \frac{\hbar}{2}, \varphi_{y,\hbar/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_3} \binom{1}{i}$; $\qquad s_y = -\frac{\hbar}{2}, \varphi_{y,-\hbar/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha_4} \binom{1}{-i}$.

11.9. Для частицы со спином $s = 1/2$ найти квадрат проекции спина на произвольное направление. Какой вывод можно отсюда сделать относительно величины проекции спина на произвольное направление?

Ответ: $S_a^2 = \hbar^2/4$; $\qquad S_a = \pm\hbar/2$.

11.10. Доказать, что оператор квадрата спина частицы $\hat{S}^2$ коммутирует с оператором любой динамической переменной.

11.11. Какими квантовыми числами характеризуется стационарное состояние частицы в трехмерной потенциальной яме, если частица обладает спином?

11.12. Используя соотношения

$$\left(\hat{S}_x\psi\right)(\sigma) = \sum_{\sigma'} (S_x)_{\sigma\sigma'}\, \psi(\sigma')$$

$$\left(\hat{S}_y\psi\right)(\sigma) = \sum_{\sigma'} (S_y)_{\sigma\sigma'}\, \psi(\sigma')$$

$$\left(\hat{S}_z\psi\right)(\sigma) = \sum_{\sigma'} (S_z)_{\sigma\sigma'}\, \psi(\sigma')$$

проверить, что операторы проекции спина - линейные операторы.

11.13. Проверить равенства

$$\hat{S}_x\Psi = (S_x)\Psi, \qquad \hat{S}_y\Psi = (S_y)\Psi, \qquad \hat{S}_z\Psi = (S_z)\Psi.$$

Указание: Выражение $\hat{S}_i\Psi$ является спинором, который получается из спинора Ψ при действии на него оператора $\hat{S}_i$. Поэтому компоненты $\hat{S}_i\Psi$ совпадают со значениями функции $(\hat{S}_i\psi)(\sigma)$.

11.14. С помощью (11.8) доказать, что оператор квадрата спина (11.9) коммутирует с операторами $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$.

11.15. Непосредственно перемножая матрицы

$$(S_x) = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \qquad (S_y) = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \qquad (S_z) = \frac{\hbar}{2}\sigma_z,$$

проверить, что справедливы следующие соотношения между операторами проекций спина:

$$\hat{S}_x\hat{S}_y = \frac{i\hbar}{2}\hat{S}_z; \qquad \hat{S}_z\hat{S}_x = \frac{i\hbar}{2}\hat{S}_y; \qquad \hat{S}_y\hat{S}_z = \frac{i\hbar}{2}\hat{S}_x;$$

$$\hat{S}_x\hat{S}_y + \hat{S}_y\hat{S}_x = 0; \qquad \hat{S}_z\hat{S}_x + \hat{S}_x\hat{S}_z = 0; \qquad \hat{S}_y\hat{S}_z + \hat{S}_z\hat{S}_y = 0.$$

11.16. Используя формулу (11.7) для средних значений, показать что в квантовом состоянии частицы с $s = 1/2$, которое описывается спинором $\Psi = \psi\binom{1}{1}$ среднее значение $< S_x >= \frac{\hbar}{2}$.

11.17. Доказать коммутационные соотношения

$$[\hat{J}^2, \hat{H}] = 0, \qquad [\hat{J}_z, \hat{H}] = 0, \qquad [\hat{L}^2, \hat{H}] = 0,$$

где гамильтониан имеет вид (11.12), а оператор спин-орбитального взаимодействия дается выражением (11.13).

11.18. Подставить волновую функцию $\psi(r,\vartheta,\varphi,\sigma) = R(r)\psi_{ljm_j}(\vartheta,\varphi,\sigma)$ в стационарное уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$ с гамильтонианом (11.12) и проверить, что для радиальной части волновой функции получается уравнение

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Zq_e^2}{r} + W(r) + W_{sp-orb}(r)\right]R(r) = ER(r),$$

где $W_{sp-orb}(r)$ имеет вид

$$W_{sp-orb}(r) = \frac{Z\hbar^2 q_e^2}{4m^2c^2r^3}[j(j+1) - l(l+1) - 3/4].$$

Указание: Учесть, что волновые функции удовлетворяют уравнениям:

$$\hat{J}^2\psi = \hbar^2 j(j+1)\psi, \qquad \hat{J}_z\psi = \hbar m_j\psi, \qquad \hat{L}^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi$$

11.19. С помощью выражения

$$E_{nj} = E_n^{(0)}\left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right)\right],$$

определяющего уровни энергии водородоподобного атома с точностью до первой релятивистской поправки, показать, что "полная ширина тонкой структуры" D_n при данном n равна

$$D_n = \frac{Z^2\alpha^2(n-1)}{n^2}|E_n^{(0)}|^2.$$

Указание: При данном n: $l = 0, 1, 2, ..., (n-1)$,следовательно max и min значения квантового числа j в тонкой структуре: $j_{max} = n - 1/2; j_{min} = 1/2$.

Вычислить D_3 и D_2 для уровней атома водорода. Сравнить эти величины с разностью невозмущенных энергий $E_3^{(0)} - E_2^{(0)}$. Вычислить длины волн дуплета при расщеплении головной линии серии Бальмера.

11.20. Проекция спина электрона на ось z с достоверностью имеет значение $+1/2$. Какова вероятность того, что проекция спина на направление $z^{'}$, составляющее угол ϑ с осью z, будет иметь значение $+1/2$ и -1/2? Определить среднее значение проекции спина на указанное направление.

Ответ: $w(+1/2) = \cos^2(\vartheta/2), \qquad w(-1/2) = \sin^2(\vartheta/2); \qquad \langle S_{z'}\rangle = 1/2 \cdot \cos\vartheta$.

11.21*. Нейтральная частица со спином 1/2 движется в магнитном поле, направленном по оси z. Уравнение Паули имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi - \mu_0(\hat{\sigma}\hat{H})\psi.$$

1). Найти решение этого уравнения для постоянного и однородного поля H_z.

2). Найти решение этого уравнения для зависящего от времени магнитного поля $H(t)$. Рассмотреть частные случаи явной зависимости магнитного поля от времени: а)$H(t) = H_0 \exp(-|t|/t_0)$; б)$H(t) = H_0[1 + t^2/t_0^2$; в)$H(t) = H_0[1 - \exp(-t/t_0)]$.

Тема 12. Квантовая механика системы частиц

Основные формулы

• Условие ортонормировки набора $\{\varphi_l(q)\}$ базисных одночастичных функций

$$\langle \varphi_l \mid \varphi_{l'} \rangle = \int \varphi_l^*(q)\varphi_{l'}(q)dq = \delta_{ll'} . \tag{12.1}$$

• Разложение произвольной одночастичной функции по полному набору базисных одночастичных функций

$$\Psi(q,t) = \sum_l a_l(t)\varphi_l(q). \tag{12.2}$$

• Базисные волновые функции системы N тождественных бозонов

$$\Phi^{(s)}_{\{n_l\}}(q_1, ..., q_N, t) = A_{\{n_l\}} \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P}\{\varphi_{l_1}(q_1)...\varphi_{l_N}(q_N)\}, \tag{12.3}$$

где нормировочная постоянная

$$A_{\{n_l\}} = \left(N! \prod_{\text{все } l} n_l! \right)^{-1/2} . \tag{12.4}$$

• Условие на числа заполнения для системы бозонов

$$\sum_{\text{все } l} n_l = N. \tag{12.5}$$

• Условие ортонормировки базисных волновых функций

$$\left\langle \Phi^{(s)}_{\{n_l\}} \middle| \Phi^{(s)}_{\{n_l'\}} \right\rangle = \int \Phi^{(s)*}_{\{n_l\}} \Phi^{(s)}_{\{n_l'\}} dq_1...d_N = \begin{cases} 1, \text{ если } \{n_l\} = \{n_l'\} \\ 0, \text{ если } \{n_l\} \neq \{n_l'\} \end{cases} \tag{12.6}$$

• Произвольное состояние системы бозонов

$$\Psi(q_1, ..., q_N, t) = \sum_{\{n_l\}} C(\{n_l\}, t) \Phi^{(s)}_{\{n_l\}}(q_1, ..., q_N). \tag{12.7}$$

• Коэффициенты разложения (амплитуды вероятностей)

$$C(\{n_l\}, t) = \left\langle \Phi^{(s)}_{\{n_l\}} \middle| \Psi(t) \right\rangle . \tag{12.8}$$

• Условие нормировки амплитуд вероятностей

$$\sum_{\{n_l\}} |C(\{n_l\}, t)|^2 = 1. \tag{12.9}$$

• Антисимметричные базисные волновые функции системы фермионов

$$\Phi^{(a)}_{\{n_l\}}(q_1, ..., q_N) = A_{\{n_l\}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \mathcal{P}\{\varphi_{l_1}(q_1)...\varphi_{l_N}(q_N)\}, \qquad (12.10)$$

где нормировочная постоянная

$$A_{\{n_l\}} = \frac{1}{\sqrt{N!}}. \qquad (12.11)$$

• Условие ортонормировки антисимметричных базисных функций

$$\left\langle \Phi^{(a)}_{\{n_l\}} \middle| \Phi^{(a)}_{\{n_l'\}} \right\rangle = \int \Phi^{(a)*}_{\{n_l\}} \Phi^{(a)}_{\{n_l'\}} dq_1...dq_N = \begin{cases} 1, \text{ если } \{n_l\} = \{n_l'\} \\ 0, \text{ если } \{n_l\} \neq \{n_l'\} \end{cases} \qquad (12.12)$$

• Одночастичные спиновые функции частиц со спином $s = 1/2$

$$\chi_{\uparrow}(\sigma) \equiv \chi_{1/2}(\sigma) = \delta_{\sigma,1/2}, \qquad \chi_{\downarrow}(\sigma) \equiv \chi_{-1/2}(\sigma) = \delta_{\sigma,-1/2}. \qquad (12.13)$$

Задачи

12.1. Проверить, что полное число перестановок переменных $\{q_k\}$ в волновой функции $\Psi(q_1, ..., q_N, t)$ равно $N!$.

12.2. Доказать, что две симметризованные волновые функции $\Phi^{(s)}_{l_1,..,l_N}$ и $\Phi^{(s)}_{l_1{}',...,l_N{}'}$ системы, состоящей из N тождественных бозонов, ортогональны, если в наборах $\{l_1, ..., l_N\}$ и $\{l_1', ..., l_N'\}$ нет совпадающих индексов.

Указание: Проверить, что скалярное произведение $\langle \Phi^{(s)}_{l_1,...,l_N} \mid \Phi^{(s)}_{l_1',...,l_N'} \rangle$ можно представить как сумму многомерных интегралов, каждый из которых разбивается на произведение интегралов вида $\langle \varphi_{l_k} \mid \varphi_{l'_{k'}} \rangle$. Далее следует использовать условие ортогональности (12.1) для одночастичных волновых функций.

12.3. Вычислить явно нормировочную постоянную A в формуле

$$\Phi^{(s)}_{n_{\vec{p}_1}=2, n_{\vec{p}_2}=1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = A \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P}\{\varphi_{\vec{p}_1}(\vec{r}_1), \varphi_{\vec{p}_2}(\vec{r}_2)\varphi_{\vec{p}_3}(\vec{r}_3)\},$$

описывающей систему $N = 3$ бесспиновых частиц и проверить, что результат согласуется с общим выражением (12.4).

12.4. Вывести выражение (12.8) для амплитуд вероятностей.

Указание: Умножить обе части равенства (12.7) на $\Phi^{(s)*}_{\{n_l\}}(q_1, ..., q_N)$ и проинтегрировать по переменным всех частиц с учетом условия ортогональности (12.6).

12.5. Вывести выражение (12.11) для нормировочной постоянной в формуле (12.10).

Указание: Используя явное выражение (12.10) для антисимметричных базисных волновых функций, записать выражение для скалярного произведения (12.12). Учесть, что для фермионов в любом наборе $\{l_1, ..., l_N\}$ нет совпадающих индексов одночастичных состояний, а одночастичные волновые функции удовлетворяют условию ортогональности (12.1).

12.6. Проверить, что базисные спиновые функции двух фермионов

$$\chi_0(\sigma_1,\sigma_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\chi_\uparrow(\sigma_1)\chi_\downarrow(\sigma_2)-\chi_\downarrow(\sigma_1)\chi_\uparrow(\sigma_2)\right\},$$

$$\chi_1(\sigma_1,\sigma_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\chi_\uparrow(\sigma_1)\chi_\downarrow(\sigma_2)+\chi_\downarrow(\sigma_1)\chi_\uparrow(\sigma_2)\},$$

$$\chi_2(\sigma_1,\sigma_2)=\chi_\uparrow(\sigma_1)\chi_\uparrow(\sigma_2),$$

$$\chi_3(\sigma_1,\sigma_2)=\chi_\downarrow(\sigma_1)\chi_\downarrow(\sigma_2)$$

ортогональны друг другу и нормированы на единицу.

12.7. Доказать равенства

$$\hat{S}_z\chi_0=0,\qquad \hat{S}_z\chi_1=0,\qquad \hat{S}_z\chi_2=\hbar\chi_2,\qquad \hat{S}_z\chi_3=-\hbar\chi_3,$$

где $\hat{S}=\hat{S}_1+\hat{S}_2$ - оператор полного спина системы двух частиц со спином $s=1/2$, используя явные выражения для базисных спиновых функций двух фермионов, приведенные в предыдущей задаче, и тот факт, что одночастичные спиновые функции (12.12) являются собственными функциями оператора $\hat{S}_z$.

Тема 13. Стационарные состояния сложных атомов

Основные формулы

• Атом с двумя электронами: основное состояние

$$\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{W} \tag{13.1}$$

$$\hat{H}^{(0)}=-\frac{\hbar^2}{2m}(\triangle_1+\triangle_2)-Zq_e^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right);\qquad \hat{W}=\frac{q_e^2}{r_{12}}. \tag{13.2}$$

• Нулевой порядок теории возмущений

$$E^{(0)}_{\text{осн}}=2\epsilon_{n=1}=-2Z^2E_H;\qquad \psi^{(0)}_{\text{осн}}=\Phi^{(0)}_{\text{осн}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\chi(\sigma_1,\sigma_2), \tag{13.3}$$

где $E_H=\frac{mq_e^4}{2\hbar^2}\simeq 13,605$ эВ - энергия ионизации атома водорода,

$$\Phi^{(0)}_{\text{осн}}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2)=\frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{r_B}\right)^3\exp\left[-\frac{Z}{r_B}(r_1+r_2)\right]. \tag{13.4}$$

• Первый порядок теории возмущений

$$E_n^{(1)}=W_{nn}=\langle\psi_n^{(0)}|\hat{W}|\psi_n^{(0)}\rangle;\qquad E_{\text{осн}}=-2Z^2E_H+Q;$$

$$Q=\langle\psi^{(0)}_{\text{осн}}|\hat{W}|\psi^{(0)}_{\text{осн}}\rangle=\int\psi^2_{100}(\vec{r}_1)\frac{q_e^2}{r_{12}}\psi^2_{100}(\vec{r}_2)\,dV_1dV_2=\frac{5}{4}ZE_H;$$

$$E_{\text{осн}}=-2ZE_H\left(Z-\frac{5}{8}\right). \tag{13.5}$$

• Атом с двумя электронами: возбужденные состояния
1-ое возбужденное состояние: электронная конфигурация $(1s)^1(2s)^1$
Симметричная и антисимметричная волновые функции

$$\Phi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{2s}(\vec{r}_2) + \varphi_{2s}(\vec{r}_1)\varphi_{1s}(\vec{r}_2)\right\},$$

$$\Phi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{2s}(\vec{r}_2) - \varphi_{2s}(\vec{r}_1)\varphi_{1s}(\vec{r}_2)\}. \tag{13.6}$$

Полные антисимметричные двухчастичные волновые функции

$$\psi_{\uparrow\downarrow}(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \Phi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi^{(a)}(\sigma_1, \sigma_2) - \text{парасостояние},$$

$$\psi_{\uparrow\uparrow}(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \Phi^{(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi^{(s)}(\sigma_1, \sigma_2) - \text{ортосостояние}. \tag{13.7}$$

Энергия пара- и ортосостояний в нулевом приближении

$$E^{(0)}_{\uparrow\downarrow} = \langle\psi_{\uparrow\downarrow}|\hat{H}^{(0)}|\psi_{\uparrow\downarrow}\rangle = \langle\Phi^{(s)}|\hat{H}^{(0)}|\Phi^{(s)}\rangle = \epsilon_1 + \epsilon_2 = -5E_H,$$

$$E^{(0)}_{\uparrow\uparrow} = \langle\psi_{\uparrow\uparrow}|\hat{H}^{(0)}|\psi_{\uparrow\uparrow}\rangle = \langle\Phi^{(a)}|\hat{H}^{(0)}|\Phi^{(a)}\rangle = \epsilon_1 + \epsilon_2 = -5E_H. \tag{13.8}$$

Энергия пара- и ортосостояний в первом приближении по оператору взаимодействия между электронами $\hat{W}$

$$E_{\uparrow\downarrow} = \langle\Phi^{(s)}|\hat{H}|\Phi^{(s)}\rangle = -5E_H + Q + Q_{\text{обм}},$$

$$E_{\uparrow\uparrow} = \langle\Phi^{(a)}|\hat{H}|\Phi^{(a)}\rangle = -5E_H + Q - Q_{\text{обм}}, \tag{13.9}$$

где

$$Q = \int \varphi^2_{1s}(\vec{r}_1)\frac{q_e^2}{r_{12}}\varphi^2_{2s}(\vec{r}_2)\, dV_1 dV_2 \tag{13.10}$$

- кулоновский интеграл (средняя энергия кулоновского взаимодействия электронов),

$$Q_{\text{обм}} = \int \varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{2s}(\vec{r}_2)\frac{q_e^2}{r_{12}}\varphi_{2s}(\vec{r}_1)\varphi_{1s}(\vec{r}_2)\, dV_1 dV_2 \tag{13.11}$$

- обменный интеграл (энергия обменного взаимодействия электронов).

Для вычисления интегралов (13.10) и (13.11) используются водородоподобные функции

$$\varphi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}}\exp[-r/r_B], \qquad \varphi_{2s} = \frac{\exp[-r/2r_B]}{2\sqrt{2\pi}r_B^{3/2}}\left(1 - \frac{r}{2r_B}\right), \tag{13.12}$$

где $r_B = \frac{\hbar^2}{2mq_e^2} = 0,2645 \cdot 10^{-10}$м - боровский радиус для водородоподобного атома с $Z = 2$.

Задачи

13.1. Вычислить интегралы

$$I_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \Phi_{\text{проб}}(\triangle_1 + \triangle_2)\Phi_{\text{проб}}\, dV_1 dV_2,$$

$$I_2 = -Zq_e^2 \int \Phi^2_{\text{проб}} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) dV_1 dV_2,$$

$$I_3 = q_e^2 \int \Phi^2_{\text{проб}} \frac{1}{r_{12}}\, dV_1 dV_2,$$

где пробная волновая функция дается выражением

$$\Phi_{\text{проб}}(r_1, r_2) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z^*}{r_B}\right)^3 \exp\left[-\frac{Z^*}{r_B}(r_1 + r_2)\right]$$

и убедиться, что значения этих интегралов даются формулами

$$I_1 = 2(Z^*)^2 E_H, \qquad I_2 = -4ZZ^* E_H, \qquad I_3 = \frac{5}{4} Z^* E_H,$$

где $E_H = \frac{mq_e^4}{2\hbar^2} \simeq 13,605$ эВ - энергия ионизации атома водорода ($Z = 1$); $q_e^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$.

Указание: Волновая функция $\Phi_{\text{проб}}(r_1, r_2)$ есть произведение двух функций, каждая из которых зависит от координат одного электрона и нормирована на 1. Тогда интеглалы нетрудно вычислить, используя интегрирование по dV_1 и dV_2 в сферической системе координат.

13.2. Вычислить средние значения в формулах

$$E^{(0)}_{\uparrow\downarrow} = \langle\psi_{\uparrow\downarrow}|\hat{H}^{(0)}|\psi_{\uparrow\downarrow}\rangle = \langle\Phi^{(s)}|\hat{H}^{(0)}|\Phi^{(s)}\rangle = \epsilon_1 + \epsilon_2 = -5E_H,$$

$$E^{(0)}_{\uparrow\uparrow} = \langle\psi_{\uparrow\uparrow}|\hat{H}^{(0)}|\psi_{\uparrow\uparrow}\rangle = \langle\Phi^{(a)}|\hat{H}^{(0)}|\Phi^{(a)}\rangle = \epsilon_1 + \epsilon_2 = -5E_H,$$

где $\Phi^{(s)}$ и $\Phi^{(a)}$ - симметричная и антисимметричная координатные волновые функции двух электронов. Убедиться,что в нулевом приближении по взаимодействию между электронами энергии пара- и ортосостояний атома гелия имеют одинаковое значение $E^{(0)}_{\uparrow\downarrow} = E^{(0)}_{\uparrow\uparrow} = -5E_H$.

Указание: Невозмущенный гамильтониан (13.2) есть сумма двух операторов $\hat{H}^{(0)} = \hat{h}(1) + \hat{h}(2)$, где $\hat{h}$ - гамильтониан водородоподобного иона He^+, а аргументы (1) и (2) показывают, что $\hat{h}$ действует на переменные 1-го или 2-го электрона. Следует учесть, что волновые функции $\varphi_{1s}, \varphi_{2s}$ ортогональны друг к другу и являются собственными функциями оператора $\hat{h}$, причем $\hat{h}\varphi_{1s} = \epsilon_1\varphi_{1s}$ и $\hat{h}\varphi_{2s} = \epsilon_2\varphi_{2s}$.

13.3. Доказать, что у атомов бериллия Be и магния Mg основным термом является терм $^1S_0$.

13.4. Вывести выражение

$$\langle d_z\rangle = 2e^2\mathcal{E}\sum_{n>1}\sum_{l,m}\frac{|\langle nlm|z|100\rangle|^2}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_{\text{осн}}}$$

для среднего дипольного момента атома водорода в основном состоянии.

Указание: Записав матричный элемент $\langle\psi_{\text{осн}}|z|\psi_{\text{осн}}\rangle$ с точностью до первой поправки по внешнему электрическому полю $\mathcal{E}$, учесть, что $\langle 100|z|nlm\rangle = \langle nlm|z|100\rangle^*$.

13.5. Доказать, что при выборе векторного потенциала однородного магнитного поля в виде $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}[\vec{B}\times\vec{r}]$ оператор импульса $\hat{\vec{p}}$ коммутирует с $\vec{A}$.

Указание: Достаточно доказать, что $\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A} = 0$, где $\hat{\vec{p}}$ действует только на $\vec{A}$. Это можно проверить непосредственно, записав

$$\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A} = \hat{p}_x A_x + \hat{p}_y A_y + \hat{p}_z A_z = -i\hbar\left(\frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}\right)$$

и убедившись, что каждое слагаемое в скоках равно нулю.

Тема 14. Стационарные состояния молекул

Основные формулы

• Гамильтониан молекулы водорода без учета спин-спиновых и спин-орбитальных взаимодействий

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{эл}} + \hat{T}_{\text{яд}} + \frac{q_e^2}{R}, \tag{14.1}$$

$$\hat{H}_{\text{эл}} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\triangle_1 + \triangle_2) + q_e^2\left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1A}} - \frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2A}} - \frac{1}{r_{2B}}\right),$$

$$\hat{T}_{\text{яд}} = -\frac{\hbar^2}{2M}(\triangle_A + \triangle_B),$$

$$R = |\vec{R}_A - \vec{R}_B|, \qquad r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|, \qquad r_{1A} = |\vec{r}_1 - \vec{R}_A|, \qquad r_{1B} = |\vec{r}_1 - \vec{R}_B|$$

и аналогично для r_{2A} и r_{2B}.

• Уравнение Шредингера для координатной волновой функции молекулы

$$\left(\hat{H}_{\text{эл}} + \hat{T}_{\text{яд}} + \frac{q_e^2}{R}\right)\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_A, \vec{R}_B) = E\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_A, \vec{R}_B), \tag{14.2}$$

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_A, \vec{R}_B) = \sum_n \Phi_{\text{эл};n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \{\vec{R}\})\Phi_{\text{яд};n}(\vec{R}_A, \vec{R}_B). \tag{14.3}$$

• Координатные волновые функции электронов в $1s$ состояниях

$$\Phi_{\text{эл}}^{(s)} = \frac{1}{\sqrt{2(1+K^2)}}\{\varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2) + \varphi_A(\vec{r}_2)\varphi_B(\vec{r}_1)\}, \tag{14.4}$$

$$\Phi_{\text{эл}}^{(a)} = \frac{1}{\sqrt{2(1-K^2)}}\{\varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_2) - \varphi_A(\vec{r}_2)\varphi_B(\vec{r}_1)\}, \tag{14.5}$$

где, например, $\varphi_A(\vec{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r_{1A}/a}$ - волновая функция электрона 1, движущегося в поле ядра A; $a \equiv \frac{\hbar^2}{mq_e}$ -боровский радиус электрона в атоме водорода.

• Интеграл перекрытия волновых функций электрона в поле двух атомов водорода

$$K = \int \varphi_A(\vec{r}_1)\varphi_B(\vec{r}_1)\, dV_1 = \frac{1}{\pi a^3}\int \exp\left(-\frac{r_{1A}+r_{1B}}{a}\right) dV_1. \qquad (14.6)$$

• Условие нормировки

$$\int \left(\Phi^{(s)}_{\text{эл}}\right)^2 dV_1 dV_2 = \int \left(\Phi^{(a)}_{\text{эл}}\right)^2 dV_1 dV_2 = 1. \qquad (14.7)$$

Задачи

14.1. Проверить, что волновые функции электронов в молекуле водорода (14.4) и (14.5) ортогональны друг к другу и нормированы на единицу (14.7), если интеграл перекрытия K имеет вид (14.6).

14.2. Вывести выражение

$$\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(R) = 2\varepsilon_{1s} + \frac{Q+Q_{\text{обм}}}{1+K^2}; \qquad \varepsilon_{\uparrow\uparrow}(R) = 2\varepsilon_{1s} + \frac{Q-Q_{\text{обм}}}{1-K^2}$$

для энергии электронов в пара- и ортосостояниях в молекуле водорода в 1-ом приближении теории возмущений.

Указание: Используя формулы (14.4) и (14.5) при записи интегралов,определяющих $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}$ и $\varepsilon_{\uparrow\uparrow}$

$$\varepsilon_{\uparrow\downarrow}(R) = \int \Phi^{(s)}_{\text{эл}}\hat{H}_{\text{эл}}\Phi^{(s)}_{\text{эл}}\, dV_1 dV_2, \qquad \varepsilon_{\uparrow\uparrow}(R) = \int \Phi^{(a)}_{\text{эл}}\hat{H}_{\text{эл}}\Phi^{(a)}_{\text{эл}}\, dV_1 dV_2,$$

учесть, что одноэлектронные волновые функции удовлетворяют уравнению Шредингера для изолированного атома водорода

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_1 - \frac{q_e^2}{r_{1A}}\right)\varphi_A(\vec{r}_1) = \varepsilon_{1s}\varphi_A(r_1),$$

где $\varepsilon_{1s} = -E_H$ - энергия основного состоляния атома водорода.

14.3. Получить выражение

$$\hat{T}_{\text{яд}} = -\frac{\hbar^2}{2M_{\text{мол}}}\triangle_r - \frac{\hbar^2}{2M_{\text{прив}}}\triangle_R$$

для оператора кинетической энергии ядер через производные по проекциям $\vec{r}$ и $\vec{R}$. $M_{\text{мол}} = 2M$ - масса молекулы водорода, $M_{\text{прив}} = M/2$ - приведенная масса.

Указание: Пример преобразования производных

$$\frac{\partial}{\partial x_A} = \frac{\partial x}{\partial x_A}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial X}{\partial x_A}\frac{\partial}{\partial X} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial X},$$

где были использованы соотношения $x = (x_A + x_B)/2$, $X = x_A - x_B$.

14.4. Проверить,что оператор

$$\hat{K}^2 = -\hbar^2\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\}$$

есть квадрат векторного оператора момента импульса относителоного движения ядер в системе центра масс $\hat{\vec{K}} = \vec{R} \times \hat{\vec{P}}$, где $\hat{\vec{P}} = \hat{\vec{p_A}} - \hat{\vec{p_B}} =$
$= -i\hbar \left(\vec{e_x} \frac{\partial}{\partial X} + \vec{e_y} \frac{\partial}{\partial Y} + \vec{e_z} \frac{\partial}{\partial Z} \right)$ - оператор импульса относительного движения ядер.

Указание: Операторы декартовых проекций момента импульса имеют вид
$\hat{K}_x = -i\hbar \left(Y \frac{\partial}{\partial Z} - Z \frac{\partial}{\partial Y} \right)$ и аналогично для $\hat{K}_y$ и $\hat{K}_z$. Использовать $\hat{K}^2 = \hat{\vec{K}} \cdot \hat{\vec{K}}$ записанное в сферической системе координат.

14.5. Вывести систему уравнений для волновых функций ядер двухатомной молекулы

$$(\hat{T}_{\text{ЯД}} + U_n(R) - E)\Phi_{\text{ЯД};n}(\vec{R}_A, \vec{R}_B) = \sum_{n'} \hat{\Lambda}_{nn'} \Phi_{\text{ЯД};n'}(\vec{R}_A, \vec{R}_B),$$

где $U_n(R) = \varepsilon_n(R) + \frac{q_e^2}{R}$ - эффективная энергия взаимодействия ядер при условии, что электроны находятся в состоянии $\Phi_{\text{ЭЛ};n}$, и $\varepsilon_n(R)$ - энергия электронов в этом состоянии. Найти также явный вид операторов $\hat{\Lambda}_{nn'}$.

Указание: Пусть $\{\Phi_{\text{ЭЛ};n}\}$ - ортонормированная система волновых функций электронов при фиксированныых координатах ядер. Умножим слева обе части уравнения Шредингера (14.2) на $\Phi^*_{\text{ЭЛ};n}$ и проинтегрируем по координатам электронов. Подставляя затем вместо Φ разложение (14.3) и учитывая, что электронные волновые функции ортонормированы и являются собственными функциями оператора $\hat{H}_{\text{ЭЛ}}$, получим

$$(U_n(R) - E)\Phi_{\text{ЭЛ};n} + \sum_{n'} \int \Phi^*_{\text{ЭЛ};n} \hat{T}_{\text{ЯД}} (\Phi_{\text{ЭЛ};n'} \Phi_{\text{ЯД};n'})\, dV_1 dV_2 = 0,$$

где dV_1 и dV_2 - элементы объема при интегрировании по координатам электронов. Воспользуемся тождеством

$$\hat{T}_{\text{ЯД}} \Phi_{\text{ЭЛ};n'} = \Phi_{\text{ЭЛ};n'} \hat{T}_{\text{ЯД}} + [\hat{T}_{\text{ЯД}}, \Phi_{\text{ЭЛ};n'}].$$

Тогда приходим к искомой системе уравнений, а для оператора $\hat{\Lambda}_{nn'}$ имеем компактное выражение

$$\hat{\Lambda}_{nn'} = -\int \Phi^*_{\text{ЭЛ};n} [\hat{T}_{\text{ЯД}}, \Phi_{\text{ЭЛ};n'}]\, dV_1 dV_2.$$

Коммутатор нетрудно записать через операторы дифференциирования по координатам ядер, если использовать явное выражение для $\hat{T}_{\text{ЯД}}$, приведенное в формулах (14.1).

Тема 15. Электронные состояния в кристаллах

Основные формулы

• Уравнение Шредингера для валентных электронов

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \triangle + U_0(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = \varepsilon \psi(\vec{r}), \tag{15.1}$$

где $U_0(\vec{r})$ - самосогласованное поле, ε - уровни энергии валентных электронов.

• Волновые функции стационарных состояний электрона в самосогласованном кристаллическом поле (функции Блоха)

$$\psi_{\vec{k}a}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}a}(\vec{r}), \tag{15.2}$$

где $u_{\vec{k}a}(\vec{r}) = u_{\vec{k}a}(\vec{r}+\vec{n})$, $\vec{n} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ - вектор сдвига ($n_i = 0, \pm 1, \pm 2, ...$).

• Уравнение Шредингера для функций $u_{\vec{k}a}(\vec{r})$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + i\vec{k})^2 + U_0(\vec{r})\right) u_{\vec{k}a}(\vec{r}) = \varepsilon_a(\vec{k}) u_{\vec{k}a}(\vec{r}), \tag{15.3}$$

где условие периодичности самосогласованного кристаллического поля $U_0(\vec{r}+\vec{n}) = U_0(\vec{r})$. Индекс a нумерует энергетические зоны валентных электронов.

• Свойство функций Блоха

$$\psi_{\vec{k}+\vec{g},a}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k},a}(\vec{r}), \tag{15.4}$$

где вектор обратной решетки $\vec{g}$ удовлетворяет соотношениям

$$\vec{g}\cdot\vec{n} = 2\pi \times (\text{целое число}), \qquad \vec{g} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3. \tag{15.5}$$

Здесь элементарные векторы обратной решетки имеют вид

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{v}[\vec{a}_2 \times \vec{a}_3], \qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{v}[\vec{a}_3 \times \vec{a}_1], \qquad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{v}[\vec{a}_1 \times \vec{a}_2],$$

где $v = \vec{a}_1 \cdot [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]$ - объем примитивной ячейки.

Задачи

15.1 Построить векторы основных трансляций $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ для объемноцентрированной и гранецентрированной кубических решеток.

Указание: Векторы $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ соединяют ядро иона с тремя его ближайшими соседями.

15.2. Вывести уравнение (15.3) из уравнения Шредингера (15.1).

Указание: Сначала полезно проверить соотношение

$$\nabla\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} f(\vec{r})\right) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}(\nabla + i\vec{k}) f(\vec{r}),$$

где $f(\vec{r})$ - произвольная функция.

15.3. Доказать свойство (15.4) функций Блоха для произвольной кристаллической решетки.

15.4. Используя формулы

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \qquad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \qquad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z, \qquad n_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, ...$$

для возможных значений проекций волнового вектора электрона в кубической решетке, подсчитать число различных квантовых состояний в зоне Бриллюэна и убедиться, что оно равно числу атомов N в кристалле.

15.5. Доказать, что волновые функции

$$\psi^{(0)}_{\vec{k}a}(\vec{r}) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{R}_n} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n}\varphi_a(\vec{r}-\vec{R}_n)$$

сильно связанных электронов в нулевом порядке теории возмущений ортонормированы, если пренебречь перекрытием атомных волновых функций, т.е. если

$$\int \varphi^*_a(\vec{r}-\vec{R}_n)\varphi_a(\vec{r}-\vec{R}_{n'})\,dV \approx 0 \qquad \text{при} \qquad \vec{R}_n \neq \vec{R}_{n'}.$$

Указание: При вычислении скалярного произведения двух таких функций $\langle\psi^{(0)}_{\vec{k}a}|\psi^{(0)}_{\vec{k}'a}\rangle$ нужно учесть, что каждая атомная волновая функция нормирована на единицу. Тогда $\langle\psi^{(0)}_{\vec{k}a}|\psi^{(0)}_{\vec{k}'a}\rangle = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$.

15.6. Доказать, что волновые функции нулевого приближения для сильно связанных электронов, приведенные в предыдущей задаче, обладают свойством функций Блоха

$$\psi^{(0)}_{\vec{k}a}(\vec{r}+\vec{n}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}}\psi^{(0)}_{\vec{k}a}(\vec{r}).$$

Указание: Учесть, что атомные волновые функции являются периодическими,т.е.

$$\varphi_a(\vec{r}+\vec{n}) = \varphi_a(\vec{r}).$$

Тема 16. Общая схема квантовой механики

Основные формулы

• Вектор состояния в гильбертовом пространстве

$$|\Psi(t)\rangle.$$

• Скалярное произведение векторов состояния и его свойства

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle \text{ - комплексное число},$$

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle^* = \langle\Psi_2|\Psi_1\rangle,$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle > 0,$$

$$\langle c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2|\Psi\rangle = c_1^*\langle\Psi_1|\Psi\rangle + c_2^*\langle\Psi_2|\Psi\rangle,$$

$$\langle\Psi|c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\rangle = c_1\langle\Psi|\Psi_1\rangle + c_2\langle\Psi|\Psi_2\rangle. \tag{16.1}$$

• Разложение вектора состояния системы по полному набору $\{|a\rangle\}$ базисных векторов состояния

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_a C(a,t)|a\rangle. \tag{16.2}$$

• Условие ортонормировки базисных векторов состояния $\{|a\rangle\}$

$$\langle a|a^{'}\rangle = \delta_{aa'}. \tag{16.3}$$

• Среднее значение физической величины A в состоянии $|\Psi(t)\rangle$

$$\langle A\rangle^t = \langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle. \tag{16.4}$$

• Коэффициенты разложения (амплитуды вероятностей) из (16.2) и разложение вектора состояния

$$C(a,t) = \langle a|\Psi(t)\rangle, \qquad |\Psi(t)\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|\Psi(t)\rangle. \tag{16.5}$$

• Волновая функция системы в a - представлении

$$\Psi(a,t) = \langle a|\Psi(t)\rangle. \tag{16.6}$$

(набор "проекций" вектора состояния $|\Psi(t)\rangle$ на выбранные базисные векторы состояния $|a\rangle$.)

• Переход от волновых функций заданных в a - представлении к волновым функциям в b - представлении и наоборот

$$\langle b|\Psi(t)\rangle = \sum_a \langle b|a\rangle\langle a|\Psi(t)\rangle, \qquad \langle a|\Psi(t)\rangle = \sum_b \langle a|b\rangle\langle b|\Psi(t)\rangle, \tag{16.7}$$

где $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$ - соотношение между матрицами преобразований.

• Связь между базисными векторами

$$|b\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|b\rangle. \tag{16.8}$$

• Свойство линейности оператора $\hat{A}$

$$\hat{A}\left(\sum_i c_i|\Psi_i\rangle\right) = \sum_i c_i\hat{A}|\Psi_i\rangle. \tag{16.9}$$

• Определение эрмитова сопряжения операторов

$$\langle\Psi_1|\hat{A}^+|\Psi_2\rangle = \langle\Psi_2|\hat{A}|\Psi_1\rangle^*, \tag{16.10}$$

• Самосопряженный (эрмитов) оператор

$$\hat{A}^+ = \hat{A}. \tag{16.11}$$

• В любом a - представлении действие оператора $\hat{A}$ на волновые функции $\Psi(a) \equiv \langle a|\Psi\rangle$ полностью определяется его матричными элементами $A_{aa'} \equiv \langle a|\hat{A}|a^{'}\rangle$

$$\tilde{\Psi}(a) = \sum_{a^{'}} A_{aa'}\Psi(a^{'}), \qquad \text{где} \qquad |\tilde{\Psi}\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle. \tag{16.12}$$

• Связь матрицы оператора $\hat{A}^+$ с матрицей оператора $\hat{A}$

$$\left(\hat{A}^+\right)_{aa'} = A^*_{a'a}. \tag{16.13}$$

• Для самосопряженного (эрмитова) оператора $\hat{A}^{+} = \hat{A}$

$$A_{aa'} = A^{*}_{a'a}. \tag{16.14}$$

• Матрицы оператора $\hat{A}$ в двух различных представлениях связаны соотношением

$$A_{bb'} = \sum_{aa'} \langle b|a\rangle \langle b'|a'\rangle^{*} A_{aa'}. \tag{16.15}$$

• Выражение матричных элементов оператора $\hat{A}$ в a - представлении через его собственные значения

$$A_{aa'} = \sum_{n} \langle a|n\rangle \langle a'|n\rangle^{*} A_{n}, \tag{16.16}$$

где $A_{nn'} \equiv \langle n|\hat{A}|n'\rangle = A_{n}\delta_{nn'}$, A_{n} - собственные значения оператора.
• Среднее значение физической величины в a - представлении

$$\langle A\rangle^{t} = \sum_{a,a'} \Psi^{*}(a,t) A_{aa'} \Psi(a',t). \tag{16.17}$$

Задачи
16.1. Доказать, что соотношения

$$\sum_{a} C^{*}_{ba} C_{b'a} = \delta_{b'b}, \qquad \sum_{b} C^{*}_{ba} C_{ba'} = \delta_{aa'}$$

являются необходимыми и достаточными условиями того, чтобы набор векторов состояния $|b\rangle = \sum_{a} C_{ba}|a\rangle$ был полным и ортонормированным.

Указание: Запишем скалярное произведение $\langle b|b'\rangle$ в виде

$$\langle b|b'\rangle = \sum_{a'} C_{b'a'} \langle b|a'\rangle = \sum_{a,a'} C^{*}_{ba} C_{b'a'} \langle a|a'\rangle = \sum_{a} C^{*}_{ba} C_{b'a}.$$

Таким образом, для выполнения равенства $\langle b|b'\rangle = \delta_{bb'}$ необходимо и достаточно, чтобы выполнялось первое из доказываемых соотношений. Второе соотношение получается из требования, чтобы набор $\{|b\rangle\}$ был полным. По предположению, исходный набор $\{|a\rangle\}$ является полным, т.е. любой вектор состояния можно разложить по этим векторам. Значит, для полноты нового набора необходимо и достаточно, чтобы любой вектор $|a\rangle$ мог быть разложен по векторам $|b\rangle$. Записав $|a\rangle = \sum_{b} |b\rangle\langle b|a\rangle$, а затем, вычислив с помощью этого равенства скалярное произведение $\langle a'|a\rangle$ и приравняв его $\delta_{aa'}$, можно получить второе из доказываемых соотношений.

16.2. Используя определение

$$\langle \Psi_{1}|\hat{A}^{+}|\Psi_{2}\rangle = \langle \Psi_{2}|\hat{A}|\Psi_{1}\rangle^{*}$$

эрмитова сопряженного оператора, доказать, что среднее значение самосопряженного (эрмитова) оператора в любом квантовом состоянии является действительным числом.

16.3. Доказать, что матрица оператора $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ в любом представлении есть произведение матриц операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$:

$$C_{aa'} = \sum_{a''} A_{aa''} B_{a''a'}.$$

Обобщить это соотношение на операторы вида $\hat{C} = \hat{A}_1 \hat{A}_2 ... \hat{A}_k$.

Указание: Матричный элемент $C_{aa'}$ можно записать в виде

$$C_{aa'} = \langle a|\hat{A}\hat{B}|a'\rangle = \langle a|\hat{A}\hat{I}\hat{B}|a'\rangle.$$

Остается воспользоваться формулой $\sum_a \hat{P}_a = \sum_a |a\rangle\langle a| = \hat{I}$ для единичного оператора.

16.4. Показать, что уравнение $\hat{A}|A\rangle = A|A\rangle$ в произвольном a - представлении эквивалентно следующему матричному уравнению для волновой функции $\psi_A(a) = \langle a|A\rangle$:

$$\sum_{a'} (A_{aa'} - A\delta_{aa'})\psi_A(a') = 0.$$

Указание: Умножить скалярно обе части исходного уравнения на базисный вектор $|a\rangle$, а затем разложить вектор состояния $|A\rangle$ по базисным векторам.

16.5. В волновой механике Шредингера гамильтониан частицы во внешнем поле имеет вид $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + U(\vec{r})$. Проверить, что матричные элементы гамильтониана в координатном представлении имеют вид

$$\langle \vec{r}|\hat{H}|\vec{r}'\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(\vec{r})\right)\delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

где $\triangle$ - оператор дифференциирования по компонентам вектора $\vec{r}$.

16.6. Рассматривается частица со спином s. В качестве базисных состояний частицы выбраны состояния $|q\rangle = |\vec{r}, m_s\rangle$, где спиновое магнитное квантовое число $(m_s = -s, -s+1, ..., s)$ определяет значение проекции спина частицы $s_z = \hbar m_s$ на ось квантования z.

а) Записать условие нормировки для векторов состояния $|q\rangle$ и условие полноты базиса;

б) Найти матричные элементы $\langle q|\hat{\vec{r}}|q'\rangle$ оператора радиус-вектора и матричные элементы $\langle q|\hat{\vec{p}}|q'\rangle$ оператора импульса в q - представлении;

в) Найти матричные элементы $\langle q|\hat{S}_z|q'\rangle$ оператора $\hat{S}_z$ в этом представлении;

г) Для случая $s = 1/2$ найти также матричные элементы $\langle q|\hat{S}_x|q'\rangle$ и $\langle q|\hat{S}_y|q'\rangle$.

16.7. Проверить условие нормировки

$$\int |\Phi(\vec{p}, t)|^2 \, d^3\vec{p} = 1$$

для волновой функции частицы в импульсном представлении.

Указание: Если записать $\Phi^*(\vec{p}, t)$ в виде интеграла, выполнив комплексное сопряжение в формуле

$$\Phi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) \, d^3\vec{r},$$

тогда получаем

$$\int |\Phi(\vec{p},t)|^2 \, d^3\vec{p} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\vec{p} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r'} \, e^{-i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r'})/\hbar} \Psi^*(\vec{r'},t)\Psi(\vec{r},t).$$

Интегрирование по $\vec{p}$ дает дельта-функцию $\delta(\vec{r}-\vec{r'})$, которая затем снимает интеграл по $\vec{r'}$.

16.8. Используя формулу (6.5) для полиномов Эрмита, проверить равенства

$$\xi H_n(\xi) = nH_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi),$$

$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi).$$

16.9. Вывести соотношения

$$\hat{x}\psi_n \equiv x\psi_n = x_0 \left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1} \right),$$

$$\hat{p}_x\psi_n = -\frac{i\hbar}{x_0} \left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1} \right).$$

где $\psi_n(x) = \left(\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}\right)^{1/2} e^{-x^2/(2x_0^2)} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right), \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$

16.10. Проверить, что оператор

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - \frac{ix_0}{\hbar}\hat{p}_x \right)$$

является эрмитово сопряженным оператору

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + \frac{ix_0}{\hbar}\hat{p}_x \right).$$

16.11. С помощью выражений

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\hat{a} + \hat{a}^+ \right), \qquad \hat{p}_x = -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}x_0} \left(\hat{a} - \hat{a}^+ \right)$$

преобразовать гамильтониан осциллятора

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}$$

к виду

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right).$$

Тема 17. Вторичное квантование

Основные формулы

Представление чисел заполнения для бозонов.

• Базисные векторы состояния для системы

$$|\{n_l\}\rangle = |n_1, n_2, ..., n_l, ...\rangle, \tag{17.1}$$

где $n_l = 0, 1, 2, ..., N$, n_l - число частиц, находящихся в одночастичном состоянии l, $\{n_l\}$ - всевозможные наборы чисел заполнения, удовлетворяющие условию

$$\sum_{\text{все } l} n_l = N. \tag{17.2}$$

• Условие ортонормировки базиса

$$\langle\{n_l\}|\{n_l^{'}\}\rangle = \delta_{\{n_l\},\{n_l^{'}\}}. \tag{17.3}$$

• Операторы уничтожения и рождения бозонов

$$\hat{a}_l|..., n_l, ...\rangle = \sqrt{n_l}|..., n_l - 1, ...\rangle,$$

$$\hat{a}_l^{+}|..., n_l, ...\rangle = \sqrt{n_l + 1}|..., n_l + 1, ...\rangle. \tag{17.4}$$

• Коммутационные соотношения для операторов уничтожения и рождения

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_{l'}] = [\hat{a}_l^{+}, \hat{a}_{l'}^{+}] = 0, \qquad [\hat{a}_l, \hat{a}_{l'}^{+}] = \delta_{ll'}. \tag{17.5}$$

• Оператор числа частиц $\hat{n}_l$ (оператор чисел заполнения)

$$\hat{n}_l = \hat{a}_l^{+}\hat{a}_l,$$

$$\hat{n}_l|..., n_l, ...\rangle = n_l|..., n_l, ...\rangle. \tag{17.6}$$

• Гамильтониан газа бозонов в представлении вторичного квантования при учете попарного взаимодействия частиц

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k^{+}\hat{a}_k + \frac{1}{2}\sum_{k,p,l,m}\langle l, m|W|k, p\rangle \hat{a}_l^{+}\hat{a}_m^{+}\hat{a}_k\hat{a}_p, \tag{17.7}$$

где попарное взаимодействие трактуется как столкновение двух частиц, находящихся в p - ом и k - ом состояниях и их переход после взаимодействия в l - ое и m - ое состояния.

Представление чисел заполнения для фермионов

• Возможные значения чисел заполнения для фермионов

$$n_l = 0; 1. \tag{17.8}$$

• Антикоммутационные соотношения для операторов уничтожения $\hat{b}_k$ и рождения $\hat{b}_k^{+}$ фермионов

$$\{\hat{b}_k, \hat{b}_l\} = \{\hat{b}_k^{+}, \hat{b}_l^{+}\} = 0, \qquad \{\hat{b}_k, \hat{b}_l^{+}\} = \delta_{kl}. \tag{17.9}$$

• Гамильтониан газа фермионов в представлении вторичного квантования при учете попарного взаимодействия частиц

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k + \frac{1}{2} \sum_{kplm} \langle l, m|W|k, p\rangle \hat{b}_l^+ \hat{b}_m^+ \hat{b}_k \hat{b}_p. \qquad (17.10)$$

Задачи

17.1. Доказать коммутационные соотношения (17.5).

Указание: Достаточно проверить, что любой из коммутаторов (17.5) при действии на любой базисный вектор состояния $|\{n_l\}\rangle$ дает нуль.

17.2. Доказать, что операторы чисел заполнения $\hat{n}_l$ для бозонов коммутируют друг с другом.

Указание: Достаточно проверить, что коммутатор $[\hat{n}_l, \hat{n}_{l'}]$ при действии на любой базисный вектор состояния $|\{n_l\}\rangle$ дает нуль. Для этого проще всего воспользоваться соотношением $[\hat{a}_l, \hat{a}_l^+] = 1$.

17.3. Проверить антикоммутационные соотношения (17.9) для ферми-операторов

17.4. Проверить, что для бозе- и ферми-операторов выполняются коммутационные соотношения

$$[\hat{a}_l, \hat{n}_{l'}] = \delta_{ll'} \hat{a}_l, \qquad [\hat{a}_l, \hat{n}_{l'}] = -\delta_{ll'} \hat{a}_l^+$$

(для фермионов - аналогично с заменой бозонных операторов на фермионные).

17.5. Исходя из антикоммутационных соотношений для фермиевских операторов уничтожения $\hat{b}$ и рождения $\hat{b}^+$ показать, что собственные значения оператора числа частиц $\hat{n} = \hat{b}^+ \hat{b}$ равны 0 и 1.

17.6. Выразить оператор Гамильтона одномерного гармонического осциллятора через операторы рождения $\hat{a}^+$ и уничтожения $\hat{a}$ и получить его собственные значения.

17.7. Показать, что любую физическую систему имеющую положение равновесия, можно представить как гармонический осциллятор, колеблющийся вблизи положения равновесия. Найти гамильтониан системы, написать уравнения колебаний инайти их решения для классической и квантовой систем.

17.8. Построить операторы рождения и уничтожения для системы гармонических квантовых осцилляторов. Написать их явный вид и проверить их действие на волновую функцию ψ_n.

17.9. Используя операторы рождения и уничтожения $\hat{a}^+, \hat{a}$, получить волновую функцию n - го состояния ψ_n из волновой функции нулевого состояния.

17.10. В базисе чисел заполнения построить матрицы, соответствующие операторам $\hat{a}^+, \hat{a}$ и $\hat{n}$.

Тема 18. Квантовая динамика

Основные формулы

• Уравнение Шредингера для вектора состояния

$$\hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle. \qquad (18.1)$$

• Система с двумя состояниями. Ортонормированные базисные состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$

$$\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1, \qquad \langle 1|2\rangle = 0. \qquad (18.2)$$

• Вектор состояния системы как суперпозиция базисных состояний

$$|\Psi(t)\rangle = C_1(t)|1\rangle + C_2(t)|2\rangle, \tag{18.3}$$

где $C_1(t), C_2(t)$ - амплитуды вероятностей обнаружить систему в каждом из базисных состояний.

• Условие нормировки вероятностей

$$w_1(t) + w_2(t) \equiv |C_1(t)|^2 + |C_2(t)|^2 = 1. \tag{18.4}$$

• Зависимость амплитуд вероятностей от времени

$$C_1(t) = a_1 e^{-i(\omega_0+\Omega)t} + b_1 e^{-i(\omega_0-\Omega)t}, \qquad C_2(t) = a_2 e^{-i(\omega_0+\Omega)t} + b_2 e^{-i(\omega_0-\Omega)t}, \tag{18.5}$$

где $\omega_0 = \frac{1}{2\hbar}(E_1 + E_2)$, $\Omega = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{1}{4}(E_1 - E_2)^2 + |A|^2}$.

• Уровни энергии системы с двумя состояниями

$$E_I = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) + \sqrt{\frac{1}{4}(H_{11} - H_{22})^2 + |H_{12}|^2},$$

$$E_{II} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) - \sqrt{\frac{1}{4}(H_{11} - H_{22})^2 + |H_{12}|^2}, \tag{18.6}$$

где H_{ij} - матричные элементы гамильтониана по базисным состояниям $|1\rangle$ и $|2\rangle$, $(H_{21} = H_{12}^*)$.

• Ортонормированные векторы стационарных состояний $|I\rangle$ и $|II\rangle$

$$|I\rangle = \alpha_1 \left(|1\rangle + \frac{H_{21}}{E_I - H_{22}}|2\rangle\right), \qquad |II\rangle = \alpha_2 \left(|2\rangle + \frac{H_{12}}{E_{II} - H_{11}}|1\rangle\right), \tag{18.7}$$

где

$$\alpha_1 = \left(1 + \frac{|H_{12}|^2}{(E_I - H_{22})^2}\right)^{-1/2}, \qquad \alpha_2 = \left(1 + \frac{|H_{12}|^2}{(E_{II} - H_{11})^2}\right)^{-1/2}. \tag{18.8}$$

• Матричные элементы гамильтониана для дипольной молекулы ($\vec{d}$ - дипольный момент), помещенной в электрическое поле $\vec{\mathcal{E}}$

$$H_{11} = E^{(0)} + \mathcal{E}d, \qquad H_{22} = E^{(0)} - \mathcal{E}d, \qquad H_{12} = H_{21}^* = A. \tag{18.9}$$

• Оператор взаимодействия (энергия взаимодействия) атома с полем электромагнитной волны $\vec{\mathcal{E}}(t), \vec{\mathcal{B}}(t)$

$$\hat{W}(t) = -\hat{\vec{d}} \cdot \vec{\mathcal{E}}(t) - \hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{\mathcal{B}}(t), \tag{18.10}$$

где $\hat{\vec{d}}$ и $\hat{\vec{\mu}}$ - операторы дипольного и магнитного моментов атома.

• Вероятность перехода в первом порядке теории возмущений $(f \neq i)$

$$w_{fi}(\tau) = \left|a_{fi}^{(1)}(\tau)\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau \langle f|\hat{W}(t)|i\rangle e^{i\omega_{fi}t}\, dt\right|^2, \tag{18.11}$$

где $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$.

• Вероятность перехода в единицу времени ("золотое правило Ферми")

$$P_{fi} = \frac{w_{fi}(\tau)}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|\hat{W}|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i). \qquad (18.12)$$

• Гамильтониан системы, состоящей из атома и фотонов

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{атом}} + \hat{H}_{\text{поле}} + \hat{W}. \qquad (18.13)$$

• Вероятности излучения и поглощения фотонов атомом в единицу времени

$$P_{fi}^{(\text{изл})} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f, n_{\vec{k}\alpha} + 1|\hat{W}|i, n_{\vec{k}\alpha}\rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega),$$

$$P_{fi}^{(\text{погл})} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f, n_{\vec{k}\alpha} - 1|\hat{W}|i, n_{\vec{k}\alpha} \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \qquad (18.14)$$

Задачи

18.1. Исходя из уравнения (18.1) для вектора состояния, вывести уравнение Шредингера для волновой функции бесспиновой частицы $\Psi(\vec{r}, t)$, находящейся во внешнем поле $U(\vec{r})$.

18.2. Пусть $|1'\rangle$ и $|2'\rangle$ - нормированные на единицу, но не ортогональные базисные состояния, причем $c = \langle 1'|2'\rangle = \langle 2'|1'\rangle^*$. Перейдем от этих базисных состояний к двум другим

$$|1\rangle = |1'\rangle, \qquad |2\rangle = \alpha(|2'\rangle - \beta|1'\rangle).$$

Потребуем, чтобы новый базис был ортонормированным, т.е. чтобы выполнялись соотношения $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1, \quad \langle 1|2\rangle = 0$. Найти из этих условий величины α и β. Является ли выбор α и β однозначным?

18.3. Проверить, что из условия нормировки $\langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 1$ вектора состояния (18.3) следуют соотношения

$$|a_1|^2 + |b_1|^2 + |a_2|^2 + |b_2|^2 = 1, \qquad a_1 b_1^* = -a_2 b_2^*,$$

где a_1, b_1, a_2, b_2 - коэффициенты в формулах (18.5) для амплитуд вероятностей.

Указание: Использовать условие нормировки (18.4).

18.4. Проверить непосредственным вычислением скалярного произведения $\langle I|II\rangle$, что базисные состояния (18.7) ортогональны друг другу.

Указание: Учесть равенства (18.2) и явные выражения (18.6) для уровней энергии.

18.5. Найти векторы стационарных состояний молекулы аммиака в электрическом поле.

Указание: Воспользоваться формулами (18.7). (18.6) и (18.9).

18.6. Взаимодействие атома с классическим переменным электромагнитным полем описывается оператором (18.10). Во многих случаях основную роль играет взаимодействие с электрическим полем волны, так что оператор взаимодействия берется в виде $\hat{W}(t) = -\vec{d}\cdot\vec{\mathcal{E}}(t)$. Пусть напряженность электрического поля волны изменяется со временем по закону $\vec{\mathcal{E}}(t) = \vec{\mathcal{E}}_0 \cos\omega t$, где $\vec{\mathcal{E}}_0$ - постоянный вектор. Записать для этого случая оператор взаимодействия в виде

$$\hat{W}(t) = \hat{W}e^{i\omega t} + \hat{W}^{+}e^{-i\omega t}$$

и найти выражение для оператора $\hat{W}$.

Указание: Учесть, что оператор дипольного момента атома - эрмитов оператор.

18.7. Вывести выражения

$$P_{fi}^{(\uparrow)} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle f|\hat{W}|i\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega),$$

$$P_{fi}^{(\downarrow)} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle f|\hat{W}|i\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)$$

для вероятностей перехода с поглощением и передачей кванта энергии $\hbar\omega$ в единицу времени под действием возмущения $\hat{W}(t)$, приведенного в предыдущей задаче.

Указание: Подстановка оператора возмущения $\hat{W}(t)$ в общую формулу (18.11) для вероятности перехода с последующим интегрированием по времени t дает

$$w_{fi}(\tau) = \frac{1}{\hbar^2}\left|F_1 + F_2\right|^2,$$

где введены обозначения

$$F_1 = \frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)} - 1}{i(\omega_{fi}+\omega)}\langle f|\hat{W}|i\rangle, \qquad F_2 = \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)} - 1}{i(\omega_{fi}-\omega)}\langle i|\hat{W}|f\rangle^*$$

и использовано соотношение $\langle f|\hat{W}^{+}|i\rangle = \langle i|\hat{W}|f\rangle^*$, которое следует из определения эрмитово сопряженного оператора. Если записать очевидное соотношение

$$|F_1 + F_2|^2 = |F_1|^2 + |F_2|^2 + (F_1^* F_2 + F_1 F_2^*),$$

то первые два слагаемых в правой части приводят к выражению

$$P_{fi} = P_{fi}^{(\uparrow)} + P_{fi}^{(\downarrow)},$$

в которое входят искомые соотношения. Легко проверить, что "интерференционный" член, стоящий в круглых скобках, быстро осциллирует со временем и, при больших значениях τ, дает пренебрежимо малый вклад в вероятность перехода P_{fi}. В этой связи напомним, что $|F_1|^2$ и $|F_2|^2$ растут пропорционально τ, если аргументы $\omega_{fi} \pm \omega$ близки к нулю.

18.8. Вывести формулы (18.14) для вероятностей излучения и поглощения фотона атомом в единицу времени.

Указание: Предполагая, что в каждый момент времени t вектор состояния системы "атом + поле" имеет вид суперпозиции

$$|\Psi(t)\rangle = C_0(t)|f, n_{\vec{k}\alpha}\rangle + \sum_f C_{fi}^{(\text{изл})}(t)|f, n_{\vec{k}\alpha}+1\rangle + \sum_f C_{fi}^{(\text{погл})}(t)|f, n_{\vec{k}\alpha}-1\rangle,$$

а гамильтониан системы дается формулой (18.13), можно вывести систему уравнений для амплитуд $C_0(t), C_{fi}^{(\text{изл})}(t)$ и $C_{fi}^{(\text{погл})}(t)$. Затем удобно перейти к новым амплитудам $a^{(0)}(t), a_{fi}^{(+)}(t)$ и $a_{fi}^{(-)}(t)$, которые определяются формулами

$$C_0(t) = a^{(0)}(t)e^{-iE^{(0)}t/\hbar},$$

$$C_{fi}^{(\text{изл})}(t) = a_{fi}^{(+)}(t)e^{-iE_f^{(+)}t/\hbar}, \qquad C_{fi}^{(\text{погл})}(t) = a_{fi}^{(-)}(t)e^{-iE_f^{(-)}t/\hbar},$$

где $E^{(0)}, E_f^{(+)}, E_f^{(-)}$ - значения энергии системы "атом + поле" в базисных состояниях

$$E^{(0)} = E_i + \hbar\omega n_{\vec{k}\alpha}, \qquad E_f^{(\pm)} = E_f + \hbar\omega(n_{\vec{k}\alpha} \pm 1).$$

В начальный момент времени $a^{(0)}(0) = 1$ и $a_{fi}^{(\pm)}(0) = 0$. Уравнения для амплитуд $a_{fi}^{(\pm)}(t)$ решаются методом итераций в первом приближении по оператору возмущения $\hat{W}$, а затем находятся соответствующие вероятности перехода.