

«Операторы, их собственные функции и собственные значения»

Задачи

1. Перемножьте операторы $\hat{L} - \hat{M}$ и $\hat{L} + \hat{M}$.

Произведение

$$(\hat{L} - \hat{M})(\hat{L} + \hat{M}) = \hat{L}(\hat{L} + \hat{M}) - \hat{M}(\hat{L} + \hat{M}) = \hat{L}^2 - \hat{M}^2 + (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}).$$

Ответ: $\hat{L}^2 - \hat{M}^2 + (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})$.

2. Для операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$, удовлетворяющих соотношению $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 1$, найдите $\hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{L}$.

К соотношению $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 1$ добавим и отнимем $\hat{M}\hat{L}\hat{M}$

$$\hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}\hat{L}\hat{M} + \hat{M}\hat{L}\hat{M} - \hat{M}^2\hat{L} = (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})\hat{M} + \hat{M}(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}) = 2\hat{M}$$

т.к. $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 1$.

Ответ: $\hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{L} = 2\hat{M}$.

3. Для операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$, удовлетворяющих соотношению $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 1$, найдите $\hat{L}f(\hat{M}) - f(\hat{M})\hat{L}$.

Используя результаты предыдущей задачи, докажем, что полученное при $n = 2$ соотношение верно и для $n + 1$. Пусть

$$\hat{L}\hat{M}^n - \hat{M}^n\hat{L} = n\hat{M}^{n-1},$$

тогда

$$\hat{L}\hat{M}^{n+1} - \hat{M}^{n+1}\hat{L} = \hat{L}\hat{M}^n\hat{M} - \hat{M}(\hat{M}^n\hat{L}) = \hat{L}\hat{M}^n\hat{M} - \hat{M}(\hat{L}\hat{M}^n - n\hat{M}^{n-1}) =$$

$$= \hat{L}\hat{M}^{n+1} - \hat{M}(\hat{L}\hat{M}^n - n\hat{M}^{n-1}) = \hat{L}\hat{M}^{n+1} - \hat{M}\hat{L}\hat{M}^n + n\hat{M}^n =$$

$$= (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})\hat{M}^n + n\hat{M}^n = (n+1)\hat{M}^n.$$

Это соотношение справедливо для любого n . Разложим $f(\hat{M})$ в ряд по $\hat{M}$

$$f(\hat{M}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \hat{M}^n$$

$$\hat{L}f(\hat{M}) - f(\hat{M})\hat{L} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} (\hat{L}\hat{M}^n - \hat{M}^n\hat{L}) =$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} n\hat{M}^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[f'(0)]^{(n-1)}}{(n-1)!} \hat{M}^{n-1} = f'(\hat{L}).$$

Ответ: $\hat{L}f(\hat{M}) - f(\hat{M})\hat{L}$.

4. Проверьте, является ли оператор возведения в квадрат линейным.

Условие линейности оператора

$$\hat{L}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = C_1\hat{L}\psi_1 + C_2\hat{L}\psi_2.$$

Возведем в квадрат линейную комбинацию функций

$$(C_1\psi_1 + C_2\psi_2)^2 = (C_1\psi_1)^2 + (C_2\psi_2)^2 + 2C_1C_2\psi_1\psi_2 \neq C_1\psi_1^2 + C_2\psi_2^2.$$

Оператор возведения в квадрат не является линейным.

5. Проверьте, является ли оператор $\hat{L} = \frac{d}{dx}$ линейным.

Условие линейности оператора

$$\hat{L}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = C_1\hat{L}\psi_1 + C_2\hat{L}\psi_2.$$

Найдем

$$\frac{d}{dx}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = C_1 \frac{d\psi_1}{dx} + C_2 \frac{d\psi_2}{dx}.$$

Оператор $\hat{L} = \frac{d}{dx}$ является линейным.

6. Докажите, что оператор комплексного сопряжения не является линейным.

Пусть оператор комплексного сопряжения $\hat{K}$. Тогда по определению

$$\hat{K}\psi = \psi^*.$$

Тогда для любых a_1, a_2 и ψ_1, ψ_2 имеем

$$\begin{aligned}\hat{K}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) &= (a_1\psi_1 + a_2\psi_2)^* = a_1^*\psi_1^* + a_2^*\psi_2^* = \\ &= a_1^*\hat{K}\psi_1 + a_2^*\hat{K}\psi_2 \neq a_1\hat{K}\psi_1 + a_2\hat{K}\psi_2,\end{aligned}$$

что требовалось доказать.

7. Найдите оператор, переводящий функцию $\psi(x)$ в функцию $\psi(x+a)$ (оператор трансляции).

Воспользуемся определением оператора

$$\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$$

и разложим функцию $\psi(x+a)$ в ряд по степеням a :

$$\psi(x+a) = \psi(x) + a \frac{d\psi}{dx} + \frac{a^2}{2!} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \psi(x).$$

Заметим, что $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ax)^n}{n!} = e^{ax}$, можем записать получившийся

ряд в виде $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \psi(x) = e^{a \frac{d}{dx}} \psi(x)$, а оператор

$$\hat{T}_a = e^{a \frac{d}{dx}}.$$

Ответ: $\hat{T}_a = e^{a \frac{d}{dx}}$.

8. Найдите оператор, переводящий функцию $\psi(\varphi)$ в функцию $\psi(\varphi+\alpha)$, где φ – угловая переменная (оператор поворота пространства на угол α).

Воспользуемся определением оператора

$$\hat{T}_\alpha\psi(\varphi) = \psi(\varphi+\alpha)$$

и разложим функцию $\psi(\varphi+\alpha)$ в ряд по степеням α :

$$\psi(\varphi+\alpha) = \psi(\varphi) + \alpha \frac{d\psi}{d\varphi} + \frac{\alpha^2}{2!} \frac{d^2\psi}{d\varphi^2} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n}{d\varphi^n} \psi(\varphi).$$

Заметим, что $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\alpha \frac{d}{d\varphi}\right)^n}{n!} = e^{\alpha \frac{d}{d\varphi}}$, можем записать оператор

$$\hat{T}_\alpha = e^{\alpha \frac{d}{d\varphi}}.$$

Ответ: $\hat{T}_\alpha = e^{\alpha \frac{d}{d\varphi}}$.

9. Найдите собственные функции и собственные значения оператора $\frac{d}{d\varphi}$.

Уравнение на собственные функции и собственные значения

$$\frac{d\psi}{d\varphi} = \lambda\psi.$$

Решение уравнения следует искать в виде $\psi = Ae^{\alpha\varphi}$, где $\alpha = \lambda$. По условию угловой периодичности переменной $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$,

$$Ae^{\lambda\varphi} = Ae^{\lambda(\varphi+2\pi)} = Ae^{\lambda\varphi} e^{2\pi\lambda}, \quad e^{2\pi\lambda} = 1,$$

что может быть, если $\lambda = im$, где m – целое.

Пронормируем функцию

$$1 = \int_0^{2\pi} A^* e^{-im\varphi} A e^{im\varphi} d\varphi = |A|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = |A|^2 2\pi,$$

откуда $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$, тогда собственная функция

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

Ответ: $\lambda = im, \psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$.

10. Найдите собственные функции и собственные значения оператора $\sin \frac{d}{d\varphi}$.

Уравнение на собственные функции и собственные значения

$$\sin \frac{d\psi}{d\varphi} = \lambda \psi.$$

Чтобы решить это уравнение, разложим оператор $\sin \frac{d}{d\varphi}$ в степенной ряд

$$\sin \frac{d}{d\varphi} \psi = \left(\frac{d}{d\varphi} - \frac{1}{3!} \frac{d^3}{d\varphi^3} + \frac{1}{5!} \frac{d^5}{d\varphi^5} - \dots \right) \psi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \frac{d^{2k+1}}{d\varphi^{2k+1}} \psi.$$

Решение уравнения

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} \frac{d^{2k+1}}{d\varphi^{2k+1}} \psi = \lambda \psi$$

следует искать в виде $\psi = Ae^{i\alpha\varphi}$ и из требования периодичности функции $\alpha = im$, где m – целое. Нормировка на 1 дает $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

Подставим эту функцию в уравнение и получим собственные значения:

$$\lambda = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!} (im)^k = \sin(im).$$

Ответ: $\lambda = \sin(im)$, $\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$.

11. Найдите собственное значение оператора $\hat{L} = \frac{d^2}{dx^2}$, соответствующее собственной функции $f(x) = \sin kx$.

Согласно определению собственных функций $f(x)$ и собственных значений λ оператора $\hat{L}$

$$\hat{L}f(x) = \lambda f(x),$$

применим определение к заданной функции

$$\frac{d^2}{dx^2} \sin kx = -k^2 \sin kx.$$

Сравнивая данное равенство с определением, получаем, что

заданной функции соответствует собственное значение оператора $\hat{L}$:

$$\lambda = -k^2.$$

Ответ: $\lambda = -k^2$.

12. Найдите спектр собственных значений и собственных функций уравнения $\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -k^2 f(x)$, если граничные условия имеют вид $f(0) = 0$, $f(a) = 0$.

Данное уравнение является дифференциальным уравнением второго порядка с постоянными коэффициентами:

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + k^2 f(x) = 0$$

волновое уравнение. Его общее решение:

$$f(x) = A \sin kx + B \cos kx,$$

где A и B – произвольные постоянные интегрирования.

Из граничных условий

$$f(0) = 0 \Rightarrow B = 0,$$

$$f(a) = 0 \Rightarrow A \sin ka + B \cos ka = 0.$$

То есть постоянная A – произвольная, а $\sin ka = 0$ при $ka = \pi n$, где n – целое. Т.е. $k = \frac{\pi n}{a}$. Собственные функции уравнения:

$$f(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a},$$

а соответствующие им собственные значения

$$k = \frac{\pi n}{a}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Ответ: $f(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}$, $k = \frac{\pi n}{a}$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

13. Найдите условие нормировки волн де Бройля. Волна де Бройля имеет вид:

$$\psi(x, t) = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right) = \psi(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right),$$

где

$$\psi(x) = C \exp \frac{ipx}{\hbar}.$$

Если период волны де Бройля равен ℓ , то есть $\psi(x) = \psi(x + \ell)$, то

$$C \exp \frac{ipx}{\hbar} = C \exp \frac{ipx}{\hbar} \cdot \exp \frac{ip\ell}{\hbar},$$

то есть

$$\exp \frac{ip\ell}{\hbar} = 1,$$

следовательно,

$$p = \frac{2\pi n}{\ell} \hbar.$$

Из условий нормировки

$$\int_0^\ell |\psi(x)|^2 dx = 1$$

или

$$\int_0^\ell C^* e^{\frac{ipx}{\hbar}} C e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx = |C|^2 \int_0^\ell dx = |C|^2 \ell = 1,$$

то есть

$$C = \frac{1}{\sqrt{\ell}}.$$

Отсюда нормировка волны де Бройля имеет вид:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right).$$

Для трехмерного случая

$$p_x = \frac{2\pi n_x}{\ell_x} \hbar, \quad p_y = \frac{2\pi n_y}{\ell_y} \hbar, \quad p_z = \frac{2\pi n_z}{\ell_z} \hbar,$$

где $V = \ell_x \cdot \ell_y \cdot \ell_z$ — параллелепипед периодичности, $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Волна де Бройля

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\ell_x \cdot \ell_y \cdot \ell_z}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})\right).$$

Ответ: $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right).$

14. Функция $f(\varphi) = Ce^{ik\varphi}$ задана в интервале $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Определите нормирующий на единицу множитель C .

Условие нормировки на единицу

$$\int f^*(x) f(x) dx = 1,$$

интегрирование производится по всей области определения функции. Следовательно, для полярной координаты φ нормировка

$$\int_0^{2\pi} C^* e^{-ik\varphi} C e^{ik\varphi} d\varphi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = |C|^2 2\pi = 1,$$

откуда нормирующий множитель

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},$$

а нормированная функция имеет вид:

$$f(\varphi) = \frac{e^{ik\varphi}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Ответ: $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$

15. В момент времени $t = 0$ частица описывается функцией $\psi(x, 0) = Ae^{-a^2 x^2 + ik_0 x}$, где a и k_0 — постоянные. Определите ширину волнового пакета.

Разложим данную функцию в ряд Фурье по k :

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx} dk$$

— волновой пакет, описывающий частицу.

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, 0) e^{ikx} dx = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2 x^2 + i(k_0 - k)x} dx.$$

Дополняя показатель экспоненты до полного квадрата, получим

$$C(k) = \frac{A}{2\pi} e^{-\frac{(k_0-k)^2}{2a^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{2} \left(x - i \frac{(k_0-k)}{a}\right)^2} dx = \frac{A}{a\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(k_0-k)^2}{2a^2}}.$$

Значение $C(k)$ максимально вблизи $k = k_0$. Выражение

$$|C(k)|^2 dk = \frac{A^2}{2\pi a^2} e^{-\frac{(k_0-k)^2}{a^2}} dk$$

пропорционально вероятности найти у частицы квазиимпульс в интервале $k \div k + dk$. Ширину пакета в квазиимпульсном про-

странстве можно определить как $\Delta k \approx \frac{1}{a}$.

Ответ: $\Delta k \approx \frac{1}{a}$.

16. Пусть собственные функции и собственные значения двух операторов удовлетворяют условиям $\hat{L}_1 f_1(x) = \lambda_1 f_1(x)$ и $\hat{L}_2 f_2(y) = \lambda_2 f_2(y)$. Будет ли собственная функция оператора $\psi(x, y)$ иметь вид $\psi(x, y) = f_1(x)f_2(y)$, если $\hat{L}\psi(x, y) = \lambda\psi(x, y)$, а $\hat{L} = \hat{L}_1 \cdot \hat{L}_2$, причем $\hat{L}_1 = \frac{d}{dx}$ и $\hat{L}_2 = \frac{d}{dy}$?

Решим уравнение на собственные функции и собственные значения:

$$\hat{L}\psi(x, y) = \lambda\psi(x, y).$$

Подставим в него явное значение оператора $\hat{L} = \frac{d^2}{dxdy}$ и функцию $\psi(x, y)$ в виде произведения $\psi(x, y) = f_1(x)f_2(y)$:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dxdy} f_1(x)f_2(y) &= \frac{d}{dx} \left(f_1(x) \frac{d}{dy} f_2(y) \right) = \frac{d}{dx} (f_1(x)\lambda_2 f_2(y)) = \\ &= \left(\frac{d}{dx} f_1(x) \right) \lambda_2 f_2(y) = \lambda_1 f_1(x) \lambda_2 f_2(y) = \lambda_1 \lambda_2 f_1(x)f_2(y). \end{aligned}$$

Следовательно, функция $\psi(x, y) = f_1(x)f_2(y)$ является собственной функцией оператора $\hat{L}$, соответствующей собственному значению $\lambda = \lambda_1 \lambda_2$.

Ответ: да.

17. Найдите собственные функции и собственные значения оператора $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$. Какая волновая функция соответствует проекции момента $L_z = 3\hbar$?

Уравнение на собственные функции и собственные значения

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \psi &= \lambda \psi, \\ -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} &= \lambda \psi \end{aligned}$$

приводит к дифференциальному уравнению

«Понятие вероятности в квантовой механике. Среднее значение физической величины»

Задачи

1. Найдите возможные собственные значения оператора $\hat{L}_z$ и их вероятности для частицы, находящейся в состоянии

а) $\Psi(\varphi) = A \sin^3 \varphi$; б) $\Psi(\varphi) = A(2 - \cos 4\varphi)$.

а) Собственные функции оператора $\hat{L}_z$

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

Выразим функцию состояния через экспоненты.

$$\sin \varphi = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i},$$

тогда

$$\begin{aligned} \Psi(\varphi) &= A \left(\frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i} \right)^3 = -\frac{A}{8i} (e^{3i\varphi} - 3e^{i\varphi} + 3e^{-i\varphi} - e^{3i\varphi}) = \\ &= -\frac{A\sqrt{2\pi}}{8i} \left(\frac{e^{3i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} - 3\frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + 3\frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} - \frac{e^{3i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \right) = \\ &= \left(-\frac{A\sqrt{2\pi}}{8i} \frac{e^{3i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i} \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} - \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i} \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{A\sqrt{2\pi}}{8i} \frac{e^{3i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \right) = \\ &= \left(-\frac{A\sqrt{2\pi}}{8i} \Psi_3(\varphi) + \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i} \Psi_1(\varphi) - \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i} \Psi_{-1}(\varphi) + \frac{A\sqrt{2\pi}}{8i} \Psi_{-3}(\varphi) \right). \end{aligned}$$

Разложение функции состояния по собственным функциям оператора $\hat{L}_z$

$$\Psi(\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m \Psi_m(\varphi)$$

содержит коэффициенты разложения c_m , такие, что $w_m = |c_m|^2$ – вероятность системы находиться в состоянии с магнитным квантовым числом m . Тогда из разложения функции получаем коэффициенты:

$$c_3 = -\frac{A\sqrt{2\pi}}{8i}, \quad c_1 = \frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i}, \quad c_{-1} = -\frac{3A\sqrt{2\pi}}{8i}, \quad c_{-3} = \frac{A\sqrt{2\pi}}{8i}$$

и вероятности:

$$w_3 = \frac{|A|^2 \pi}{32}, \quad w_1 = \frac{9|A|^2 \pi}{32}, \quad w_{-1} = \frac{9|A|^2 \pi}{32}, \quad w_{-3} = \frac{|A|^2 \pi}{32},$$

но поскольку сумма вероятностей должна быть равна 1, то

$$1 = \frac{|A|^2 \pi}{32} + \frac{9|A|^2 \pi}{32} + \frac{9|A|^2 \pi}{32} + \frac{|A|^2 \pi}{32} = \frac{10|A|^2 \pi}{16},$$

откуда

$$|A|^2 = \frac{16}{10\pi}, \quad \text{а } A = \frac{4}{\sqrt{10\pi}},$$

тогда

$$w_3 = \frac{16\pi}{32 \cdot 10\pi} = \frac{1}{20}, \quad w_1 = \frac{9}{20}, \quad w_{-1} = \frac{9}{20}, \quad w_{-3} = \frac{9}{20}.$$

Итак, частица может находиться в состояниях с квантовыми числами $m = \pm 1; \pm 3$, то есть проекция момента импульса может иметь значения с соответствующими вероятностями:

L_z	$-$	$-\hbar$	$\hbar$	$3\hbar$
w	$0,05$	$0,45$	$0,45$	$0,05$

б) Аналогично:

$$\cos \varphi = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2},$$

тогда

$$\Psi(\varphi) = A \left(1 - \frac{e^{i4\varphi} + e^{-i4\varphi}}{2} \right)^3 = A\sqrt{2\pi} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} - \frac{e^{i4\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + \frac{e^{-i4\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \right) =$$

$$= \left(A\sqrt{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} - A\sqrt{2\pi} \frac{e^{i4\varphi}}{\sqrt{2\pi}} + A\sqrt{2\pi} \frac{e^{-i4\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \right) =$$

$$= (A\sqrt{2\pi}\psi_0(\varphi) - A\sqrt{2\pi}\psi_4(\varphi) + A\sqrt{2\pi}\psi_{-4}(\varphi)).$$

коэффициенты:

$$c_0 = 2A\sqrt{2\pi}, \quad c_4 = A\sqrt{2\pi}, \quad c_{-4} = -A\sqrt{2\pi}$$

и вероятности:

$$w_0 = 4|A|^2\pi, \quad w_4 = |A|^2\pi, \quad w_{-4} = |A|^2\pi,$$

но поскольку сумма вероятностей должна быть равна 1, то

$$1 = 4|A|^2\pi + |A|^2\pi + |A|^2\pi = 6|A|^2\pi,$$

откуда

$$|A|^2 = \frac{1}{6\pi}, \text{ а } A = \frac{1}{\sqrt{6\pi}},$$

тогда

$$w_0 = \frac{4\pi}{6\pi} = \frac{2}{3}, \quad w_4 = \frac{1}{6}, \quad w_{-4} = \frac{1}{6}.$$

Итак, частица может находиться в состояниях с квантовыми числами $m=0, \pm 4$, то есть проекция момента импульса может иметь значения с соответствующими вероятностями:

L_z	0	$-4\hbar$	$4\hbar$
w	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$

Ответ: а) $L_z = \pm\hbar; \pm 3\hbar; w=0,05; 0,45;$

б) $L_z = 0; \pm 4\hbar; w = \frac{2}{3}; \frac{1}{6}.$

2. В момент времени $t=0$ частица описывается функцией

$$\psi(x,0) = Ae^{-a^2x^2 + ik_0x},$$

где a и k_0 – постоянные. Пронормируйте функцию и найдите область локализации частицы и плотность тока.

Из условия нормировки

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^* e^{-a^2x^2 - ik_0x} A e^{-a^2x^2 + ik_0x} dx =$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2a^2x^2} dx = |A|^2 \frac{1}{a} \sqrt{\frac{\pi}{2}},$$

откуда

$$A = \sqrt{a\sqrt{\frac{2}{\pi}}}.$$

Чтобы найти область локализации, найдем плотность вероятности

$$\rho(x) = |\psi(x,0)|^2 = a\sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-2a^2x^2}.$$

Эта функция имеет максимум в точке $x_0=0$ и быстро убывает с ростом $|x|$, следовательно, частица локализована в начале координат. Ширина пакета, заданного такой функцией, порядка $\frac{1}{a\sqrt{2}}.$

Плотность тока вероятности

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{a\hbar k_0}{m\sqrt{\pi}} e^{-2a^2x^2} = \frac{\hbar k_0}{m} \rho.$$

Конечное выражение для тока совпадает с классическим. Множитель ρ (аналог плотности заряда) зависит только от параметров вещественной части функции состояния, а множитель $\frac{\hbar k_0}{m}$ (аналог скорости частицы) – связан только с мнимой частью.

$$\text{Ответ: } x_0 = 0, \quad \psi(x) = \sqrt{a\sqrt{\frac{2}{\pi}}} e^{-a^2x^2 + ik_0x}, \quad j_x = \frac{a\hbar k_0}{m\sqrt{\pi}} e^{-2a^2x^2}.$$

3. Определите распределение вероятности различных значений импульса для основного состояния частицы, находящейся в «ящике» размерами $a \times b \times c$.

Волновая функция такой частицы в координатном представлении

$$\Psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi y}{b} \sin \frac{\pi z}{c}.$$

В импульсном представлении

$$\Psi(p_x, p_y, p_z) = \int_0^a dx \int_0^b dy \int_0^c dz \frac{e^{-\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{\pi^3 \hbar^3 abc}} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi y}{b} \sin \frac{\pi z}{c} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi^3 \hbar^3 abc}} \int_0^a e^{-\frac{ip_x x}{\hbar}} \sin \frac{\pi x}{a} dx \int_0^b e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}} \sin \frac{\pi y}{b} dy \int_0^c e^{-\frac{ip_z z}{\hbar}} \sin \frac{\pi z}{c} dz.$$

Интеграл

$$\int e^{-\alpha x} \sin \beta x dx = \left| \begin{array}{l} U = \sin \beta x \quad dU = \beta \cos \beta x dx \\ dV = e^{-\alpha x} dx \quad V = -\frac{1}{\alpha} e^{-\alpha x} \end{array} \right| =$$

$$= -\frac{\sin \beta x}{\alpha} e^{-\alpha x} + \frac{\beta}{\alpha} \int e^{-\alpha x} \cos \beta x dx =$$

$$= \left| \begin{array}{l} U = \cos \beta x \quad dU = -\beta \sin \beta x dx \\ dV = e^{-\alpha x} dx \quad V = -\frac{1}{\alpha} e^{-\alpha x} \end{array} \right| =$$

$$= -\frac{\sin \beta x}{\alpha} e^{-\alpha x} + \frac{\beta}{\alpha} \left(-\frac{\cos \beta x}{\alpha} e^{-\alpha x} - \frac{\beta}{\alpha} \int e^{-\alpha x} \sin \beta x dx \right) =$$

$$= -\frac{\sin \beta x}{\alpha} e^{-\alpha x} - \frac{\beta \cos \beta x}{\alpha^2} e^{-\alpha x} - \frac{\beta^2}{\alpha^2} \int e^{-\alpha x} \sin \beta x dx,$$

$$\int e^{-\alpha x} \sin \beta x dx = -\frac{\alpha \sin \beta x + \beta \cos \beta x}{\alpha^2 + \beta^2} e^{-\alpha x}$$

Распределение вероятности значений импульса

$$\rho(\vec{p}) = |\Psi(p_x, p_y, p_z)|^2 = \frac{(4\pi\hbar^3)^3 abc \cos^2 \frac{p_x a}{2\hbar} \cos^2 \frac{p_y b}{2\hbar} \cos^2 \frac{p_z c}{2\hbar}}{(p_x^2 a^2 - \pi^2 \hbar^2)(p_y^2 b^2 - \pi^2 \hbar^2)(p_z^2 c^2 - \pi^2 \hbar^2)}.$$

$$\text{Ответ: } \rho(\vec{p}) = \frac{(4\pi\hbar^3)^3 abc \cos^2 \frac{p_x a}{2\hbar} \cos^2 \frac{p_y b}{2\hbar} \cos^2 \frac{p_z c}{2\hbar}}{(p_x^2 a^2 - \pi^2 \hbar^2)(p_y^2 b^2 - \pi^2 \hbar^2)(p_z^2 c^2 - \pi^2 \hbar^2)}.$$

4. Найдите сумму $\sum_n x_n \delta_{nk}$.

$$\text{Так как} \quad \delta_{nk} = \begin{cases} 1 & \text{при } n = k, \\ 0 & \text{при } n \neq k, \end{cases}$$

то сумма $\sum_n x_n \delta_{nk} = x_k$.

Ответ: x_k .

5. Найдите вероятность того, что импульс электрона в основном состоянии атома водорода заключен в интервале $(p, p + dp)$.

Вероятность частицы иметь указанный импульс

$$dw = |\Psi(\vec{p})|^2 d\vec{p},$$

где $\Psi(\vec{p})$ – функция состояния в импульсном представлении.

Функция основного состояния электрона в атоме водорода в координатном представлении

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}},$$

где a – радиус первой боровской орбиты электрона.

Волновая функция в импульсном представлении может быть записана так

$$\Psi(\vec{p}) = \int \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \Psi(r) dV = \frac{1}{\pi^2 (2a\hbar)^{3/2}} \int e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar} - \frac{r}{a}} dV.$$

Вычисление интеграла по бесконечному объему проведем в сферических координатах. Ось Oz направим вдоль вектора импульса,

$$\int e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar} - \frac{r}{a}} dV = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi e^{-i\frac{pr \cos \theta}{\hbar} - \frac{r}{a}} \sin \theta d\theta =$$

$$= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^1 e^{-i\frac{pr \cos \theta}{\hbar} - \frac{r}{a}} d \cos \theta = \frac{2\pi\hbar}{ip} \int_0^\infty \left[e^{-\left(\frac{1}{a} - i\frac{p}{\hbar}\right)r} - e^{-\left(\frac{1}{a} + i\frac{p}{\hbar}\right)r} \right] r dr =$$

$$= \frac{8\pi a^3 \hbar^4}{(a^2 p^2 + \hbar^2)^2}.$$

Волновая функция в импульсном представлении имеет вид

$$\Psi(\vec{p}) = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar(2a\hbar)^{3/2}}{(a^2 p^2 + \hbar^2)^2}.$$

Квадрат волновой функции

$$|\Psi(\vec{p})|^2 = \frac{8a^3 \hbar^5}{\pi^2 (a^2 p^2 + \hbar^2)^4}.$$

Умножая на объем шарового слоя в импульсном пространстве $4\pi p^2 dp$, получим искомую вероятность

$$dw = \frac{32a^3 \hbar^5 p^2}{\pi^2 (a^2 p^2 + \hbar^2)^4} dp.$$

Ответ: $dw = \frac{32a^3 \hbar^5 p^2}{\pi^2 (a^2 p^2 + \hbar^2)^4} dp.$

6. Вычислите вероятности нахождения частицы в интервалах значений координаты z от z_1 до z_2 по заданной волновой функции

$$\Psi(x, y, z) = A \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2a^2}\right).$$

Вероятность частицы иметь координату

$$w = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{z_1}^{z_2} dz \left| A \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2a^2}\right) \right|^2 =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{z_1}^{z_2} dz |A|^2 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{a^2}\right) =$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) dx \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{y^2}{a^2}\right) dy \int_{z_1}^{z_2} \exp\left(-\frac{z^2}{a^2}\right) dz =$$

$$= |A|^2 a \sqrt{\pi} a \sqrt{\pi} a (\operatorname{erf}(z_2) - \operatorname{erf}(z_1)) = \pi |A|^2 a^3 (\operatorname{erf}(z_2) - \operatorname{erf}(z_1)),$$

где $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ — интеграл Пуассона, а функция

$$\operatorname{erf}(z) = \int_z^{\infty} \exp(-\alpha x^2) dx \text{ — интеграл ошибок.}$$

Ответ: $w = \pi |A|^2 a^3 (\operatorname{erf}(z_2) - \operatorname{erf}(z_1)).$

7. Найдите среднее значение проекции момента импульса $\hat{L}_z$ и среднее значение квадрата проекции момента импульса $\hat{L}_z^2$ для частицы, находящейся в состоянии

а) $\Psi(\varphi) = A \sin^3 \varphi$; **б)** $\Psi(\varphi) = A(2 - \cos 4\varphi).$

а) Исходя из решения задачи 18, частица может находиться в состояниях с квантовыми числами $m = \pm 1; \pm 3$, то есть проекция момента импульса может иметь значения с соответствующими вероятностями:

L_z	$-3\hbar$	$-\hbar$	$\hbar$	$3\hbar$
w	0,05	0,45	0,45	0,05

Тогда среднее значение проекции момента L_z

$$\langle L_z \rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} w_m (L_z)_m,$$

$$\langle L_z \rangle = 0,05 \cdot (-3\hbar) + 0,45 \cdot (-\hbar) + 0,45 \cdot \hbar + 0,05 \cdot 3\hbar = 0,$$

а среднее значение квадрата проекции момента L_z^2

$$\langle L_z^2 \rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} w_m (L_z^2)_m,$$

$$\langle L_z^2 \rangle = 0,05 \cdot 9\hbar^2 + 0,45 \cdot \hbar^2 + 0,45 \cdot \hbar^2 + 0,05 \cdot 9\hbar^2 = 1,8\hbar^2.$$

Аналогично, частица может находиться в состояниях с квантовыми числами $m = 0; \pm 4$, то есть проекция момента импульса может иметь значения с соответствующими вероятностями:

L_z	0	$-4\hbar$	$4\hbar$
w	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$

Тогда среднее значение проекции момента L_z

$$\langle L_z \rangle = \frac{2}{3} \cdot 0 + \frac{1}{6} \cdot (-4\hbar) + \frac{1}{6} \cdot 4\hbar = 0,$$

а среднее значение квадрата проекции момента L_z^2

$$\langle L_z^2 \rangle = \frac{2}{3} \cdot 0 + \frac{1}{6} \cdot 16\hbar^2 + \frac{1}{6} \cdot 16\hbar^2 = \frac{16}{3} \hbar^2.$$

«Эрмитовы операторы. Коммутатор операторов»

Задачи

1. Найдите правило эрмитового сопряжения произведения операторов.

Правило получим, пользуясь следующими преобразованиями матричных элементов операторов $\hat{L}$ и $\hat{M}$.

$$\begin{aligned} \left((\hat{L}\hat{M})^+ \right)_{nk} &= \left(\psi_n; (\hat{L}\hat{M})^+ \psi_k \right) = \left((\hat{L}\hat{M}) \psi_n; \psi_k \right) = \\ &= \left(\psi_k; (\hat{L}\hat{M}) \psi_n \right)^* = \sum_m \left(\psi_k; \hat{L} \psi_m \right)^* \left(\psi_m; \hat{M} \psi_n \right)^* = \\ &= \sum_m \left(\hat{L} \psi_m; \psi_k \right) \left(\hat{M} \psi_n; \psi_m \right) = \sum_m \left(\psi_m; \hat{L}^+ \psi_n \right) \left(\psi_k; \hat{M}^+ \psi_m \right) = \\ &= \sum_m \left(\psi_k; \hat{M}^+ \psi_m \right) \left(\psi_m; \hat{L}^+ \psi_n \right) = \left(\psi_k; \hat{M}^+ \hat{L}^+ \psi_n \right) = \left(\psi_k; \hat{M}^+ \hat{L}^+ \psi_n \right), \\ &\quad (\hat{L}\hat{M})^+ = \hat{M}^+ \hat{L}^+. \end{aligned}$$

Ответ: $(\hat{L}\hat{M})^+ = \hat{M}^+ \hat{L}^+$.

2. Докажите, что оператор Лапласа является самосопряженным.

Воспользуемся равенствами

$$\Delta \varphi = \text{div} \nabla \varphi \quad \text{и} \quad \text{div}(\varphi \vec{B}) = \varphi \text{div} \vec{B} + \vec{B} \cdot \nabla \varphi.$$

Рассмотрим произвольные функции ψ_1 и ψ_2 , интегрируемые с квадратом модуля и равные нулю на бесконечности. Найдем

$$\begin{aligned} (\psi_1; \Delta \psi_2) &= \int \psi_1^* \Delta \psi_2 dV = \int \psi_1^* \text{div}(\nabla \psi_2) dV = \\ &= \int \text{div}(\psi_1^* \nabla \psi_2) dV - \int \nabla \psi_1^* \cdot \nabla \psi_2 dV. \end{aligned}$$

$\int \text{div}(\psi_1^* \nabla \psi_2) dV = \oint \psi_1^* \nabla \psi_2 \cdot d\vec{s}$ по теореме Остроградского-Гаусса, $\oint \psi_1^* \nabla \psi_2 \cdot d\vec{s} = 0$ – по свойству функций.

Тогда

$$\begin{aligned} (\psi_1; \Delta \psi_2) &= - \int \nabla \psi_1^* \cdot \nabla \psi_2 dV = - \int \nabla \psi_2 \cdot \nabla \psi_1^* dV = \\ &= - \int \{ \text{div}(\psi_2 \cdot \nabla \psi_1^*) - \psi_2 \text{div} \nabla \psi_1^* \} dV = \int \psi_2 \Delta \psi_1^* dV = \int \Delta \psi_1^* \psi_2 dV. \end{aligned}$$

Выполняется условие самосопряженности оператора

$$(\psi_1; \Delta \psi_2) = (\Delta \psi_1; \psi_2),$$

что требовалось доказать.

3. Оператор $\hat{A}$ эрмитов. Является ли оператор $\hat{B} = C\hat{A}$, где C – произвольная константа, тоже эрмитовым?

Согласно определению эрмитового оператора

$$(\psi, \hat{A} \varphi) = (\hat{A} \psi, \varphi),$$

где ψ и φ – произвольные функции. Т.е.

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

Воспользуемся этим определением для оператора $\hat{B}$

$$\begin{aligned} \int \psi^*(x) C \hat{A} \varphi(x) dx &= C \int \psi^*(x) \hat{A} \varphi(x) dx = \\ &= C \int \hat{A}^* \psi^*(x) \varphi(x) dx = \int C \hat{A}^* \psi^*(x) \varphi(x) dx, \end{aligned}$$

следовательно, $\int \psi^*(x) \hat{B} \varphi(x) dx = \int \hat{B}^* \psi^*(x) \varphi(x) dx$ выполняется для действительных C .

Ответ: является при действительном C .

4. Найдите оператор, сопряженный оператору трансляции координаты x на величину a $\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a)$.

Воспользуемся определением эрмитовости оператора

$$(\psi_1(x); \hat{T}_a \psi_2(x)) = (\hat{T}_a^+ \psi_1(x); \psi_2(x))$$

или в явном виде:

$$\int \psi_1^*(x) \hat{T}_a \psi_2(x) dx = \int \hat{T}_a^+ \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx.$$

Воспользуемся определением оператора трансляции

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a):$$

$$\int \psi_1^*(x) \hat{T}_a \psi_2(x) dx = \int \psi_1^*(x) \psi_2(x+a) dx.$$

Поскольку интегрирование ведется по всему координатному пространству, замена $x+a=x'$ не отразится на пределах интегрирования:

$$\int \psi_1^*(x'-a) \psi_2(x') dx' = \int \hat{T}_{-a} \psi_1^*(x') \psi_2(x') dx',$$

то есть $\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$.

Ответ: $\hat{T}_a^+ = \hat{T}_{-a}$.

5. Докажите, что собственные значения эрмитового оператора действительны.

Пусть ψ_n и λ_n – собственные функции и собственные значения эрмитового оператора $\hat{L}$. Тогда они связаны определением:

$$\hat{L} \psi_n = \lambda_n \psi_n.$$

Умножим это уравнение слева скалярно на ψ_n :

$$(\psi_n; \hat{L} \psi_n) = (\psi_n; \lambda_n \psi_n) = \lambda_n (\psi_n; \psi_n) = \lambda_n.$$

Умножим это уравнение справа скалярно на ψ_n :

$$(\hat{L} \psi_n; \psi_n) = (\lambda_n^* \psi_n; \psi_n) = \lambda_n^* (\psi_n; \psi_n) = \lambda_n^*.$$

Так как оператор $\hat{L}$ эрмитов, то

$$(\psi_n; \hat{L} \psi_n) = (\hat{L} \psi_n; \psi_n) \text{ и } \lambda_n^* = \lambda_n,$$

что возможно только для действительных собственных значений.

6. Докажите, что невырожденные собственные функции оператора $\hat{L}$, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны друг другу.

Пусть λ и μ – различные ($\lambda \neq \mu$) собственные значения оператора $\hat{L}$, а ψ и ϕ – его собственные функции, соответствующие этим собственным значениям.

Тогда для ψ и ϕ выполняется определение

$$\hat{L} \psi = \lambda \psi, \quad (1)$$

$$\hat{L} \phi = \mu \phi. \quad (2)$$

Домножим (1) на ϕ справа, а (2) на ψ слева и учтем действительность собственных значений

$$\begin{aligned} (\hat{L} \psi; \phi) &= (\lambda^* \psi; \phi) \Rightarrow (\hat{L} \psi; \phi) = \lambda (\psi; \phi), \\ (\psi; \hat{L} \phi) &= (\psi; \mu \phi) \Rightarrow (\psi; \hat{L} \phi) = \mu (\psi; \phi). \end{aligned}$$

Вычтем одно из другого

$$(\hat{L} \psi; \phi) - (\psi; \hat{L} \phi) = (\lambda - \mu) (\psi; \phi). \quad (3)$$

По определению эрмитового оператора левая часть равенства равна 0, по условию $\lambda \neq \mu$, следовательно, $(\psi; \phi) = 0$, что возможно, только если эти функции ортогональны, что требовалось доказать.

7. Докажите, что собственные функции вырожденного состояния ортогональны друг другу.

Пусть оператор $\hat{L}$ обладает дискретным спектром собственных значений и имеет место вырождение:

$$\hat{L} \psi_{ni} = \lambda_n \psi_{ni}, \quad (1)$$

где $i=1, 2, \dots, m_n$. Здесь одному и тому же собственному значению λ_n принадлежит несколько (m_n) собственных функций $\psi_{n1}, \psi_{n2}, \dots, \psi_{nm_n}$, где m_n – кратность вырождения. Уравнению (1) удовлетворяет также любая линейная комбинация этих функций

$\psi_n^j = \sum_{i=1}^{m_n} C_{ij} \psi_{ni}$. Эта функция нормирована на единицу. Покажем, что если данные функции ψ_{ni} неортогональны, то мы можем заменить их последовательностью функций, являющихся их линейной комбинацией, и потребовать, чтобы они были ортогональными.

Рассмотрим случай двукратного вырождения. Пусть имеет место

$$\hat{L} \psi_1 = \lambda \psi_1; \quad \hat{L} \psi_2 = \lambda \psi_2.$$

Допустим, ψ_1 и ψ_2 неортогональны, т. е. $(\psi_1, \psi_2) \neq 0$. Вместо ψ_1 и ψ_2 выберем ортогональные друг другу функции $\psi'_1 = \psi_1$ и $\psi'_2 = \psi_1 + a\psi_2$, тогда $(\psi'_1, \psi'_2) = 0$, т. е.

$(\psi_1, \psi_1 + a\psi_2) = 0$; $(\psi_1, \psi_1) + a(\psi_1, \psi_2) = 0$,
откуда $a = -\frac{(\psi_1, \psi_1)}{(\psi_1, \psi_2)}$. Аналогично можно провести ортогонализацию собственных функций и при m_n -кратном вырождении.

8. Покажите, что унитарный оператор $\hat{U}$ можно представить в виде $\hat{U} = e^{i\hat{\Phi}}$, где $\hat{\Phi}$ – некоторый эрмитов оператор.

Если $\hat{U} = e^{i\hat{\Phi}}$, то $\hat{U}^{-1} = e^{-i\hat{\Phi}}$.

Покажем, что $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^+$. Разложим экспоненту в ряд

$$\hat{U} = e^{i\hat{\Phi}} = 1 + i\hat{\Phi} + \frac{i^2}{2!}\hat{\Phi}^2 + \frac{i^3}{3!}\hat{\Phi}^3 + \dots$$

$$\hat{U}^{-1} = e^{-i\hat{\Phi}} = 1 - i\hat{\Phi} + \frac{i^2}{2!}\hat{\Phi}^2 - \frac{i^3}{3!}\hat{\Phi}^3 + \dots$$

Поскольку оператор $\hat{\Phi}$ эрмитов, то $\hat{\Phi}^+ = \hat{\Phi}$ и его любая степень $\hat{\Phi}^n = (\hat{\Phi}^n)^+ = (\hat{\Phi}^+)^n$, собирая члены разложения опять в экспоненту, получим $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^+$.

9. Докажите следующие равенства для коммутаторов:

а) $[\hat{p}_x; \hat{x}] = -i\hbar$; **б)** $[\hat{p}_y; \hat{x}] = 0$; **в)** $[f(\hat{x})\hat{p}_x; f(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x}$, где

$f(\hat{x})$ – функция оператора $\hat{x}$;

г) $[\hat{a}; [\hat{b}; \hat{c}]] + [\hat{b}; [\hat{c}; \hat{a}]] + [\hat{c}; [\hat{a}; \hat{b}]] = 0$.

а) Найдем коммутатор, действуя им на некоторую произвольную функцию $\psi(x, y, z)$.

$$[\hat{p}_x; \hat{x}]\psi.$$

Раскроем коммутатор и подставим явный вид операторов

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

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x; \hat{x}]\psi &= \hat{p}_x \hat{x} \psi - \hat{x} \hat{p}_x \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) + xi\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = \\ &= -i\hbar \psi - i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} = -i\hbar \psi. \end{aligned}$$

Поскольку функция была выбрана произвольно, то равенство доказано.

б) Аналогично пункту а)

$$\begin{aligned} [\hat{p}_y; \hat{x}]\psi &= \hat{p}_y \hat{x} \psi - \hat{x} \hat{p}_y \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}(x\psi) + xi\hbar \frac{\partial}{\partial y} \psi = \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial y} + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0. \end{aligned}$$

в) Покажем, что действие коммутатора на произвольную функцию $\psi(x, y, z)$ равносильно умножению этой функции на правую часть равенства

$$[f(\hat{x})\hat{p}_x; f(\hat{x})]\psi = -i\hbar f'(\hat{x}) \psi.$$

Для этого раскроем коммутатор и подставим явный вид операторов $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x; f(\hat{x})]\psi &= \hat{p}_x f(\hat{x})\psi - f(\hat{x})\hat{p}_x \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(f(\hat{x})\psi) + f(\hat{x})i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = \\ &= -i\hbar \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x} \psi - i\hbar f(\hat{x}) \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar f(\hat{x}) \frac{\partial \psi}{\partial x} = -i\hbar \psi \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x}, \end{aligned}$$

что требовалось доказать.

г) Раскроем коммутаторы

$$\begin{aligned} &[\hat{a}; [\hat{b}; \hat{c}]] + [\hat{b}; [\hat{c}; \hat{a}]] + [\hat{c}; [\hat{a}; \hat{b}]] = \\ &= \hat{a}(\hat{b}\hat{c} - \hat{c}\hat{b}) - (\hat{b}\hat{c} - \hat{c}\hat{b})\hat{a} + \hat{b}(\hat{c}\hat{a} - \hat{a}\hat{c}) - (\hat{c}\hat{a} - \hat{a}\hat{c})\hat{b} + \hat{c}(\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}) - (\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a})\hat{c} = \\ &= \underline{\hat{a}\hat{b}\hat{c}} - \underline{\hat{a}\hat{c}\hat{b}} - \hat{b}\hat{c}\hat{a} + \hat{c}\hat{b}\hat{a} + \hat{b}\hat{c}\hat{a} - \hat{b}\hat{a}\hat{c} - \hat{c}\hat{a}\hat{b} + \underline{\hat{a}\hat{c}\hat{b}} + \hat{c}\hat{a}\hat{b} - \hat{c}\hat{b}\hat{a} - \underline{\hat{a}\hat{b}\hat{c}} + \hat{b}\hat{a}\hat{c} = 0. \end{aligned}$$

Для наглядности подчеркнуты некоторые одинаковые слагаемые с разными знаками.

10. Найдите коммутаторы операторов

- а) $[\hat{L}_x; \hat{x}]$; б) $[\hat{L}_x; \hat{y}]$; в) $[\hat{L}_x; \hat{z}]$; г) $[\hat{L}_x; \hat{p}_x]$; д) $[\hat{L}_x; \hat{p}_y]$;
 е) $[\hat{L}_x; \hat{p}_z]$; ж) $[\hat{L}_x; \hat{L}_y]$; з) $[\hat{L}_x; \hat{L}_z]$; и) $[\hat{L}_x; \hat{L}^2]$.

а) Найдем коммутатор операторов, используя соотношение между операторами проекции момента импульса и проекции импульса и координаты

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

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x; \hat{x}] &= \hat{L}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{L}_x = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) \hat{x} - \hat{x} (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = \\ &= \hat{y}\hat{p}_z \hat{x} - \hat{z}\hat{p}_y \hat{x} - \hat{x} \hat{y}\hat{p}_z + \hat{x} \hat{z}\hat{p}_y = \hat{x} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{x} \hat{z}\hat{p}_y - \hat{x} \hat{y}\hat{p}_z + \hat{x} \hat{z}\hat{p}_y = 0. \end{aligned}$$

б) Аналогично пункту а)

$$[\hat{L}_x; \hat{y}] = \hat{L}_x \hat{y} - \hat{y} \hat{L}_x = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) \hat{y} - \hat{y} (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) =$$

$$= \hat{y}\hat{p}_z \hat{y} - \hat{z}\hat{p}_y \hat{y} - \hat{y} \hat{y}\hat{p}_z + \hat{y} \hat{z}\hat{p}_y = \hat{y} \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z} (\hat{y}\hat{p}_y - i\hbar) - \hat{y} \hat{y}\hat{p}_z + \hat{y} \hat{z}\hat{p}_y = i\hbar \hat{z}.$$

Здесь использованы результаты предыдущей задачи. Из коммутатора $\hat{p}_y \hat{y} - \hat{y} \hat{p}_y = -i\hbar$ следует $\hat{p}_y \hat{y} = \hat{y} \hat{p}_y - i\hbar$.

в) Аналогично пункту б)

$$[\hat{L}_x; \hat{z}] = -i\hbar \hat{y}.$$

$$\begin{aligned} \text{г) } [\hat{L}_x; \hat{p}_x] &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) \hat{p}_x - \hat{p}_x (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = \\ &= \hat{y}\hat{p}_z \hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_y \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{y}\hat{p}_z + \hat{p}_x \hat{z}\hat{p}_y = \\ &= \hat{y}\hat{p}_z \hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_z \hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_x \hat{p}_y = 0. \end{aligned}$$

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

е) Аналогично пункту д)

$$[\hat{L}_x; \hat{p}_z] = -i\hbar \hat{p}_y.$$

ж) Используем результаты предыдущих пунктов и соотношения

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

$$[\hat{L}_x; \hat{L}_y] = \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = \hat{L}_x (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) \hat{L}_x =$$

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

з) Аналогично пункту ж)

$$[\hat{L}_x; \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z.$$

и) Используем результаты предыдущих пунктов

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x; \hat{L}^2] &= \hat{L}_x \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_x = \hat{L}_x (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) - (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) \hat{L}_x = \\ &= \hat{L}_x \hat{L}_x^2 + \hat{L}_x \hat{L}_y^2 + \hat{L}_x \hat{L}_z^2 - \hat{L}_x^2 \hat{L}_x - \hat{L}_y^2 \hat{L}_x - \hat{L}_z^2 \hat{L}_x = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \hat{L}_x^2 \hat{L}_x + (\hat{L}_y \hat{L}_x + i\hbar \hat{L}_z) \hat{L}_y + (\hat{L}_z \hat{L}_x - i\hbar \hat{L}_y) \hat{L}_z - \hat{L}_x^2 \hat{L}_x - \hat{L}_y^2 \hat{L}_x - \hat{L}_z^2 \hat{L}_x = \\ &= i\hbar (\hat{L}_z \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_z) + \hat{L}_y (\hat{L}_y \hat{L}_x + i\hbar \hat{L}_z) + \hat{L}_z (\hat{L}_z \hat{L}_x - i\hbar \hat{L}_y) - \\ &\quad - \hat{L}_y^2 \hat{L}_x - \hat{L}_z^2 \hat{L}_x = i\hbar (\hat{L}_z \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_z) = 0. \end{aligned}$$

Ответ: а) $[\hat{L}_x; \hat{x}] = 0$, б) $[\hat{L}_x; \hat{y}] = i\hbar \hat{z}$, в) $[\hat{L}_x; \hat{z}] = -i\hbar \hat{y}$,

г) $[\hat{L}_x; \hat{p}_x] = 0$, д) $[\hat{L}_x; \hat{p}_y] = i\hbar \hat{p}_z$, е) $[\hat{L}_x; \hat{p}_z] = -i\hbar \hat{p}_y$,

ж) $[\hat{L}_x; \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$, з) $[\hat{L}_x; \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_y$, и) $[\hat{L}_x; \hat{L}^2] = 0$.

11. Докажите, что $[\hat{p}_x; f(\hat{x})] = \hat{p}_x f(\hat{x}) - f(\hat{x}) \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x}$, где $f(\hat{x})$ – функция оператора $\hat{x}$.

Воспользуемся явным видом оператора импульса $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ и подействуем коммутатором $[\hat{p}_x; f(\hat{x})]$ на произвольную дифференцируемую функцию $\psi(x)$:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x; f(\hat{x})]\psi(x) &= \hat{p}_x f(\hat{x})\psi(x) - f(\hat{x})\hat{p}_x\psi(x) = \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (f(x)\psi(x)) - f(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) = \\ &= -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x} \psi - i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} f + i\hbar f \frac{\partial \psi}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x} \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} \psi, \end{aligned}$$

поскольку функция произвольная, то равенство доказано.

12. Докажите, что физические величины L и M одновременно могут быть точно измерены тогда и только тогда, когда операторы этих величин $\hat{L}$ и $\hat{M}$ коммутируют.

Пусть у этих операторов существует произвольная общая собственная функция ψ , и собственные значения операторов, которым соответствует эта функция λ и μ тогда

$$\hat{L}\hat{M}\psi = \hat{L}\mu\psi = \lambda\mu\psi, \quad \hat{M}\hat{L}\psi = \hat{M}\lambda\psi = \mu\lambda\psi,$$

вычтем одно равенство из другого

$$\hat{M}\hat{L}\psi - \hat{L}\hat{M}\psi = \mu\lambda\psi - \lambda\mu\psi = 0,$$

тогда $[\hat{M}; \hat{L}] = \hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M} = 0$, что требовалось доказать.

15. Проверьте, является ли импульс $\hat{p}$ интегралом движения в центральном поле.

Необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю производной по времени от соответствующего оператора

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{\partial \hat{p}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{p}\} = 0,$$

где $\{\hat{H}, \hat{p}\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}]$ – квантовые скобки Пуассона, выраженные

через коммутатор оператора $\hat{p}$ с оператором Гамильтона. В центральном поле оператор Гамильтона имеет вид:

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

где r – модуль радиус-вектора. Оператор $\hat{p}$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю, он коммутирует со слагаемым кинетической энергии $\frac{\hat{p}^2}{2m}$, но не коммутирует с оператором потенциальной энергии:

$$\begin{aligned} [\hat{U}(r), \hat{p}] \psi &= \hat{U}(r) \hat{p} \psi - \hat{p} \hat{U}(r) \psi = -i\hbar (\hat{U}(r) \nabla \psi - \nabla (\hat{U}(r) \psi)) = \\ &= -i\hbar (\hat{U}(r) \nabla \psi - (\nabla \hat{U}(r)) \psi - \hat{U}(r) (\nabla \psi)) = -i\hbar (\nabla \hat{U}(r)) \psi, \end{aligned}$$

следовательно, коммутатор

$$[\hat{U}(r), \hat{p}] = -i\hbar \nabla \hat{U}(r).$$

Вывод: оператор импульса не является интегралом движения в центрально симметричном поле.

16. Проверьте, является ли момент импульса $\hat{L}$ интегралом движения в центральном поле.

Необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю производной по времени от соответствующего оператора

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{L}\} = 0,$$

где $\{\hat{H}, \hat{L}\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}]$ – квантовые скобки Пуассона, выраженные

через коммутатор оператора $\hat{L}$ с оператором Гамильтона. Оператор $\hat{L}$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю. В центральном поле оператор Гамильтона имеет вид:

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

где r – модуль радиус-вектора. Найдем коммутатор оператора одной из проекций импульса $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ с оператором Гамильтона:

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

Операторы $\hat{x}\hat{p}_y$ и $\hat{y}\hat{p}_x$ коммутируют с $\hat{p}_z$. Воспользуемся соотношением $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$ и $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$.

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{L}_z] &= \frac{\hat{p}_y}{2m} [\hat{p}_x^2, \hat{x}] - \frac{\hat{p}_x}{2m} [\hat{p}_y^2, \hat{y}] + \hat{x} [\hat{U}(r), \hat{p}_y] - \hat{y} [\hat{U}(r), \hat{p}_x] = \\ &= -i\hbar \left(\frac{\hat{p}_y \hat{p}_x}{m} - \frac{\hat{p}_x \hat{p}_y}{m} + \hat{x} \left(\hat{U}(r) \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \hat{U}(r) \right) - \hat{y} \left(\hat{U}(r) \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \hat{U}(r) \right) \right) = \\ &= -i\hbar \left(\hat{x} \left(\hat{U}(r) \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial \hat{U}(r)}{\partial y} \right) - \hat{y} \left(\hat{U}(r) \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial \hat{U}(r)}{\partial x} \right) - \hat{U}(r) \frac{\partial}{\partial x} \hat{y} + \hat{U}(r) \frac{\partial}{\partial y} \hat{x} \right) = 0. \end{aligned}$$

Аналогично можно показать, что $[\hat{H}, \hat{L}_x] = 0$ и $[\hat{H}, \hat{L}_y] = 0$.

Вывод: оператор момента импульса является интегралом движения в центральном поле.

17. Проверьте, является ли квадрат момента импульса $\hat{L}^2$ интегралом движения в центральном поле.

Поскольку оператор $\hat{L}^2$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю. Тогда необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю скобки Пуассона соответствующего квантового оператора с оператором Гамильтона.

$$\{\hat{H}, \hat{L}^2\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}^2] = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{H}).$$

Оператор Гамильтона для частицы в центральном поле имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r),$$

где $\hat{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ – оператор, содержащий только производные по угловым переменным, следовательно, он коммутирует с любой функцией радиальной переменной.

Тогда

$$[\hat{H}; \hat{L}^2] = \left[\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}; \hat{L}^2 \right] + [\hat{U}(r); \hat{L}^2] = 0,$$

следовательно, момент количества движения является интегралом движения. В классическом случае модуль момента импульса сохраняется.

18. Покажите, что квадрат момента количества движения свободной частицы является интегралом движения.

Поскольку оператор $\hat{L}^2$ явно не зависит от времени, следовательно, его частная производная равна нулю. Тогда необходимым и достаточным условием того, что физическая величина является интегралом движения, является равенство нулю скобки Пуассона соответствующего квантового оператора с оператором Гамильтона.

$$\{\hat{H}; \hat{L}^2\} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}; \hat{L}^2] = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{L}^2 - \hat{L}^2\hat{H}).$$

Оператор Гамильтона для свободной частицы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m}.$$

Поскольку коммутатор

$$[\hat{H}; \hat{L}^2] = \left[\frac{\hat{P}^2}{2m}; \hat{L}^2 \right] = \frac{1}{2m} [\hat{P}^2; \hat{L}^2] = 0,$$

следовательно, момент количества движения является интегралом движения свободной частицы. В классическом случае модуль момента импульса свободной частицы сохраняется.

8. Найдите среднее значение проекции момента импульса $\hat{L}_z$ частицы, находящейся в состоянии $\Psi(\theta, \varphi) = A \sin \theta \cos \varphi$.

По определению среднего значения физической величины L^2 , которой соответствует оператор $\hat{L}^2$

$$\langle L^2 \rangle = (\Psi; \hat{L}^2 \Psi),$$

в сферических координатах оператор $\hat{L}^2$ имеет вид

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right),$$

тогда среднее значение

$$\langle L^2 \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Psi^* \hat{L}^2 \Psi \sin \theta d\theta d\varphi =$$

$$= -\hbar^2 |A|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta \cos \varphi \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \sin \theta \cos \varphi \sin \theta d\theta d\varphi =$$

$$= -\hbar^2 |A|^2 \left[\int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi \int_0^\pi \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \sin^2 \theta d\theta - \int_0^{2\pi} \cos \varphi \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \cos \varphi d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \right] = \frac{8}{3} \hbar^2 |A|^2 \pi.$$

Пронормируем функцию Ψ

$$1 = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Psi^* \Psi \sin \theta d\theta d\varphi = |A|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin^2 \theta \cos^2 \varphi \sin \theta d\theta d\varphi =$$

$$= -|A|^2 \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi \int_0^\pi \sin^2 \theta d \cos \theta = -|A|^2 \pi \left(\cos \theta - \frac{\cos^3 \theta}{3} \right) \Big|_0^\pi = \frac{4}{3} |A|^2 \pi,$$

$$|A|^2 = \frac{3}{4\pi},$$

тогда

$$\langle L^2 \rangle = 2\hbar^2.$$

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

9. Найдите среднее значение координаты $\langle x \rangle$ и импульса

$\langle p_x \rangle$ частицы, находящейся в состоянии $\Psi(x) = A e^{ikx - \frac{x^2}{a^2}}$.

По определению среднего значения

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx = |A|^2 \int e^{-ikx - a^2 x^2} x e^{ikx - a^2 x^2} dx = |A|^2 \int x e^{-a^2 x^2} dx = 0,$$

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx = \int \Psi^* \left(\hbar k + \frac{i\hbar x}{a} \right) \Psi dx = \\ &= \hbar k \int \Psi^* \Psi dx + \frac{i\hbar x}{a} \int \Psi^* x \Psi dx = \hbar k. \end{aligned}$$

Ответ: $\langle x \rangle = 0$, $\langle p_x \rangle = \hbar k$.

10. Найдите среднее значение квадратичного отклонения координаты $\langle \Delta x^2 \rangle$ частицы, находящейся в состоянии $\Psi(x) = A e^{ikx - a^2 x^2}$.

Поскольку среднее значение координаты в этом состоянии равно нулю, то $\Delta x = x - \langle x \rangle = x$ и $\langle \Delta x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle$.

По определению среднего значения квадрата координаты

$$\langle x^2 \rangle = \int \Psi^* x^2 \Psi dx = |A|^2 \int e^{-ikx - a^2 x^2} x^2 e^{ikx - a^2 x^2} dx = |A|^2 \int x^2 e^{-a^2 x^2} dx.$$

Воспользуемся интегралом Пуассона

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}, \quad \frac{\partial}{\partial \beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta x^2} dx = \frac{\partial}{\partial \beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}}, \quad - \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx = -\frac{1}{2\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}},$$

тогда с учетом нормировки $A = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}}$ (задача 8)

$$\langle x^2 \rangle = \frac{|A|^2 \sqrt{\pi}}{2a^3} = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{2a^3} = \frac{1}{2a^2}.$$

Ответ: $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2a^2}.$

11. Проверьте соотношение неопределенностей для частицы, описываемой функцией $\Psi(x) = Ae^{ikx - \alpha x^2}$.

Пронормируем волновую функцию

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx - \alpha x^2} \cdot e^{ikx - \alpha x^2} dx = \\ &= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}, \\ A &= \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{1/4}. \end{aligned}$$

Найдем среднее значение квадрата отклонения координаты для случая, когда начало отсчета выбрано в точке локализации частицы $\bar{x} = 0$.

$$\begin{aligned} \Delta x^2 &= \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} = (\Psi; \hat{x}^2 \Psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{x}^2 \Psi dx = \\ &= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx - \alpha x^2} \cdot x^2 \cdot e^{ikx - \alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \cdot e^{-2\alpha x^2} dx. \end{aligned}$$

Значение интеграла найдем с помощью интеграла Пуассона

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$

Продифференцируем интеграл Пуассона по α

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(\alpha)}{\partial \alpha} &= - \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}. \\ \Delta x^2 &= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{8\alpha^3}} = \frac{1}{4\alpha}. \end{aligned}$$

Найдем среднее значение квадрата отклонения импульса для случая, когда начало отсчета движется с постоянной скоростью, равной скорости частицы $\bar{p} = p_0 = \hbar k$.

$$\begin{aligned} \Delta p^2 &= \overline{(p - \bar{p})^2} = (\Psi; (\hat{p} - p_0)^2 \Psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (\hat{p} - p_0)^2 \Psi dx = \\ &= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx - \alpha x^2} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - p_0 \right)^2 e^{ikx - \alpha x^2} dx = \\ &= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \hbar k \right) e^{-ikx - \alpha x^2} \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \hbar k \right) e^{ikx - \alpha x^2} dx = \\ &= \hbar^2 \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (k - 2i\alpha x - k) e^{-ikx - \alpha x^2} \cdot (k + 2i\alpha x - k) e^{ikx - \alpha x^2} dx = \\ &= 4\alpha^2 \hbar^2 \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx = 4\alpha^2 \hbar^2 \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{8\alpha^3}} = \alpha \hbar^2. \end{aligned}$$

Найдем

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\overline{(x - \bar{x})^2} \overline{(p - \bar{p})^2}} = \sqrt{\frac{1}{4\alpha} \alpha \hbar^2} = \frac{\hbar}{2}.$$

Вывод: соотношение неопределенностей выполняется.

$$\frac{d\psi}{\psi} = i\hbar\lambda d\varphi,$$

его решение $\psi = Ce^{i\hbar\lambda\varphi}$. В силу периодичности функции угловой координаты $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$:

$$Ce^{i\hbar\lambda\varphi} = Ce^{i\hbar\lambda\varphi + i\hbar\lambda 2\pi}, \quad e^{i\hbar\lambda 2\pi} = 1,$$

следовательно, $\hbar\lambda = m$, где m – целое. То есть собственному значению $L_z = m\hbar$ соответствует собственная функция $\psi_m = Ce^{im\varphi}$.

Пронормируем ее:

$$1 = \int_0^{2\pi} |\psi_m(\varphi)|^2 d\varphi = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi |C|^2, \quad \text{откуда } C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},$$

$$\text{тогда } \psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

Собственному значению $L_z = 3\hbar$ соответствует функция

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

$$\text{Ответ: } \psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad L_z = m\hbar, \quad \psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

Задачи

1. Частица находится в основном состоянии в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a . Найдите среднее значение координаты и квадрата координаты частицы.

Волновая функция частицы в основном состоянии

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a},$$

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{\pi x}{a} x \sin \frac{\pi x}{a} dx = \frac{1}{a} \int_0^a x \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a} \right) dx =$$

$$= \frac{1}{a} \left[\frac{x^2}{2} - \frac{xa \sin \frac{2\pi x}{a}}{2\pi} - \frac{a^2 \cos \frac{2\pi x}{a}}{4\pi^2} \right]_0^a = \frac{1}{a} \cdot \frac{a^2}{2} = \frac{a}{2}$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \sin \frac{\pi x}{a} x^2 \sin \frac{\pi x}{a} dx = \frac{1}{a} \int_0^a x^2 \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a} \right) dx =$$

$$= \frac{1}{a} \left[\frac{x^3}{3} - \frac{x^2 a \sin \frac{2\pi x}{a}}{2\pi} - \frac{xa^2 \cos \frac{2\pi x}{a}}{2\pi^2} + \frac{a^3 \sin \frac{2\pi x}{a}}{4\pi^3} \right]_0^a =$$

$$= \frac{1}{a} \left(\frac{a^3}{3} - \frac{a^3}{2\pi^2} \right) = a^2 \frac{2\pi^2 - 3}{6\pi^2}.$$

Ответ: $\langle x \rangle = \frac{a}{2}, \quad \langle x^2 \rangle = a^2 \frac{2\pi^2 - 3}{6\pi^2}.$

2. Найдите уровни энергии и собственные функции частицы массы m , находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме вида

$$U = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq b, \quad 0 \leq z \leq c, \\ \infty & \text{при } x < 0, x > a, \quad y < 0, y > b, \quad z < 0, z > c. \end{cases}$$

Вне ямы, где потенциал равен ∞ , частица находиться не может, то есть вероятность равна 0, волновая функция тоже равна нулю. На границах ямы волновая функция тоже равна нулю.

Будем искать решение трехмерного уравнения Шредингера внутри ямы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E \psi ,$$

$$\Delta \psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 .$$

Будем искать решение уравнения в виде

$$\psi(x, y, z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z) .$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) XYZ + \frac{2mE}{\hbar^2} XYZ = 0 ,$$

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} YZ + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} XZ + \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} XY + \frac{2mE}{\hbar^2} XYZ = 0 ,$$

разделим все уравнение на XYZ .

$$\frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} ,$$

каждое из слагаемых в левой части зависит от разных переменных, их сумма – постоянная величина, следовательно, каждое из этих слагаемых – тоже константа.

Тогда уравнения и граничные условия примут вид

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{2mE_1}{\hbar^2} X = 0 , \quad X(0) = X(a) = 0 ,$$

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{2mE_2}{\hbar^2} Y = 0 , \quad Y(0) = Y(b) = 0 ,$$

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + \frac{2mE_3}{\hbar^2} Z = 0 , \quad Z(0) = Z(c) = 0 ,$$

где $E = E_1 + E_2 + E_3$. Решения этих уравнений аналогичны решению уравнений для одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямы:

$$X_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} , \quad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n_1^2 ,$$

$$Y_{n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{\pi n_2 y}{b}, \quad E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mb^2} n_2^2,$$

$$Z_{n_3}(z) = \sqrt{\frac{2}{c}} \sin \frac{\pi n_3 z}{c}, \quad E_3 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mc^2} n_3^2,$$

тогда волновая функция

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{b} \sin \frac{\pi n_3 z}{c}$$

и энергия

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

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

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{b} \sin \frac{\pi n_3 z}{c}.$$

3. Найдите возможные собственные значения энергии и их вероятности для частицы массы m , находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a в состоянии $\Psi(x) = Ax(a-x)$.

Сначала нормируем функцию

$$1 = |A|^2 \int_0^a x^2 (a-x)^2 dx = |A|^2 \left(\frac{x^3 a^2}{3} - \frac{2x^4 a}{4} + \frac{x^5}{5} \right) \Bigg|_0^a = \frac{|A|^2 a^5}{30},$$

$$A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}.$$

Собственные функции оператора частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a},$$

соответствующие им уровни энергии

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma}.$$

Разложение функции состояния по собственным функциям:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

содержит коэффициенты разложения c_n , такие, что

$$c_n = (\psi_n(x); \psi(x)),$$

$$\begin{aligned} c_n &= \int_0^a \psi_n^*(x) \psi(x) dx = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x) dx = \\ &= \frac{\sqrt{60}}{a^2} \int_0^a x \sin \frac{\pi n x}{a} dx - \frac{\sqrt{60}}{a^3} \int_0^a x^2 \sin \frac{\pi n x}{a} dx = \\ &= \frac{\sqrt{60}}{a^2} \left(\frac{a}{\pi n} \right)^2 \int_0^a \left(\frac{\pi n x}{a} \right) \sin \frac{\pi n x}{a} d \left(\frac{\pi n x}{a} \right) - \\ &\quad - \frac{\sqrt{60}}{a^3} \left(\frac{a}{\pi n} \right)^3 \int_0^a \left(\frac{\pi n x}{a} \right)^2 \sin \frac{\pi n x}{a} d \left(\frac{\pi n x}{a} \right) = \\ &= \frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^2} \int_0^{\pi n} y \sin y dy - \frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^3} \int_0^{\pi n} y^2 \sin y dy = \\ &= \frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^2} (\sin y - y \cos y) \Big|_0^{\pi n} - \frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^3} ((1-y^2) \cos y + 2y \sin y) \Big|_0^{\pi n} = \\ &= \frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^2} (\sin \pi n - \pi n \cos \pi n - \sin 0) - \\ &\quad - \frac{\sqrt{60}}{(\pi n)^3} ((1 - (\pi n)^2) \cos \pi n + 2\pi n \sin \pi n - \cos 0) = \\ &= \frac{2\sqrt{60}}{(\pi n)^3} (1 - (-1)^n) = \begin{cases} \frac{2\sqrt{60}}{(\pi n)^3} & \text{при } n = 2k + 1 \text{ (нечетное)} \\ 0 & \text{при } n = 2k \text{ (четное)} \end{cases} \end{aligned}$$

Вероятности

$$w_n = \begin{cases} \frac{960}{\pi^6 n^6} & \text{при } n = 2k + 1 \text{ (нечетное)} \\ 0 & \text{при } n = 2k \text{ (четное)} \end{cases}$$

Ответ: $w_n = \begin{cases} \frac{960}{\pi^6 n^6} & \text{при } n = 2k + 1 \text{ (нечетное)} \\ 0 & \text{при } n = 2k \text{ (четное)} \end{cases}.$

4. Покажите, что волновая функция $\Psi(x) = Ax(a-x)$ может достаточно точно описывать основное состояние частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

Исходя из ответа задачи 3, видим, что вероятность нахождения частицы на первом уровне равна

$$w_1 = \frac{960}{\pi^6} = 0,9985$$

На следующем разрешенном ($n=3$)

$$w_3 = \frac{960}{3^6 \pi^6} = \frac{960}{729 \pi^6} = 0,0014$$

Вероятности следующих уровней меньше w_1 в n^6 раз. Следовательно, волновая функция $\Psi(x) = Ax(a-x)$ близка к функции состояния первого уровня частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

5. Найдите вероятность того, что частица массы m , находящаяся в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной a в состоянии $\psi(x) = Ax(a-x)$, имеет энергию

$$E = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

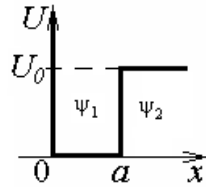
Энергия $E = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ соответствует уровню энергии частицы массы m в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a с номером $n=3$. Исходя из задач 3 и 4 искомая вероятность

$$w_3 = \frac{960}{3^6 \pi^6} = \frac{960}{729 \pi^6} = 0,0014.$$

Ответ: $w_3 = 0,0014$.

6. Частица массы m находится в полубесконечной потенциальной яме с потенциалом вида

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



Найдите уравнение на уровни энергии. Найдите условие появления первого и n -го дискретного энергетического уровня.

Разобьем пространство на три области, где волновые функции

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0; \\ \psi_1 & 0 < x < a; \\ \psi_2 & x \geq a. \end{cases}$$

Уравнения Шредингера в одномерном случае

$$\psi_1'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1 = 0, \quad \psi_2'' - \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi_2 = 0.$$

Условия непрерывности, гладкости и ограниченности функции

$$\psi_1(0) = 0, \quad \psi_1(a) = \psi_2(a), \quad \psi_1'(a) = \psi_2'(a), \quad |\psi_2(\infty)| < \infty.$$

Решение этих уравнений:

$$\psi_1(x) = A \sin(kx + b), \text{ где } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ из } \psi_1(0) = 0 \Rightarrow b = 0,$$

$$\psi_2(x) = Be^{-qx} + Ce^{qx}, \text{ где } q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}, \text{ из } |\psi_2(\infty)| < \infty \Rightarrow C = 0,$$

$$\text{из } \psi_1(a) = \psi_2(a) \Rightarrow A \sin ka = Be^{-qa},$$

$$\text{из } \psi_1'(a) = \psi_2'(a) \Rightarrow kA \cos ka = -qBe^{-qa}.$$

Из последних уравнений

$$\frac{1}{k} \operatorname{tg} ka = -\frac{1}{q}.$$

Преобразуем

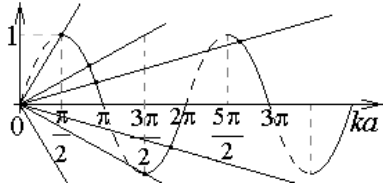
$$\sin ka = \frac{\pm \operatorname{tg} ka}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 ka}} = \pm \frac{k}{q \sqrt{1 + \frac{k^2}{q^2}}} = \pm \frac{k}{\sqrt{q^2 + k^2}},$$

$$q^2 + k^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mU_0}{\hbar^2},$$

$$\sin ka = \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}a^2} ka$$

– уравнение на уровни энергии, т.к. $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Это уравнение можно решить графически. Решение – точки пересечения синусоиды и прямой, зависящих от параметра ka . Удовлетворяют условию только те области определения синусоиды, где $\operatorname{tg} ka$ отрицателен. Угол наклона прямой



зависит от множителя $\frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}a^2}$, то есть от параметров ямы – ширины a и глубины U_0 .

Количество точек пересечения конечно. Нет ни одного уровня энергии, если $ka < \frac{\pi}{2}$, $U_0 a^2 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$. Первый уровень появляется,

если $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$. При увеличении размеров ямы количество уровней увеличивается, появляется n -й уровень при $ka = \pi \left(n - \frac{1}{2} \right)$, $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} (2n-1)^2$.

Ответ: Уравнение $\sin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}a^2} \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a$ дает дискретный спектр, первый уровень появляется при $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$, n -й – при $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} (2n-1)^2$.

7. В потенциальной яме задачи 6 энергия единственного уровня $E = U_0/2$. Определите: а) параметры ямы $U_0 a^2$, б) наиболее вероятное значение координаты частицы, в) найдите вероятность нахождения частицы внутри ямы, г) постройте график плотности вероятности.

Воспользуемся решением задачи 6. а) Поскольку уровень единственный, то

$$\frac{\pi}{2} < ka < \frac{3\pi}{2}, \quad \frac{\pi}{2} < \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a < \frac{3\pi}{2}, \quad \frac{\pi}{2} < \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} a < \frac{3\pi}{2}.$$

Уравнение на уровни энергии даст

$$\sin ka = \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}} k = \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}} \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2}}{2},$$

$$ka = \frac{3\pi}{4}, \quad \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} a = \frac{3\pi}{4}, \quad U_0 a^2 = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{16m}.$$

б) волновая функция

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin kx & 0 < x < a; \\ B e^{-qx} & x \geq a. \end{cases}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} = k.$$

Плотность вероятности

$$w(x) = \begin{cases} A^2 \sin^2 kx & 0 < x < a; \\ B^2 e^{-2qx} & x \geq a. \end{cases}$$

Очевидно, что наиболее вероятное положение частицы – внутри ямы. Чтобы найти эту координату, найдем экстремум плотности вероятности.

$$\frac{dw}{dx} = a^2 2 \sin kx \cdot k \cdot \cos kx = 0, \quad \sin 2kx = 0, \quad 2kx = \pi n, \quad x_n = \frac{\pi n}{2k}.$$

Из а)

$$k = \frac{3\pi}{4a}, \quad x_n = \frac{4a\pi n}{2 \cdot 3\pi} = \frac{2an}{3}.$$

Наиболее вероятное значение координаты $x_1 = \frac{2a}{3}$.

в) Вероятность нахождения частицы внутри ямы

$$w_1 = \int_0^a A^2 \sin^2 kx dx = \frac{A^2}{2} \int_0^a (1 - \cos 2kx) dx = \frac{A^2}{2} \left(a - \frac{1}{2k} \sin 2ka \right),$$

поскольку $ka = \frac{3\pi}{4}$,

$$w_1 = \frac{A^2}{2} \left(a - \frac{4a}{2 \cdot 3\pi} \sin 2 \frac{3\pi}{4} \right) = \frac{A^2 a}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{3\pi} \right).$$

Найдем так же вероятность нахождения частицы вне ямы

$$w_2 = \int_a^\infty B^2 e^{-2qx} dx = \frac{B^2 e^{-2qa}}{2q},$$

поскольку $q = k = \frac{3\pi}{4a}$ (см. б)), и $A \sin ka = B e^{-qa}$ (см. б), то

$$B e^{-qa} = -A \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad w_2 = \frac{A^2 a}{3\pi}.$$

Полная вероятность $w_1 + w_2 = 1$, откуда

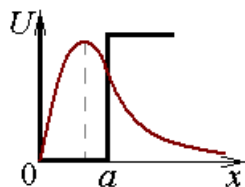
$$1 = \frac{A^2 a}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{3\pi} + \frac{2}{3\pi} \right),$$

тогда $A^2 = \frac{6\pi}{a(3\pi + \sqrt{2} + 4)}.$

Вероятность нахождения частицы внутри ямы

$$w_1 = \frac{3\pi + \sqrt{2}}{3\pi + \sqrt{2} + 4} = 0,73.$$

Ответ: а) $U_0 a^2 = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{16m}$, б) $x_1 = \frac{2a}{3}$, в) $w_1 = 0,73$.



8. Параметры ямы задачи 6 $U_0 a^2 = \frac{75\hbar^2}{m}$. Определите

количество уровней энергии.

Воспользуемся ответом задачи 6

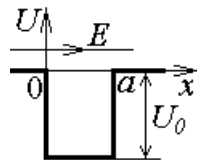
$$\frac{75\hbar^2}{m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} (2n-1)^2, \quad (2n-1)^2 = \frac{75 \cdot 8}{\pi^2}, \quad n = 4,3,$$

то есть $n = 4$.

Ответ: $n = 4$.

9. Частица находится в потенциальном поле вида

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



Найдите уравнение, определяющее возможные значения уровней энергии при $E < U_0$.

Покажите, что уровни энергии дискретны.

Разобьем пространство на три области, где волновые функции

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1 & x \leq 0; \\ \psi_2 & 0 < x < a; \\ \psi_3 & x \geq a. \end{cases}$$

Уравнения Шредингера в одномерном случае

$$\psi_2'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_2 = 0, \quad \psi_{1,3}'' - \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi_{1,3} = 0.$$

Условия непрерывности, гладкости и ограниченности функции на бесконечности:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0), \quad \psi_2(a) = \psi_3(a), \quad \psi_2'(a) = \psi_3'(a), \\ |\psi_1(-\infty)| < \infty, \quad |\psi_3(\infty)| < \infty.$$

Решение этих уравнений:

$$\psi_2(x) = A \sin(kx + b), \text{ где } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$$\psi_1(x) = B e^{-qx} + C e^{qx}, \quad \psi_3(x) = D e^{-qx} + E e^{qx}, \text{ где } q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar},$$

$$\text{из } |\psi_1(-\infty)| < \infty \Rightarrow B = 0, \text{ из } |\psi_3(\infty)| < \infty \Rightarrow E = 0,$$

$$\text{из } \psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A \sin b = C, \text{ из } \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \Rightarrow k A \cos b = q C,$$

$$\text{из } \psi_1(a) = \psi_2(a) \Rightarrow A \sin(ka + b) = D e^{-qa},$$

$$\text{из } \psi_1'(a) = \psi_2'(a) \Rightarrow k A \cos(ka + b) = -q D e^{-qa}.$$

Из последних уравнений

$$\operatorname{tg} b = \frac{k}{q}, \quad \operatorname{tg}(ka + b) = -\frac{k}{q},$$

$$\text{т.е. } \operatorname{tg}(ka + b) = -\operatorname{tg} ka, \text{ из тригонометрии } ka + b = \pi n - b, \text{ т.е. } ka = \pi n - 2b.$$

Преобразуем

$$\sin b = \frac{\pm \operatorname{tg} b}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 b}} = \pm \frac{k}{q \sqrt{1 + \frac{k^2}{q^2}}} = \pm \frac{k}{\sqrt{q^2 + k^2}},$$

$$q^2 + k^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mU_0}{\hbar^2}, \quad \sin b = \pm \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}},$$

$$\text{то уравнение на уровни энергии } ka = \pi n - 2 \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}},$$

$$\text{т.к. } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \text{ то } \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = \pi n - 2 \arcsin \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}},$$

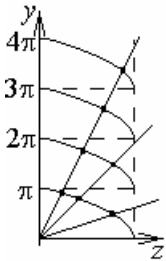
$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} a \sqrt{\frac{E}{U_0}} = \pi n - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E}{U_0}},$$

это уравнение вида $\alpha z = \pi n - 2 \arcsin z$. Его можно решать графически. Решение – точки пересечения графика семейства функций $y = \pi n - 2 \arcsin z$ и прямой $y = \alpha z$. Угол наклона прямой зависит

от множителя $\alpha = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} a$, то есть от параметров ямы – ширины a и глубины U_0 . Уровни энергии дискретны.

В этой потенциальной яме обязательно есть хотя бы один уровень энергии. Из графика видно, что прямая обязательно пересекает хотя одну кривую семейства. Количество точек пересечения конечно.

$$\text{Ответ: } \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} a \sqrt{\frac{E}{U_0}} = \pi n - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E}{U_0}}.$$



10. Частица находится в потенциальном поле задачи 9. Найдите параметры ямы $U_0 a^2$, при которых: а) энергия основного состояния равна $E = U_0/2$, б) появляется n -й уровень энергии, в) определите количество уровней энергии, если размеры ямы удовлетворяют соотношению $U_0 a^2 = \frac{75\hbar^2}{m}$.

а) Воспользуемся результатами задачи 9.

$$\frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} a \sqrt{\frac{U_0}{2U_0}} = \pi \cdot 1 - 2 \arcsin \sqrt{\frac{U_0}{2U_0}},$$

$$\frac{\sqrt{mU_0}}{\hbar} a = \pi - 2 \frac{\pi}{4} = \frac{\pi}{2}, \quad U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m}.$$

б) Условия возникновения нового уровня – $ka = \pi(n-1)$, подставим это в

$$\pi(n-1) = \pi n - 2 \arcsin \frac{\hbar \pi(n-1)}{a \sqrt{2mU_0}},$$

$$\frac{\hbar \pi(n-1)}{a \sqrt{2mU_0}} = 1, \quad U_0 a^2 = \frac{\pi^2 (n-1)^2 \hbar^2}{2m}.$$

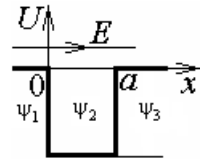
в) $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 (n-1)^2 \hbar^2}{2m} = \frac{75 \hbar^2}{m}, \quad (n-1)^2 = \frac{150}{\pi^2} = 15,3, \quad n = 4,8,$

поскольку n – целое, причем по условию предыдущего пункта пятый уровень не появился, то $n = 4$.

Ответ: а) $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m}$, б) $U_0 a^2 = \frac{\pi^2 (n-1)^2 \hbar^2}{2m}$, в) $n = 4$.

11. Частица массы m падает слева на симметричную потенциальную яму глубиной U_0

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



Энергия частицы $E > 0$. Найдите коэффициент прозрачности D ямы и коэффициент отражения частицы R .

Разобьем пространство на три области, где волновые функции

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1 & x \leq 0; \\ \psi_2 & 0 < x < a; \\ \psi_3 & x \geq a. \end{cases}$$

Уравнения Шредингера в одномерном случае

$$\psi_2'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_2 = 0, \quad \psi_{1,3}'' + \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2} \psi_{1,3} = 0.$$

Условия непрерывности, гладкости и ограниченности функции

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \psi'_1(0) = \psi'_2(0), \quad \psi_2(a) = \psi_3(a), \quad \psi'_2(a) = \psi'_3(a),$$

$$|\psi_1(-\infty)| < \infty, \quad |\psi_3(\infty)| < \infty.$$

Решение этих уравнений:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{iqx} + B_1 e^{-iqx}, \quad \psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, \quad \text{где}$$

$$q = \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar},$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, \quad \text{где } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Аналогично задаче 63 $B_3 = 0$.

$$\text{из } \psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2,$$

$$\text{из } \psi'_1(0) = \psi'_2(0) \Rightarrow A_1 - B_1 = (A_2 - B_2) \frac{q}{k}.$$

$$\text{из } \psi_1(a) = \psi_2(a) \Rightarrow A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika} + B_2 e^{-ika} = A_3 e^{ika},$$

$$\text{из } \psi'_1(a) = \psi'_2(a) \Rightarrow A_2 e^{iqa} - B_2 e^{-iqa} = \frac{k}{q} A_3 e^{ika}.$$

Из последних двух уравнений

$$A_2 = \frac{1}{2} e^{i(k-q)a} \left(\frac{q+k}{q} \right) A_3, \quad B_2 = \frac{1}{2} e^{i(k+q)a} \left(\frac{q-k}{q} \right) A_3.$$

Из первых двух уравнений с учетом полученных выражений

$$A_1 = \frac{1}{2} \left(A_2 \left(1 + \frac{q}{k} \right) + B_2 \left(1 - \frac{q}{k} \right) \right) =$$

$$= \frac{A_3}{4} \left(e^{i(k-q)a} \frac{q+k}{q} \frac{q+k}{k} + e^{i(k+q)a} \frac{q-k}{q} \frac{k-q}{k} \right) =$$

$$= \frac{A_3}{4kq} \left(e^{-iqa} (q+k)^2 - e^{iqa} (q-k)^2 \right) e^{ika}.$$

$$B_1 = \frac{1}{2} \left(A_2 \left(1 - \frac{q}{k} \right) + B_2 \left(1 + \frac{q}{k} \right) \right) =$$

$$= \frac{A_3}{4} \left(e^{i(k-q)a} \frac{k-q}{q} \frac{q+k}{k} + e^{i(k+q)a} \frac{q-k}{q} \frac{k+q}{k} \right) =$$

$$= \frac{A_3}{4kq} (e^{iqa} - e^{-iqa}) (q^2 - k^2) e^{ika} = \frac{iA_3}{2kq} (q^2 - k^2) e^{ika} \sin qa.$$

Коэффициент прозрачности:

$$D = \frac{w_{прош}}{w_{наб}} = \frac{|\Psi_{прош}|^2}{|\Psi_{наб}|^2} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{16k^2 q^2}{|e^{-iqa}(q+k)^2 - e^{iqa}(q-k)^2|^2}.$$

Коэффициент отражения:

$$R = \frac{w_{отр}}{w_{наб}} = \frac{|\Psi_{отр}|^2}{|\Psi_{наб}|^2} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{2(q^2 - k^2) \sin qa}{(e^{-iqa}(q+k)^2 - e^{iqa}(q-k)^2)} \right|^2.$$

Находим модуль комплексного знаменателя и получаем:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 - q^2)^2}{4k^2 q^2} \sin^2 qa}.$$

$$k^2 - q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2} = -\frac{2mU_0}{\hbar^2},$$

$$k^2 q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2} = \frac{2mE(E + U_0)}{\hbar^4}.$$

В результате $D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E + U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar} a}.$

$$R = \frac{\frac{U_0^2}{4E(E + U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar} a}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E + U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar} a}.$$

Ответ: $D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E + U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E + U_0)}}{\hbar} a},$

$$R = \frac{\frac{U_0^2}{4E(E+U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar} a}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E+U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar} a}.$$

12. Для частицы из задачи 11 найдите возможные значения энергии E , при которых частица беспрепятственно проходит над ямой, и ширину ямы, при которой коэффициент прозрачности минимален.

Воспользуемся результатами задачи 11:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E+U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar} a},$$

в знаменателе может быть $\sin \frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar} a = 0$, тогда коэффициент $D = 1$.

$$\frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar} a = \pi n, \quad E = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2} - U_0.$$

Если λ_0 — де Бройлевская длина волны частицы, то волновое число

$$\frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar} = k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}, \quad k_0 a = \pi n, \quad a = \frac{n}{2} \lambda_0.$$

Это значит, что если ширина ямы равна целому числу полудлин волн де Бройля, то частица проходит яму беспрепятственно. Для фотона примером такой ямы может служить эффект «просветления оптики».

Коэффициент прозрачности минимален, если $\sin \frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar} a = \pm 1$. При этом

$$\frac{\sqrt{2m(E+U_0)}}{\hbar} a = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 - U_0.$$

$$D_{\min} = \frac{4E(E+U_0)}{4E(E+U_0) + U_0^2} = \frac{4E(E+U_0)}{(2E+U_0)^2}.$$

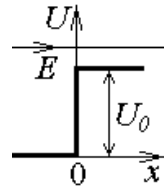
Ширина ямы с минимальным коэффициентом отражения

$$a = \frac{\lambda_0}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Для оптики это ширина так называемой «четвертьволновой» пленки.

Ответ: $E = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2} - U_0, \quad a = \frac{\lambda_0}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right).$

13. Частица массы m падает слева на потенциальный барьер высотой U_0 . Энергия частицы $E > U_0$. Найдите коэффициент отражения частицы от барьера R и коэффициент прозрачности D .



Разобьем пространство на две области, где волновые функции

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1 & x \leq 0; \\ \psi_2 & x \geq a. \end{cases}$$

Уравнения Шредингера в одномерном случае

$$\psi_1'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1 = 0, \quad \psi_2'' + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \psi_2 = 0.$$

Условия непрерывности, гладкости и ограниченности функции

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0), \quad |\psi_1(-\infty)| < \infty, \quad |\psi_2(\infty)| < \infty.$$

Решение этих уравнений:

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{где } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$$\psi_2(x) = Ce^{iqx} + Ge^{-iqx}, \quad \text{где } q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar},$$

– плоские волны, в функции $\psi_1(x)$ слагаемое Ae^{ikx} описывает волну, падающую на барьер, а Be^{-ikx} – отраженную, аналогично в $\psi_2(x)$ слагаемое Ce^{iqx} описывает прошедшую над барьером волну, а отраженной волны нет, поэтому $G = 0$.

Из граничных условий

$$\text{из } \psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A + B = C,$$

$$\text{из } \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \Rightarrow kA - kB = qC, \text{ или } A - B = \frac{q}{k}C.$$

$$\text{Выразим коэффициенты } A = \frac{k+q}{2k}C, \quad B = \frac{k-q}{2k}C.$$

Коэффициент отражения частицы от барьера

$$R = \frac{w_{\text{отр}}}{w_{\text{пад}}} = \frac{|\psi_{\text{отр}}|^2}{|\psi_{\text{пад}}|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{k-q}{k+q} \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{2mE} - \sqrt{2m(E-U_0)}}{\sqrt{2mE} + \sqrt{2m(E-U_0)}} \right|^2,$$

сокращая, получим:

$$R = \left| \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0}} \right|^2 = \left| \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E-U_0})^2}{E - E + U_0} \right|^2,$$

$$R = \left(2\frac{E}{U_0} - 1 - 2\sqrt{\frac{E}{U_0} - 1} \right)^2.$$

Коэффициент прозрачности

$$D = \frac{w_{\text{прош}}}{w_{\text{пад}}} = \frac{|\psi_{\text{прош}}|^2}{|\psi_{\text{пад}}|^2} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left| \frac{2k}{k+q} \right|^2 = \left| \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-U_0}} \right|^2,$$

$$D = 4 \left(1 - \frac{E}{U_0} - \left(2\frac{E}{U_0} + 1 \right) \sqrt{\frac{E}{U_0} - 1} \right).$$

Ответ:

$$R = \left(2\frac{E}{U_0} - 1 - 2\sqrt{\frac{E}{U_0} - 1} \right)^2, \quad D = 4 \left(1 - \frac{E}{U_0} - \left(2\frac{E}{U_0} + 1 \right) \sqrt{\frac{E}{U_0} - 1} \right).$$

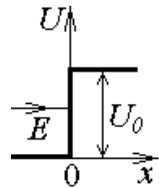
14. Для частицы из задачи 13 найдите приближенные значения коэффициента отражения частицы от барьера R и коэффициента прозрачности D для случаев: а) частица пролетает непосредственно над барьером $E \approx U_0$ и б) частица пролетает значительно выше над барьером $E \gg U_0$.

Проанализируем полученные в задаче 13 результаты. При $E \approx U_0$, $\frac{E}{U_0} \approx 1$ коэффициент отражения близок к единице, а коэффициент прозрачности – к нулю. В обратном случае, когда $E \gg U_0$, $\frac{U_0}{E} \approx 0$

$$R = \left| \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}} \right|^2 \approx 0, \quad D = \left| \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}} \right|^2 \approx 1$$

коэффициент отражения близок к нулю, а коэффициент прозрачности – к единице.

15. Частица массы m падает слева на потенциальный барьер высотой U_0 . Энергия частицы $E < U_0$. Найдите эффективную глубину $\chi_{эф}$ проникновения частицы под барьер $\left(w(\chi_{эф}) = \frac{w_0}{e} \right)$. Вычислите $\chi_{эф}$ для электрона, если $E - U_0 = 1$ эВ.



Найдем решение уравнения Шредингера для частицы под барьером $x > 0$:

$$\psi'' - \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi = 0.$$

Решение $\psi(x) = Be^{-qx} + Ce^{qx}$, где $q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$, в силу ограниченности $|\psi(\infty)| < \infty$ имеет вид $\psi(x) = Be^{-qx}$. Плотность вероятности нахождения частицы под барьером

$$w(x) = B^2 e^{-2qx},$$

вероятность иметь координату $x=0$ $w(0) = B^2$. По определению $\chi_{эф}$ такое, что на глубине $\chi_{эф}$ вероятность частицы уменьшается в e раз по сравнению с вероятностью на границе:

$$w(\chi_{эф}) = B^2 e^{-2q\chi_{эф}} = \frac{w(0)}{e} = \frac{B^2}{e}, \quad \chi_{эф} = \frac{1}{2q} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}.$$

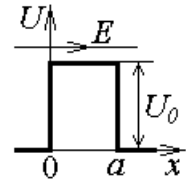
Для электрона

$$\chi_{эф} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2\sqrt{2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} = 10^{-10} \text{ м} = 0,1 \text{ нм}.$$

$$\text{Ответ: } \chi_{эф} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}, \quad \chi_{эф} = 10^{-10} \text{ м} = 0,1 \text{ нм}.$$

16. Частица массы m падает слева на симметричный потенциальный барьер высотой U_0 .

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



Энергия частицы $E > U_0$. Найдите коэффициент отражения частицы от ямы R и коэффициент прозрачности D .

Воспользуемся результатами задачи 11, заменив в ответе U_0 на $-U_0$:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} a}.$$

$$R = \frac{\frac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} a}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} a}.$$

Коэффициент прозрачности может равняться $D=1$, если в знаменателе $\sin \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} a = 0$.

$$\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}a = \pi n, \quad E = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2} + U_0.$$

Если λ_0 – де бройлевская длина волны частицы, то волновое число

$$\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} = k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}, \quad k_0 a = \pi n, \quad a = \frac{n}{2} \lambda_0.$$

Это значит, что если ширина ямы равна целому числу полудлин волн де Бройля, то частица проходит яму беспрепятственно. Для фотона примером такой ямы может служить эффект «просветления оптики».

Коэффициент прозрачности минимален, если $\sin \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}a = \pm 1$. При этом

$$\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}a = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + U_0,$$

$$D_{\min} = \frac{4E(E-U_0)}{4E(E-U_0) + U_0^2} = \frac{4E(E-U_0)}{(2E-U_0)^2}.$$

Ширина ямы с минимальным коэффициентом отражения

$$a = \frac{\lambda_0}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Для оптики это толщина так называемой «четвертьволновой» пленки.

При $E \rightarrow U_0$ аргумент синуса в формуле коэффициента прозрачности

$$D = \left(1 + \frac{2mU_0^2}{4E\hbar^2} \frac{\hbar^2}{2m(E-U_0)} \sin^2 \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}a \right)^{-1},$$

$z = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}a \rightarrow 0$. Найдём предел $\lim_{z \rightarrow 0} \frac{\sin^2 z}{z^2} = 1$, тогда

$$D = \left(1 + \frac{mU_0^2}{2E\hbar^2} \right)^{-1}.$$

1. Найдите уровни энергии и собственные функции одномерного гармонического осциллятора.

Будем искать решение уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = E \psi(x).$$

Сделаем обезразмеривающую замену $\xi = \frac{x}{x_0}$, $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ и

обозначим $\frac{2E}{\hbar\omega} = \varepsilon$. Уравнение примет вид:

$$\frac{\partial^2 \psi(\xi)}{\partial \xi^2} + (\varepsilon - \xi^2) \psi(\xi) = 0.$$

Легко убедиться, что при $\xi \rightarrow \infty$ волновая функция имеет вид $\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}}$. Это легко сделать, пренебрегая ε по сравнению с ξ^2 .

Тогда функция должна иметь вид $\psi(\xi) = f(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$. Будем искать решение уравнения

$$\frac{\partial^2 f(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial f(\xi)}{\partial \xi} + (\varepsilon - 1) f(\xi) = 0$$

в виде степенного ряда $f(\xi) = \sum_{k=k_0}^{\infty} a_k \xi^k$. Подставим этот ряд в уравнение и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях ξ , получим ряд соотношений

$$\begin{aligned} k_0(k_0 - 1)a_{k_0} &= 0 \quad \text{при} \quad \xi^{k_0-2}, \\ k_0(k_0 + 1)a_{k_0+1} &= 0 \quad \text{при} \quad \xi^{k_0-1}, \\ (k+2)(k+1)a_{k+2} + (\varepsilon - 1 - 2k)a_k &= 0 \quad \text{при} \quad \xi^k, \text{ если } k \geq k_0. \end{aligned}$$

Первые два уравнения являются тождествами, если положить $k_0 = 0$, $a_0 \neq 0$, $a_1 \neq 0$. Из последнего уравнения получаем рекуррентную формулу для коэффициентов ряда

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2)(k+1)}.$$

Все четные a_k можно определить через a_0 , а нечетные – через a_1 .

Бесконечный степенной ряд в общем случае не является сходящимся. Следовательно, его следует сделать конечным, то есть оборвать на некотором члене. То есть в рекуррентной формуле следует положить некоторое $a_{n+2} = 0$. Откуда $\varepsilon = 2n+1$,

$E = \frac{\hbar\omega}{2}\varepsilon$, уровни энергии $E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)$ дискретны, а уравнение на собственные функции примет вид:

$$\frac{\partial^2 f_n}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial f_n}{\partial \xi} + n f_n = 0,$$

ему удовлетворяют полиномы Чебышева-Эрмита

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

Волновая функция имеет вид:

$$\psi_n(\xi) = C e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi).$$

Пронормируем ее.

$$\int |\psi_n(x)|^2 dx = x_0 \int |\psi_n(\xi)|^2 d\xi = x_0 |C_n|^2 \int e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1$$

Один из полиномов представим в явном виде и проведем n раз интегрирование по частям, получим

$$1 = x_0 |C_n|^2 (-1)^n \int \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} H_n(\xi) d\xi = x_0 |C_n|^2 \int e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} d\xi,$$

так как

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n \cdot n!, \text{ то } |C_n|^2 = \frac{x_0}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2^n \cdot n!}.$$

Ответ: $E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)$, $\psi_n(\xi) = \frac{x_0}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi).$

2. Найдите уровни энергии и собственные функции трехмерного гармонического осциллятора вида

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

Рассмотрите случай изотропного осциллятора.

Будем искать решение трехмерного уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U\psi = E\psi,$$

в виде $\psi(x, y, z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$. Уравнение примет вид:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) XYZ - \hbar^2 (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) XYZ + \frac{2mE}{\hbar^2} XYZ = 0,$$

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} YZ + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} XZ + \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} XY -$$

$$- (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) XYZ + \frac{2mE}{\hbar^2} XYZ = 0,$$

разделим все уравнение на XYZ .

$$\left(\frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} - \omega_1^2 x^2 \right) + \left(\frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} - \omega_2^2 y^2 \right) + \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} - \omega_3^2 z^2 \right) = -\frac{2mE}{\hbar^2},$$

каждое из слагаемых в левой части зависит только от одной переменной, их сумма – постоянная, следовательно, каждое из этих слагаемых тоже константа.

Тогда уравнения примут вид

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} - \omega_1^2 x^2 X + \frac{2mE_1}{\hbar^2} X = 0,$$

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} - \omega_2^2 y^2 Y + \frac{2mE_2}{\hbar^2} Y = 0,$$

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} - \omega_3^2 z^2 Z + \frac{2mE_3}{\hbar^2} Z = 0,$$

где $E = E_1 + E_2 + E_3$. Решения этих уравнений аналогичны решению уравнений для одномерного гармонического осциллятора:

$$X_{n_1}(\xi) = C_1 e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_{n_1}(\xi), \quad E_{n_1} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right),$$

$$Y_{n_2}(\eta) = C_2 e^{-\frac{\eta^2}{2}} H_{n_2}(\eta), \quad E_{n_2} = \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right),$$

$$Z_{n_3}(\zeta) = C_3 e^{-\frac{\zeta^2}{2}} H_{n_3}(\zeta), \quad E_{n_3} = \hbar\omega_3 \left(n_3 + \frac{1}{2} \right),$$

где $\xi = \sqrt{\frac{m\omega_1}{\hbar}}x$, $\eta = \sqrt{\frac{m\omega_2}{\hbar}}y$, $\zeta = \sqrt{\frac{m\omega_3}{\hbar}}z$.

Тогда волновая функция

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(\xi, \eta, \zeta) = C e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}{2}} H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta) H_{n_3}(\zeta),$$

с учетом нормировки

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{\sqrt[4]{m^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}{2}}}{(\pi \hbar)^{\frac{3}{4}} \sqrt{2^{n_1 + n_2 + n_3} n_1! n_2! n_3!}} H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta) H_{n_3}(\zeta)$$

и энергия

$$E = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_3 \left(n_3 + \frac{1}{2} \right).$$

Заметим, что в случае изотропного осциллятора $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$ уровни энергии являются вырожденными:

$$E = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right).$$

Так, например, если $n_1 + n_2 + n_3 = 1$, то значению энергии $E = \frac{5}{2} \hbar\omega$ соответствуют три набора квантовых чисел $(n_1; n_2; n_3)$ – $(1; 0; 0)$, $(0; 1; 0)$, $(0; 0; 1)$, а следовательно, три различные волновые функции. Если $n_1 + n_2 + n_3 = 2$, то $(n_1; n_2; n_3)$ могут быть $(2; 0; 0)$, $(1; 1; 0)$, $(1; 0; 1)$, $(0; 2; 0)$, $(0; 1; 1)$, $(0; 0; 2)$ – уровень энергии $E = \frac{7}{2} \hbar\omega$ шесть раз вырожден, в общем случае если $n_1 + n_2 + n_3 = N$, то уровень энергии $E = \left(N + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega$ вырожден $\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$ раз.

Ответ: $E = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_3 \left(n_3 + \frac{1}{2} \right),$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{\sqrt[4]{m^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2}{2}}}{(\pi \hbar)^{\frac{3}{4}} \sqrt{2^{n_1 + n_2 + n_3} n_1! n_2! n_3!}} H_{n_1}(\xi) H_{n_2}(\eta) H_{n_3}(\zeta).$$

3. Найдите возможные значения энергии E квантового гармонического осциллятора с частотой ω , находящегося в состоянии, описываемом волновой функцией:

а) $\psi(x) = A e^{-a^2 x^2}$, **б)** $\psi(x) = A x e^{-a^2 x^2}$.

Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора с частотой ω :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m \omega^2 x^2}{2} \psi = E \psi$$

даст значение энергии осциллятора: а)

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{\psi} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m \omega^2 x^2}{2} = -\frac{\hbar^2 A a^2 (4a^2 x^2 - 2) e^{-a^2 x^2}}{2m A e^{-a^2 x^2}} + \frac{m \omega^2 x^2}{2} = \\ &= -\frac{2\hbar^2 a^4 x^2}{m} + \frac{\hbar^2 a^2}{m} + \frac{m \omega^2 x^2}{2}. \end{aligned}$$

Поскольку энергия не может зависеть от координаты, вероятно, слагаемые, содержащие координату, в сумме равны нулю:

$$\frac{2\hbar^2 a^4 x^2}{m} = \frac{m \omega^2 x^2}{2}, \quad a^2 = \frac{m \omega}{2\hbar},$$

тогда

$$E = \frac{\hbar^2}{m} \frac{m \omega}{2\hbar} = \frac{\hbar \omega}{2};$$

$$\begin{aligned} \text{б) } E &= -\frac{1}{\psi} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m \omega^2 x^2}{2} = -\frac{\hbar^2 A (4a^4 x^3 - 6a^2 x) e^{-a^2 x^2}}{2m A x e^{-a^2 x^2}} + \frac{m \omega^2 x^2}{2} = \\ &= -\frac{2\hbar^2 a^4 x^2}{m} + \frac{3\hbar^2 a^2}{2m} + \frac{m \omega^2 x^2}{2}, \end{aligned}$$

аналогично $a^2 = \frac{m \omega}{2\hbar}$, и

$$E = \frac{3\hbar^2}{m} \frac{m \omega}{2\hbar} = \frac{3\hbar \omega}{2}.$$

Ответ: а) $E = \frac{\hbar\omega}{2}$, б) $E = \frac{3\hbar\omega}{2}$.

4. Вычислите среднее значение квадрата координаты $\langle x^2 \rangle$ и среднюю потенциальную энергию одномерного гармонического осциллятора, находящегося на n -ом энергетическом уровне.

По определению среднего значения кинетическая энергия

$$\langle \epsilon^2 \rangle = \int \psi^* x^2 \psi dx = \int x^2 |\psi|^2 dx.$$

При $\xi = \frac{x}{x_0}$, где $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$$\psi_n = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \text{ где } C_n = \sqrt{\frac{x_0}{\sqrt{\pi}}} \frac{1}{2^n \cdot n!}.$$

Подставим явный вид функции в формулу

$$\langle \epsilon^2 \rangle = |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \int \xi^2 \left(e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \right)^2 d\xi = |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \int \xi^2 e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi.$$

Заменяя один из полиномов $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}$ и интегрируя

$$\begin{aligned} \langle \epsilon^2 \rangle &= |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (-1)^n \int \xi^2 e^{-\xi^2} e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} H_n(\xi) d\xi = \\ &= |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \int e^{-\xi^2} \frac{d^n (H_n(\xi) \xi^2)}{d\xi^n} d\xi. \end{aligned}$$

Очевидно,

$$\frac{d^n (H_n(\xi) \xi^2)}{d\xi^n} = \frac{d^n}{d\xi^n} (a_n \xi^{n+2} + a_{n-2} \xi^n + \dots) = a_n \frac{(n+2)!}{2!} \xi^2 + n! a_{n-2}.$$

По рекуррентной формуле

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+2)(k+1)},$$

$$a_n = 2^n, \quad a_{n-2} = -a_n \frac{n(n-1)}{4}.$$

Подставляя производную в интеграл, получаем

$$\langle \mathcal{E}^2 \rangle = |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \int e^{-\xi^2} \left(a_n \frac{(n+2)!}{2!} \xi^2 + n! a_{n-2} \right) d\xi.$$

Эти интегралы легко взять при помощи интеграла Пуассона

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \quad \text{и} \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}:$$

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{E}^2 \rangle &= |C_n|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \left(2^n \frac{(n+2)!}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} - 2^n \frac{n(n-1)}{4} n! \sqrt{\pi} \right) = \\ &= \frac{\hbar}{m\omega\sqrt{\pi}} \frac{1}{2^n \cdot n!} 2^n \frac{\sqrt{\pi}}{4} n! ((n+2)(n+1) - n(n-1)) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

Тогда средняя потенциальная энергия

$$\langle U \rangle = \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} = \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{E_n}{2}.$$

Ответ: $\langle \mathcal{E}^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \langle U \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right).$

5 Вычислите среднюю кинетическую энергию одномерного гармонического осциллятора, энергия которого равна $\frac{5}{2}\hbar\omega$.

Для одномерного осциллятора оператор кинетической энергии

$$\mathcal{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2},$$

то средняя кинетическая энергия

$$\langle \hat{F} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx = \frac{\hbar^2}{2M} \int \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx.$$

В данном случае энергия $\frac{5}{2} \hbar \omega$ соответствует номеру уровня

$n = 2$, волновая функция осциллятора при $\xi = \frac{x}{x_0}$, где $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{x_0}{\sqrt{\pi}}} \frac{1}{2^2 \cdot 2!} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_2(\xi), \quad H_2 = 4\xi^2 - 2.$$

Подставим явный вид функции в формулу

$$\langle \hat{F} \rangle = \frac{\hbar \omega}{16\sqrt{\pi}} \int \left\{ \frac{d}{d\xi} \left[e^{-\frac{\xi^2}{2}} (4\xi^2 - 2) \right] \right\}^2 dx,$$

$$\langle \hat{F} \rangle = \frac{\hbar \omega}{4\sqrt{\pi}} \int e^{-\xi^2} (4\xi^6 - 20\xi^4 + 25\xi^2) d\xi.$$

Эти интегралы легко взять, если к интегралу Пуассона

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

применить интегрирование по параметру

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2k} e^{-\alpha x^2} dx = \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha} \right)^k \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2k-1)}{2^k} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2k+1}}},$$

то

$$\langle \hat{F} \rangle = \frac{5\hbar\omega}{4} = \frac{E_2}{2}.$$

Ответ: $\langle \hat{F} \rangle = \frac{5\hbar\omega}{4}.$

6. Определите минимальную энергию одномерного квантового осциллятора, пользуясь соотношением неопределенностей.

Среднее значение энергии одномерного квантового осциллятора можно записать

$$\bar{E} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \overline{x^2}}{2} \geq \frac{(\overline{\Delta p})^2}{2m} + \frac{m\omega^2 (\overline{\Delta x})^2}{2}.$$

Из соотношения неопределенностей $\overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4(\Delta p)^2}$

$$\bar{E} \geq \frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8(\Delta p)^2}.$$

Найдем минимум энергии, как функции $\overline{(\Delta p)^2}$:

$$\frac{1}{2m} - \frac{m\hbar^2\omega^2}{8\left(\overline{(\Delta p)^2}\right)^2} = 0, \quad \overline{(\Delta p)^2} = \frac{m\hbar\omega}{2},$$

тогда среднее значение энергии

$$\bar{E} \geq \frac{m\hbar\omega}{4m} + \frac{2m\omega^2\hbar^2}{8m\hbar\omega} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Ответ: $\bar{E} \geq \frac{\hbar\omega}{2}.$

7. Найдите уровни энергии и собственные функции одномерного заряженного гармонического осциллятора, помещенного в однородное электрическое поле напряженностью $\vec{\varepsilon}$, направленной вдоль оси колебаний. Заряд осциллятора q .

Потенциальная энергия такого осциллятора

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2} - q\varepsilon x.$$

Будем искать решение уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) - q\varepsilon x \psi(x) = E\psi(x).$$

Выделим в потенциальной энергии полный квадрат

$$U = \frac{m\omega^2}{2} \left(x^2 - \frac{2q\varepsilon}{m\omega^2} x + \left(\frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \right)^2 \right) - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} =$$

$$= \frac{m\omega^2}{2} \left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} = \frac{m\omega^2}{2} x'^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2},$$

где сделана замена $x' = x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}$, тогда уравнение с учетом заме-

ны $E' = E + \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$ примет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x')}{dx'^2} + \frac{m\omega^2 x'^2}{2} \psi(x') = E' \psi(x'),$$

решение которого известно:

$$E'_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1), \quad \psi_n(\xi) = \frac{x_0}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi).$$

Уровни энергии осциллятора в электрическом поле смещены:

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1) - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2},$$

а в волновых функциях $\xi = \frac{x'}{x_0} = \left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \right) / x_0$.

Ответ: $E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1) - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}, \quad \psi_n(\xi) = \frac{x_0}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi),$

где $\xi = \frac{x'}{x_0} = \left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \right) / x_0$.