КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

***Кафедра вычислительной физики
и моделирования физических процессов***

А.В. МОКШИН, Р.М. ХУСНУТДИНОВ

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
Раздел №3.
Собственные функции и собственные значения. Средние значения физических величин. Вероятность результата измерения

Учебно-методическое пособие

Казань – 2015

УДК 530.1
ББК 22.31

Принято на заседании кафедры вычислительной физики и моделирования физических процессов
Протокол № 4 от 10 июня 2015 года

Рецензенты:
доктор физико-математических наук,
профессор кафедры образовательных технологий в физике КФУ
Л.А. Нефедьев;
кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры информационных систем КФУ
Ф.М. Гафаров

Мокшин А.В., Хуснутдинов Р.М.,
Квантовая механика. Раздел №3. Собственные функции и собственные значения. Средние значения физических величин. Вероятность результата измерения / А.В. Мокшин, Р.М. Хуснутдинов. – Казань: Казан. ун-т, 2015. – 22 с.

В данном учебно-методическом пособии представлены задачи по курсу "Квантовая механика", основные положения и формулы, необходимые для решения задач, а также примеры с решениями типичных задач.

§5. СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ И СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ. СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН. ВЕРОЯТНОСТЬ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЯ

1. Собственные функции и собственные значения:
Те значения оператора $\hat{\mathcal{L}}$, при которых выполняется уравнение

$$\hat{\mathcal{L}}\Psi = \mathcal{L}\Psi,$$

называются *собственными значениями* $\mathcal{L}$, а соответсвующие им решения называются *собственными функциями* Ψ.

2. Основные свойства собственных функций:
а) *ортонормированность*

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^* \Psi_n dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases} \text{ – дискретный спектр,}$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, A')\,\Psi(x, A)\,dx = \delta(A' - A) \text{ – непрерывный спектр,}$$

$$\Psi_m,\ \Psi_n \quad (\Psi(x, A'),\ \Psi(x, A)) \text{ – собственные функции оператора } \hat{A}.$$

б) система собственных функций операторов является *полной*. Это означает, что любую функцию $\Psi(x)$ можно представить в следующем виде:

$$\left.\begin{array}{l} \Psi(x) = \sum\limits_n c_n \Psi_n(x), \\ \text{где} \quad c_n = \int \Psi_n^*(x)\,\Psi(x)\,dx \end{array}\right\} \text{ – дискретный спектр,}$$

$$\left.\begin{array}{l} \Psi(x) = \int\limits_{\{A\}} c(A)\Psi(x, A)\,dA \\ \text{где} \quad c(A) = \int \Psi^*(x, A)\,\Psi(x)\,dx \end{array}\right\} \text{ – непрерывный спектр.}$$

3. Среднее значение физической величины A, описываемой оператором $\hat{A}$:

$$\overline{A} = \int \Psi^* \hat{A} \Psi \, dx.$$

4. Вероятность:

Вероятность найти значение механической величины A равным одному из ее возможных значений A_n равна квадрату модуля амплитуды собственного состояния ψ_n

$$\omega\left(A_n\right) = \left|c_n\right|^2, \quad \sum_n \left|c_n\right|^2 = 1 \quad \text{– дискретный спектр,}$$

$$\omega\left(A\right) = \left|c(A)\right|^2, \quad \int \left|c(A)\right|^2 dA = 1 \quad \text{– непрерывный спектр.}$$

5. Плотность вероятности обнаружения микрочастицы в точке пространства (x, y, z) в момент времени t:

$$\omega\left(x, y, z, t\right) = \left|\Psi\left(x, y, z, t\right)\right|^2.$$

6. Плотность вероятности обнаружения импульса $\vec{p}$ микрочастицы в момент времени t:

$$\omega(\vec{p}) = \left|c(\vec{p})\right|^2, \quad c(\vec{p}) = \int d\vec{r}\, \Psi_p^*\left(\vec{r}, t\right) \Psi\left(\vec{r}, t\right),$$

$$\Psi_p\left(\vec{r}, t\right) = \left(2\pi\hbar\right)^{-3/2} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\vec{r} - Et\right)\right\} \quad \text{– волна де-Бройля,}$$

$$\int d\vec{p}\, \omega(\vec{p}) = 1.$$

Пример 1. Найти собственное значение оператора $\hat{M}^2$, соответствующее его собственной функции $\Psi(\theta,\varphi) = c(\cos\theta + 2\sin\theta\cos\varphi)$.

Решение: Используем явный вид оператора $\hat{M}^2$:

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

Тогда можно записать уравнение

$$\hat{M}^2\Psi(\theta,\varphi) = M^2\Psi(\theta,\varphi),$$

которое после подстановки оператора принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2} = M^2\Psi.$$

Раскрывая его, получаем

$$-\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\cdot c\cdot(-\sin\theta + 2\cos\theta\cos\varphi)\right] =$$
$$= 2c\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\sin\theta\cos\varphi = 2\hbar^2 c(\cos\theta + 2\sin\theta\cos\varphi).$$

Следовательно, получаем $M^2 = 2\hbar^2$.

Пример 2. Найти собственные функции и собственные значения оператора импульса $\hat{p}_x$.

Решение: Уравнение для собственных значений и собственных функций оператора $\hat{p}_x$ имеет вид

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} = p_x\Psi.$$

Решение этого уравнения легко находится

$$\frac{d\Psi}{\Psi} = \frac{i}{\hbar}p_x dx,$$

$$\ln\Psi = \frac{i}{\hbar}p_x x + \text{const}.$$

Отсюда собственные функции имеют вид

$$\Psi = Ce^{ip_x x/\hbar},$$

где C - некоторая константа. Для того, чтобы решение было всюду конечным, достаточно, чтобы p_x являлось вещественным числом. Очевидно, что при этом решение будет непрерывным и однозначным. В этом случае спектр собственных значений непрерывен, т.е. $-\infty < p_x < \infty$.

Нормируем собственные функции оператора p_x следующим образом:

$$\int \Psi^*\left(p'_x, x\right) \Psi\left(p_x, x\right) dx = |C|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar} x (p_x - p'_x)} dx = |C|^2\, 2\pi\hbar\delta(p'_x - p_x),$$

где $\delta(p'_x - p_x)$ – дельта-функция Дирака.

Поскольку собственные функции, отвечающие различным значениям (p'_x и p_x) ортогональны, то

$$|C|^2\, 2\pi\hbar\delta\left(p'_x - p_x\right) = \delta\left(p'_x - p_x\right).$$

Отсюда находим, что $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$, а нормированные собственные функции оператора $\hat{p}_x$ принимают вид

$$\Psi(p_x, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}.$$

Пример 3. Определить вероятность различных значений импульса частицы в основном состоянии, находящейся в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме, волновая функция которой имеет вид:

$$\Psi\left(x\right) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos\frac{\pi}{l} x.$$

Решение:

Разложим рассматриваемое состояние $\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos\frac{\pi}{l} x$ по собственным функциям $\Psi(p_x, x)$ с учетом того, что спектр собственных значений непрерывен:

$$\Psi(x) = \int C(p_x) \Psi(p_x, x)\, dp_x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int C(p_x) e^{ip_x x/\hbar}\, dp_x.$$

Вероятность значения импульса p_x есть

$$\omega(p_x) = |C(p_x)|^2 .$$

Коэффициент $C(p_x)$ находится согласно известному соотношению:

$$\begin{aligned} C(p_x) &= \int \Psi^*(x)\Psi(p_x,x)dx = \frac{1}{\sqrt{\pi l \hbar}} \int_0^l \sin\frac{\pi}{l} x e^{\frac{i}{\hbar}p_x x} dx = \\ &= \frac{1}{2i}\frac{1}{\sqrt{\pi l \hbar}} \left\{ \int_0^l e^{i\left(\frac{\pi}{l}+\frac{p_x}{\hbar}\right)x} dx - \int_0^l e^{-i\left(\frac{\pi}{l}-\frac{p_x}{\hbar}\right)x} dx \right\} = \\ &= \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\pi l \hbar}} \frac{2\pi}{l} \frac{\left(e^{i\frac{p_x}{\hbar}l}+1\right)}{\pi^2\hbar^2 - p_x^2 l^2} \hbar^2 l^2 = \\ &= \frac{e^{i\frac{p_x}{\hbar}l}+1}{\pi^2\hbar^2 - p_x^2 l^2}\sqrt{\pi l \hbar^3}. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\omega(p_x) = \pi l \hbar^3 \frac{\left(1+\cos\frac{p_x l}{\hbar}\right)^2 + \sin^2\frac{p_x l}{\hbar}}{\left(\pi^2\hbar^2 - p_x^2 l^2\right)^2} = \frac{4\pi l \hbar^3}{\left(\pi^2\hbar^2 - p_x^2 l^2\right)^2}\cos^2\frac{p_x l}{2\hbar}.$$

Пример 4. Определить возможные собственные значения оператора $\hat{M}_z$ и их вероятности для системы, находящейся в состоянии $\Psi(\varphi) = C\cos^2\varphi$.

Решение: Найдем коэффициент C, исходя из нормировочного соотношения:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \psi^2(\varphi)\, d\varphi &= c^2 \int_0^{2\pi} \cos^4\varphi d\varphi = c^2 \int_0^{2\pi} \left(\frac{1+\cos 2\varphi}{2}\right)^2 d\varphi = \\ &= \frac{c^2}{4}\int_0^{2\pi}\left(1 + 2\cos 2\varphi + \frac{1+\cos 4\varphi}{2}\right) d\varphi = \\ &= \frac{c^2}{4}\left(\varphi + \sin 2\varphi + \frac{\varphi}{2} + \frac{1}{8}\sin 4\varphi\right)\Bigg|_0^{2\pi} = \frac{3}{4}\pi c^2 = 1. \end{aligned}$$

Отсюда находим $C = 2/\sqrt{3\pi}$.

Разложим функцию $\Psi(\varphi)$ по собственным функциям оператора $\hat{M}_z$ (которые имеют вид $\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$):

$$\begin{aligned}
\Psi(\varphi) &= C\cos^2\varphi = \frac{1}{\sqrt{3\pi}}\left(1+\cos 2\varphi\right) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{3\pi}}\left(1 + \frac{1}{2}e^{2i\varphi} + \frac{1}{2}e^{-2i\varphi}\right) = \\
&= \sqrt{\frac{2}{3}}\Psi_0 + \frac{1}{\sqrt{6}}\Psi_{+2} + \frac{1}{\sqrt{6}}\Psi_{-2}.
\end{aligned}$$

Отсюда очевидно, что возможные собственные значения оператора $\hat{M}_z$ в состоянии $\psi\left(\varphi\right)$ есть

$$M_z = 0,\ +2\hbar,\ -2\hbar,$$

поскольку $\Psi_0,\ \Psi_{\pm 2}$ есть собственные функции $\hat{M}_z$, соответствующие собственным значениям

$$0,\, \pm 2\hbar \quad \left(\hat{M}_z\psi_m = \hbar_m\psi_m\right).$$

Их вероятности определяются коэффициентами разложения C_m:

$$\omega_0 = \left|C_0\right|^2 = \frac{2}{3},$$

$$\omega_{\pm 2} = \left|C_{\pm 2}\right|^2 = \frac{1}{6}.$$

Для проверки подсчитываем полную вероятность:

$$\omega_0 + \omega_{+2} + \omega_{-2} = \frac{2}{3} + \frac{1}{6} + \frac{1}{6} = 1,$$

то есть нормировка вероятности выполняется.

Пример 5. Вычислить среднее значение импульса p_x, квадрата импульса p_x^2 и средне-квадратичные отклонения импульса $\overline{\Delta p_x^2}$ частицы, заключенной в одномерную бесконечно глубокую потенциальную яму ширины l, в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{l}}\cos\frac{\pi}{l}x.$$

Решение: В соответствии с определением среднего значения физической величины, изображенной оператором

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

запишем

$$\begin{aligned} \overline{p_x} &= \int \Psi^* \hat{A} \Psi \, dx = -2i\hbar \frac{\pi}{l^2} \int_{-l/2}^{l/2} \cos \frac{\pi}{l} x \sin \frac{\pi}{l} x \, dx = \\ &= -i\hbar \frac{\pi}{l^2} \int_{-l/2}^{l/2} \sin \frac{2\pi}{l} x \, dx = i\hbar \frac{\pi}{l^2} \frac{l}{2\pi} \cos \frac{2\pi}{l} x \bigg|_{-l/2}^{l/2} = 0. \quad (0.1) \end{aligned}$$

По аналогии найдем средние значения других величин.

$$\hat{p}_x^2 = (\hat{p}_x)^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2},$$

$$\begin{aligned} \overline{p_x^2} &= \int_{-l/2}^{l/2} \Psi^* \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) \Psi \, dx = \hbar^2 \frac{2}{l} \left(\frac{\pi}{l} \right)^2 \int_{-l/2}^{l/2} \cos^2 \frac{\pi}{l} x \, dx = \\ &= \frac{2\pi^2\hbar^2}{l^3} \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1 + \cos \frac{2\pi x}{l}}{2} dx = \\ &= \frac{\pi^2\hbar^2}{l^3} \left(x + \frac{l}{2\pi} \sin \frac{2\pi}{l} x \right) \bigg|_{-l/2}^{l/2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{l^2}, \end{aligned}$$

$$\overline{\Delta p_x^2} = \overline{(p_x - \overline{p_x})} = \overline{p_x^2} - \overline{p_x}^2 = \overline{p_x^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{l^2}.$$

ЗАДАЧИ И УПРАЖЕНИЯ

5.1 Частица находится в ящике длиной l ($x \in [0, l]$) с абсолютно непроницаемыми стенками и описывается волновой функцией Ψ. Вычислить нормировочную константу C.
а) $\Psi = C\cos(\pi x/l)$,
б) $\Psi = \dfrac{C}{2}\sin(\pi x/l)\cos(\pi x/l)$,
в) $\Psi = C\sin(7\pi x/l)$.

5.2 Частица находится в ящике длиной $[-l, l]$ с абсолютно непроницаемыми стенками и описывается волновой функцией $\Psi = C\exp(ipx/\hbar)$. Вычислить нормировочную константу C.

5.3 Найти собственные функции и собственные значения операторов

а) $\dfrac{d}{dx}$, б) $i\dfrac{d}{dx}$, в) $\hat{k}_x = \dfrac{\hat{p}_x}{\hbar}$.

5.4 Найти собственные функции и собственные значения операторов

а) $\dfrac{d}{d\varphi}$, б) $i\dfrac{d}{d\varphi}$, в) $\hat{M}_z$.

5.5 Найти собственные функции и собственные значения операторов

а) $-ie^{ix}\dfrac{d}{dx}$, б) $\hat{p}_x + \hat{x}$, в) $\hat{p}_y + \hat{y}$, г) $\hat{p}_z + \hat{z}$.

5.6 Найти собственные функции и собственные значения следующих операторов:

а) $x - i\dfrac{d}{dx}$,
б) $-\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$ (при граничных условиях: $\Psi(x) = 0$ при $x = 0, l$),
в) $-\left[\dfrac{\partial^2}{\partial r^2} + \dfrac{2}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\right]$ (сферическая система координат) при граничном условии: $\Psi(r) = 0$ при $r \geq r_0$.

5.7 Найти собственные значения оператора $\hat{A}$, соответствующие собственной функции $\Psi_A(x) \quad (-\infty < x < \infty)$

1) $\hat{A} = -\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad \Psi_A = C\sin 2x;$

2) $\hat{A} = -\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2,$

$\Psi_A = C\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right),$

$\Psi_A = Cx\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right),$

$\Psi_A = C\left(2x^2 - 1\right)\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right);$

3) $\hat{A} = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{2}{x}\dfrac{\partial}{\partial x}, \quad \Psi_A = \dfrac{C}{x}\sin ax;$

4) $\hat{A} = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{2}{x}\left(\dfrac{\partial}{\partial x} + 1\right), \quad \Psi_A = C\exp(-x),$

$\Psi_A = C(2 - x)\exp\left[-(x/2)\right].$

5.8 Найти общую собственную функцию операторов

а) $\hat{p}_x, \quad \hat{p}_y, \quad \hat{p}_z;$
б) $\hat{x}, \quad \hat{p}_y;$
в) $\hat{p}_x, \quad \hat{p}_x^2.$

5.9 Доказать, что две физические величины A и B могут быть измерены тогда и только тогда, когда операторы этих величин $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют друг с другом.

5.10 Показать, что энергия свободной частицы может принимать любые значения (непрерывный спектр собственных значений).

5.11 Найти собственные функции и спектр энергии электрона, движущегося в постоянном и однородном магнитном поле $\vec{H}$ $(H_x = H_y = 0,\ H_z = H)$.

5.12 Доказать, что собственные функции Ψ_1 и Ψ_2 самосопряженного оператора $\hat{A}$, принадлежащие различным собственным значениям A_1 и A_2 дискретного спектра, ортогональны между собой.

5.13 Найти собственные функции и собственные значения энергии частицы, находящейся в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l.

5.14 Непосредственным вычислением убедиться в ортогональности собственных функций: а) оператора полной энергии $\hat{H}$ частицы, находящейся в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l (см. предыдущее задание), б) оператора $\hat{M}_z$.

5.15 Имеется две нормированные, линейно независимые, неортогональные собственные функции, принадлежащие одному и тому же собственному значению A оператора $\hat{A}$. Найти две линейные комбинации U_1 и U_2 этих функций, которые были бы ортонормированными. Будут ли функции U_1 и U_2 собственными функциями оператора $\hat{A}$? Будут ли они вырожденными?

5.16 Имеются три нормированные, независимые и неортогональные собственные функции Ψ_1, Ψ_2 и Ψ_3 принадлежащие одному и тому же собственному значению A оператора $\hat{A}$. Найти три линейные комбинации этих функций (U_1, U_2 и U_3), которые были бы взаимно ортогональны. Будут ли функции U_1, U_2 и U_3 вырожденными?

5.17 Доказать, что если механическая величина изображается самосопряженным оператором, то ее среднее значение квадрата этой величины – положительное.

5.18 Найти среднее значение кинетической энергии свободной частицы.

5.19 Доказать, что среднее значение импульса одномерного движения может быть представлено в виде:

$$\bar{p}_x = \frac{\hbar}{2i}\int\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)dx = m\int j_x dx.$$

5.20 Показать, что в состоянии Ψ, где оператор $\hat{M}_z$ имеет определенное собственное значение, средние значения $\overline{M_x}$ и $\overline{M_y}$ равны нулю (воспользоваться коммутационным).

5.21 Используя выражение оператора $\hat{p}_x$ через коммутатор операторов $\hat{H}$ и $\hat{x}$, показать, что в одномерном потенциальном поле в стационарном состоянии дискретного спектра Ψ среднее значение $\bar{p}_x$ равно нулю. *Примечание*: при решении воспользоваться уравнением $\hat{H}\Psi = E\Psi$.

5.22 Найти вероятности отдельных квантовых состояний и среднюю кинетическую энергию частицы в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l, если частица находится в состоянии с волновой функцией:

а) $\Psi(x) = C\sin^2\dfrac{\pi x}{l}$,
б) $\Psi(x) = Cx\,(l - x)$,
в) $\Psi(x) = C\sin\dfrac{\pi x}{l}\cos\dfrac{\pi x}{l}$.

5.23 Вычислить среднее значение квадрата момента импульса в состоянии $\Psi(\theta, \varphi) = C\sin\theta\cos\varphi$.

5.24 Определить среднее значение механической величины, описываемой оператором $\hat{M}_z^2$ в состоянии $\Psi(\varphi) = C\sin^2\varphi$.

5.25 Найти произведение $\Delta x \Delta p_x$ для частицы, заключенной в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме, находящейся в нормальном состоянии

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{l}}\cos\frac{\pi}{l}x.$$

5.26 Вычислить средние значения $\overline{p_x}$ и $\overline{p_x^2}$
а) для одномерного гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии $\Psi = C\exp\left(-\alpha^2 x^2\right)$, $\alpha^2 = m\omega/\hbar$;
б) для частицы, находящейся на n-м энергетическом уровне в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме
$\Psi_n(x) = C\cos\pi x n/l$.

5.27 Вычислить среднее значение потенциальной энергии

$$U = \frac{kx^2}{2}$$

осциллятора с частотой ω в основном состоянии $\Psi = Ce^{-\alpha^2 x^2}$, где $\alpha^2 = k/2\hbar\omega$, k – коэффициент квазиупругой силы.

5.28 Найти среднюю энергию линейного гармонического осциллятора, находящегося в первом возбужденном состоянии с волновой функцией

$$\Psi_1 = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-m\omega x^2/\hbar}.$$

5.29 Найти среднее значение расстояния r от начала отсчета системы координат частицы, состояние которой описывается волновой функцией

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \frac{1}{r} \sin\frac{n\pi}{r_0} r \quad (0 \le r \le r_0).$$

5.30 Для $1s$-состояния электрона в атоме водорода с волновой функцией $\Psi_{1s}(r) = \left(\pi a^3\right)^{-1/2} e^{-r/a}$, $a = \hbar^2/me^2$ вычислить среднеквадратичные величины: $\overline{T}$, $\overline{T^2}$, $\overline{\Delta T^2}$, $\overline{U}$, $\overline{U^2}$, $\overline{\Delta U^2}$.

5.31 Вычислить средний электростатический потенциал, возникающий от $1s$-электрона на ядре атома водорода.

5.32 В состоянии с волновой функцией

$$\Psi(x) = C \exp\left\{-\frac{x^2}{4\sigma^2} + ik_0 x\right\}$$

вычислить средне-квадратичные значения: $\overline{x}$, $\overline{x^2}$, $\overline{\Delta x^2}$, $\overline{p_x}$, $\overline{p_x^2}$, $\overline{\Delta p_x^2}$.

Проверьте соотношение неопределенностей.

5.33 Определить вероятность нахождения $1s$-электрона атома водорода:
1) в области $0 \le r \le 2a$,
2) в области $10a \le r \le \infty$,
3) в области $0 \le r \le a$.

5.34 Найти положение максимума плотности вероятности для $2p$ - состояние электрона в атоме водорода, волновая функция которого имеет вид:

$$\Psi_{21} = \frac{1}{\sqrt{6a^3}} e^{-r/2a} \frac{r}{2a},$$

где $a = \hbar^2/me^2$.

5.35 Для $2p$-электрона в атоме водорода (см. предыдущее задание) вычислить:

1) наиболее вероятное расстояние от ядра $\overline{r}$;

2) средне-квадратичное отклонение $\overline{(r-\overline{r})^2}$;

3) среднюю величину кулоновской силы;

4) средне-квадратичную скорость и среднее значение потенциальной энергии.

5.36 Частица с массой m находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l. Определить вероятность пребывания частицы в основном состоянии $\Psi_1 = \sqrt{\dfrac{2}{l}} \cos \dfrac{\pi}{l} x$, если состояние частицы описывается волновой функцией $\Psi(x) = C \sin^2 \dfrac{\pi}{l} x$. Найти среднее значение энергии в состоянии $\Psi(x)$.

5.37 Частица с массой m находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной l. Определить вероятность пребывания частицы на n-м энергетическом уровне ω_n:

$$\left(\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos \frac{\pi}{l} xn\right),$$

если состояние частицы описывается волновой функцией $\Psi(x) = Cx\,(l-x)$; вычислить ω_n для $n = 1,\ 2,\ 3$. Определить средне-квадратичную флуктуацию энергии и положения частицы в состоянии $\Psi(x):\ \left(\overline{\Delta E^2},\ \overline{\Delta x^2}\right)$.

5.38 Определить возможные собственные значения оператора $\hat{M}_z$ и их вероятности для системы, находящейся в состоянии

а) $\Psi(\varphi) = C \sin^2 \varphi$,

б) $\Psi(\varphi) = C\,(1+\cos\varphi)^2$.

Вычислить среднее значение $\hat{M}_z$ для этих состояний.

5.39 Имея в виду, что собственные функции оператора волнового числа $\hat{k} = \frac{\hat{p}}{\hbar}$ есть $\Psi_k(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$, найти распределение вероятностей различных значений волнового числа k

а) для частицы на n-м уровне в одномерной бесконечно глубо-

кой потенциальной яме шириной l,
б) для осциллятора в состоянии $\Psi(x) = Ce^{-\alpha^2 x^2}$.

5.40 Состояние электрона в атоме описывается волновой функцией

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Найти средние значения $\overline{p_r}$ и $\overline{p_r^2}$.

ОТВЕТЫ И УКАЗАНИЯ

5.1 а) $C = \sqrt{2/l}$, б) $C = 4\sqrt{2/l}$, в) $C = \sqrt{2/l}$.

5.2 $C = 1/\sqrt{2l}$.

5.3 а) $\Psi = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{Ax}$ – решение уравнения, из условия конечности $\Psi(x)$ при $x = \pm\infty$ следует, что $A = i\lambda$, λ – любое вещественное число (спектр непрерывен),

б) $\Psi = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-iAx}$, A – любое вещественное число (спектр непрерывен);

в) $\Psi = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$, k – любое вещественное число (спектр непрерывен).

5.4 а) $\Psi(\varphi) = Ce^{A\varphi}$ – решение уравнения. В систему однозначности собственной функции нужно потребовать выполнение равенства $\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$, отсюда $e^{A2\pi} = 1$. Следовательно, $A = im$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$
$\Psi = Ce^{im\varphi}$ (спектр дискретный);

б) $\Psi(\varphi) = Ce^{-iA\varphi}$. Из условия однозначности $\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$, имеем $A = n$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ (спектр дискретный);

в) $\Psi(\varphi) = Ce^{im\varphi}$, $M_z = \hbar m$ (спектр дискретный).

5.5 а) $\Psi(x) = C\exp\left(iAe^{-ix}\right)$, где A – любое вещественное число (сплошной спектр);

б) $\Psi(x) = C\exp\left\{i\left(Ax - \frac{x^2}{2}\right)/\hbar\right\}$ имеет конечное значение при всех вещественных значениях A.
Задачи в), г) решаются аналогично.

5.6 а) $\Psi(x) = C\exp i\left(Ax - \frac{x^2}{2}\right)$ (сплошной спектр), A – любое действительное значение;

б) $\Psi(x) = C\sin\left(\sqrt{A}x + \alpha\right)$. Из граничных условий находим $\alpha = 0$, $A = \dfrac{\pi^2}{l^2}n^2$, $n = 1,\ 2,\ 3, \ldots$ (дискретный спектр).

в) Введем новую функцию $\Psi = \frac{U}{r}$. Подставив эту формулу в уравнение для нахождения собственных значений, получим

$$-\frac{d^2U}{dr^2} = AU.$$

Решение этого уравнения $U = C\sin\left(\sqrt{A}r + \alpha\right)$, откуда $\Psi(r) = C\sin\left(\sqrt{A}r + \alpha\right)$.

Из условия конечности Ψ при $r = 0$ следует, что $\alpha = 0$. Из граничного условия получаем

$$A = \frac{\pi^2}{r_0^2}n^2,\ n = 1, 2, 3, \ldots,$$

т.е. спектр – дискретный.

5.7 1) $A = 4$; 2) $A = 1,\ 3,\ 5$; 3) $A = \alpha^2$; 4) $A = 1,\ 1/4$.

5.8 а) $\Psi(x, y, z) = C\exp\left\{i\left(xp_x + yp_y + zp_z\right)/\hbar\right\}$;

б) $\Psi(x, y, z) = f\left(x, z\right)\exp\left(ip_y y/\hbar\right)$;

в) $\Psi(x, y, z) = f\left(y, z\right)\exp\left(\pm ik_x x/\hbar\right)$, где f – произвольная функция.

5.9 Гамильтониан электрона в однородном постоянном магнитном поле есть $\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2$, где при $H_x = H_y = 0,\ H_z = H$, $A_y = xH,\ A_x = A_z = 0,\ \hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^2 + \frac{e^2}{2mc^2}x^2H^2 - \frac{eH}{mc}x\hat{p}_y.$

Уравнение для нахождения собственных функций и собственных значений

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - i\hbar\frac{eHx}{mc}\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \left(\frac{eH}{2mc}x^2 - E\right)\Psi = 0.$$

Координаты y и z явно в уравнение не входят, решение запишем в виде:

$$\Psi = C\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(p_y y + p_z z\right)\right\} f\left(x\right).$$

Отсюда, для $f\left(x\right)$ получаем уравнение

$$\frac{d^{2f}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E' - \frac{e^2H^2}{2mc^2}\left(x + \delta\right)^2\right) f = 0$$

где $E' = E - \frac{p_z^2}{2m}$, $\delta = \frac{cp_y}{eH}$.

Решение: $f_n = c_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi)$,

где $H(\xi)$ - полином Эрмита, $\xi = \sqrt{\frac{2ma}{\hbar}}(x+\delta)$, $a = \frac{eH}{2mc}$, c_n - нормировочный множитель, $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$. Отсюда $\Psi_{np_yp_z} = c_n C \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right\} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi)$, $E_{np_z} = \frac{e\hbar H}{2mc}(2n+1) + \frac{p_z^2}{2m}$.

Последний член представляет собой кинетическую энергию электронов, свободно движущихся вдоль оси z, и особого интереса не представляет.

5.13 $\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{\pi x}{l} n$, $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ml^2}$.

5.15 Возьмем $U_1 = \Psi_1$, $U_2 = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$.

Причем 1) $\int U_1^* U_2\, dx = 0$, откуда $c_1/c_2 = -\int \Psi_1^*\Psi_2 dx = S$;
2) $\int U_2^* U_2\, dx =1$, откуда $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ и $|c_k|^2 + |c_2|^2 a^2 = 1$, $c_2 = e^{i\alpha}/\sqrt{1+S^2}$; $c_1 = c_2 a = Se^{i\alpha}/\sqrt{1+S^2}$.

Коэффициенты c_1, c_2 определены с точностью до несущественного фазового множителя $e^{i\alpha}$. Функции U_1, U_2 являются вырожденными, они отвечают одному и тому же собственному значению A.

5.16 В качестве искомых U_1, U_2 и U_3 возьмем следующие линейные комбинации: $U_1 = \Psi_1$; $U_2 = a\Psi_1 + \Psi_2$; $U_3 = b\Psi_1 + c\Psi_2 + \Psi_3$.

Коэффициенты a, b, c находим из условия ортогональности:

$$a = -S_{12}; \quad b = \frac{S_{13} - S_{12}S_{23}}{|S_{12}|^2 - 1}; \quad c = \frac{S_{23} - S_{12}^* S_{13}}{|S_{12}|^2 - 1},$$

где $S_{12} = \int \Psi_1^*\Psi_2\, dx$; $S_{12}^* = \int \Psi_1\Psi_2^*\, dx$; $S_{13} = \int \Psi_1^*\Psi_3 dx$; $S_{23} = \int \Psi_2^*\Psi_3\, dx$.

Нормированные функции U_1, U_2, U_3:

$$U_1 = \Psi_1; \quad U_2 = \frac{a}{\sqrt{a^2+1}}\Psi_1 + \frac{1}{\sqrt{a^2+1}}\Psi_2,$$
$$U_3 = \frac{b}{\sqrt{b^2+c^2+1}}\Psi_1 + \frac{c}{\sqrt{b^2+c^2+1}}\Psi_2 + \frac{1}{\sqrt{b^2+c^2+1}}\Psi_3.$$

Функции U_1, U_2, U_3 – вырожденные, т.к. отвечают одному и тому же собственному значению A.

5.18 $\overline{T} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$, где k – волновое число.

Примечание: Используйте волновую функцию свободной частицы (пример 8).

5.21 $\left[\hat{H}, \hat{x}\right] = -i\hbar \hat{p}_x/m$,

$$\begin{aligned}\overline{p_x} &= \frac{im}{\hbar}\int\left(\Psi^*\hat{H}\hat{x}\Psi - \Psi^*\hat{x}\hat{H}\Psi\right)dx = \\ &= \frac{im}{\hbar}\int\left(\Psi^*\hat{H}U - E\Psi^*U\right)dx = \\ &= \frac{im}{\hbar}\int\left(\Psi^*\hat{H}U - U\hat{H}^*\Psi^*\right)dx = 0,\end{aligned}$$

т.к. H – самосопряженный оператор, $U = x\Psi$,

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad \hat{H}^*\Psi^* = E\Psi^*.$$

5.22 а) Из условия нормировки $C^2 = 8/3l$,

$$\overline{T} = \int \Psi^* \frac{\hat{p}^2}{2m}\Psi\, dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \Psi^* \frac{d^2\Psi}{dx^2}\, dx = \frac{2}{3}\frac{\pi^2\hbar^2}{ml^2},$$

б) $C^2 = 30/l^5$, $\overline{T} = 5\hbar^2/ml^2$.

ПРИЛОЖЕНИЕ

1. Символ Кронекера:

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n; \\ 0, & m \neq n. \end{cases}$$

2. δ - функция Дирака и ее свойства:

$$\delta\left(x\right) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk;$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta\left(x\right) dx = 1; \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty} f\left(x\right) \delta\left(x-a\right) dx = f\left(a\right);$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} f\left(x\right) \delta\left(x\right) = f\left(0\right)$$

3. Гауссов интеграл:

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

$$\int_{0}^{\infty} x^{2n} e^{-x^2/a^2}\, dx = \sqrt{\pi} \frac{2n!}{n!} \left(\frac{a}{2}\right)^{2n+1},$$

$$\int_{0}^{\infty} x^{2n+1} e^{-x^2/a^2}\, dx = \frac{n!}{2} a^{2n+2}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Давыдов А.С. *Квантовая механика: учеб. пособие..* – СПб.: БХВ-Петербург, 2011.

2. Браун А.Г., Левитина И.Г. *Элементы квантовой механики и физики атомного ядра.* – М.: НИЦ ИНФРА-М, 2015.

3. Кузнецов С.И., Лидер А.М. *Физика. Волновая оптика. Квантовая природа излучения. Элементы атомной и ядерной физики.* – М.: Вузов. учеб.: НИЦ ИНФРА-М, 2015.

4. Стрекалов Ю.А., Тенякова Н.А. *Физика твердого тела: Учебное пособие.* – М.: ИЦ РИОР: НИЦ Инфра-М, 2013.

5. Сергеев Н.А., Рябушкин Д.С. *Основы квантовой теории ядерного магнитного резонанса.* –М.: Логос, 2013.

6. Канн К.Б. *Курс общей физики.* – М.: КУРС: НИЦ ИНФРА-М, 2014.

7. Кузнецов С.И. *Физика в вузе. Современный учебник по механике.* – М.: НИЦ ИНФРА-М, 2014.

8. Ильюшонок А.В., Астахов П.В., Гончаренко И.А. и др. *Физика: Учебное пособие.* – М.: Нов. знание, 2013.

9. Никеров В.А. *Физика. Современный курс.* – М: Дашков и К, 2012.

10. Кузнецов С.И. *Ускорители заряженных частиц. Курс физики с примерами решения задач.* – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2011.