**КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**ИНСТИТУТ ФИЗИКИ**

***Кафедра теоретической физики***

**О.В. СОЛОВЬЕВ, Э.И. БАЙБЕКОВ, С.И. БЕЛОВ**

# КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ (ПРАКТИЧЕСКИЙ КУРС)

**Задачник для физиков**

**Часть I**

**Казань – 2015**

**УДК 530.145**
**ББК 22.314**

*Принято на заседании кафедры теоретической физики*
*Протокол № 10 от 8 мая 2015 года*

**Рецензент:**
доктор физико-математических наук, доцент,
заведующий кафедрой вычислительной физики и моделирования физических процессов КФУ **Мокшин А.В.**

**Соловьев О.В.**
**Квантовая теория (практический курс). Задачник для физиков. Часть I** / О.В. Соловьев, Э.И. Байбеков, С.И. Белов. – Казань: Казан. ун-т, 2015. – 111 с.

В данном учебном пособии разобрано решение типовых задач, иллюстрирующих основные понятия и математический аппарат квантовой теории, способы вычисления вероятностей значений наблюдаемых величин для простейших квантово-механических систем – частицы в одномерном потенциальном поле, линейного гармонического осциллятора, атома водорода. Предложены задачи для самостоятельного решения. Пособие предназначено для студентов физических специальностей, изучающих курс «Квантовая теория». Может быть использовано широким кругом читателей для самостоятельного знакомства с основными понятиями квантовой теории при наличии базовых знаний математического анализа и курсов общей физики в объеме, предусмотренном классическим университетским образованием.

# ОГЛАВЛЕНИЕ

# ВВЕДЕНИЕ

Данное учебное пособие представляет собой сборник задач по квантовой теории, иллюстрирующих ее основные положения и физические следствия. Пособие состоит из семи глав, по содержанию охватывающих первую половину семестрового курса «Квантовая теория» у студентов физических специальностей ВУЗов Российской Федерации. В пособие включены разделы, посвященные математическому аппарату квантовой теории, одномерному движению частицы и движению в поле центральных сил. В каждой главе кратко изложены основные теоретические сведения и приведены подробные решения нескольких типовых задач, далее приводится список задач для самостоятельного решения. С точки зрения авторов, такое построение пособия позволяет на конкретных примерах освоить концепции квантовой механики, и в то же время приобрести навыки использования соответствующей математической техники. Стиль изложения материала соответствует теоретическим курсам квантовой механики [1, 2]. Часть задач взята авторами из ранее издававшихся учебно-методических пособий кафедры теоретической физики Казанского Федерального университета [3, 4]. В конце пособия имеется краткое математическое приложение и список рекомендуемой литературы.

Наиболее важные понятия, встречающиеся в тексте впервые, выделены курсивом. Векторные величины выделены жирным шрифтом. Конец разбора решения задачи обозначен символом ▲. Звездочкой в списке задач для самостоятельного решения отмечены задачи повышенной сложности. В конце пособия к некоторым из задач приведены ответы и указания, обращаться к которым рекомендуется только после попыток решить задачи самостоятельно.

Авторы выражают благодарность профессору Б.З. Малкину за ценные замечания.

# 1. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ, КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ, ИХ СВОЙСТВА И ОПЕРАЦИИ НАД НИМИ

Рассмотрим изолированную частицу в трехмерном пространстве. В квантовой механике ее состояние задается комплексной функцией $\psi(x,y,z)$, которая называется *волновой функцией*. Квадрат модуля волновой функции $|\psi(x,y,z)|^2$ имеет физический смысл плотности вероятности найти частицу в точке $(x,y,z)$ при измерении ее положения в пространстве. Отсюда следует *условие нормировки* волновой функции: $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dy \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dz |\psi(x,y,z)|^2 = 1$. Вместо декартовых координат можно использовать криволинейные – например, сферические $(r, \theta, \varphi)$. Далее совокупность координат будем обозначать $\xi$, а элемент объема как $d\xi$ (например, в сферических координатах $d\xi = r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$). Условие нормировки запишется как $\int d\xi |\psi(\xi)|^2 = 1$. Здесь и далее интеграл по $\xi$ берется по всему пространству.

Все возможные волновые функции образуют линейное пространство, поэтому волновую функцию $\psi(\xi)$ можно рассматривать как вектор линейного пространства. Будем называть его *вектор состояния* и обозначать как $|\psi\rangle$. Можно ввести *скалярное произведение* волновых функций (векторов состояния):

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int d\xi \varphi^*(\xi)\psi(\xi) \tag{1.1}$$

Очевидно, что $\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*$. Из (1.1) следует также свойство линейности скалярного произведения по обоим векторам ($\alpha, \beta, \gamma, \delta = \text{const}$):

$$\langle \alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2 | \gamma\psi_1 + \delta\psi_2 \rangle = \\ = \alpha^*\gamma\langle\varphi_1|\psi_1\rangle + \alpha^*\delta\langle\varphi_1|\psi_2\rangle + \beta^*\gamma\langle\varphi_2|\psi_1\rangle + \beta^*\delta\langle\varphi_2|\psi_2\rangle. \quad (1.2)$$

Волновые функции $\psi(\xi)$ и $\varphi(\xi)$ (векторы состояния $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$) называются ортогональными, если $\langle\varphi|\psi\rangle = 0$. Условие нормировки в обозначениях векторов состояния имеет вид $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

Комплексное линейное пространство, в котором определено скалярное произведение векторов, и скалярное произведение любого вектора самого на себя есть конечное число, называется *гильбертовым пространством* (строго говоря, также должно выполняться требование полноты линейного пространства). Таким образом, можно говорить, что состояние квантово-механической системы описывается вектором гильбертова пространства.

Волновая функция (вектор состояния) определяется с точностью до *фазового множителя* вида $e^{i\cdot\varphi}$, где $\varphi$ – постоянная. Добавление такого множителя не приводит к изменению нормировки волновой функции и значений наблюдаемых физических величин, которые, согласно постулатам квантовой механики, определяются выражениями, билинейными по волновой функции $\psi(\xi)$ и комплексно-сопряженной к ней функции.

**<u>Задача 1.</u>**

Вектор состояния системы равен $|\psi\rangle = \alpha(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)$, где $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ – ортогональные и нормированные вектора. Найти постоянную $\alpha$.

*Решение:*

Постоянная $\alpha$ найдется из условия нормировки для вектора состояния $|\psi\rangle$. Используя свойство линейности скалярного произведения (1.2), запишем:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\alpha(\psi_1 + \psi_2)|\alpha(\psi_1 + \psi_2)\rangle = \\ = \alpha^*\alpha(\langle\psi_1|\psi_1\rangle + \langle\psi_1|\psi_2\rangle + \langle\psi_2|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|\psi_2\rangle) = 1.$$

Условие ортономированности векторов $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ означает, что $\langle\psi_1|\psi_1\rangle = 1$, $\langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1$, $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^* = 0$. Тогда имеем $|\alpha|^2 = 1/2$. Можно положить $\alpha = 1/\sqrt{2}$, поскольку волновая функция (вектор состояния) определяется с точностью до фазового множителя. ▲

В квантовой механике наблюдаемым физическим величинам ставятся в соответствие линейные эрмитовы *операторы*, действующие в пространстве волновых функций (или, говоря иначе, в гильбертовом пространстве векторов состояния). Оператор переводит вектор состояния в другой вектор по определенному закону. Свойство линейности означает, что $\hat{F}\left(a\psi(\xi) + b\varphi(\xi)\right) = a\hat{F}\psi(\xi) + b\hat{F}\varphi(\xi)$ для любых $\psi(\xi)$ и $\varphi(\xi)$ ($a$ и $b$ – произвольные комплексные числа). Тривиальным примером линейного оператора может служить *тождественный оператор*: $\hat{E}\psi(\xi) = \psi(\xi)$ для любой функции $\psi(\xi)$. Пример нелинейного оператора: $\hat{F}\psi(\xi) = \sqrt{\psi(\xi)}$. О свойстве эрмитовости оператора см. (1.7) и далее.

Операторы $\hat{F}_1$ и $\hat{F}_2$ *равны*, если $\hat{F}_1\psi(\xi) = \hat{F}_2\psi(\xi)$ для любой функции $\psi(\xi)$. Можно доказать *следующее свойство*: операторы $\hat{F}_1$ и $\hat{F}_2$ равны, если для любых волновых функций $\varphi(\xi)$ и $\psi(\xi)$

$$\int d\xi \varphi(\xi)\hat{F}_1\psi(\xi) = \int d\xi \varphi(\xi)\hat{F}_2\psi(\xi). \tag{1.3}$$

Оператор называется *комплексно-сопряженным* оператором к $\hat{F}$ и обозначается $\hat{F}^*$, если для любой волновой функции $\psi(\xi)$ выполняется

$$\hat{F}^*\psi^*(\xi) = \left(\hat{F}\psi(\xi)\right)^*. \tag{1.4}$$

**<u>Задача 2.</u>**

Доказать, что $\left(\hat{F}^*\right)^* = \hat{F}$.

*Решение:*

Для любой функции $\psi(\xi)$ верно $\left(\hat{F}^*\right)^*\psi(\xi)=\left(\hat{F}^*\psi^*(\xi)\right)^*=\left(\left(\hat{F}\psi(\xi)\right)^*\right)^*=\hat{F}\psi(\xi)$, отсюда по определению равенства операторов получим $\left(\hat{F}^*\right)^*=\hat{F}$. ▲

Оператор называется *транспонированным* оператором к $\hat{F}$ и обозначается $\tilde{\hat{F}}$, если для любых волновых функций $\varphi(\xi)$ и $\psi(\xi)$ выполняется

$$\int d\xi\varphi(\xi)\tilde{\hat{F}}\psi(\xi)=\int d\xi\psi(\xi)\hat{F}\varphi(\xi). \tag{1.5}$$

**<u>Задача 3.</u>**

Доказать, что $\tilde{\tilde{\hat{F}}}=\hat{F}$.

*Решение:*

Для любых $\varphi(\xi)$ и $\psi(\xi)$

$$\int d\xi\varphi(\xi)\tilde{\tilde{\hat{F}}}\psi(\xi)=\int d\xi\psi(\xi)\tilde{\hat{F}}\varphi(\xi)=\int d\xi\varphi(\xi)\hat{F}\psi(\xi).$$

Отсюда по свойству (1.3) операторы $\tilde{\tilde{\hat{F}}}$ и $\hat{F}$ равны. ▲

Заметим, что интеграл $\int d\xi\varphi^*(\xi)\hat{F}\psi(\xi)$ представляет собой скалярное произведение (см. (1.1)) $\langle\varphi|\hat{F}\psi\rangle$. Последнее обычно записывают в симметричной форме и называют *матричным элементом оператора* $\hat{F}$ на функциях $\varphi(\xi)$ и $\psi(\xi)$:

$$\langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle=\int d\xi\varphi^*(\xi)\hat{F}\psi(\xi). \tag{1.6}$$

**<u>Задача 4.</u>**

Показать, что операции транспонирования и комплексного сопряжения оператора можно производить в любом порядке, то есть $\widetilde{\left(\hat{F}^*\right)}=\left(\tilde{\hat{F}}\right)^*$.

*Решение:*

Для любых $\varphi(\xi)$ и $\psi(\xi)$ выполняется (опустим аргумент $\xi$ в записи волновых функций)

$$\int d\xi\varphi\widetilde{\left(\hat{F}^{*}\right)}\psi=\int d\xi\psi\hat{F}^{*}\varphi=\int d\xi\psi\left(\hat{F}\varphi^{*}\right)^{*}=\left(\int d\xi\psi^{*}\hat{F}\varphi^{*}\right)^{*}=\left(\int d\xi\varphi^{*}\tilde{\hat{F}}\psi^{*}\right)^{*}=$$

$$=\int d\xi\varphi\left(\tilde{\hat{F}}\psi^{*}\right)^{*}=\int d\xi\varphi\left(\tilde{\hat{F}}\right)^{*}\psi.$$

Отсюда по свойству (1.3) $\widetilde{\left(\hat{F}^{*}\right)}=\left(\tilde{\hat{F}}\right)^{*}$. ▲

Последовательное выполнение операций транспонирования и комплексного сопряжения (в любом порядке) над оператором $\hat{F}$ задает *эрмитово сопряженный* оператор $\hat{F}^{+}$:

$$\hat{F}^{+}=\widetilde{\left(\hat{F}^{*}\right)}=\left(\tilde{\hat{F}}\right)^{*}. \tag{1.7}$$

На основании разобранных задач 2–4 легко показать, что $\left(\hat{F}^{+}\right)^{+}=\hat{F}$.

Если выполняется $\hat{F}=\hat{F}^{+}$, то оператор $\hat{F}$ называется *эрмитовым*. Подчеркнем, что в квантовой механике наблюдаемым физическим величинам ставятся в соответствие именно эрмитовы операторы.

Рассмотрим одномерное движение частицы вдоль оси $x$. Физической наблюдаемой – координате $x$ частицы в квантовой механике соответствует *оператор координаты* $\hat{x}$, действие которого на функцию заключается в умножении ее на $x$:

$$\hat{x}\psi(x)=x\psi(x). \tag{1.8}$$

**<u>Задача 5.</u>**

Найти а) $\hat{x}^{*}$; б) $\tilde{\hat{x}}$; в) $\hat{x}^{+}$.

*Решение:*

а) Для произвольной волновой функции $\psi(x)$ по определению (1.4) имеем $\hat{x}^*\psi(x)=\left(\hat{x}\psi^*(x)\right)^*=\left(x\psi^*(x)\right)^*=x\psi(x)=\hat{x}\psi(x)$, отсюда по свойству (1.3) $\hat{x}^*=\hat{x}$;

б) для любых функций $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ по определению (1.5) имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\varphi(x)\tilde{\hat{x}}\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty} dx\psi(x)\hat{x}\varphi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty} dx\psi(x)x\varphi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty} dx\varphi(x)x\psi(x)=$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty} dx\varphi(x)\hat{x}\psi(x),$$ отсюда по свойству (1.3) $\tilde{\hat{x}}=\hat{x}$;

в) из пунктов а) и б) и определения (1.7) получим $\hat{x}^+=\hat{x}$, то есть оператор координаты $\hat{x}$ – эрмитов, как и должно быть для оператора, соответствующего физической наблюдаемой. ▲

**Задача 6.**

Рассмотрим оператор $\frac{\partial}{\partial x}$ дифференцирования по координате, который волновой функции $\psi(x)$ ставит в соответствие ее производную $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$. Найти а) $\frac{\partial}{\partial x}^*$; б) $\widetilde{\frac{\partial}{\partial x}}$; в) $\frac{\partial}{\partial x}^+$. *Примечание*: для одномерной задачи можно было бы писать полную производную $\frac{d}{dx}$, однако аналогичные результаты будут справедливы и в случае большего числа измерений, так что для общности будем писать здесь частную производную.

*Решение:*

а) Для произвольной волновой функции $\psi(x)$ по определению (1.4) имеем $\frac{\partial}{\partial x}^*\psi(x)=\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x)\right)^*=\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$, отсюда по определению равенства операторов $\frac{\partial}{\partial x}^*=\frac{\partial}{\partial x}$;

б) для любых волновых функций $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ по определению (1.5):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\varphi(x)\frac{\tilde{\partial}}{\partial x}\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\psi(x)\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x) = \left(\psi(x)\varphi(x)\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\varphi(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x).$$

Для волновых функций выполняется условие нормировки $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\left|\psi(x)\right|^2 = 1$, из которого следует, что $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\psi(x) = 0$ (иначе интеграл расходится). Таким образом, первое слагаемое в правой части равно нулю, и по свойству (1.3) получается $\frac{\tilde{\partial}}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}$.

в) из пунктов а) и б) и определения (1.7) получим $\frac{\partial}{\partial x}^{+} = -\frac{\partial}{\partial x}$, то есть оператор дифференцирования $\frac{\partial}{\partial x}$ – неэрмитов. ▲

Заметим, что если оператор $\frac{\partial}{\partial x}$ умножить на мнимую единицу, то получится эрмитов оператор. Физической наблюдаемой – проекции импульса $p_x$ частицы в квантовой механике отвечает *оператор импульса* $\hat{p}_x$:

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \tag{1.9}$$

где $\hbar$ – постоянная Планка. Из результатов задачи 6 ясно, что оператор $\hat{p}_x$ – эрмитов. Для трехмерного движения частицы вводится векторный оператор импульса:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}\right) = -i\hbar\nabla\,. \tag{1.10}$$

Определим *сложение* и *умножение* операторов. *Сумма* операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ – это оператор $\left(\hat{F}+\hat{G}\right)$, который действует на волновые функции следующим образом:

$$\left(\hat{F}+\hat{G}\right)\psi(\xi) = \hat{F}\psi(\xi) + \hat{G}\psi(\xi). \tag{1.11}$$

*Произведение* операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ – это оператор $\hat{F} \cdot \hat{G}$, который действует на волновые функции следующим образом:

$$\left(\hat{F} \cdot \hat{G}\right)\psi(\xi) = \hat{F}\left(\hat{G}\psi(\xi)\right). \tag{1.12}$$

В дальнейшем точку, обозначающую умножение операторов, часто будем опускать. Непосредственной проверкой можно убедиться, что выполняются свойства ассоциативности сложения и умножения операторов:

$$\left(\hat{F} + \hat{G}\right) + \hat{A} = \hat{F} + \left(\hat{G} + \hat{A}\right), \quad \left(\hat{F}\hat{G}\right)\hat{A} = \hat{F}\left(\hat{G}\hat{A}\right), \tag{1.13}$$

а также свойство дистрибутивности:

$$\left(\hat{F} + \hat{G}\right)\hat{A} = \hat{F}\hat{A} + \hat{G}\hat{A}. \tag{1.14}$$

Выполняются также следующие свойства, связывающие операции сложения и умножения с операциями комплексного сопряжения, транспонирования и эрмитова сопряжения:

$$\begin{gathered}
\left(\alpha\hat{F} + \beta\hat{G}\right)^* = \alpha^*\hat{F}^* + \beta^*\hat{G}^*, \quad \widetilde{\left(\alpha\hat{F} + \beta\hat{G}\right)} = \alpha\tilde{\hat{F}} + \beta\tilde{\hat{G}}, \\
\left(\alpha\hat{F} + \beta\hat{G}\right)^+ = \alpha^*\hat{F}^+ + \beta^*\hat{G}^+ \qquad \left(\alpha, \beta = \mathrm{const}\right), \\
\left(\hat{F}\hat{G}\right)^* = \hat{F}^*\hat{G}^*, \quad \widetilde{\left(\hat{F}\hat{G}\right)} = \tilde{\hat{G}}\tilde{\hat{F}}, \quad \left(\hat{F}\hat{G}\right)^+ = \hat{G}^+\hat{F}^+.
\end{gathered} \tag{1.15}$$

Последнее равенство обобщим на произвольное число сомножителей:

$$\left(\hat{F}_1\hat{F}_2\ldots\hat{F}_n\right)^+ = \hat{F}_n^+\ldots\hat{F}_2^+\hat{F}_1^+. \tag{1.16}$$

Определим операцию возведения оператора в *степень n*:

$$\hat{F}^n = \underbrace{\hat{F} \cdot \hat{F} \ldots \hat{F} \cdot \hat{F}}_{n \text{ сомножителей}}. \tag{1.17}$$

Пусть функция $f(x)$ разложима в ряд Маклорена:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) x^n,$$

где $f^{(n)}(0)$ – производная *n*-го порядка от функции $f(x)$ в точке $x = 0$. Тогда под *функцией* $f\left(\hat{F}\right)$ *от оператора* $\hat{F}$ будем понимать ряд

$$f\left(\hat{F}\right)=\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{n!}f^{(n)}\left(0\right)\hat{F}^{n}. \qquad (1.18)$$

*Обратный оператор* к оператору $\hat{F}$ – такой оператор $\hat{F}^{-1}$, который при умножении на $\hat{F}$ (неважно, справа или слева) дает тождественный оператор:

$$\hat{F}\hat{F}^{-1}=\hat{F}^{-1}\hat{F}=\hat{E}. \qquad (1.19)$$

Из определения очевидно, что $\left(\hat{F}^{-1}\right)^{-1}=\hat{F}$.

**<u>Задача 7.</u>**

Доказать, что $\left(\hat{F}\hat{G}\right)^{-1}=\hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1}$.

*Решение:*

Докажем равенство, умножив левую и правую части справа на $\left(\hat{F}\hat{G}\right)$. В левой части по определению (1.19) получим $\left(\hat{F}\hat{G}\right)^{-1}\left(\hat{F}\hat{G}\right)=\hat{E}$. В правой части по свойству (1.13) ассоциативности умножения операторов получим:

$$\left(\hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1}\right)\left(\hat{F}\hat{G}\right)=\hat{G}^{-1}\left(\hat{F}^{-1}\hat{F}\right)\hat{G}=\hat{G}^{-1}\hat{E}\hat{G}=\hat{G}^{-1}\hat{G}=\hat{E}. \ \blacktriangle$$

Оператор $\hat{F}$ называется *унитарным*, если

$$\hat{F}^{-1}=\hat{F}^{+}. \qquad (1.20)$$

Тривиальный пример унитарного оператора – тождественный оператор $\hat{E}$. Напомним, что именно унитарные операторы задают переход от одного ортонормированного базиса линейного пространства к другому.

Можно показать, что если оператор $\hat{F}$ – линейный, эрмитов или унитарный, то оператор $\hat{F}^{-1}$ также линейный, эрмитов или унитарный, соответственно.

**Задачи для самостоятельного решения**

1.1. Вычислить:

а) $\left|i+1\right|^{2}$, г) $\left|e^{2i}\right|$, б) $\left|1-i\right|^3$,

д) $\left|e^{-i}\right|^3$,

в) $\left|3i-\sqrt{2}\right|^2$,

е) $\left|e^{i-1}\right|$.

1.2. Пусть векторы состояния $\left|\psi_1\right\rangle$ и $\left|\psi_2\right\rangle$ нормированы ($\left\langle\psi_1\middle|\psi_1\right\rangle=\left\langle\psi_2\middle|\psi_2\right\rangle=1$), но не ортогональны: $\left\langle\psi_1\middle|\psi_2\right\rangle=\alpha$, где $\alpha$ – некоторое комплексное число. Введем

$$|\psi_2'>=\frac{-\alpha}{\sqrt{1-|\alpha|^2}}|\psi_1>+\frac{1}{\sqrt{1-|\alpha|^2}}|\psi_2>.$$

Показать, что векторы состояния $|\psi_1>$ и $|\psi_2'>$ ортонормированы.

1.3. Доказать свойства (1.15).

1.4. Найти оператор, эрмитово сопряженный оператору $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$ ($n$ – произвольное натуральное число).

1.5. Найти результат действия операторов $\frac{\partial^2}{\partial x^2}x^2$ и $\left(\frac{\partial}{\partial x}x\right)^2$ на функции:

а) $\sin x$,

б) $e^{2x}$.

1.6. Какое соотношение должно выполняться для двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, чтобы оператор $\hat{A}\hat{B}$ был также эрмитовым?

1.7. Эрмитовы ли операторы:

а) $\hat{x}^2$,

б) $\hat{p}_x^2$,

в) $i\left(\hat{p}_x^2\hat{x}-\hat{x}\hat{p}_x^2\right)$,

г) $\hat{x}\hat{p}_x$,

д) умножения на число: $\hat{\alpha}\psi\left(\xi\right)=\alpha\psi\left(\xi\right)$,

е) инверсии: $\hat{I}\psi\left(x\right)=\psi\left(-x\right)$,

ж) комплексного сопряжения: $\hat{C}\psi\left(\xi\right)=\psi^*\left(\xi\right)$?

1.8. Показать, что для любого оператора $\hat{\sigma}$, для которого $\hat{\sigma}^2 = \hat{E}$, выполняется соотношение $e^{i\theta\hat{\sigma}} = \cos\theta + i\hat{\sigma}\sin\theta$, где $\theta$ – некоторое вещественное число.

1.9. Показать, что если $\hat{F}$ – унитарный оператор, то оператор $\hat{F}^{-1}$ также унитарный.

1.10. Показать, что если $\hat{F}$ – эрмитов оператор, то оператор $\hat{G} = e^{i\hat{F}}$ будет унитарным.

1.11. Показать, что произвольный оператор $\hat{F}$ можно представить в виде $\hat{F} = \hat{A} + i\hat{B}$, где $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – эрмитовы операторы.

1.12. Показать, что если $\hat{F}$ – эрмитов оператор, то оператор $\hat{A}\hat{F}\hat{A}^{+}$ также эрмитов.

1.13. Показать, что оператор сдвига $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$ имеет вид $\hat{T}_a = \exp\left(\frac{i}{\hbar} a\hat{p}_x\right)$.

1.14. Выразить результат действия оператора $\exp\left(-\hat{I}^{-1}\right)$ на некоторую волновую функцию $\psi(x)$ через $\psi(x)$ и $\psi(-x)$, $\hat{I}$ – оператор инверсии: $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$.

1.15. Найти операторы: а) $\frac{\partial}{\partial r}^{+}$, б) $\frac{\partial}{\partial \varphi}^{+}$, в) $\frac{\partial}{\partial \theta}^{+}$, г) $\frac{\partial}{\partial \rho}^{+}$, где $r, \theta, \varphi$ – сферические координаты, $\rho$ – цилиндрическая координата. Указание: для краткости рассматривать абстрактный случай пространства волновых функций, зависящих только от одной соответствующей криволинейной координаты.

1.16.* Получится ли правильный результат для оператора $\frac{\partial^2}{\partial \rho^2}^{+}$, если в равенство $\frac{\partial^2}{\partial \rho^2}^{+} = \left(\frac{\partial}{\partial \rho}^{+}\right)^2$ (см. (1.15)) подставить результат пункта г) предыдущей задачи $\dfrac{\partial}{\partial\rho}^{+} = -\dfrac{1}{\rho} - \dfrac{\partial}{\partial\rho}$? Указание: выясните, для какого класса функций верен указанный результат задачи 1.15.

1.17.* Пусть $\hat{F}$ – эрмитов оператор, и $\hat{F}^n \psi(\xi) = 0$ для некоторой волновой функции $\psi(\xi)$, $n$ – натуральное число, $n > 1$. Показать, что $\hat{F}\psi(\xi) = 0$.

# 2. КОММУТАТОРЫ

Операция умножения операторов (1.12) не является коммутативной: $\hat{F}\hat{G}$ в общем случае не равно $\hat{G}\hat{F}$. *Коммутатором* двух операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ называется третий оператор, обозначаемый $\left[\hat{F},\hat{G}\right]$ и равный

$$\left[\hat{F},\hat{G}\right]=\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F} \tag{2.1}$$

Если коммутатор $\left[\hat{F},\hat{G}\right]$ равен 0, то говорят, что операторы $\hat{F}$ и $\hat{G}$ *коммутируют*. Например, любой оператор коммутирует сам с собой и с любой своей степенью: $\left[\hat{F},\hat{F}\right]=0$, $\left[\hat{F},\hat{F}^n\right]=0$ ($n$ – натуральное число). Заметим, что если $\hat{F}$ коммутирует с $\hat{H}$, и $\hat{G}$ коммутирует $\hat{H}$, то $\hat{F}$ и $\hat{G}$ могут не коммутировать: из $\left[\hat{F},\hat{H}\right]=0$ и $\left[\hat{G},\hat{H}\right]=0$ не следует, что $\left[\hat{F},\hat{G}\right]=0$.

Используя определение (2.1), легко убедиться, что выполняются следующие свойства коммутатора:

а) антисимметричность: $\left[\hat{F},\hat{G}\right]=-\left[\hat{G},\hat{F}\right]$;

б) линейность по обоим операторам; например, линейность по первому оператору означает, что $\left[\alpha_1\hat{F}_1+\alpha_2\hat{F}_2,\hat{G}\right]=\alpha_1\left[\hat{F}_1,\hat{G}\right]+\alpha_2\left[\hat{F}_2,\hat{G}\right]$, где $\alpha_1$ и $\alpha_2$ – произвольные комплексные числа.

**<u>Задача 1.</u>**

Заданы операторы:

$$\hat{F}\psi(x,y,z)=f(x,y,z)\psi(x,y,z),\quad \hat{G}\psi(x,y,z)=g(x,y,z)\psi(x,y,z),$$

где $f(x,y,z)$ и $g(x,y,z)$ – некоторые функции. Вычислить коммутатор $\left[\hat{F},\hat{G}\right]$.

*Решение:*

Подействуем искомым коммутатором на некоторую волновую функцию $\psi(x,y,z)$:

$$\left[\hat{F},\hat{G}\right]\psi(x,y,z)=\left(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}\right)\psi(x,y,z)=\hat{F}\left(\hat{G}\psi(x,y,z)\right)-\hat{G}\left(\hat{F}\psi(x,y,z)\right)=$$
$$=f(x,y,z)g(x,y,z)\psi(x,y,z)-g(x,y,z)f(x,y,z)\psi(x,y,z)=0.$$

Отсюда, ввиду произвольности $\psi(x,y,z)$, следует $\left[\hat{F},\hat{G}\right]=0$. ▲

**Задача 2.**

Вычислить коммутатор $\left[\hat{p}_x,\hat{x}\right]$.

*Решение:*

Подействуем искомым коммутатором на некоторую волновую функцию $\psi(x,y,z)$ (для краткости опустим аргументы функции $\psi$):

$$\left[\hat{p}_x,\hat{x}\right]\psi=\left(\hat{p}_x\hat{x}-\hat{x}\hat{p}_x\right)\psi=\hat{p}_x\left(\hat{x}\psi\right)-\hat{x}\left(\hat{p}_x\psi\right)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(x\psi\right)-x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)=$$
$$=-i\hbar\left(\psi+x\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)+i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi=-i\hbar\psi.$$

Отсюда, ввиду произвольности $\psi(x,y,z)$, следует $\left[\hat{p}_x,\hat{x}\right]=-i\hbar$. ▲

Очевидно, аналогичный результат получится и для других декартовых осей: $\left[\hat{p}_y,\hat{y}\right]=-i\hbar$, $\left[\hat{p}_z,\hat{z}\right]=-i\hbar$. Если же взять оператор проекции импульса на одну декартову ось, а оператор координаты по другой оси, то коммутатор будет равен нулю – например, $\left[\hat{p}_x,\hat{y}\right]=0$. Действительно, операции дифференцирования волновой функции по координате $x$ и умножения ее на координату $y$ можно производить в любом порядке, то есть они коммутируют. Обобщая вышесказанное, можно записать для произвольных осей:

$$\left[\hat{p}_\alpha,\hat{x}_\beta\right]=-i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \tag{2.2}$$

где $\alpha,\beta$ – индексы декартовых осей, $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера, равный 1, если индексы одинаковые, и равный 0, если индексы разные.

В случае, когда один из операторов в коммутаторе (например, первый) представляет собой произведение двух операторов, иногда бывает удобно преобразовать коммутатор с помощью следующего соотношения:

$$\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right]=\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B}. \qquad (2.3)$$

Для доказательства соотношения (2.3) раскроем правую часть по определению коммутатора: $\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B}=\hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B}\right)+\left(\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\right)\hat{B}=$

$$=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{A}\hat{C}\hat{B}+\hat{A}\hat{C}\hat{B}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}=\left(\hat{A}\hat{B}\right)\hat{C}-\hat{C}\left(\hat{A}\hat{B}\right)=\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right].$$

Запишем также соотношение, аналогичное (2.3), для случая, когда второй из операторов в коммутаторе представляет собой произведение двух операторов:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}+\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]. \qquad (2.4)$$

Физической наблюдаемой – моменту импульса $\mathbf{L}=\left[\mathbf{r}\times\mathbf{p}\right]$ частицы в квантовой механике отвечает *оператор момента импульса* $\hat{\mathbf{L}}$:

$$\hat{\mathbf{L}}=\left[\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}}\right]=\begin{vmatrix}\mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z\\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z}\\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z\end{vmatrix}. \qquad (2.5)$$

Здесь квадратные скобки означают векторное произведение векторных операторов, $\mathbf{e}_x,\mathbf{e}_y,\mathbf{e}_z$ – орты декартовой системы координат. Раскрывая определитель и используя (1.10), запишем выражения для операторов проекций момента импульса на декартовы оси:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x&=\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y=i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial z}\right),\\ \hat{L}_y&=\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z=i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial x}\right),\\ \hat{L}_z&=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x=i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right).\end{aligned} \qquad (2.6)$$

Заметим, что в каждом из шести слагаемых в формулах (2.6) сомножители коммутируют, так что их можно было бы записать в другом порядке.

**Задача 3.**

Вычислить коммутатор $\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]$.

*Решение:*

Подставим определения (2.6) и воспользуемся линейностью коммутатора по обоим операторам:

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=\left[\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y,\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z\right]=\left[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{z}\hat{p}_x\right]-\left[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{x}\hat{p}_z\right]-\left[\hat{z}\hat{p}_y,\hat{z}\hat{p}_x\right]+\left[\hat{z}\hat{p}_y,\hat{x}\hat{p}_z\right]$$
.

Рассмотрим первый коммутатор в правой части: $\left[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{z}\hat{p}_x\right]=\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x-\hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z$. Заметим, что оператор $\hat{p}_x$ коммутирует со всеми остальными операторами, встречающимися в этом коммутаторе. Это значит, что в каждом из слагаемых мы можем переместить оператор $\hat{p}_x$ на первое место, произведя некоторое количество перестановок – меняя местами оператор $\hat{p}_x$ с соседними операторными сомножителями:

$$\left[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{z}\hat{p}_x\right]=\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x-\hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z=\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}-\hat{p}_x\hat{z}\hat{y}\hat{p}_z=\hat{p}_x\left(\left(\hat{y}\hat{p}_z\right)\hat{z}-\hat{z}\left(\hat{y}\hat{p}_z\right)\right)=\hat{p}_x\left[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{z}\right]$$
.

Таким образом, мы фактически выяснили, что операторы, коммутирующие со всеми остальными операторами, фигурирующими в коммутаторе, *можно выносить за знак коммутатора*.

Например, оператор $\hat{y}$ также коммутирует со всеми остальными операторами, встречающимися в рассматриваемом коммутаторе $\left[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{z}\hat{p}_x\right]$, и его мы также можем вынести за знак коммутатора и поставить, например, на второе место после оператора $\hat{p}_x$:

$$\left[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{z}\hat{p}_x\right]=\hat{p}_x\left[\hat{y}\hat{p}_z,\hat{z}\right]=\hat{p}_x\hat{y}\left[\hat{p}_z,\hat{z}\right].$$

Рассуждая аналогичным образом, получим

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=\hat{p}_x\hat{y}\left[\hat{p}_z,\hat{z}\right]-\hat{y}\hat{x}\left[\hat{p}_z,\hat{p}_z\right]-\hat{p}_y\hat{p}_x\left[\hat{z},\hat{z}\right]+\hat{p}_y\hat{x}\left[\hat{z},\hat{p}_z\right].$$

Таким образом, мы свели задачу к уже известным коммутаторам (2.2):

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=\hat{p}_x\hat{y}\cdot(-i\hbar)-\hat{y}\hat{x}\cdot 0-\hat{p}_y\hat{p}_x\cdot 0+\hat{p}_y\hat{x}\cdot(i\hbar)=i\hbar\left(\hat{p}_y\hat{x}-\hat{p}_x\hat{y}\right).$$

Сравнивая результат с (2.6), запишем:

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]=i\hbar\hat{L}_z.\ \blacktriangle \tag{2.7}$$

Как следует из антисимметричности коммутатора, $\left[\hat{L}_y,\hat{L}_x\right]=-i\hbar\hat{L}_z$. Рассуждая аналогично задаче 3, можно также получить следующие коммутаторы: $\left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right]=-\left[\hat{L}_z,\hat{L}_y\right]=i\hbar\hat{L}_x$, $\left[\hat{L}_z,\hat{L}_x\right]=-\left[\hat{L}_x,\hat{L}_z\right]=i\hbar\hat{L}_y$. Все эти результаты можно объединить формулой

$$\left[\hat{L}_\alpha,\hat{L}_\beta\right]=i\hbar e_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma, \tag{2.8}$$

где $\alpha,\beta,\gamma$ – индексы декартовых осей. В правой части подразумевается суммирование по повторяющемуся индексу $\gamma$ (правило Эйнштейна), $e_{\alpha\beta\gamma}$ – единичный полностью антисимметричный тензор (тензор Леви-Чивиты): он равен 1, если тройку индексов $(\alpha,\beta,\gamma)$ можно получить из тройки $(x,y,z)$ четным числом перестановок соседних индексов; равен $-1$, если тройку индексов $(\alpha,\beta,\gamma)$ можно получить из тройки $(x,y,z)$ нечетным числом перестановок соседних индексов; и равен 0, если хотя бы два индекса из тройки $(\alpha,\beta,\gamma)$ одинаковые.

Введем *оператор квадрата момента импульса*:

$$\hat{\mathbf{L}}^2=\left(\hat{L}_x\right)^2+\left(\hat{L}_y\right)^2+\left(\hat{L}_z\right)^2. \tag{2.9}$$

**Задача 4.**

Вычислить коммутаторы $\left[\hat{L}_x,\hat{\mathbf{L}}^2\right]$, $\left[\hat{L}_y,\hat{\mathbf{L}}^2\right]$, $\left[\hat{L}_z,\hat{\mathbf{L}}^2\right]$.

*Решение:*

Наиболее простой способ решить эту задачу – свести ее к уже известным коммутаторам (2.8). Для этого воспользуемся определением (2.9) и свойством (2.4):

$$\left[\hat{L}_x,\hat{\mathbf{L}}^2\right]=\left[\hat{L}_x,\left(\hat{L}_x\right)^2\right]+\left[\hat{L}_x,\left(\hat{L}_y\right)^2\right]+\left[\hat{L}_x,\left(\hat{L}_z\right)^2\right]=$$

$$=\left[\hat{L}_x,\hat{L}_x\right]\hat{L}_x+\hat{L}_x\left[\hat{L}_x,\hat{L}_x\right]+\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]\hat{L}_y+\hat{L}_y\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]+\left[\hat{L}_x,\hat{L}_z\right]\hat{L}_z+\hat{L}_z\left[\hat{L}_x,\hat{L}_z\right]=$$

$$=0\cdot\hat{L}_x+\hat{L}_x\cdot 0+i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y+\hat{L}_y i\hbar\hat{L}_z+\left(-i\hbar\hat{L}_y\right)\hat{L}_z+\hat{L}_z\left(-i\hbar\hat{L}_y\right)=0.$$

Аналогично можно получить $\left[\hat{L}_y,\hat{\mathbf{L}}^2\right]=0$, $\left[\hat{L}_z,\hat{\mathbf{L}}^2\right]=0$. Полученные результаты можно объединить в формулу:

$$\left[\hat{L}_\alpha,\hat{\mathbf{L}}^2\right]=\left[\hat{\mathbf{L}}^2,\hat{L}_\alpha\right]=0, \tag{2.10}$$

где $\alpha$ – индекс декартовой оси. ▲

Часто используют *безразмерные операторы момента импульса*:

$$\hat{l}_x=\frac{\hat{L}_x}{\hbar},\quad \hat{l}_y=\frac{\hat{L}_y}{\hbar},\quad \hat{l}_z=\frac{\hat{L}_z}{\hbar}. \tag{2.11}$$

Соотношения (2.8) и (2.10) для безразмерных операторов момента импульса примут вид

$$\left[\hat{l}_\alpha,\hat{l}_\beta\right]=ie_{\alpha\beta\gamma}\hat{l}_\gamma,\quad \left[\hat{l}_\alpha,\hat{\mathbf{l}}^2\right]=\left[\hat{\mathbf{l}}^2,\hat{l}_\alpha\right]=0, \tag{2.12}$$

где $\alpha, \beta, \gamma$ – индексы декартовых осей.

В ряде случаев оказывается удобным использовать следующие операторы:

$$\hat{l}_+=\hat{l}_x+i\hat{l}_y,\quad \hat{l}_-=\hat{l}_x-i\hat{l}_y. \tag{2.13}$$

Для введенных операторов справедливы следующие коммутационные соотношения:

$$\left[\hat{l}_-,\hat{l}_z\right]=\hat{l}_-,\quad \left[\hat{l}_+,\hat{l}_z\right]=-\hat{l}_+,\quad \left[\hat{l}_+,\hat{l}_-\right]=2\hat{l}_z. \tag{2.14}$$

Запишем безразмерные операторы проекций момента импульса на декартовы оси в виде линейных дифференциальных операторов (см. (2.6) и (2.11))

$$\hat{l}_x=i\left(z\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial z}\right),\quad \hat{l}_y=i\left(x\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial x}\right),\quad \hat{l}_z=i\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right). \tag{2.15}$$

Форму (2.15) записи данных операторов удобно использовать при вычислении результата их действия на волновую функцию как функцию декартовых координат: $\psi(x,y,z)$. Однако в ряде случаях оказывается удобным рассматривать волновую функцию как функцию сферических координат: $\psi(r,\theta,\varphi)$. Таким образом, возникает необходимость записать операторы проекций момента импульса на декартовы оси в форме, удобной для вычисления результата их действия на функцию сферических координат. Опуская детали вычислений (по сути, речь идет об обычной замене переменных), сразу запишем результат:

$$\begin{gathered}
\hat{l}_x = i\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\
\hat{l}_y = -i\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\
\hat{l}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}.
\end{gathered} \tag{2.16}$$

Обращает на себя внимание независимость операторов момента от переменной $r$. Отсюда сразу следуют, например, следующие коммутационные соотношения:

$$\left[f(r),\hat{l}_\alpha\right]=0,\quad \left[f\left(\frac{\partial}{\partial r}\right),\hat{l}_\alpha\right]=0, \tag{2.17}$$

где $f(x)$ – функция, разложимая в ряд Маклорена, $\alpha$ – индекс декартовой оси.

Запишем также явное выражение для безразмерного оператора квадрата момента импульса в сферических координатах:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = -\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right), \tag{2.18}$$

Этот оператор тоже не содержит переменную $r$, поэтому выполняются соотношения, аналогичные (2.17):

$$\left[f(r),\hat{\mathbf{l}}^2\right]=0,\quad \left[f\left(\frac{\partial}{\partial r}\right),\hat{\mathbf{l}}^2\right]=0. \tag{2.19}$$

Наконец, запишем выражение для оператора Лапласа $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ в сферических координатах:

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) = \\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\hat{\mathbf{l}}^2.\end{aligned} \tag{2.20}$$

Отсюда следуют коммутационные соотношения оператора Лапласа с операторами проекций момента импульса и квадрата момента импульса:

$$\left[\Delta, \hat{l}_\alpha\right] = 0, \quad \left[\Delta, \hat{\mathbf{l}}^2\right] = 0, \tag{2.21}$$

где $\alpha$ – индекс декартовой оси.

**<u>Задача 5.</u>**

Вычислить $\frac{d}{d\lambda}e^{\lambda\hat{F}}$, где $\lambda$ – численный параметр.

*Решение:*

По определению (1.18) функции от оператора $e^{\lambda\hat{F}} = \sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{n!}\lambda^n\hat{F}^n$. Возьмем от этого ряда почленно производную по параметру $\lambda$, вынесем общий множитель – оператор $\hat{F}$ и сделаем замену индекса суммирования:

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\lambda}e^{\lambda\hat{F}} &= \sum_{n=0}^{+\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{d}{d\lambda}\lambda^n\right)\hat{F}^n = \sum_{n=1}^{+\infty}\frac{1}{n!}n\lambda^{n-1}\hat{F}^n = \hat{F}\left(\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{1}{(n-1)!}\lambda^{n-1}\hat{F}^{n-1}\right) = \\ &= \hat{F}\left(\sum_{k=0}^{+\infty}\frac{1}{k!}\lambda^k\hat{F}^k\right) = \hat{F}e^{\lambda\hat{F}}.\end{aligned}$$

Общий множитель $\hat{F}$ можно было вынести и справа от ряда. Заметим, что, вообще, любой оператор $\hat{F}$ коммутирует с любой своей функцией $f\left(\hat{F}\right)$:

$$\left[\hat{F}, f(\hat{F})\right] = \hat{F}f(\hat{F}) - f(\hat{F})\hat{F} = 0. \tag{2.22}$$

Итого, ответ задачи можно записать двояко:

$$\frac{d}{d\lambda}e^{\lambda\hat{F}} = \hat{F}e^{\lambda\hat{F}} = e^{\lambda\hat{F}}\hat{F}. \ \blacktriangle \qquad (2.23)$$

**Задачи для самостоятельного решения**

2.1. Доказать, что операторы $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, определенные в (2.6), являются эрмитовыми.

2.2. Вычислить коммутатор $\left[ie^{ix}\frac{\partial}{\partial x}, e^{-ix}\right]$.

2.3. Вычислить коммутатор $\left[\hat{p}_x, \hat{F}\right]$, где $\hat{F}$ – оператор из задачи 1.

2.4. Вычислить коммутаторы $\left[\hat{x}_\alpha, \hat{L}_\beta\right]$, где $\alpha, \beta$ – индексы декартовых осей.

2.5. Вычислить коммутаторы $\left[\hat{p}_\alpha, \hat{L}_\beta\right]$, где $\alpha, \beta$ – индексы декартовых осей.

2.6. Доказать, что $\left(\hat{l}_+\right)^+ = \hat{l}_-$, $\left(\hat{l}_-\right)^+ = \hat{l}_+$.

2.7. Доказать соотношения (2.14).

2.8. Записать операторы $\hat{l}_+$ и $\hat{l}_-$, введенные в (2.13), в сферических координатах.

2.9. Доказать равенства $\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z$, $\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_-\hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z$ и $\hat{\mathbf{l}}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+\right) + \hat{l}_z^2$.

2.10. Доказать равенство

$$\mathrm{e}^{\hat{G}}\,\hat{F}\,\mathrm{e}^{-\hat{G}} = \hat{F} + \left[\hat{G}, \hat{F}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{G}, \left[\hat{G}, \hat{F}\right]\right] + \frac{1}{3!}\left[\hat{G}, \left[\hat{G}, \left[\hat{G}, \hat{F}\right]\right]\right] + \dots .$$

2.11. Доказать равенство $\mathrm{e}^{-i\hat{l}_x\theta}\,\hat{l}_z\,\mathrm{e}^{i\hat{l}_x\theta} = \hat{l}_z\cos\theta - \hat{l}_y\sin\theta$.

2.12. Равны ли нулю коммутаторы: а) $\left[\hat{I}, \hat{p}_x\right]$, б) $\left[\hat{I}, \frac{d^2}{dx^2}\right]$? $\hat{I}$ – оператор инверсии; в одномерном случае $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$; см. также задачу 1.7 е).

2.13. Пусть для операторов $\hat{F}$ и $\hat{G}$ выполняется равенство $\left[\hat{F},\hat{G}\right]=1$. Доказать равенство $\left[\hat{F}^n,\hat{G}\right]=n\hat{F}^{n-1}$.

2.14. Доказать тождество Якоби $\left[\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]\right]+\left[\hat{B}\left[\hat{C},\hat{A}\right]\right]+\left[\hat{C}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=0$.

2.15.* Для операторов, удовлетворяющих условиям $\left[\hat{F},\left[\hat{F},\hat{G}\right]\right]=0$ и $\left[\hat{G},\left[\hat{F},\hat{G}\right]\right]=0$, доказать тождество Вейля: $e^{\left(\hat{F}+\hat{G}\right)}=e^{\hat{G}}e^{\hat{F}}e^{-\frac{1}{2}\left[\hat{G},\hat{F}\right]}$.

# 3. СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ И СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ ОПЕРАТОРОВ

*Собственной функцией* оператора $\hat{F}$ называется такая функция $\psi(\xi)$, при действии на которую оператором $\hat{F}$ получается снова функция $\psi(\xi)$ с точностью до численного множителя $\lambda$:

$$\hat{F}\psi(\xi) = \lambda\psi(\xi). \tag{3.1}$$

Численный множитель $\lambda$ называется *собственным значением* оператора $\hat{F}$. Собственное значение $\lambda$ оператора $\hat{F}$ называется *невырожденным*, если существует единственная собственная функция оператора $\hat{F}$ с таким собственным значением. Собственное значение $\lambda$ оператора $\hat{F}$ называется *вырожденным*, если у оператора $\hat{F}$ есть более чем одна собственная функция с собственным значением $\lambda$:

$$\hat{F}\psi_1(\xi) = \lambda\psi_1(\xi),\ \hat{F}\psi_2(\xi) = \lambda\psi_2(\xi),\ \hat{F}\psi_3(\xi) = \lambda\psi_3(\xi), \ldots \tag{3.2}$$

В силу линейности оператора $\hat{F}$ любая линейная комбинация функций $\psi_1(\xi)$, $\psi_2(\xi)$, $\psi_3(\xi)$,… также является собственной функцией оператора $\hat{F}$ с собственным значением $\lambda$. Таким образом, все собственные функции оператора $\hat{F}$, отвечающие данному вырожденному собственному значению $\lambda$, образуют линейное подпространство, которое мы будем обозначать $L_\lambda$. Пусть $n$ – размерность $L_\lambda$. Тогда говорят, что собственное значение $\lambda$ оператора $\hat{F}$ *n-кратно вырожденно*.

Для эрмитова оператора $\hat{F}$ выполняются следующие *свойства*:

а) все собственные значения оператора $\hat{F}$ – вещественные числа;

б) собственные функции оператора $\hat{F}$, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны;

в) из собственных функций оператора $\hat{F}$ можно составить *ортогональный базис* в пространстве волновых функций. При этом для всех вырожденных собственных значений $\lambda$ нужно будет выбирать ортогональные базисы в соответствующих линейных подпространствах $L_\lambda$ (заметим, что это можно сделать бесконечным числом способов).

Собственные значения эрмитова оператора $\hat{F}$, соответствующего физической наблюдаемой $F$, имеют простой физический смысл – это те значения наблюдаемой $F$, которые можно получить при ее измерении на эксперименте. Более того, если система находится в состоянии с волновой функцией $\psi(\xi)$, для которой выполняется (3.1), то при измерении наблюдаемой $F$ получится значение $\lambda$. Отсюда ясно, почему физическим наблюдаемым ставятся в соответствие именно эрмитовы операторы: результаты измерения наблюдаемых на эксперименте, очевидно, вещественны.

В дальнейшем будем говорить о собственных значениях и собственных функциях только эрмитовых операторов.

***Оператор с дискретным спектром***

Вся совокупность собственных значений оператора называется его *спектром*. Говорят, что оператор $\hat{F}$ обладает *дискретным спектром*, если все его собственные значения можно перенумеровать: $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \ldots$ Из собственных функций такого оператора можно составить *ортогональный базис* в пространстве волновых функций, то есть такую систему функций $\{\psi_1(\xi), \psi_2(\xi), \psi_3(\xi), \ldots\}$, для которой выполняется

$$\hat{F}\psi_n(\xi) = \lambda_n \psi_n(\xi), \quad n = 1, 2, 3, \ldots, \tag{3.3}$$

и справедливы следующие свойства:

1) $\langle \psi_k | \psi_n \rangle = \int d\xi \psi_k^*(\xi) \psi_n(\xi) = 0$, где $n, k$ – целые числа и $n \neq k$, то есть все функции системы попарно ортогональны; вкупе с условием нормировки всех функций системы это дает равенство

$$\langle \psi_k | \psi_n \rangle = \delta_{nk}, \tag{3.4}$$

где $\delta_{nk}$ – символ Кронекера.

2) любую волновую функцию $\psi(\xi)$ можно разложить в ряд

$$\psi(\xi) = \sum_n C_n \psi_n(\xi), \tag{3.5}$$

где $C_n$ – комплексные коэффициенты. Вычисляя скалярное произведение базисной функции $\psi_k(\xi)$ и функции $\psi(\xi)$, и подставляя разложение (3.5), получим формулу для вычисления коэффициента $C_k$:

$$\langle \psi_k | \psi \rangle = \sum_n C_n \langle \psi_k | \psi_n \rangle = \sum_n C_n \delta_{kn} = C_k. \tag{3.6}$$

***Оператор с непрерывным спектром***

Говорят, что оператор обладает *непрерывным спектром*, если его собственные значения нельзя перенумеровать, а можно только маркировать параметром $f$, непрерывно меняющимся в некоторых пределах. В этом случае уравнение на собственные значения и собственные функции примет вид:

$$\hat{F}\psi_f(\xi) = \lambda_f \psi_f(\xi). \tag{3.7}$$

Для собственных функций оператора с непрерывным спектром не выполняется условие нормировки на единицу, интеграл $\int d\xi \left|\psi_f(\xi)\right|^2$ расходится. При этом квадрат модуля волновой функции $\left|\psi(x,y,z)\right|^2$ уже *не имеет* физического смысла плотности вероятности найти частицу в точке $(x,y,z)$, однако отношение квадратов модулей волновой функции в двух разных точках определяет относительную вероятность соответствующих значений координат. Строго говоря, собственные функции оператора с непрерывным спектром принадлежат не гильбертову пространству, а так называемому *обобщенному* гильбертову пространству.

Из собственных функций оператора с непрерывным спектром также можно составить ортогональный базис в пространстве волновых функций:

1) все функции системы базисных функций попарно ортогональны; однако вместо соотношения (3.4) справедливо следующее:

$$\left\langle \psi_{f'} \middle| \psi_f \right\rangle = \int d\xi \psi_{f'}^*(\xi) \psi_f(\xi) = \delta(f - f'), \tag{3.8}$$

где $\delta(f - f')$ – дельта-функция Дирака.

2) любую волновую функцию $\psi(\xi)$ можно разложить в интеграл

$$\psi(\xi) = \int df C_f \psi_f(\xi), \tag{3.9}$$

где $C_f$ – комплексные коэффициенты (фактически это комплексная функция $C(f)$), явная формула для вычисления которых будет приведена ниже – см. (3.11).

*Дельта-функцию Дирака* $\delta(x)$ можно попытаться представить себе, как функцию, равную нулю везде, кроме точки $x = 0$, и равную $+\infty$ в точке $x = 0$, причем выполняется равенство $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) = 1$. Из этого описания видно, что дельта-функция не является функцией в общепринятом смысле этого слова. Определением дельта-функции можно считать следующее равенство:

$$\int\limits_a^b dx \delta(x) f(x) = f(0), \tag{3.10}$$

где $a < 0,\ b > 0$, $f(x)$ – любая функция. Отсюда видно, что дельта-функция, по сути, является *функционалом*, так как она ставит в соответствие функции $f(x)$ число $f(0)$ (в функциональном анализе вводятся также термины *обобщенная функция* и *сингулярная функция* для обозначения объектов, подобных дельта-функции).

Запишем некоторые *свойства* дельта-функции:

1) $\delta(ax) = \dfrac{\delta(x)}{|a|}$, где $a$ – число; в частности $\delta(-x) = \delta(x)$ – дельта-функция четная;

2) $\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dk\, e^{ikx}$ – интеграл Фурье от дельта-функции;

3) $\int\limits_a^b dx\delta(x-c)f(x)=f(c)$, где $a<c<b$ – непосредственное обобщение (3.10).

Под дельта-функцией от радиус-вектора $\mathbf{r}=(x,y,z)$ будем понимать $\delta(\mathbf{r})=\delta(x)\cdot\delta(y)\cdot\delta(z)$.

Вернемся к разложению (3.9). Вычисляя скалярное произведение базисной функции $\psi_{f'}(\xi)$ и функции $\psi(\xi)$, получим формулу для вычисления коэффициента $C_{f'}$:

$$\langle\psi_{f'}|\psi\rangle=\int dfC_f\langle\psi_{f'}|\psi_f\rangle=\int dfC_f\delta(f-f')=C_{f'}. \qquad (3.11)$$

Заметим, что нормировка (3.8) собственных функций оператора с непрерывным спектром не является однозначной в силу неоднозначности выбора параметра $f$, маркирующего собственные значения и собственные функции. Мы можем использовать другой непрерывно меняющийся параметр $g$ и потребовать, чтобы вместо (3.8) выполнялось соотношение $\langle\psi_{g'}|\psi_g\rangle=\delta(g-g')$.

Говорят, что оператор обладает *смешанным спектром*, если часть его спектра – дискретная, а часть – непрерывная.

**Задача 1.**

Рассматривается одномерное движение частицы вдоль оси $x$. Найти собственные значения и собственные функции оператора $\hat{p}_x$.

*Решение:*

Запишем уравнение на собственные значения и собственные функции оператора $\hat{p}_x$, воспользовавшись определением (1.9) последнего:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}=\lambda\psi(x). \qquad (3.12)$$

Решение дифференциального уравнения (3.12) имеет вид $\psi(x)=C\exp\left(\frac{i}{\hbar}\lambda x\right)$. Предположим, что $\lambda$ – комплексное число: $\lambda=\mathrm{Re}\,\lambda+i\,\mathrm{Im}\,\lambda$; тогда $\psi(x)=C\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathrm{Re}\,\lambda x\right)\exp\left(-\frac{\mathrm{Im}\,\lambda}{\hbar}x\right)$. Если $\mathrm{Im}\,\lambda>0$, то получим $\lim\limits_{x\to-\infty}|\psi(x)|=+\infty$, что недопустимо. Если же $\mathrm{Im}\,\lambda<0$, тогда $\lim\limits_{x\to+\infty}|\psi(x)|=+\infty$. Таким образом получаем, что должно быть $\mathrm{Im}\,\lambda=0$, то есть $\lambda$ – вещественное число (как и должно быть для собственного значения эрмитова оператора). Собственные значения $\hat{p}_x$ будем обозначать $p$. Имеем:

$$\psi_p(x)=C\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right), \tag{3.13}$$

где $p$ – любое вещественное число. Мы получили, что спектр оператора $\hat{p}_x$ – непрерывный. Заметим, что все собственные значения оператора $\hat{p}_x$ – невырожденные.

Если частица находится в состоянии с волновой функцией $\psi_p(x)$, то при измерении на эксперименте проекции ее импульса $p_x$ получится значение $p$. Подчеркнем, что величина $|\psi_p(x)|^2$, равная постоянной, уже не имеет смысла плотности вероятности найти частицу в точке с координатой $x$.

Постоянная $C$ в (3.13) найдется из условия нормировки найденных собственных функций на дельта-функцию (см. (3.8)) $\langle\psi_{p'}|\psi_p\rangle=\delta(p-p')$. Скалярное произведение вычислим, используя указанные выше свойства дельта-функции:

$$\langle\psi_{p'}|\psi_p\rangle=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dx\psi_{p'}^*(x)\psi_p(x)=|C|^2\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dx\exp\left(\frac{i}{\hbar}(p-p')x\right)=$$

$$=|C|^2\,2\pi\delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right)=|C|^2\,2\pi\hbar\delta(p-p').$$

Отсюда $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\alpha}$, где $\alpha$ – произвольное вещественное число. Поскольку волновая функция определяется с точностью до фазового множителя вида $e^{i\cdot\varphi}$, который удобно принять равным единице, мы получаем окончательный ответ задачи:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right), \tag{3.14}$$

где собственное значение $p$ – любое вещественное число. ▲

**<u>Задача 2.</u>**

Найти собственные значения и собственные функции оператора $\hat{x}$ (рассматривается одномерное движение частицы вдоль оси $x$).

*Решение:*

Запишем уравнение на собственные значения и собственные функции оператора $\hat{x}$:

$$\hat{x}\psi(x) = a\psi(x). \tag{3.15}$$

С учетом определения (1.8) оператора $\hat{x}$, (3.15) запишется в виде $x\psi(x) = a\psi(x)$. Перенесем правую часть влево: $(x-a)\psi(x) = 0$. Отсюда видно, что $\psi(x) = 0$ во всех точках, кроме $x = a$. Отсюда сразу следует, что $a$ – вещественное число (как и должно быть для собственного значения эрмитова оператора), иначе $\psi(x) = 0$ во всех точках, и $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \left|\psi(x)\right|^2 = 0$, что физически бессмысленно. Далее, если бы функция $\psi(x)$ в точке $x = a$ была равна некоторому конечному значению, то тогда вновь $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \left|\psi(x)\right|^2 = 0$. Получается, что функция $\psi(x)$ в точке $x = a$ должна быть равна бесконечности. Следовательно, $\psi(x)$ обладает признаками дельта-функции, и можно положить

$$\psi_a(x) = C\delta(x-a).$$

Мы получили, что спектр оператора $\hat{x}$ – непрерывный, а все собственные значения оператора $\hat{x}$ – невырожденные. Если частица находится в состоянии с волновой функцией $\psi_a(x)$, то при измерении на эксперименте ее координаты $x$ получится значение $a$.

Постоянная $C$ найдется из условия нормировки найденных собственных функций на дельта-функцию (см. (3.8)) $\langle\psi_{a'}|\psi_a\rangle = \delta(a-a')$. Вычислим скалярное произведение:

$$\langle\psi_{a'}|\psi_a\rangle = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx\delta(x-a')\delta(x-a) = |C|^2 \delta(a-a').$$

Следовательно, можно положить $C=1$. Получим ответ задачи:

$$\psi_a(x) = \delta(x-a), \qquad (3.16)$$

где собственное значение $a$ – любое вещественное число. ▲

*Замечание*. В задачах 1 и 2 собственные значения рассмотренных операторов оказывались произвольными вещественными числами. Учитывая физический смысл собственных значений операторов в квантовой механике, мы можем утверждать, что при измерении на эксперименте для различных систем проекции импульса $p_x$ и координаты $x$ частицы могут получаться любые вещественные значения. В классической механике это утверждение было бы тривиальным, однако в квантовой механике возможны ситуации, когда у физической наблюдаемой на эксперименте может наблюдаться только дискретный набор значений. Примером такого рода служит следующая задача.

**Задача 3.**

Найти собственные значения и собственные функции оператора $\hat{l}_z$ (плоский ротатор).

*Решение:*

Рассмотрим систему, положение которой однозначно определяется одной координатой – полярным углом $\varphi$. Такая система называется *плоским ротатором* (классический аналог – твердое тело, которое может вращаться вокруг закрепленной оси). Состояния такой модельной системы описываются волновыми функциями вида $\psi(\varphi)$. Запишем уравнение на собственные значения и собственные функции $\hat{l}_z$:

$$-i\frac{\partial\psi(\varphi)}{\partial\varphi}=\lambda\psi(\varphi). \tag{3.17}$$

Выше использована запись оператора $\hat{l}_z$ в сферических координатах (2.16). Решение дифференциального уравнения (3.17) имеет вид $\psi(\varphi)=C\exp(i\lambda\varphi)$. Волновая функция должна быть однозначной функцией в пространстве, поэтому должно выполняться условие $\psi(0)=\psi(2\pi)$.

Отсюда следует $\exp(2\pi i\lambda)=1$. Это уравнение накладывает ограничения на возможные значения $\lambda$. Предположим, что $\lambda$ – комплексное число: $\lambda=\mathrm{Re}\lambda+i\,\mathrm{Im}\lambda$. Тогда получим $\exp(2\pi i\,\mathrm{Re}\lambda)\cdot\exp(-2\pi\,\mathrm{Im}\lambda)=1$. Данное равенство может выполняться, только если $\mathrm{Im}\lambda=0$ (то есть $\lambda$ – вещественное число, как и должно быть для собственного значения эрмитова оператора) и $\mathrm{Re}\lambda=\lambda=m$, где $m$ – целое число. Таким образом, получаем собственные функции оператора $\hat{l}_z$ в виде

$$\psi_m(\varphi)=C\exp(im\varphi), \tag{3.18}$$

где собственное значение $m$ – целое число. Мы получили, что спектр оператора $\hat{l}_z$ – дискретный. С физической точки зрения это означает, что проекция момента импульса на выделенную ось может при измерении на эксперименте принимать только дискретный набор значений. Если система находится в состоянии с волновой функцией $\psi_m(\varphi)$, то при измерении на эксперименте проекции момента импульса $l_z$ получится значение $m$. Заметим также, что все собственные значения оператора $\hat{l}_z$ – невырожденные.

Волновые функции (3.18), как функции дискретного спектра, должны быть нормированы на единицу: $\langle\psi_m|\psi_m\rangle=1$. Отсюда найдется постоянная $C$:

$$\langle \psi_m | \psi_m \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_m^*(\varphi) \psi_m(\varphi) = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(-im\varphi) \exp(im\varphi) =$$

$$= |C|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = |C|^2 \, 2\pi.$$

Следовательно, можно положить $C = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Окончательные выражения для собственных функций оператора $\hat{l}_z$ примут вид:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi), \qquad (3.19)$$

где $m$ – собственное значение – целое число. ▲

**Задача 4.**

Найти собственные значения и собственные функции оператора $\hat{l}_z$ в случае движения в трехмерном пространстве.

*Решение:*

Отличие от задачи 3 заключается в том, что теперь состояния системы описываются волновыми функциями вида $\psi(r, \theta, \varphi)$. Запишем уравнение на собственные значения и собственные функции оператора $\hat{l}_z$, аналогичное (3.17):

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \theta, \varphi) = \lambda \psi(r, \theta, \varphi). \qquad (3.20)$$

Уравнение (3.20) не накладывает никаких ограничений на зависимость волновой функции от переменных $(r, \theta)$, а зависимость от угла $\varphi$ совпадает с таковой в задаче 3. Таким образом, оказывается возможным сразу записать ответ задачи (ср. (3.19)):

$$\psi_m(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(r, \theta) \exp(im\varphi), \qquad (3.21)$$

где собственное значение $m$ – целое число, $f(r, \theta)$ – любая функция, удовлетворяющая общим требованиям для волновых функций (то есть непрерывная и удовлетворяющая соотношению нормировки). ▲

***Одновременно измеримые физические величины***

Рассмотрим две наблюдаемые величины $A$ и $B$, которым соответствуют операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Пусть выполняются равенства

$$\hat{A}\psi_{\lambda\mu}(\xi) = \lambda\psi_{\lambda\mu}(\xi), \quad \hat{B}\psi_{\lambda\mu}(\xi) = \mu\psi_{\lambda\mu}(\xi),$$

то есть $\psi_{\lambda\mu}(\xi)$ – общая собственная функция операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$. При измерении в состоянии $\psi_{\lambda\mu}(\xi)$ наблюдаемых $A$ и $B$ получатся значения $\lambda$ и $\mu$, соответственно.

Если из общих собственных функций операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ можно составить базис в пространстве волновых функций, наблюдаемые величины $A$ и $B$ называются *одновременно измеримыми* (или *совместными*). Подчеркнем, что в данном определении говорится о *возможности* выбрать общие собственные функции операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ так, чтобы они образовывали базис. Однако в общем случае у каждого из этих операторов могут существовать собственные функции, не являющиеся собственными функциями для другого оператора.

Можно доказать следующую важную *теорему о коммутирующих операторах*: из общих собственных функций операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ можно составить базис в пространстве волновых функций тогда и только тогда, когда операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то есть $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0$ (см. (2.1)).

**<u>Задача 5.</u>**

Рассматривается одномерное движение частицы массы $m$ вдоль оси $x$. Для оператора кинетической энергии $\hat{T} = \dfrac{\hat{p}_x^2}{2m}$ найти собственные значения и собственные функции. Указать собственные функции, общие с оператором проекции импульса $\hat{p}_x$, если таковые существуют.

*Решение:*

Запишем уравнение на собственные значения и собственные функции оператора $\hat{T}$, воспользовавшись определением $\hat{p}_x$ (1.9):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}=\lambda\psi(x). \qquad (3.22)$$

Решение линейного однородного дифференциального уравнения (3.22) ищем с помощью стандартной подстановки $\psi(x)=C\exp(\gamma x)$. Получаем уравнение на $\gamma$: $\gamma=\pm\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{-\lambda}$. Волновая функция не должна стремиться по модулю к $+\infty$ при $x\to\pm\infty$, поэтому $\gamma$ должно быть чисто мнимой величиной, и, следовательно, $\lambda$ должно быть вещественным и неотрицательным числом. Собственные значения будем теперь обозначать за $E$, имея ввиду их физический смысл – возможные значения кинетической энергии частицы. Мы получили, что спектр оператора $\hat{T}$ – непрерывный, а все собственные значения (кроме значения $E=0$) двукратно вырождены, поскольку для данного $E>0$ в соответствии с двумя значениями $\gamma=\pm i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ получаем два независимых решения уравнения (3.22):

$$\psi_E^{(1)}(x)=C\exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right),\quad \psi_E^{(2)}(x)=C\exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right). \qquad (3.23)$$

Указанные функции являются базисом в двумерном линейном подпространстве $L_E$ из собственных функций оператора $\hat{T}$, отвечающих двукратно вырожденному собственному значению $E>0$. А вся совокупность функций вида (3.23) с различными значениями $E$ образует полный базис в пространстве волновых функций.

Сравнивая (3.23) и (3.13), можно заметить, что функции (3.23) являются также собственными функциями оператора проекции импульса $\hat{p}_x$:

$$\psi_E^{(1)}(x)\equiv\psi_{p=\sqrt{2mE}}(x),\quad \psi_E^{(2)}(x)\equiv\psi_{p=-\sqrt{2mE}}(x). \qquad (3.24)$$

Тем самым мы показали, что операторы $\hat{T}$ и $\hat{p}_x$ имеют общую систему собственных функций, образующих полный базис в пространстве волновых функций – это функции (3.23). Данный результат находится в согласии с изложенной выше теоремой о коммутирующих операторах: операторы $\hat{T}$ и $\hat{p}_x$, очевидно, коммутируют, поскольку $\hat{T}$ с точностью до численного множителя представляет собой вторую степень $\hat{p}_x$, а любой оператор коммутирует со своей степенью. Таким образом, кинетическая энергия $T$ и проекция импульса $p_x$ являются одновременно измеримыми (совместными) наблюдаемыми. ▲

**<u>Задача 6.</u>**

Рассматривается одномерное движение частицы массы $m$ вдоль оси $x$. Для оператора кинетической энергии $\hat{T} = \dfrac{\hat{p}_x^2}{2m}$ указать собственные функции, общие с оператором инверсии $\hat{I}$.

*Решение:*

Воспользуемся результатами, полученными в ходе решения задачи 5. Заметим, что в двумерном линейном подпространстве $L_E$ из собственных функций оператора $\hat{T}$, отвечающих двукратно вырожденному собственному значению $E > 0$, можно выбрать любой базис, а не обязательно базис из функций вида (3.23). Например, можно взять в качестве базисных следующие функции

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_E^{(1)}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_E^{(1)}(x) + \psi_E^{(2)}(x)\right) = \sqrt{2}C\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right),\\ \tilde{\psi}_E^{(2)}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_E^{(1)}(x) - \psi_E^{(2)}(x)\right) = \sqrt{2}iC\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right).\end{aligned} \tag{3.25}$$

Используя определение оператора инверсии $\hat{I}$ (см. задачу 1.7, е)), легко убедиться, что функции (3.25) являются собственными функциями $\hat{I}$:

$$\hat{I}\tilde{\psi}_E^{(1)}(x) = \tilde{\psi}_E^{(1)}(x), \quad \hat{I}\tilde{\psi}_E^{(2)}(x) = -\tilde{\psi}_E^{(2)}(x). \tag{3.26}$$

Тем самым мы показали, что операторы $\hat{T}$ и $\hat{I}$ имеют общую систему собственных функций, образующих полный базис в пространстве волновых функций – это функции вида (3.25) с различными вещественными значениями $E$. Данный результат находится в согласии с теоремой о коммутирующих операторах: можно показать, что операторы $\hat{T}$ и $\hat{I}$ коммутируют (см. задачу 2.12, б)). ▲

*Замечание.* Еще раз подчеркнем, что для оператора $\hat{T}$ можно выбрать все собственные функции, общие с оператором $\hat{p}_x$, – это функции вида (3.23). Эти функции не являются собственными для оператора инверсии. Для оператора $\hat{T}$ можно также выбрать все собственные функции, общие с оператором инверсии, – это функции вида (3.25). Эти функции, в свою очередь, не являются собственными для оператора $\hat{p}_x$. Но невозможно выбрать собственные функции, общие одновременно для всех трех операторов $\hat{T}$, $\hat{p}_x$ и $\hat{I}$. Это связано с тем, что операторы $\hat{p}_x$ и $\hat{I}$ не коммутируют (см. задачу 2.12, а)).

**Задача 7.**

Найти собственные значения и собственные функции оператора $\hat{\mathbf{p}}$.

*Решение:*

Под собственными функциями векторного оператора $\hat{\mathbf{p}} = \left(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z\right)$ будем понимать общие собственные функции операторов $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$; эти операторы, очевидно, коммутируют друг с другом, следовательно, у них существует общая полная система собственных функций $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$:

$$\hat{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}). \tag{3.27}$$

Декартовы координаты в (3.27), очевидно, разделяются; для каждой координаты получается зависимость вида (3.13), так что

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_x x\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_y y\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_z z\right) = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}\right). \tag{3.28}$$

Наложив условие нормировки $\left\langle \psi_{\mathbf{p}'} \middle| \psi_{\mathbf{p}} \right\rangle = \delta\left(\mathbf{p} - \mathbf{p}'\right)$, окончательно найдем

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}\right).$$

***Собственные функции оператора квадрата момента. Сферические функции***

Как было показано в задаче 4 главы 2, оператор квадрата момента импульса $\hat{\mathbf{l}}^2$ коммутирует с оператором $\hat{l}_z$, поэтому можно найти их общие собственные функции, в соответствии с теоремой о коммутирующих операторах. Эти функции носят название «сферические функции» и обозначаются $Y_{lm}(\theta,\varphi)$. Выполняются соотношения:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{3.29}$$

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{3.30}$$

Индекс $l$ принимает целые неотрицательные значения. Индекс $m$ для данного $l$ принимает значения $-l, (-l+1), \ldots, (l-1), l$ – таким образом, всего $2l+1$ значение. Сферические функции, как функции дискретного спектра, удовлетворяют условию ортонормированности (ср. (3.4)):

$$\langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta Y_{lm}^*(\theta,\varphi) Y_{l'm'}(\theta,\varphi) = \delta_{lm,l'm'} = \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \tag{3.31}$$

Явный вид некоторых сферических функций приведен в Приложении. Сферические функции образуют базис в пространстве функций углов $(0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \varphi \le 2\pi)$, так что произвольную волновую функцию $\psi(\theta,\varphi)$ можно разложить в ряд (см. (3.5), (3.6)):

$$\psi(\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm} Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{3.32}$$

$$C_{lm} = \langle Y_{lm} | \psi \rangle. \tag{3.33}$$

Для вектора состояния $|Y_{lm}\rangle$ будем в дальнейшем использовать также сокращенное обозначение $|lm\rangle$.

***Матричный формализм в квантовой механике***

Для операторов с дискретным спектром часто оказывается удобным использовать матричный подход, в котором каждому оператору ставится в соответствие его матрица, записанная в некотором дискретном базисе волновых функций. Пусть $\{\psi_1(\xi),\psi_2(\xi),\psi_3(\xi),\ldots\}$ – такой базис. Тогда матричный элемент оператора $\hat{F}$ в строке $m$ и в столбце $n$ обозначается как $\left(\hat{F}\right)_{mn}$, или просто $F_{mn}$, и вычисляется по формуле (см. (1.6)):

$$F_{mn} = \langle\psi_m|\hat{F}|\psi_n\rangle = \int d\xi\psi_m^*(\xi)\hat{F}\psi_n(\xi). \qquad (3.34)$$

Покажем, что матрица эрмитова оператора будет эрмитовой:

$$\left(\hat{F}^+\right)_{mn} = (F_{nm})^*. \qquad (3.35)$$

В самом деле, воспользовавшись определением (1.7) эрмитово-сопряженного оператора, запишем:

$$\left(\hat{F}^+\right)_{mn} = \langle\psi_m|\hat{F}^+|\psi_n\rangle = \int d\xi\psi_m^*(\xi)\hat{F}^+\psi_n(\xi) = \int d\xi\psi_n(\xi)\hat{F}^*\psi_m^*(\xi) =$$

$$= \int d\xi\psi_n(\xi)\left(\hat{F}\psi_m(\xi)\right)^* = \left(\int d\xi\psi_n^*(\xi)\hat{F}\psi_m(\xi)\right)^* = (F_{nm})^*.$$

Матричный элемент суммы операторов и произведения операторов вычисляется по следующим формулам:

$$\left(\hat{F}+\hat{G}\right)_{mn} = F_{mn} + G_{mn}, \qquad (3.36)$$

$$\left(\hat{F}\hat{G}\right)_{mn} = \sum_k F_{mk}G_{kn}. \qquad (3.37)$$

Формула (3.37) соответствует известному в линейной алгебре правилу произведения матриц «строка-столбец». Пусть $\psi(\xi)$ – произвольная волновая функция. Можно разложить ее по выбранному базису: $\psi(\xi) = \sum_n C_n\psi_n(\xi)$. В матричном формализме волновой функции $\psi(\xi)$ (вектору состояния $|\psi\rangle$) ставится в соответствие столбец $\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$, а функции

$\hat{F}\psi(\xi)$ – столбец, получаемый в результате умножения матрицы оператора $\hat{F}$ на этот столбец. Вектору состояния $\langle\psi|$ ставится в соответствие строка $\begin{pmatrix} C_1^* & C_2^* & \ldots \end{pmatrix}$, так что, например, скалярное произведение $\langle\psi|\psi\rangle$ вычисляется по правилу матричного умножения как

$$\langle\psi|\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_1^* & C_2^* & \ldots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = C_1^* C_1 + C_2^* C_2 + \ldots = \sum_n |C_n|^2 = 1 .$$

**<u>Задача 8.</u>**

Пусть $\hat{F}$ – оператор с дискретным спектром: $\hat{F}\psi_n(\xi) = \lambda_n \psi_n(\xi)$. Найти матрицу оператора $\hat{F}$ в базисе, составленном из его собственных функций.

*Решение:*

Найдем матричный элемент $F_{mn}$ по формуле (3.34)

$$F_{mn} = \langle\psi_m|\hat{F}|\psi_n\rangle = \langle\psi_m|\lambda_n|\psi_n\rangle = \lambda_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \lambda_n \delta_{mn} .$$

Таким образом, мы получили, что матрица оператора в базисе из его собственных функций – диагональная, причем по диагонали стоят собственные значения оператора. Поэтому процедуре нахождения собственных функций и собственных значений оператора в матричном формализме соответствует процедура приведения его матрицы к диагональному виду, или процедура «диагонализации» матрицы. ▲

***Матрицы операторов $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_+$ и $\hat{l}_-$ в базисе сферических функций***

Сферические функции, введенные выше, являются собственными функциями операторов $\hat{\mathbf{l}}^2$ и $\hat{l}_z$, но не операторов $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$. Матричные элементы операторов $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$ в базисе состояний $|Y_{lm}\rangle \equiv |lm\rangle$ проще всего получить, если вычислить предварительно матричные элементы операторов $\hat{l}_+$ и $\hat{l}_-$ (см. (2.13)). Ниже приводятся ненулевые матричные элементы для указанных операторов:

$$\left\langle l,m+1\right|\hat{l}_+\left|lm\right\rangle=\sqrt{l(l+1)-m(m+1)},$$
$$\left\langle lm\right|\hat{l}_-\left|l,m+1\right\rangle=\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}. \tag{3.38}$$

$$\left\langle l,m+1\right|\hat{l}_x\left|lm\right\rangle=\left\langle lm\right|\hat{l}_x\left|l,m+1\right\rangle=\frac{1}{2}\sqrt{l(l+1)-m(m+1)},$$
$$\left\langle l,m+1\right|\hat{l}_y\left|lm\right\rangle=-\left\langle lm\right|\hat{l}_y\left|l,m+1\right\rangle=-\frac{i}{2}\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}. \tag{3.39}$$

**Задачи для самостоятельного решения**

3.1. Найти собственные значения и собственные функции следующих операторов:

а) умножения на число $\alpha$,

б) $-i\exp(i\alpha x)\dfrac{\partial}{\partial x}$, $\alpha$ – постоянная,

в) $x+\dfrac{1}{a}\dfrac{\partial}{\partial x}$, $a$ – постоянная,

г) $\sin\left(\dfrac{\partial}{\partial x}\right)$,

д) $\cos\left(i\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)$, где $0\le\varphi\le 2\pi$,

е) $\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{2}{x}\dfrac{\partial}{\partial x}$.

3.2. Является ли функция $\psi(\mathbf{r})=C\dfrac{x-iy}{\sqrt{x^2+y^2}}$ собственной функцией оператора $\hat{l}_z$? Если да, то какое ей соответствует собственное значение?

3.3. Пусть $\psi(\xi)$ – собственная функция оператора $\hat{A}$: $\hat{A}\psi(\xi)=\lambda\psi(\xi)$. Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют: $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$. Является ли функция $\psi(\xi)$ собственной функцией оператора $\hat{B}$?

3.4. Пусть $\psi(\xi)$ – собственная функция оператора $\hat{A}$: $\hat{A}\psi(\xi)=\lambda\psi(\xi)$. Операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют: $\left[\hat{A},\hat{B}\right]\neq 0$. Является ли функция $\psi(\xi)$ собственной функцией оператора $\hat{B}$?

3.5. Рассматривается частица в трехмерном пространстве. Найти общие собственные функции операторов $\hat{p}_z$ и $\hat{l}_z$.

3.6. Оператор $\hat{F}$ в ортонормированном базисе $\{\psi_1(\xi),\psi_2(\xi)\}$ имеет матрицу $\begin{pmatrix} 0 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix}$. Найти собственные значения и собственные функции оператора $\hat{F}$.

3.7. Найти матрицы операторов $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ и $\hat{l}_z$ в базисе

а) сферических функций с $l=1$,

б) сферических функций с $l=2$.

3.8. Найти диагональные матричные элементы $\langle lm|\hat{l}_x|lm\rangle$, $\langle lm|\hat{l}_y|lm\rangle$, $\langle lm|\hat{l}_z|lm\rangle$, $\langle lm|\hat{l}_x^2|lm\rangle$, $\langle lm|\hat{l}_y^2|lm\rangle$, $\langle lm|\hat{l}_z^2|lm\rangle$.

3.9. Пусть эрмитов оператор $\hat{F}$ имеет конечное число собственных значений $F_1, F_2, \ldots F_n$. Показать, что выполняется равенство

$$\left(\hat{F}-F_1\right)\cdot\left(\hat{F}-F_2\right)\cdot\ldots\cdot\left(\hat{F}-F_n\right)=0.$$

3.10. Пусть $\psi_{\lambda\mu}(\xi)$ – общая собственная функция операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, где $\lambda$ – собственное значение оператора $\hat{A}$, и $\mu$ – собственное значение оператора $\hat{B}$. Пусть операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ *антикоммутируют*: $\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$. Что можно сказать о $\lambda$ и $\mu$? В качестве примера рассмотреть операторы импульса $\hat{p}_x$ и инверсии $\hat{I}$.

3.11. Эрмитовы операторы $\hat{A}$, $\hat{B}$ и $\hat{C}$ удовлетворяют следующим соотношениям: $\left[\hat{A},\hat{C}\right]=0$, $\left[\hat{B},\hat{C}\right]=0$, $\left[\hat{A},\hat{B}\right]\neq 0$. Показать, что среди собственных значений оператора $\hat{C}$ есть вырожденные.

3.12. Найти собственные функции оператора $\dfrac{d}{dx}-x$.

# 4. СРЕДНИЕ ЗНАЧЕНИЯ И ВЕРОЯТНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ НАБЛЮДАЕМЫХ, ПОЛУЧАЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ИЗМЕРЕНИЯ

Как уже было сказано в главе 3, если квантово-механическая система находится в состоянии с волновой функцией, которая является собственной функцией эрмитова оператора $\hat{F}$, то при измерении физической наблюдаемой $F$ на эксперименте обязательно получится соответствующее собственное значение оператора $\hat{F}$; можно говорить, что в данном состоянии наблюдаемая $F$ имеет определенное значение. Если же система находится в состоянии с волновой функцией, которая не является собственной функцией $\hat{F}$, то однозначно предсказать результат измерения физической наблюдаемой $F$ невозможно; эта неопределенность – фундаментальное свойство квантового мира. Можно вычислить лишь *вероятности различных результатов* измерения наблюдаемой $F$ на эксперименте (для наблюдаемой с непрерывным спектром возможных значений – *плотность вероятности*). Это наиболее подробное предсказание, которое можно сделать относительно результатов измерения наблюдаемой для квантово-механической системы.

Менее подробным предсказанием является вычисление среднего арифметического для большого (в пределе – бесконечно большого) количества независимых измерений наблюдаемой $F$, проведенных над идентичными квантово-механическими системами, каждая из которых находится в данном состоянии $\psi(\xi)$. Такая величина обозначается $\langle F \rangle_\psi$, называется «*средним значением* наблюдаемой $F$ в состоянии $\psi(\xi)$» и может быть вычислена по формуле

$$\langle F \rangle_\psi = \int_\infty d\xi \psi^*(\xi) \hat{F} \psi(\xi) = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle . \tag{4.1}$$

Заметим, что в правой части (4.1) стоит диагональный матричный элемент оператора $\hat{F}$ на функции $\psi(\xi)$ (см. (1.6)). Таким образом, диагональные матричные элементы эрмитовых операторов имеют физический смысл средних значений отвечающих им физических наблюдаемых в соответствующих состояниях.

Ясно, что если волновая функция системы $\psi(\xi)$ – собственная функция оператора $\hat{F}$, то есть $\hat{F}\psi(\xi)=\lambda\psi(\xi)$, то среднее значение $\langle F\rangle_\psi=\lambda$; и вообще, для любого натурального $n$ верно $\langle F^n\rangle_\psi=\lambda^n$. Как следствие, дисперсия $\left\langle\left(F-\langle F\rangle_\psi\right)^2\right\rangle_\psi=\langle F^2\rangle_\psi-\langle F\rangle_\psi^2=0$, как и должно быть, поскольку в данном состоянии $\psi(\xi)$ наблюдаемая $F$ имеет определенное значение, и при измерении с достоверностью будет получено значение $\lambda$.

**<u>Задача 1.</u>**

Найти среднее значение координаты $x$ и среднее значение проекции импульса $p_x$ в состоянии с волновой функцией $\psi(x)=A\exp\left(-\dfrac{x^2}{a^2}+ikx\right)$, где $a, k$ – вещественные постоянные, $A$ – нормировочный множитель.

*Решение:*

В соответствии с (4.1) запишем

$$\langle x\rangle_\psi=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi^*(x)\hat{x}\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}dxA^*\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}-ikx\right)x\,A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}+ikx\right)=$$

$$=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}dx\cdot x\exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right)=0;$$

$$\langle p_x\rangle_\psi=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi^*(x)\,\hat{p}_x\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}dxA^*\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}-ikx\right)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}+ikx\right)=$$

$$=-i\hbar|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}dx\left(-\frac{2x}{a^2}+ik\right)\exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right)=k\hbar|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}dx\exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right)=k\hbar.$$

Последнее равенство следует из условия нормировки для волновой функции $\psi(x)$: $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \left|\psi(x)\right|^2 = |A|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right) = 1$. ▲

**<u>Задача 2.</u>**

Вектор состояния системы $|\psi\rangle$ задан в рамках матричного подхода (см. главу 3): $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$. Найти среднее значение наблюдаемой $F$ в этом состоянии, если ей соответствует оператор с матрицей $\begin{pmatrix} 5 & 1-2i \\ 1+2i & -4 \end{pmatrix}$.

*Решение:*

Вычислим диагональный матричный элемент (4.1) по правилам матричного умножения:

$$\langle F \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 1-2i \\ 1+2i & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{5}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{2i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{2i}{\sqrt{2}} + \frac{4}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{4+2i}{2} - \frac{5+2i}{2} = -\frac{1}{2}. \quad ▲$$

Рассмотрим две наблюдаемые величины $A$ и $B$, не измеримые одновременно (см. главу 3). Тогда их операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не коммутируют, и можно ввести $\hat{C} = -i\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ (легко убедиться, что $\hat{C}$ – эрмитов оператор). Можно показать, что для любого состояния $\psi(\xi)$ выполняется неравенство:

$$\left(\langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2\right)\left(\langle B^2 \rangle_\psi - \langle B \rangle_\psi^2\right) \geq \frac{\langle C \rangle_\psi^2}{4}. \qquad (4.2)$$

Неравенство (4.2) называется *соотношением неопределенности Гейзенберга*. Для наблюдаемых величин $x$ и $p_x$ оно превращается с учетом $\left[\hat{p}_x, \hat{x}\right] = -i\hbar$ (см. задачу 2 главы 2) в неравенство

$$\left(\left\langle x^2 \right\rangle_\psi - \left\langle x \right\rangle_\psi^2\right)\left(\left\langle p_x^2 \right\rangle_\psi - \left\langle p_x \right\rangle_\psi^2\right) \geq \frac{\hbar^2}{4}, \tag{4.3}$$

справедливое для любого состояния $\psi(\mathbf{r})$. Как следует из (4.3), наблюдаемые $x$ и $p_x$ не могут одновременно иметь определенные значения ни в каком состоянии частицы.

Перейдем теперь к вычислению вероятностей различных результатов измерения наблюдаемой $F$ с дискретным спектром:

$$\hat{F}\psi_n(\xi) = F_n \psi_n(\xi), \tag{4.4}$$

где $n$ – целое число. Пусть система находится в состоянии с волновой функцией $\psi(\xi)$. Ее можно разложить по базису, образованному собственными функциями эрмитова оператора $\hat{F}$ (см. (3.5)):

$$\psi(\xi) = \sum_n C_n \psi_n(\xi), \quad C_n = \left\langle \psi_n \middle| \psi \right\rangle. \tag{4.5}$$

Пусть $F_n$ – невырожденное собственное значение. Тогда *вероятность* получить при измерении наблюдаемой $F$ значение $F_n$ равна

$$P_\psi(F = F_n) = \left|C_n\right|^2 = \left|\left\langle \psi_n \middle| \psi \right\rangle\right|^2. \tag{4.6}$$

Пусть теперь $F_n$ – вырожденное собственное значение, и $\psi_{n1}(\xi),\ \psi_{n2}(\xi),\ \psi_{n3}(\xi),\ldots$ – базис линейного подпространства $L_{F_n}$ из собственных функций оператора $\hat{F}$ с собственным значением $F_n$; $\hat{F}\psi_{ni}(\xi) = F_n \psi_{ni}(\xi)$ для каждого *i*. Тогда *вероятность* получить при измерении наблюдаемой $F$ значение $F_n$ равна

$$\begin{aligned} P_\psi(F = F_n) &= \left|C_{n1}\right|^2 + \left|C_{n2}\right|^2 + \left|C_{n3}\right|^2 + \ldots = \\ &= \left|\left\langle \psi_{n1} \middle| \psi \right\rangle\right|^2 + \left|\left\langle \psi_{n2} \middle| \psi \right\rangle\right|^2 + \left|\left\langle \psi_{n3} \middle| \psi \right\rangle\right|^2 + \ldots \end{aligned} \tag{4.7}$$

Если вероятности для всех значений $F_n$ известны, то среднее значение $\langle F \rangle_\psi$ проще вычислять не по формуле (4.1), а используя эти вероятности:

$$\langle F \rangle_\psi = \sum_{F_n} F_n \cdot P_\psi \left( F = F_n \right). \tag{4.8}$$

**Задача 3.**

Состояние плоского ротатора задается волновой функцией $\psi(\varphi) = A\cos\varphi$, $A$ – нормировочный множитель. Найти вероятности $P_\psi \left( l_z = m \right)$ для всех целых чисел $m$. Найти среднее значение $\langle l_z \rangle_\psi$ и среднее значение $\left\langle l_z^{\,2} \right\rangle_\psi$.

*Решение:*

Уравнение вида (4.4) на собственные функции и собственные значения для оператора $\hat{l}_z$ уже было решено в задаче 3 главы 3: $\hat{l}_z \psi_m(\varphi) = m\psi_m(\varphi)$, $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi)$, $m$ – целое число. Далее нужно разложить заданную в задаче волновую функцию по базису из функций $\psi_m(\varphi)$ (ср. (4.5)):

$$\psi(\varphi) = \sum_m C_m \psi_m(\varphi) \quad \text{или} \quad A\cos\varphi = \sum_m C_m \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi),$$

$$C_m = \langle \psi_m | \psi \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_m^*(\varphi) \psi(\varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-im\varphi) A\cos\varphi,$$

где интеграл, вообще говоря, нужно вычислить для всех целых чисел $m$. В данной задаче, однако, коэффициенты $C_m$ можно указать сразу – заданная в задаче волновая функция $\psi(\varphi) = A\cos\varphi$ может быть непосредственно разложена в линейную комбинацию экспонент вида $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi)$, благодаря формуле Эйлера:

$$\psi(\varphi) = A\cos\varphi = \frac{A}{2}\left(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right) = \frac{A}{2}\sqrt{2\pi}\left(\psi_1(\varphi) + \psi_{-1}(\varphi)\right).$$

Таким образом, получим $C_1 = \frac{A}{2}\sqrt{2\pi}$, $C_{-1} = \frac{A}{2}\sqrt{2\pi}$, и $C_m = 0$ для $m \neq \pm 1$. Наконец, по формуле (4.6) запишем вероятности результатов измерения проекции момента импульса $l_z$:

$$P_\psi(l_z = 1) = |C_1|^2 = \left|\frac{A}{2}\sqrt{2\pi}\right|^2,$$

$$P_\psi(l_z = -1) = |C_{-1}|^2 = \left|\frac{A}{2}\sqrt{2\pi}\right|^2,$$

$$P_\psi(l_z = m,\ m \neq \pm 1) = 0.$$

Чтобы получить численный ответ, можно было бы найти константу $A$ из условия нормировки для волновой функции плоского ротатора:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi\psi^*(\varphi)\psi(\varphi) = |A|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi\cos^2\varphi = 1.$$

Однако проще воспользоваться условием нормировки вероятностей различных результатов измерения наблюдаемой: сумма вероятностей всех возможных результатов должна быть равна 1. В нашем случае, с учетом $P_\psi(l_z = m,\ m \neq \pm 1) = 0$, нормировочное соотношение принимает вид $P_\psi(l_z = 1) + P_\psi(l_z = -1) = 1$. Учитывая, что для вычисленных вероятностей выполняется $P_\psi(l_z = 1) = P_\psi(l_z = -1)$, получим окончательный численный ответ: $P_\psi(l_z = 1) = \frac{1}{2}$, $P_\psi(l_z = -1) = \frac{1}{2}$, $P_\psi(l_z = m,\ m \neq \pm 1) = 0$.

Среднее значение $\langle l_z \rangle_\psi$ найдем теперь из (4.8):

$$\langle l_z \rangle_\psi = \sum_m m \cdot P_\psi(l_z = m) = 1 \cdot \frac{1}{2} + (-1) \cdot \frac{1}{2} = 0.$$

Аналогично можно найти среднее значение наблюдаемой $l_z^2$. В общем случае $\left\langle l_z^2 \right\rangle_\psi = \sum_K K \cdot P_\psi\left(l_z^2 = K\right)$, где $K = 0, 1, 4, 9...$ (квадраты целых чисел). В нашей задаче имеем, очевидно, $\left\langle l_z^2 \right\rangle_\psi = 1 \cdot P_\psi\left(l_z^2 = 1\right) = 1$. ▲

Вновь рассмотрим наблюдаемую $F$ с дискретным спектром ($n$ – целое число): $\hat{F}\psi_n(\xi) = F_n\psi_n(\xi)$. Однако пусть теперь система находится в состоянии с волновой функцией, зависящей помимо $\xi$ еще от одной переменной (или набора переменных) $\eta$: $\psi(\xi,\eta)$. Для каждого фиксированного значения $\eta$ функцию $\psi(\xi,\eta)$ можно разложить по базису из функций $\psi_n(\xi)$; коэффициенты разложения тогда, очевидно, будут являться функциями $\eta$:

$$\psi(\xi,\eta) = \sum_n \chi_n(\eta)\psi_n(\xi). \tag{4.9}$$

Пусть $F_n$ – невырожденное собственное значение оператора $\hat{F}$. Тогда *вероятность* получить при измерении наблюдаемой $F$ значение $F_n$ равна

$$P_\psi(F = F_n) = \int d\eta \left|\chi_n(\eta)\right|^2. \tag{4.10}$$

Обобщение (4.10) на случай вырожденного собственного значения $F_n$ не представляет сложностей и аналогично (4.7).

**<u>Задача 4.</u>**

Частица находится в состоянии с волновой функцией $\psi(\mathbf{r}) = A\dfrac{yz}{r^2}$, $A$ – нормировочный множитель. Найти вероятности $P_\psi(l_z = m)$ для всех целых чисел $m$.

*Решение:*

Переходя к сферическим координатам, представим заданную волновую функцию в виде $\psi(\theta,\varphi) = A\sin\theta\cos\theta\sin\varphi$. Роль переменной $\xi$ в данной задаче играет угол $\varphi$, а роль переменной $\eta$ – угол $\theta$. Нам нужно найти разложение вида (4.9): $\psi(\theta,\varphi) = A\sin\theta\cos\theta\sin\varphi = \sum_m \chi_m(\theta)\psi_m(\varphi)$, где вновь $\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi)$, $m$ – целое число. Воспользовавшись формулой Эйлера, получим

$$\psi(\theta,\varphi) = \frac{A}{2i}\sin\theta\cos\theta\left(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}\right) = \frac{A}{2i}\sin\theta\cos\theta\sqrt{2\pi}\left(\psi_1(\varphi) - \psi_{-1}(\varphi)\right).$$

Таким образом, получаем единственные ненулевые функции $\chi_1(\theta) = \frac{A}{2i}\sin\theta\cos\theta\sqrt{2\pi}$, $\chi_{-1}(\theta) = -\frac{A}{2i}\sin\theta\cos\theta\sqrt{2\pi}$. По формуле (4.10) запишем вероятности результатов измерения проекции момента импульса $l_z$:

$$P_\psi(l_z = 1) = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \left|\chi_1(\theta)\right|^2 = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \left|\frac{A}{2i}\sin\theta\cos\theta\sqrt{2\pi}\right|^2,$$

$$P_\psi(l_z = -1) = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \left|\chi_{-1}(\theta)\right|^2 = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \left|-\frac{A}{2i}\sin\theta\cos\theta\sqrt{2\pi}\right|^2,$$

$$P_\psi(l_z = m,\ m \neq \pm 1) = 0.$$

Замечаем, что $P_\psi(l_z = 1) = P_\psi(l_z = -1)$, и, вследствие нормировки вероятности $P_\psi(l_z = 1) + P_\psi(l_z = -1) = 1$, получаем окончательный ответ $P_\psi(l_z = 1) = \frac{1}{2}$, $P_\psi(l_z = -1) = \frac{1}{2}$. ▲

Рассмотрим теперь две одновременно измеримые наблюдаемые величины $A$ и $B$ (см. главу 3). У соответствующих им операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ существует общая полная система собственных функций $\psi_{nk}(\xi)$ ($n, k$ – целые числа):

$$\hat{A}\psi_{nk}(\xi) = A_{nk}\psi_{nk}(\xi), \quad \hat{B}\psi_{nk}(\xi) = B_{nk}\psi_{nk}(\xi). \tag{4.11}$$

Будем рассматривать случай, когда пара собственных значений $(A_{nk}, B_{nk})$ соответствует единственной функции $\psi_{nk}(\xi)$ (но по отдельности собственные значения $A_{nk}$ и $B_{nk}$ могут быть вырожденными). Пусть квантово-механическая система находится в состоянии с волновой функцией $\psi(\xi)$. Ее можно разложить по базису из функций $\psi_{nk}(\xi)$:

$$\psi(\xi) = \sum_{n,k} C_{nk}\psi_{nk}(\xi), \;\; C_{nk} = \langle \psi_{nk} | \psi \rangle. \tag{4.12}$$

Поскольку $A$ и $B$ одновременно измеримы, можно говорить о вероятности наступления двойного события, когда *одновременно* при измерении наблюдаемой $A$ получится значение $A_{nk}$, а при измерении наблюдаемой $B$ – значение $B_{nk}$. Эта вероятность равна

$$P_\psi\left(A = A_{nk}, B = B_{nk}\right) = |C_{nk}|^2. \tag{4.13}$$

**<u>Задача 5.</u>**

Частица находится в состоянии с волновой функцией $\psi(\theta,\varphi) = A(\cos\theta + 2\sin\theta\cos\varphi)$. Найти вероятности $P_\psi\left(\mathbf{l}^2 = l(l+1),\, l_z = m\right)$ для всех возможных значений индексов $l$ и $m$.

*Решение:*

Общие собственные функции операторов $\hat{\mathbf{l}}^2$ и $\hat{l}_z$ – сферические функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$, где индексы принимают значения $l = 0, 1, 2...$ и $m = -l, (-l+1), \ldots, (l-1), l$. Соотношения (4.11) теперь имеют вид соотношений (3.29) и (3.30). Произвольную волновую функцию $\psi(\theta,\varphi)$ можно разложить в ряд $\psi(\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{l} C_{lm}Y_{lm}(\theta,\varphi)$, $C_{lm} = \langle Y_{lm} | \psi \rangle$. Тогда в соответствии с формулой (4.13) $P_\psi\left(\mathbf{l}^2 = l(l+1),\, l_z = m\right) = |C_{lm}|^2$.

Таким образом, задача заключается в нахождении коэффициентов разложения $C_{lm}$ заданной волновой функции $\psi(\theta,\varphi) = A(\cos\theta + 2\sin\theta\cos\varphi)$ по базису из сферических функций. Воспользуемся явным видом сферических функций, приведенным в Приложении. Разложим $\cos\varphi$ по формуле Эйлера и запишем, для краткости записи опуская аргументы у сферических функций:

$$\psi(\theta,\varphi) = A\left(\cos\theta + \sin\theta e^{i\varphi} + \sin\theta e^{-i\varphi}\right) = A\left(-i\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10} + i\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{11} - i\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1-1}\right).$$

Таким образом, отличны от нуля только коэффициенты $C_{10}=-Ai\sqrt{\frac{4\pi}{3}}$, $C_{11}=Ai\sqrt{\frac{8\pi}{3}}$, $C_{1-1}=-Ai\sqrt{\frac{8\pi}{3}}$, и, соответственно, вероятности следующих двойных событий $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2,\, l_z=0\right)=\left|-Ai\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\right|^2$, $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2,\, l_z=1\right)=\left|Ai\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\right|^2$, $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2,\, l_z=-1\right)=\left|-Ai\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\right|^2$. Воспользуемся тем, что сумма вероятностей всех возможных результатов должна быть равна 1. Обозначив значение $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2,\, l_z=0\right)=\gamma$, получим $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2,\, l_z=1\right)=2\gamma$, $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2,\, l_z=-1\right)=2\gamma$ и условие нормировки вероятности $\gamma+2\gamma+2\gamma=1$. Отсюда получим окончательный численный ответ: $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2,\, l_z=0\right)=\frac{1}{5}$, $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2,\, l_z=1\right)=\frac{2}{5}$, $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2,\, l_z=-1\right)=\frac{2}{5}$; вероятности для других пар индексов $(lm)$ равны нулю. ▲

*Замечание*. Зная вероятности двойных событий $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=l(l+1),\, l_z=m\right)$, можно найти вероятности результатов измерения для наблюдаемых $\mathbf{l}^2$ и $l_z$ по отдельности. В соответствии с законом сложения вероятностей запишем

$$P_\psi\left(\mathbf{l}^2=l(l+1)\right)=\sum_{m=-l}^{l}P_\psi\left(\mathbf{l}^2=l(l+1),\, l_z=m\right),$$

$$P_\psi\left(l_z=m\right)=\sum_{l=|m|}^{+\infty}P_\psi\left(\mathbf{l}^2=l(l+1),\, l_z=m\right).$$

Относительно последней формулы заметим, что наименьшее значение индекса $l$, которое может встретиться в паре с данным индексом $m$, равно $|m|$.

***Плотность вероятности для наблюдаемой с непрерывным спектром***

Рассмотрим наблюдаемую $F$, которой соответствует оператор $\hat{F}$ с непрерывным спектром:

$$\hat{F}\psi_F(\xi) = F\psi_F(\xi), \tag{4.14}$$

где в качестве непрерывного индекса, маркирующего собственную функцию и собственное значение, мы для удобства взяли само собственное значение (ср. (3.7)).

Пусть система находится в состоянии с волновой функцией $\psi(\xi)$. Ее можно разложить по базису, образованному собственными функциями эрмитова оператора $\hat{F}$ (ср. (3.9)):

$$\psi(\xi) = \int dF C_F \psi_F(\xi), \quad C_F = \langle \psi_F | \psi \rangle. \tag{4.15}$$

Подчеркнем, что интеграл в (4.15) – определенный, подынтегральная переменная $F$ меняется в определенных пределах.

Пусть $F$ – невырожденное собственное значение. Вероятность получить при измерении наблюдаемой любое конкретное значение $F$ равна нулю. Дифференциально малая вероятность получить при измерении наблюдаемой значение из дифференциально малого интервала $(F, F+dF)$ равна

$$dP_\psi(F, F+dF) = |C_F|^2 dF. \tag{4.16}$$

Величина $\rho_\psi(F) = \dfrac{dP_\psi(F, F+dF)}{dF}$ называется *плотностью вероятности* получить при измерении наблюдаемой значение $F$. Как следует из (4.16),

$$\rho_\psi(F) = |C_F|^2. \tag{4.17}$$

Вероятность получить при измерении наблюдаемой значение из конечного интервала $(F_1, F_2)$ равна

$$P_\psi(F_1, F_2) = \int_{F_1}^{F_2} dP_\psi(F, F+dF) = \int_{F_1}^{F_2} dF \rho_\psi(F). \tag{4.18}$$

**<u>Задача 6.</u>**

Частица находится в состоянии с волновой функцией $\psi(x) = A\exp\left(-\dfrac{x^2}{a^2}\right)$, $a$ – вещественная постоянная, $A$ – нормировочный множитель. Найти плотность вероятности $\rho_\psi\left(p_x = p\right)$ для всех вещественных чисел $p$ и вероятность $P_\psi\left(p_x > 0\right)$ того, что при измерении проекции импульса $p_x$ получится положительное значение.

*Решение:*

Уравнение вида (4.14) на собственные функции и собственные значения для оператора $\hat{p}_x$ было решено в задаче 1 главы 3: $\hat{p}_x \psi_p\left(x\right) = p\psi_p\left(x\right)$, $\psi_p\left(x\right) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\dfrac{i}{\hbar}px\right)$, $p$ – вещественное число.

Далее нужно разложить заданную в задаче волновую функцию по базису из функций $\psi_p\left(x\right)$ (см. (4.15)):

$$\psi\left(x\right) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp C_p \psi_p\left(x\right),$$

$$C_p = \left\langle \psi_p \middle| \psi \right\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_p^*\left(x\right)\psi\left(x\right) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) A\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right).$$

Выделяя в подынтегральном выражении в показателе экспоненты полный квадрат $-\dfrac{x^2}{a^2} - \dfrac{i}{\hbar}px = -\left(\dfrac{x}{a} + i\dfrac{pa}{2\hbar}\right)^2 - \dfrac{p^2a^2}{4\hbar^2}$, сведем интеграл к интегралу Эйлера-Пуассона и получим $C_p = \dfrac{Aa}{\sqrt{2\hbar}}\exp\left(-\dfrac{p^2a^2}{4\hbar^2}\right)$. Тогда искомая плотность вероятности, согласно (4.17), равна

$$\rho_\psi\left(p_x = p\right) = \left|C_p\right|^2 = \left|A\right|^2 \frac{a^2}{2\hbar}\exp\left(-\frac{p^2a^2}{2\hbar^2}\right).$$

Постоянную $A$ можно найти либо из условия нормировки для волновой функции $\psi\left(x\right)$: $\left\langle \psi \middle| \psi \right\rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \left|\psi\left(x\right)\right|^2 = \left|A\right|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-\dfrac{x^2}{a^2}\right) = 1$, либо из нормировки вероятности $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dp\rho_\psi\left(p_x = p\right) = 1$. Получим $|A|^2 = \dfrac{\sqrt{2}}{a\sqrt{\pi}}$ и, окончательно, $\rho_\psi\left(p_x = p\right) = \dfrac{a}{\sqrt{2\pi}\hbar}\exp\left(-\dfrac{p^2a^2}{2\hbar^2}\right)$.

Наконец, найдем вероятность положительной проекции импульса $p_x$: $P_\psi\left(p_x > 0\right) = \int\limits_0^{+\infty} dp\rho_\psi\left(p_x = p\right) = \dfrac{a}{\sqrt{2\pi}\hbar}\int\limits_0^{+\infty} dp\exp\left(-\dfrac{p^2a^2}{2\hbar^2}\right) = \dfrac{1}{2}$. Последний результат, впрочем, очевиден и без вычисления интеграла, поскольку плотность вероятности $\rho_\psi\left(p_x = p\right)$ получилась четной функцией проекции импульса. ▲

### *Плотность потока вероятности*

Рассмотрим частицу массы $m$ в состоянии с волновой функцией $\psi(\mathbf{r})$. Плотность потока вероятности (или просто *плотность потока*) – это векторная величина, которая определяется как

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi(\mathbf{r})\cdot\operatorname{grad}\psi^*(\mathbf{r}) - \psi^*(\mathbf{r})\cdot\operatorname{grad}\psi(\mathbf{r})\right). \qquad (4.19)$$

Интеграл от этого вектора по замкнутой поверхности имеет смысл вероятности того, что в единицу времени частица пересечет эту поверхность. Если рассмотреть волновую функцию и плотность потока как функции времени, то справедливо равенство

$$\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2 + \operatorname{div}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0, \qquad (4.20)$$

которое является аналогом уравнения непрерывности в электродинамике, выражающего закон сохранения заряда: если $q$ – заряд частицы, то $q\cdot\left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2$ можно интерпретировать как плотность заряда, а $q\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ – как плотность тока. Подробнее о зависимости волновой функции от времени – см. главу 5.

**Задача 7.**

У волновой функции частицы можно выделить модуль и комплексную фазу: $\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})| e^{i\alpha(\mathbf{r})}$. Выразить плотность потока вероятности через $|\psi(\mathbf{r})|$ и $\alpha(\mathbf{r})$.

*Решение:*

Согласно (4.19), вычислим

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{2m}\Big(|\psi(\mathbf{r})| e^{i\alpha(\mathbf{r})} \cdot \mathrm{grad}\Big(|\psi(\mathbf{r})| e^{-i\alpha(\mathbf{r})}\Big) - |\psi(\mathbf{r})| e^{-i\alpha(\mathbf{r})} \cdot \mathrm{grad}\Big(|\psi(\mathbf{r})| e^{i\alpha(\mathbf{r})}\Big)\Big) =$$

$$= \frac{\hbar}{m}|\psi(\mathbf{r})|^2 \,\mathrm{grad}\,\alpha(\mathbf{r}).$$

Заметим, что декартова компонента плотности потока равна нулю, если комплексная фаза волновой функции не зависит от соответствующей координаты. ▲

**Задача 8.**

Пусть частица находится в состоянии с определенным значением импульса $\mathbf{p}$. Найти плотность потока вероятности.

*Решение:*

Волновая функция такого состояния имеет вид (3.28) $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}\right)$. Не будем указывать конкретное значение нормировочного множителя $C$; вообще, как уже указывалось в главе 3, нормировка собственных функций оператора с непрерывным спектром неоднозначна.

Воспользуемся результатом предыдущей задачи:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m}|\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})|^2 \,\mathrm{grad}\frac{\mathbf{pr}}{\hbar} = |C|^2\frac{\mathbf{p}}{m}. \quad ▲ \tag{4.21}$$

Заметим, что если рассматривается одномерная задача, и частица находится в состоянии $\psi_p(x) = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)$ с определенным значением проекции импульса $p_x$, равным $p$, то плотность потока имеет только компоненту по оси $x$, равную

$$j_x(x) = |C|^2 \frac{p}{m}. \qquad (4.22)$$

**Задачи для самостоятельного решения**

4.1. Непосредственным вычислением проверить выполнение соотношения неопределенности (4.3) для волновой функции из задачи 1.

4.2. Пусть в состоянии $\psi(x)$ средние значения координаты $x$ и проекции импульса $p_x$ равны соответственно $x_0$ и $p_0$. Найти средние значения $x$ и $p_x$ в состоянии с волновой функцией $\psi(x + x_0)\exp\left(-\frac{ip_0 x}{\hbar}\right)$.

4.3. Пусть $\hat{F}$ – эрмитов оператор. Показать, что для любого состояния $\psi(\xi)$ среднее значение $\left\langle F^2 \right\rangle_\psi$ – неотрицательная величина.

4.4. Частица в трехмерном пространстве находится в состоянии с определенным значением проекции момента импульса $l_z$, равным $m$. Тогда ее волновая функция в сферических координатах имеет вид $\psi(r, \theta, \varphi) = f(r, \theta)\exp(im\varphi)$ (см. задачу 4 главы 3). Найти средние значения $\langle l_x \rangle_\psi$, $\langle l_y \rangle_\psi$, $\langle l_z \rangle_\psi$.

4.5. Состояние плоского ротатора задается волновой функцией $\psi(\varphi) = A\cos^3\varphi$, $A$ – нормировочный множитель. Найти вероятности $P_\psi(l_z = m)$ для всех целых чисел $m$. Найти среднее значение $\langle l_z \rangle_\psi$ и среднее значение $\left\langle l_z^{\,2} \right\rangle_\psi$.

4.6. Частица находится в состоянии с волновой функцией $\psi(\mathbf{r}) = A\frac{yz^2}{r^3}$, $A$ – нормировочный множитель. Найти вероятности $P_\psi\left(\mathbf{l}^2 = 12\right)$ и $P_\psi(l_z = 1)$.

4.7. Состояние частицы описывается волновой функцией

$$\psi(\theta,\varphi) = A\left(Y_{11} + Y_{10} + i(Y_{11} - Y_{10}) + \left(1 + i\sqrt{3}\right)Y_{21}\right),$$

где $A$ – нормировочный множитель. Найти вероятности различных значений $\mathbf{l}^2$ и среднее значение $\mathbf{l}^2$.

4.8. Волновая функция состояния $\psi(x)$ известна. Найти плотность вероятности $\rho_\psi(x=a)$, где $a$ – произвольное вещественное число.

4.9. Найти плотность потока вероятности для волновой функции из задачи 1.

# 5. ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ В ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ПОЛЕ

Волновая функция частицы $\psi(\xi,t)$ в квантовой механике изменяется со временем $t$ согласно *нестационарному уравнению Шредингера* (*волновому уравнению*):

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\xi,t)}{\partial t}=\hat{H}\psi(\xi,t), \tag{5.1}$$

где оператор $\hat{H}$ – *гамильтониан* частицы, квантово-механический аналог функции Гамильтона – эрмитов оператор, отвечающий наблюдаемой величине – энергии частицы. В случае, когда $\hat{H}$ явно не зависит от времени, важное значение представляет решение задачи на собственные функции и собственные значения оператора $\hat{H}$ (*стационарное уравнение Шредингера*):

$$\hat{H}\psi_n(\xi)=E_n\psi_n(\xi). \tag{5.2}$$

В дискретном случае принято нумеровать собственные значения $E_n$ (энергии частицы) натуральным индексом $n=1,2,3,\ldots$ по возрастанию, так что $E_1\le E_2\le E_3\le\ldots$ Значение $n=1$ соответствует *основному состоянию* частицы $\psi_1(\xi)$, обладающему наименьшей энергией $E_1$. Состояния, в которых энергия имеет определенное значение, а значит, описывающиеся собственными функциями гамильтониана, называются *стационарными состояниями*. Решая совместно (5.1) и (5.2), получим зависимость волновых функций стационарных состояний от времени: $\psi_n(\xi,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\psi_n(\xi)$. Видно, что во все моменты времени такая волновая функция отвечает одному и тому же состоянию системы, поскольку волновые функции состояний определяются в квантовой механике с точностью до фазового множителя. Отсюда следует, что в стационарном состоянии квантово-механическая система будет находиться бесконечно долго.

Пусть известна волновая функция произвольного состояния $\psi(\xi,0)$ в начальный момент $t=0$. Раскладывая ее по базису собственных функций гамильтониана $\{\psi_n(\xi)\}$

$$\psi(\xi,0)=\sum_n C_n\psi_n(\xi),$$

где $C_n$ – некоторые постоянные (см. (3.5)), мы получим решение уравнения (5.1) в виде

$$\psi(\xi,t)=\sum_n C_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_n(\xi). \tag{5.3}$$

Подчеркнем, что квантово-механическая система сама по себе является *детерминированной*: ее волновая функция согласно (5.3) однозначно определена во все будущие моменты времени. Неоднозначность же в результатах измерения наблюдаемых обусловлена процессом *измерения*, то есть взаимодействия с *классическим* объектом – макроскопическим измерительным прибором.

Рассмотрим теперь стационарное состояние частицы с энергией $E$ и координатной частью волновой функции, соответствующей состоянию частицы с определенным значением вектора импульса $\mathbf{p}$ (см. (3.28)): $\psi(\mathbf{r},t)=C\exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-Et)\right)$. Как видим, зависящая от времени волновая функция имеет в данном случае вид плоской волны с волновым вектором $\mathbf{k}=\mathbf{p}/\hbar$. Плотность потока вероятности для такого состояния не зависит от координат и равна (4.21) $\mathbf{j}(\mathbf{r})=|C|^2\frac{\hbar\mathbf{k}}{m}$, что также согласуется с представлением о «движении» частицы в виде плоской волны.

В классической механике функция Гамильтона частицы в одномерном потенциальном поле равна $H=\frac{p_x^2}{2m}+U(x)$, где $m$ – масса частицы, $U(x)$ – потенциальная функция. Заменяя все величины функции Гамильтона на операторы, мы получим гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x). \quad (5.4)$$

Ниже мы рассмотрим простейшие формы потенциала $U(x)$.

**Задача 1.** *Свободная частица*

Найти собственные функции гамильтониана и спектр энергий свободной частицы.

*Решение:*

Для свободной частицы потенциальная функция $U(x)=0$. Поскольку гамильтониан (5.4) в данном случае совпадает с оператором кинетической энергии и коммутирует с оператором $\hat{p}_x$, то $\hat{H}$ и $\hat{p}_x$ имеют общий набор собственных функций (см. задачу 5 главы 3). Каждому значению энергии $E_p$ и собственной функции гамильтониана $\psi_{E_p}(x)$ можно сопоставить модуль импульса $p$ частицы:

$$E_p = \frac{p^2}{2m}, \quad \psi_{E_p}(x) = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} \quad (p \geq 0, \quad A, B = \text{const}). \quad (5.5)$$

Каждая собственная функция гамильтониана $\psi_{E_p}(x)$ является суперпозицией двух собственных функций $\hat{p}_x$, соответствующих состояниям с проекциями импульса $p_x = \pm p$, то есть каждое собственное значение $E_p$ (кроме $E_p = 0$) двукратно вырождено.

Величина $p$ меняется непрерывно, и мы получаем непрерывный спектр энергий $E_p$. Можно показать, что так будет всегда, если движение *инфинитное* (не ограниченное потенциальным барьером, то есть энергия $E$ больше высоты барьера на бесконечности). Наоборот, в случае *финитного* движения спектр частицы будет дискретным.

Введем волновое число $k$ частицы, связанное с модулем импульса частицы соотношением $p = \hbar k$, что позволяет переписать (5.5) в виде

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \psi_k(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (5.6)$$

Если движение частицы происходит в трех измерениях, то ее гамильтониан принимает вид $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – лапласиан, $E_p = \frac{p^2}{2m}$, $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$, а собственные функции $\psi_{E_p}(\mathbf{r})$ являются суперпозицией функций вида (3.28) $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}\right)$ с одинаковым модулем импульса $p$. ▲

<u>**Задача 2.**</u> *Потенциальная яма* $U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a, \\ +\infty, & x < 0, \quad x > a. \end{cases}$

Найти собственные функции гамильтониана и спектр энергий частицы в заданном потенциале.

*Решение:*

Частица совершает одномерное движение внутри бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы ширины $a$. Вне ямы ($x < 0$ и $x < a$), где $U(x) \to +\infty$, частица находиться не может, поскольку для этого она должна была бы обладать бесконечной энергией. Следовательно, $\psi(x < 0) = \psi(x > a) = 0$. Внутри ямы $U(x) = 0$, и мы получаем уравнение Шредингера (5.2) того же вида, что и для свободной частицы (см. задачу 1) и решение вида (5.6). Необходимо теперь «сшить» эти два решения в граничных точках $x = 0$ и $x = a$, то есть задать *граничные условия*. В качестве таковых используем непрерывность волновой функции в указанных точках ($x \to a - 0$ и $x \to a + 0$ обозначают лево- и правосторонний пределы, соответственно):

$$\begin{cases} \lim\limits_{x\to -0}\psi(x) = \lim\limits_{x\to +0}\psi(x) \\ \lim\limits_{x\to a-0}\psi(x) = \lim\limits_{x\to a+0}\psi(x), \end{cases} \quad \begin{cases} 0 = Ae^0 + Be^0 \\ Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} B = -A \\ 2iA\sin ka = 0. \end{cases} \tag{5.7}$$

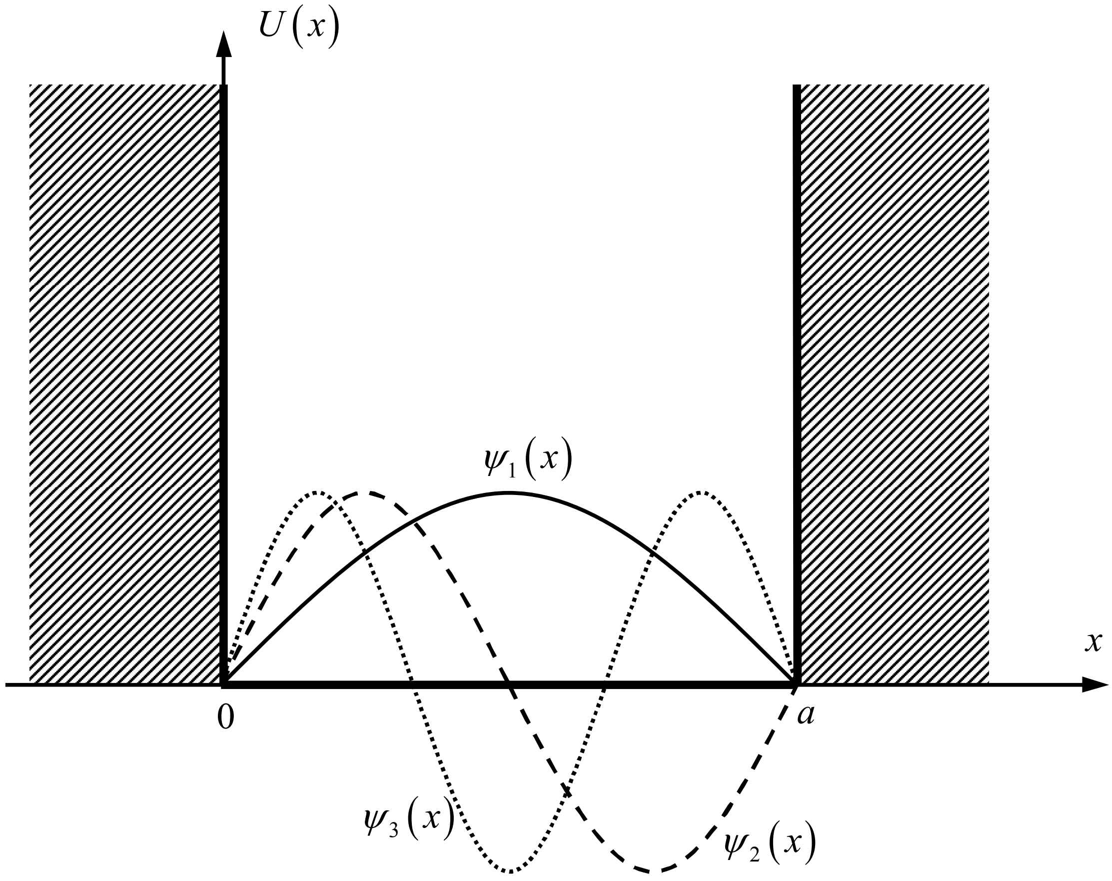


Рис. 5.1. Потенциальная функция $U(x)$ частицы в бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме и три первых собственных функции $\psi_n(x)$ с наименьшей энергией (масштаб произвольный). Штриховкой отмечены области $x < 0$ и $x > a$, где частица находиться не может

Непрерывность волновой функции является следствием того, что плотность вероятности обнаружения частицы при переходе к соседней точке не должна меняться, иначе мы бы имели источник/сток частиц в этой точке. Отбрасывая не имеющее физического смысла тривиальное решение ($A = B = 0$, $\psi(x) = 0$ на всей действительной оси, что противоречит условию нормировки волновой функции), мы получаем условие на волновое число:

$$\sin ka = 0, \quad k_n = \frac{\pi n}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots .$$

Спектр оказывается дискретным и невырожденным, что характерно для финитного движения:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad \psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \dfrac{\pi n x}{a}, & 0 \le x \le a, \\ 0, & x < 0, \quad x > a, \end{cases} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{5.8}$$

Постоянная $2iA = \sqrt{2/a}$ определяется из нормировочного условия $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \left|\psi_n(x)\right|^2 = 1$ (см. задачу 5.7). На рис. 5.1 изображены собственные функции $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$.

*Замечание.* В случае барьера конечной высоты появляется дополнительное граничное условие – непрерывность производной волновой функции $d\psi/dx$ на границе двух областей. В самом деле, как следует из стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом (5.4), производная $d\psi/dx$ равна неопределенному интегралу от кусочно-непрерывной функции $-\dfrac{2m}{\hbar^2}\big(E - U(x)\big) \cdot \psi(x)$, а следовательно, является непрерывной функцией. ▲

**<u>Задача 3.</u>** *Потенциальная «стенка»* $U(x) = \begin{cases} 0, & x \le 0, \\ +\infty, & x > 0. \end{cases}$

Частица энергии $E > 0$ движется из $x = -\infty$ в положительном направлении оси $x$. Записать волновую функцию частицы и найти коэффициент отражения частицы от «стенки».

*Решение:*

В области $x > 0$, где $U(x) = +\infty$, волновая функция равна нулю. Частица может двигаться по отрицательной полуоси $x \le 0$. Решение в этой области совпадает с (5.6):

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = \psi_{\text{пад}} + \psi_{\text{отр}} \quad \left(k \geq 0, \quad A, B = \text{const}\right). \tag{5.9}$$

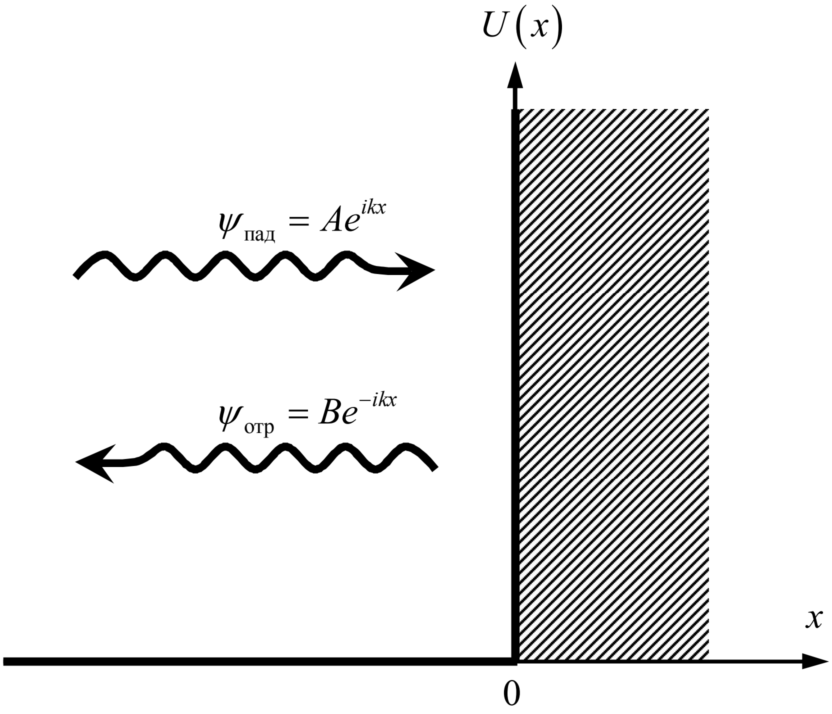


Рис. 5.2. Вертикальная потенциальная «стенка». Схематически показаны падающая ($Ae^{ikx}$) и отраженная ($Be^{-ikx}$) от «стенки» волна. Волновая функция $\psi(x)$ частицы в области $x < 0$ является суперпозицией этих двух волн

По условию, нам задана энергия $E$ частицы. Ниже будем выражать все величины через волновое число $k$. Из (5.9) следует, что

$$k = \sqrt{2mE} \big/ \hbar. \tag{5.10}$$

Первое слагаемое в $\psi(x)$ ($\psi_{\text{пад}} = Ae^{ikx}$) можно формально рассматривать как частицу с импульсом $p_x = +\hbar k$, движущуюся в положительном направлении оси $x$ (падающая на «стенку» волна). Аналогично, второе слагаемое ($\psi_{\text{отр}} = Be^{-ikx}$) соответствует частице с импульсом $p_x = -\hbar k$, движущейся в обратном направлении (отраженная от «стенки» волна). Сама же функция $\psi(x)$ в области $x < 0$ представляет собой суперпозицию этих двух волн.

Определим *коэффициент отражения* от потенциального барьера следующим образом:

$$R = \left| j_{\text{отр}} \right| \Big/ j_{\text{пад}}\,, \tag{5.11}$$

где $j_{\text{пад}}$ и $j_{\text{отр}}$ – плотности потока вероятности падающей и отраженной волны, определяемые согласно (4.19) как

$$\begin{aligned} j_{\text{пад}} &= \frac{i\hbar}{2m}\left( \psi_{\text{пад}} \cdot \frac{d\psi^*_{\text{пад}}}{dx} - \psi^*_{\text{пад}} \cdot \frac{d\psi_{\text{пад}}}{dx} \right), \\ j_{\text{отр}} &= \frac{i\hbar}{2m}\left( \psi_{\text{отр}} \cdot \frac{d\psi^*_{\text{отр}}}{dx} - \psi^*_{\text{отр}} \cdot \frac{d\psi_{\text{отр}}}{dx} \right). \end{aligned} \tag{5.12}$$

Подставив $\psi_{\text{пад}} = Ae^{ikx}$ и $\psi_{\text{отр}} = Be^{-ikx}$, мы получаем (см. также (4.22)):

$$j_{\text{пад}} = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}, \quad j_{\text{отр}} = -|B|^2 \frac{\hbar k}{m}, \quad R = \left| \frac{B}{A} \right|^2.$$

Запишем граничное условие на волновую функцию в точке $x = 0$:

$$\lim_{x\to -0} \psi(x) = \lim_{x\to +0} \psi(x), \quad Ae^0 + Be^0 = 0, \quad B = -A\,.$$

Как и следовало ожидать, коэффициент отражения от такой «стенки» $R = 1$. По аналогии с (5.11) определим также *коэффициент прохождения* через потенциальный барьер

$$D = j_{\text{пр}} \big/ j_{\text{пад}}\,, \quad j_{\text{пр}} = \frac{i\hbar}{2m}\left( \psi_{\text{пр}} \cdot \frac{d\psi^*_{\text{пр}}}{dx} - \psi^*_{\text{пр}} \cdot \frac{d\psi_{\text{пр}}}{dx} \right), \tag{5.13}$$

где $\psi_{\text{пр}}$ – прошедшая волна (волновая функция частицы справа от барьера). В нашем случае $\psi_{\text{пр}} = 0$, и $D = 0$. ▲

**Задачи для самостоятельного решения**

5.1. Непосредственной подстановкой (5.3) в (5.1) убедиться, что разложение (5.3) является решением нестационарного уравнения Шредингера.

5.2. Показать, что для произвольных волновых функций их скалярное произведение не меняется со временем: $\langle \varphi(\xi,t) | \psi(\xi,t) \rangle = \langle \varphi(\xi,0) | \psi(\xi,0) \rangle$. На основании этого показать, что если $\{\psi_1(\xi,0),\ \psi_2(\xi,0),\ \psi_3(\xi,0),\ldots\}$ – ортонормированный базис в пространстве волновых функций, то $\{\psi_1(\xi,t),\ \psi_2(\xi,t),\ \psi_3(\xi,t),\ldots\}$ – также ортонормированный базис.

5.3. Пусть наблюдаемой $F$ соответствует не зависящий от времени эрмитов оператор $\hat{F}$. Показать, что в стационарном состоянии системы среднее значение $F$ и вероятности $P_\psi(F=F_n)$ (или плотность вероятности $\rho_\psi(F)$, если $\hat{F}$ – оператор с непрерывным спектром) не зависят от времени.

5.4. Показать, что среднее значение энергии в произвольном нестационарном состоянии не зависит от времени.

5.5. Свободная частица, движущаяся в положительном направлении оси $x$, обладает импульсом $p$. Записать волновую функцию частицы $\psi(x,t)$ в произвольный момент времени $t$ с точностью до постоянного фазового множителя.

5.6. В начальный момент частица находилась в состоянии $\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(x)+\psi_2(x))$, где $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ – собственные функции гамильтониана $\hat{H}$ частицы, которым соответствуют различные энергии $E_1, E_2$. Найти волновую функцию $\psi(x,t)$ и среднее значение энергии частицы $\langle E\rangle$ в произвольный момент времени $t$.

5.7. Пользуясь нормировкой функции $\psi_n(x)$ частицы в потенциальной яме, вычислить постоянную $2iA$ в уравнении (5.7) с точностью до фазового множителя.

5.8. Пусть частица в потенциальной яме (см. задачу 2) находится в состоянии: а) $\psi_1(x)$; б) $\psi_2(x)$. Найти плотность вероятности $\rho_\psi(p_x=p)$ для всех вещественных чисел $p$.

5.9. Пусть частица в потенциальной яме (см. задачу 2) находится в данный момент времени в нестационарном состоянии с волновой функцией

$$\psi(x)=\begin{cases} 2\sqrt{\dfrac{3}{a}}\cdot\dfrac{x}{a}, & 0\le x\le\dfrac{a}{2},\\ 2\sqrt{\dfrac{3}{a}}\cdot\left(1-\dfrac{x}{a}\right), & \dfrac{a}{2}\le x\le a.\end{cases}$$

Найти вероятность того, что при измерении энергии частицы будет получено значение $E_1=\dfrac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$.

5.10. Частица энергии $E$, находящаяся в потенциале $U(x)=\begin{cases}0, & x\le 0,\\ U_0, & x>0,\end{cases}$ (потенциальная «ступенька») движется из $x=-\infty$ в положительном направлении оси *x*. Принять $E>U_0>0$. Записать волновую функцию частицы; найти коэффициент отражения от барьера $R$ и коэффициент прохождения через барьер $D$.

5.11. Решить предыдущую задачу в случае $E<U_0$. Определить также характерную глубину $\delta$ подбарьерного прохождения.

5.12. Частица энергии $E$, находящаяся в потенциале $U(x)=\begin{cases}0, & x\le 0,\ \ x\ge a\\ U_0, & 0<x<a,\end{cases}$ (прямоугольный потенциальный барьер) движется из $x=-\infty$ в положительном направлении оси *x*. Принять $E>U_0>0$. Найти коэффициент $D$ прохождения частицы через барьер.

5.13. *Туннельный эффект*: решить предыдущую задачу в случае $E<U_0$.

5.14.* Для частицы в одномерном потенциальном поле доказать правило сумм Томаса-Рейха-Куна:

$$\sum_n\left|\langle\psi_n(x)|x|\psi_k(x)\rangle\right|^2(E_n-E_k)=\frac{\hbar^2}{2m},$$

где $\psi_k(x)$ – некоторое стационарное состояние частицы, а суммирование по *n* проводится по всем стационарным состояниям частицы. Указание: рассмотреть среднее значение оператора $\left[\hat{x},\left[\hat{H},\hat{x}\right]\right]$ в состоянии $\psi_k(x)$.

# 6. ЛИНЕЙНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Пусть частица находится в некотором одномерном потенциале $U(x)$, имеющем вид потенциальной ямы с минимумом в т. $x = x_0$ (рис. 6.1).

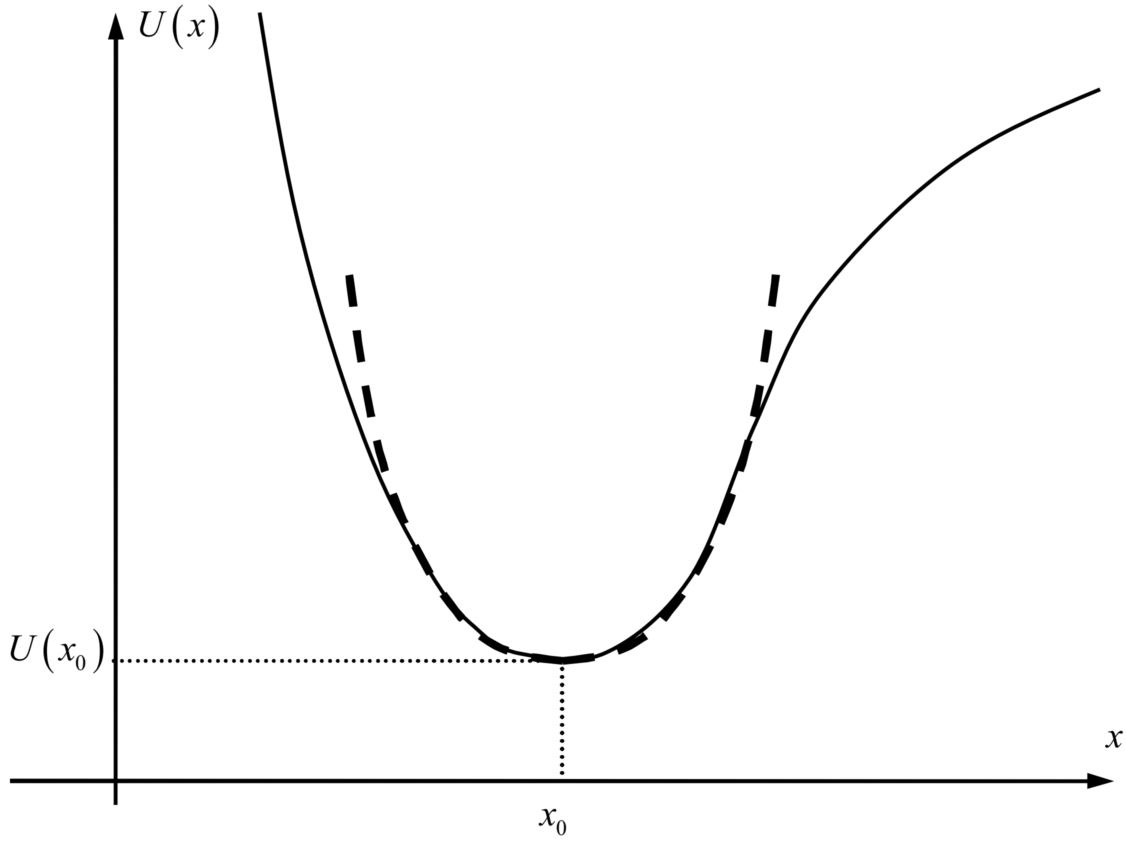


Рис. 6.1. Потенциал $U(x)$ частицы с точкой минимума $x = x_0$ (сплошная линия). Пунктиром показана аппроксимация потенциала параболой $U(x_0) + \frac{1}{2}\frac{d^2U}{dx^2}\Big|_{x=x_0}(x - x_0)^2$ при небольших значениях отклонения $|x - x_0|$

Разложим функцию $U(x)$ в ряд Тейлора в окрестности точки $x = x_0$:

$$U(x) = U(x_0) + \frac{dU}{dx}\Big|_{x=x_0}(x - x_0) + \frac{1}{2!}\frac{d^2U}{dx^2}\Big|_{x=x_0}(x - x_0)^2 + O\left[(x - x_0)^3\right], \tag{6.1}$$

где за $O\left[\left(x-x_0\right)^3\right]$ обозначены члены порядка $\left(x-x_0\right)^n$, $n \geq 3$. Нулевой член разложения даст общий сдвиг всех уровней энергии на постоянную величину $U\left(x_0\right)$, что никак не отразится на собственных функциях. Без ограничения общности можно положить $U\left(x_0\right)=0$. Так как $x=x_0$ является точкой локального экстремума, то $\left.\frac{dU}{dx}\right|_{x=x_0}=0$, и первый член разложения обращается в нуль. При небольших энергиях частицы ее волновая функция, а значит и плотность вероятности найти частицу, существенно отличны от нуля в достаточно малой окрестности точки $x=x_0$, и можно пренебречь членом $O\left[\left(x-x_0\right)^3\right]$ в разложении (6.1). Перенося начало координат в точку минимума, мы получаем потенциал вида

$$U(x)=\alpha x^2, \quad \alpha>0. \tag{6.2}$$

Выражение (6.2) идентично потенциалу *линейного гармонического осциллятора* в классической механике, если ввести угловую частоту колебаний $\omega$ при помощи подстановки $\alpha=m\omega^2/2$. Подставив этот потенциал в (5.4), мы получаем гамильтониан осциллятора:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}. \tag{6.3}$$

Стационарное уравнение Шредингера (5.2) принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi_n(x)=E_n\psi_n(x). \tag{6.4}$$

Заменой переменной $x=\xi\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ коэффициенты в уравнении (6.4) можно сделать безразмерными, и оно принимает наиболее простую форму:

$$-\frac{d^2\psi_n(\xi)}{d\xi^2}+\xi^2\psi_n(\xi)=\varepsilon_n\psi_n(\xi), \tag{6.5}$$

где $\varepsilon_n=\frac{2E_n}{\hbar\omega}$ – энергия в безразмерной форме, $\xi$ – безразмерная координата.

Поскольку частица находится в потенциальной яме, то ее движение должно быть финитным, т.е. $\lim\limits_{\xi\to\pm\infty}\psi_n(\xi)=0$. Этим свойством обладают многие гладкие функции, например, функция Гаусса $Ae^{-\beta\xi^2}$, $\beta>0$. Непосредственной подстановкой $\psi_0(\xi)=Ae^{-\beta\xi^2}$ в уравнение (6.5) можно убедиться, что такая функция является его решением при $\beta=1/2$, с энергией $\varepsilon_0=1$ (задача 6.2). Остальные функции $\psi_n(\xi)$ при $n\geq 1$ находятся подстановкой $\psi_n(\xi)=Q_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$, где $Q_n(\xi)$ – некоторый полином $n$-го порядка по $\xi$. За деталями расчетов рекомендуем читателю обратиться к любому из известных курсов квантовой механики, например, [2]. Решением уравнения (6.5) являются следующие собственные функции и собственные значения:

$$\psi_n(\xi)=C_nH_n(\xi)e^{-\xi^2/2},\quad \varepsilon_n=2n+1,\quad n=0,1,2,\ldots, \tag{6.6}$$

где $H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\dfrac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)$ – полином Эрмита $n$-го порядка, постоянная $C_n=\left(\sqrt{\pi}\,2^n n!\right)^{-1/2}$ находится из условия ортогональности

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi\psi_n^*(\xi)\psi_{n'}(\xi)=\delta_{nn'}. \tag{6.7}$$

В исходных переменных решение (6.4) выглядит так:

$$\begin{gathered}\psi_n(x)=\tilde{C}_nH_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}},\quad E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),\quad n=0,1,2,\ldots,\\ \tilde{C}_n=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}}C_n,\quad \int\limits_{-\infty}^{+\infty}dx\psi_n^*(x)\psi_{n'}(x)=\delta_{nn'}.\end{gathered} \tag{6.8}$$

В процессе решения задач нам понадобятся следующие *рекуррентные соотношения* на функции $\psi_n(\xi)$, получаемые из свойств полиномов Эрмита:

$$\begin{gathered}\xi\psi_n(\xi)=\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(\xi)+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(\xi),\\ \frac{d}{d\xi}\psi_n(\xi)=\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(\xi)-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(\xi).\end{gathered} \tag{6.9}$$

*Примечание*: для краткости вместо волновой функции $\psi_n(x)$ мы будем часто записывать вектор состояния $|n\rangle$.

**Задача 1.**

Линейный гармонический осциллятор находится в стационарном состоянии $|n\rangle$. Найти дисперсию координаты $\langle \Delta x^2 \rangle_n$ и импульса $\langle \Delta p_x^2 \rangle_n$. Проверить выполнение соотношения неопределенности Гейзенберга (4.3).

*Решение:*

Дисперсию координаты будем искать согласно выражению $\langle \Delta x^2 \rangle_n = \langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2$. Для этого найдем среднее значение координаты $\langle x \rangle_n$:

$$\langle x \rangle_n = \langle n|\hat{x}|n\rangle = \left\{ \hat{x} = \hat{\xi}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right\} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \langle n|\hat{\xi}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n^*(\xi) \cdot \xi \psi_n(\xi) =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n^*(\xi) \cdot \left( \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(\xi) \right) =$$

$$= \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n^*(\xi) \psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n^*(\xi) \psi_{n+1}(\xi) = 0,$$

где мы последовательно перешли к безразмерной переменной $\xi$, воспользовались первым из рекуррентных соотношений (6.9) и ортогональностью собственных функций гамильтониана (6.7). Среднее значение импульса $\langle p_x \rangle_n$ находится аналогично с помощью второго рекуррентного соотношения (6.9):

$$\langle p_x \rangle_n = \left\{ \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\hat{d}}{dx} = -i\sqrt{\hbar m\omega} \frac{\hat{d}}{d\xi} \right\} = -i\sqrt{\hbar m\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n^*(\xi) \cdot \frac{d}{d\xi} \psi_n(\xi) =$$

$$= -i\sqrt{\hbar m\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n^*(\xi) \cdot \left( \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(\xi) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(\xi) \right) =$$

$$= -i\sqrt{\frac{n\hbar m\omega}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n^*(\xi) \psi_{n-1}(\xi) + i\sqrt{\frac{(n+1)\hbar m\omega}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi_n^*(\xi) \psi_{n+1}(\xi) = 0.$$

Чтобы найти среднее значение квадрата координаты, придется воспользоваться рекуррентным соотношением дважды:

$$\left\langle x^2\right\rangle_n=\langle n|\hat{x}^2|n\rangle=\frac{\hbar}{m\omega}\langle n|\hat{\xi}^2|n\rangle=\frac{\hbar}{m\omega}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\xi\psi_n^*(\xi)\cdot\xi\cdot\xi\psi_n(\xi)=$$

$$=\frac{\hbar}{m\omega}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\xi\psi_n^*(\xi)\cdot\xi\cdot\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(\xi)+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(\xi)\right)=$$

$$=\frac{\hbar}{m\omega}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\xi\psi_n^*(\xi)\cdot\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\cdot\xi\psi_{n-1}(\xi)+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\cdot\xi\psi_{n+1}(\xi)\right)=$$

$$=\frac{\hbar}{m\omega}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\xi\psi_n^*(\xi)\cdot\left\{\sqrt{\frac{n}{2}}\cdot\left(\sqrt{\frac{n-1}{2}}\psi_{n-2}(\xi)+\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_n(\xi)\right)+\right.$$

$$\left.+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\cdot\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_n(\xi)+\sqrt{\frac{n+2}{2}}\psi_{n+2}(\xi)\right)\right\}=\frac{\hbar}{m\omega}\left(0+\frac{n}{2}+\frac{n+1}{2}+0\right)=\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Аналогично находится среднее значение квадрата импульса:

$$\left\langle p_x^2\right\rangle_n=-\hbar m\omega\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\xi\psi_n^*(\xi)\cdot\frac{d}{d\xi}\left(\frac{d}{d\xi}\psi_n(\xi)\right)=$$

$$=-\hbar m\omega\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\xi\psi_n^*(\xi)\cdot\frac{d}{d\xi}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(\xi)-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(\xi)\right)=$$

$$=-\hbar m\omega\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\xi\psi_n^*(\xi)\cdot\left\{\sqrt{\frac{n}{2}}\cdot\left(\sqrt{\frac{n-1}{2}}\psi_{n-2}(\xi)-\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_n(\xi)\right)-\right.$$

$$\left.-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\cdot\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_n(\xi)-\sqrt{\frac{n+2}{2}}\psi_{n+2}(\xi)\right)\right\}=\hbar m\omega\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Итого получаем:

$$\left\langle \Delta x^2\right\rangle_n=\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right),\quad \left\langle \Delta p_x^2\right\rangle_n=\hbar m\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

$$\left\langle \Delta x^2\right\rangle_n\cdot\left\langle \Delta p_x^2\right\rangle_n=\hbar^2\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\geq\frac{\hbar^2}{4}.$$

▲

**Задача 2.**

Построить матрицы операторов координаты $\hat{x}$ и импульса $\hat{p}_x$ в базисе из собственных функций $|n\rangle$ гамильтониана линейного гармонического осциллятора.

*Решение:*

Найдем матричный элемент $x_{nn'} = \langle n|\hat{x}|n'\rangle$ для двух произвольных индексов $n, n'$:

$$\begin{gathered}
x_{nn'} = \langle n|\hat{x}|n'\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi\psi_n^*(\xi)\cdot\xi\psi_{n'}(\xi) = \\
= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi\psi_n^*(\xi)\cdot\left(\sqrt{\frac{n'}{2}}\psi_{n'-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n'+1}{2}}\psi_{n'+1}(\xi)\right) = \\
= \sqrt{\frac{n'\hbar}{2m\omega}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi\psi_n^*(\xi)\psi_{n'-1}(\xi) + \sqrt{\frac{(n'+1)\hbar}{2m\omega}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi\psi_n^*(\xi)\psi_{n'+1}(\xi) = \\
= \sqrt{\frac{n'\hbar}{2m\omega}}\delta_{n,n'-1} + \sqrt{\frac{(n'+1)\hbar}{2m\omega}}\delta_{n,n'+1}.
\end{gathered} \tag{6.10}$$

Таким образом, отличны от нуля лишь следующие элементы матрицы оператора $\hat{x}$:

$$x_{n,n+1} = \sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}}, \quad x_{n,n-1} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}. \tag{6.11}$$

Нетрудно видеть, что матрица оператора эрмитова: $x_{n,n+1} = x_{n+1,n}^*$. Расчет матричных элементов оператора $\hat{p}_x$ мы предлагаем читателю выполнить самостоятельно. В результате получается эрмитова матрица:

$$(p_x)_{n,n+1} = -i\sqrt{\frac{(n+1)\hbar m\omega}{2}}, \quad (p_x)_{n,n-1} = i\sqrt{\frac{n\hbar m\omega}{2}}. \ \blacktriangle \tag{6.12}$$

**<u>Задача 3.</u>**

Вычислить матричный элемент $\langle n|\hat{x}^3|n'\rangle$ на волновых функциях стационарных состояний линейного гармонического осциллятора.

*Решение:*

Задачу можно решить, как и выше, с помощью рекуррентных соотношений (6.9). Однако быстрее будет воспользоваться результатами задачи 2 и следующими соображениями. Оператор $\hat{x}^3$ можно представить в виде произведения трех операторов: $\hat{x}^3 = \hat{x}\cdot\hat{x}\cdot\hat{x}$. Матрица такого оператора есть произведение матриц отдельных операторов $\hat{x}$ по известному в линейной алгебре правилу «строка-столбец» (3.37):

$$\left(\hat{x}^3\right)_{nn'} = \sum_{l,m=0}^{+\infty} x_{nl} \cdot x_{lm} \cdot x_{mn'} ,$$

но лишь некоторые слагаемые из записанной суммы будут отличны от нуля. Действительно, согласно (6.11) $l = n \pm 1$, $m = l \pm 1$, $n' = m \pm 1$, и путем всех возможных переборов индексов $l$ и $m$ мы получаем:

$$\left(\hat{x}^3\right)_{nn'} = x_{n,n+1} \cdot x_{n+1,n+2} \cdot x_{n+2,n'} + x_{n,n+1} \cdot x_{n+1,n} \cdot x_{nn'} +$$
$$+ x_{n,n-1} \cdot x_{n-1,n} \cdot x_{nn'} + x_{n,n-1} \cdot x_{n-1,n-2} \cdot x_{n-2,n'}.$$

Следовательно, отличны от нуля следующие матричные элементы оператора $\hat{x}^3$:

$$\left(\hat{x}^3\right)_{n,n+3} = x_{n,n+1} x_{n+1,n+2} x_{n+2,n+3} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)},$$

$$\left(\hat{x}^3\right)_{n,n+1} = x_{n,n+1} x_{n+1,n+2} x_{n+2,n+1} + x_{n,n+1} x_{n+1,n} x_{n,n+1} + x_{n,n-1} x_{n-1,n} x_{n,n+1} = 3\left(\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}\right)^{3/2},$$

$$\left(\hat{x}^3\right)_{n,n-1} = x_{n,n+1} x_{n+1,n} x_{n,n-1} + x_{n,n-1} x_{n-1,n} x_{n,n-1} + x_{n,n-1} x_{n-1,n-2} x_{n-2,n-1} = 3\left(\frac{\hbar n}{2m\omega}\right)^{3/2},$$

$$\left(\hat{x}^3\right)_{n,n-3} = x_{n,n-1} x_{n-1,n-2} x_{n-2,n-3} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \sqrt{n(n-1)(n-2)}.$$

Остальные матричные элементы $\left(\hat{x}^3\right)_{nn'}$ равны нулю. ▲

***Формализм чисел заполнения***

Определим следующие операторы:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right). \tag{6.13}$$

Справедливы также обратные соотношения:

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^+\right), \quad \frac{d}{d\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} - \hat{a}^+\right). \tag{6.14}$$

Подействуем оператором $\hat{a}$ на собственную функцию $\psi_n(\xi)$:

$$\hat{a}\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi\psi_n + \frac{d}{d\xi}\psi_n\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}\right) + \left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}\right)\right\} = \sqrt{n}\psi_{n-1}(\xi).$$

(6.15)

Выше мы воспользовались рекуррентными соотношениями (6.9). Как видно, оператор $\hat{a}$, действуя на собственную функцию, уменьшает ее индекс на 1. Оператор $\hat{a}^+$, наоборот, повышает индекс собственного состояния на 1:

$$\hat{a}^+\psi_{n-1}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi\psi_{n-1} - \frac{d}{d\xi}\psi_{n-1}\right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left(\sqrt{\frac{n-1}{2}}\psi_{n-2} + \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_n\right) - \left(\sqrt{\frac{n-1}{2}}\psi_{n-2} - \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_n\right)\right\} = \sqrt{n}\psi_n(\xi).$$

(6.16)

Из соотношений (6.15) и (6.16) мы получаем следующие отличные от нуля матричные элементы операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$:

$$\left\langle n-1\middle|\hat{a}\middle|n\right\rangle = \left\langle n\middle|\hat{a}^+\middle|n-1\right\rangle = \sqrt{n}\,. \tag{6.17}$$

Осуществив замену переменных (6.14) в гамильтониане осциллятора, мы получим (задача 6.7):

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right). \tag{6.18}$$

Выше введен оператор *чисел заполнения*, который умножает собственную функцию на ее индекс $n$:

$$\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}, \quad \hat{n}\psi_n(\xi) = n\psi_n(\xi). \tag{6.19}$$

Можно условно принять, что $n$-му состоянию гармонического осциллятора соответствуют $n$ квазичастиц с энергией $\hbar\omega$ каждая. Тогда полная энергия состояния $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ (6.8) есть сумма этих энергий и энергии вакуума $E_0 = \hbar\omega/2$. Операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ в этом формализме называются *опе-*

*раторами уничтожения* и *рождения*, соответственно, в полном согласии с (6.15) и (6.16). Действуя на стационарное состояние гармонического осциллятора, они уменьшают (увеличивают) его энергию на величину $\hbar\omega$.

**Задача 4.**

Решить задачу 3, воспользовавшись операторами $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$.

*Решение:*

С помощью (6.14) перейдем к операторам рождения и уничтожения в матричном элементе:

$$\left\langle n\left|\hat{x}^3\right|n'\right\rangle=\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2}\left\langle n\left|\hat{\xi}^3\right|n'\right\rangle=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\left\langle n\left|\left(\hat{a}+\hat{a}^+\right)^3\right|n'\right\rangle=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\times$$

$$\times\left\langle n\left|\hat{a}^3+\hat{a}^2\hat{a}^++\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}+\hat{a}^+\hat{a}^2+\left(\hat{a}^+\right)^2\hat{a}+\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^++\hat{a}\left(\hat{a}^+\right)^2+\left(\hat{a}^+\right)^3\right|n'\right\rangle=$$

Обращаем внимание на порядок раскрытия кубической степени в предыдущем выражении: так как операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ не коммутируют друг с другом, то, к примеру, $\hat{a}^2\hat{a}^+\neq\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\neq\hat{a}^+\hat{a}^2$, и все эти члены должны быть выписаны по отдельности.

$$=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\left\{\left\langle n\left|\hat{a}^3\right|n'\right\rangle+\left\langle n\left|\hat{a}^2\hat{a}^+\right|n'\right\rangle+\left\langle n\left|\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\right|n'\right\rangle+\left\langle n\left|\hat{a}^+\hat{a}^2\right|n'\right\rangle+\right.$$

$$\left.+\left\langle n\left|\left(\hat{a}^+\right)^2\hat{a}\right|n'\right\rangle+\left\langle n\left|\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\right|n'\right\rangle+\left\langle n\left|\hat{a}\left(\hat{a}^+\right)^2\right|n'\right\rangle+\left\langle n\left|\left(\hat{a}^+\right)^3\right|n'\right\rangle\right\}=$$

Далее необходимо выяснить, при каком соотношении между $n$ и $n'$ каждый из восьми матричных элементов отличен от нуля. Например, $\left\langle n\left|\hat{a}^3\right|n'\right\rangle$ не равен нулю только в случае $n'=n+3$, так как три оператора $\hat{a}$, действующих последовательно на состояние $\left|n'\right\rangle$, уменьшают его число заполнения до $n'-3$. В результате мы получаем:

$$=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\left\{\left\langle n\left|\hat{a}\hat{a}\hat{a}\right|n+3\right\rangle\delta_{n',n+3}+\left\langle n\left|\hat{a}\hat{a}\hat{a}^+\right|n+1\right\rangle\delta_{n',n+1}+\right.$$

$$+\left\langle n\left|\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\right|n+1\right\rangle\delta_{n',n+1}+\left\langle n\left|\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}\right|n+1\right\rangle\delta_{n',n+1}+\left\langle n\left|\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}\right|n-1\right\rangle\delta_{n',n-1}+$$

$$\left.+\left\langle n\left|\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\right|n-1\right\rangle\delta_{n',n-1}+\left\langle n\left|\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}^+\right|n-1\right\rangle\delta_{n',n-1}+\left\langle n\left|\hat{a}^+\hat{a}^+\hat{a}^+\right|n-3\right\rangle\delta_{n',n-3}\right\}.$$

При помощи символов Кронекера учитываются только отличные от нуля матричные элементы. Рассчитаем эти матричные элементы, воспользовавшись соотношениями (6.15) и (6.16):

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}\hat{a}|n+3\rangle = \sqrt{n+3}\langle n|\hat{a}\hat{a}|n+2\rangle = \sqrt{(n+3)(n+2)}\langle n|\hat{a}|n+1\rangle =$$
$$= \sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)},\quad \langle n|\hat{a}\hat{a}\hat{a}^{+}|n+1\rangle = \sqrt{(n+2)(n+2)(n+1)},$$
$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a}|n+1\rangle = \sqrt{(n+1)(n+1)(n+1)},\quad \langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}\hat{a}|n+1\rangle = \sqrt{(n+1)n\cdot n},$$
$$\langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}\hat{a}|n-1\rangle = \sqrt{(n-1)(n-1)n},\quad \langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}\hat{a}^{+}|n-1\rangle = \sqrt{n\cdot n\cdot n},$$
$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}|n-1\rangle = \sqrt{n(n+1)(n+1)},\quad \langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}\hat{a}^{+}|n-3\rangle = \sqrt{(n-2)(n-1)n}.$$

Получаем следующие отличные от нуля матричные элементы оператора $\hat{x}^3$:

$$\langle n|\hat{x}^3|n+3\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)},$$
$$\langle n|\hat{x}^3|n+1\rangle = 3\left(\frac{\hbar(n+1)}{2m\omega}\right)^{3/2},$$
$$\langle n|\hat{x}^3|n-1\rangle = 3\left(\frac{\hbar n}{2m\omega}\right)^{3/2},$$
$$\langle n|\hat{x}^3|n-3\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\sqrt{n(n-1)(n-2)}.$$

▲

**Задача 5.**

Найти собственные функции и спектр энергии частицы в потенциале Морза $U(x) = U_0\left(e^{2x/a} - 2e^{x/a}\right),\quad U_0, a > 0$.

*Решение:*

Найдем приближенное решение задачи. Для этого разложим функцию $U(x)$ в ряд Маклорена, оставив лишь члены вплоть до квадратичного по $x$:

$$U(x) = U_0\left\{1 + \frac{2x}{a} + \frac{1}{2!}\left(\frac{2x}{a}\right)^2 + \ldots - 2\left(1 + \frac{x}{a} + \frac{1}{2!}\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \ldots\right)\right\} \approx$$
$$\approx -U_0 + \frac{U_0 x^2}{a^2}. \qquad (6.20)$$

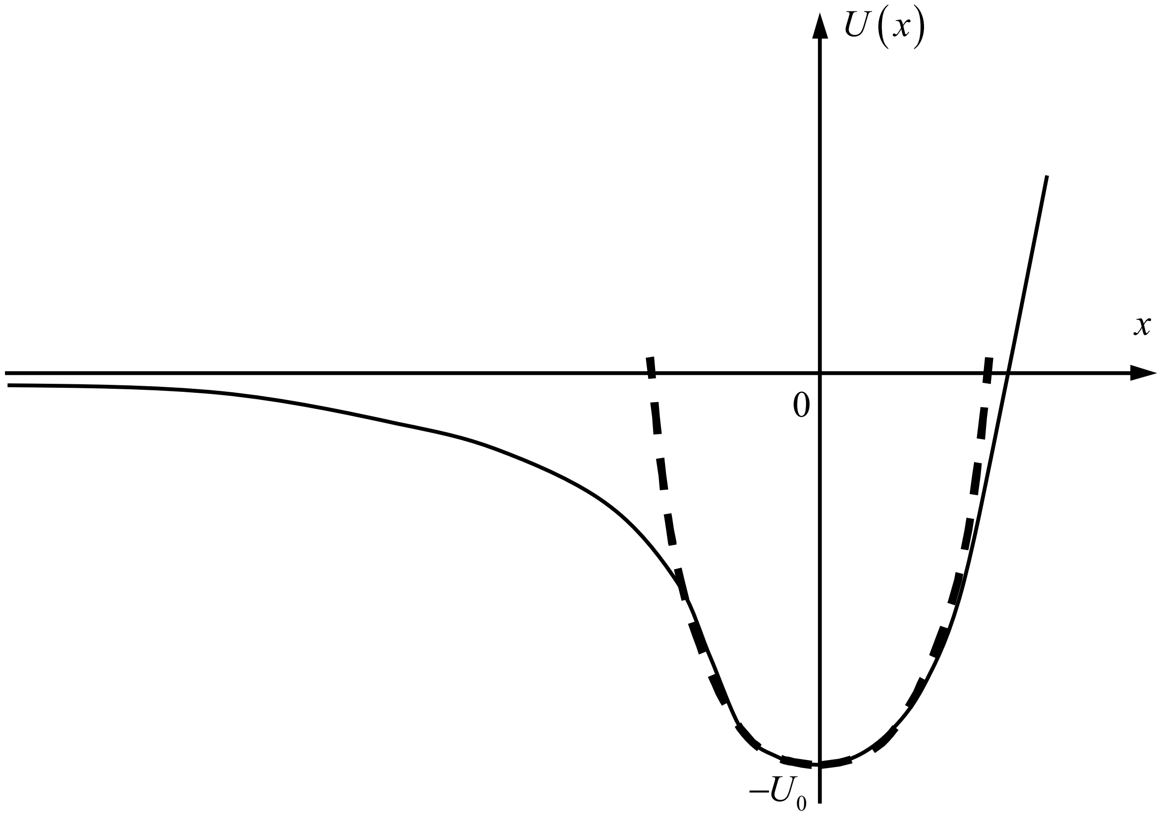


Рис. 6.2. Потенциал Морза $U(x) = U_0\left(e^{2x/a} - 2e^{x/a}\right)$ (сплошная линия). Пунктиром показана аппроксимация потенциала параболой $-U_0 + \dfrac{U_0 x^2}{a^2}$ при небольших значениях $|x|$

Если ввести частоту $\omega$ из соотношения $\dfrac{m\omega^2}{2} = \dfrac{U_0}{a^2}$, то функция $U(x)$ приближенно совпадает с потенциалом линейного гармонического осциллятора с уровнями энергиями, сдвинутыми на постоянную $-U_0$ (рис. 6.2). Собственные функции и спектр получаются согласно выражениям (6.8), в которых сделана замена $\omega = \sqrt{\dfrac{2U_0}{ma^2}}$:

$$\psi_n(x) = \frac{\sqrt[4]{2mU_0/\pi}}{\sqrt{2^n n!\hbar a}} H_n\left(\frac{\sqrt[4]{2mU_0}}{\sqrt{\hbar a}} x\right) e^{-\frac{\sqrt{2mU_0}x^2}{2\hbar a}},$$
$$E_n = \frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{2U_0}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right) - U_0, \quad n = 0,1,2,\ldots \tag{6.21}$$

Аппроксимация (6.20) применима при небольших отклонениях от точки минимума потенциала, $|x| \ll a$, то есть при небольших значениях энергии $E_n$. Другими словами, среднеквадратическое отклонение координаты, выражение для которого можно взять из решения задачи 1, должно быть много меньше $a$:

$$\sqrt{\left\langle \Delta x^2 \right\rangle} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)} = \sqrt{\frac{\hbar a}{\sqrt{2mU_0}}\left(n+\frac{1}{2}\right)} \ll a, \quad n \ll \frac{\sqrt{2mU_0}a}{\hbar} - \frac{1}{2}.$$

Только при таких значениях индекса состояния $n$ справедливо приближенное решение (6.21). ▲

**Задачи для самостоятельного решения**

6.1. Осуществить замену переменной $x = \xi\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ в уравнении (6.4) и получить уравнение (6.5).

6.2. Найти постоянную $\beta > 0$, при которой волновая функция $\psi_0(\xi) = Ae^{-\beta\xi^2}$ является решением уравнения (6.5). Найти энергию $\varepsilon_0$, соответствующую данному решению.

6.3. Линейный гармонический осциллятор находится в состоянии $\psi(x) = C\left(\psi_n(x) + i\psi_{n+1}(x)\right)$. Из условия нормировки функции $\psi$ найти с точностью до фазового множителя нормировочную постоянную $C$, после чего вычислить средние значения координаты $\langle x \rangle$ и импульса $\langle p_x \rangle$ в данном состоянии.

6.4. Линейный гармонический осциллятор находится в стационарном состоянии $|n\rangle$. Вычислить $\langle x^4 \rangle$ и $\langle p_x^4 \rangle$ в данном состоянии.

6.5. Пользуясь определением (6.13) показать, что эрмитово сопряжение оператора $\hat{a}$ дает оператор $\hat{a}^+$: $(\hat{a})^+ = \hat{a}^+$.

6.6. Пользуясь определением (6.13), вычислить коммутатор $\left[\hat{a}, \hat{a}^+\right]$.

6.7. Перейдя к операторам рождения и уничтожения с помощью замены (6.14) в гамильтониане осциллятора (6.3), вывести соотношение (6.18).

6.8. Решить задачу 1, переходя к операторам $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$.

6.9. Найти собственные функции и спектр энергии линейного гармонического осциллятора, на который действует постоянная сила $F$.

6.10. При каких условиях матричный элемент $\langle n|\hat{x}^k|m\rangle$ на стационарных состояниях гармонического осциллятора равен нулю?

6.11.* Проверить выполнение соотношения неопределенности Гейзенберга (4.2) для координаты и кинетической энергии гармонического осциллятора в состоянии $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(i\psi_0 + \psi_1)$.

# 7. АТОМ ВОДОРОДА

Гамильтониан частицы в центральном поле:

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

где $U(r)$ – сферически симметричный потенциал, в котором находится частица, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ – расстояние от центра поля до частицы.

Стационарное уравнение Шредингера (5.2) в нашем случае принимает вид

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right\}\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi). \quad (7.1)$$

Выше мы перешли к сферическим координатам $(r,\theta,\varphi)$. Как было отмечено ранее (2.20), в этих координатах оператор Лапласа выражается через квадрат оператора момента импульса: $\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\hat{\mathbf{l}}^2$. Подставляя это выражение в (7.1), мы получаем после тривиальных преобразований

$$\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\big(U(r) - E\big)\right\}\psi(r,\theta,\varphi) = \hat{\mathbf{l}}^2\psi(r,\theta,\varphi). \quad (7.2)$$

В левой части уравнения в фигурных скобках содержится оператор, действующий только на переменную $r$ и не затрагивающий угловые переменные $\theta$ и $\varphi$. Наоборот, в правой части оператор $\hat{\mathbf{l}}^2$ действует только на $\theta$ и $\varphi$, не затрагивая $r$. В таких случаях решение ищут методом разделения переменных:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi), \quad (7.3)$$

где $R(r), Y(\theta,\varphi)$ – некоторые функции. Подставим (7.3) в (7.2) и поделим обе части уравнения на $R(r)Y(\theta,\varphi)$:

$$\frac{1}{R(r)}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}\big(U(r)-E\big)\right\}R(r)=\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\hat{\mathbf{l}}^2Y(\theta,\varphi). \quad (7.4)$$

Видно, что в левой части стоит функция только от $r$, тогда как в правой – только от $\theta$ и $\varphi$. Равенство этих функций при любых значениях независимых аргументов $r,\theta,\varphi$ может достигаться только в случае, когда обе функции тождественно равны некоторой числовой константе $\lambda$:

$$\begin{cases}\dfrac{1}{R(r)}\left\{\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2\dfrac{\partial}{\partial r}\right)-\dfrac{2mr^2}{\hbar^2}\big(U(r)-E\big)\right\}R(r)=\lambda,\\ \dfrac{1}{Y(\theta,\varphi)}\hat{\mathbf{l}}^2Y(\theta,\varphi)=\lambda.\end{cases}$$

Получившуюся систему уравнений мы перепишем в следующем виде:

$$\begin{cases}\left\{\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2\dfrac{\partial}{\partial r}\right)-\dfrac{2mr^2}{\hbar^2}\big(U(r)-E\big)\right\}R(r)=\lambda R(r),\\ \hat{\mathbf{l}}^2R(r)Y(\theta,\varphi)=\lambda Y(\theta,\varphi).\end{cases} \quad (7.5)$$

Видно, что $R(r)$ и $Y(\theta,\varphi)$ являются собственными функциями операторов $\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}\big(U(r)-E\big)\right\}$ и $\hat{\mathbf{l}}^2$, соответственно, с одинаковым набором собственных значений $\lambda$. Собственные функции оператора $\hat{\mathbf{l}}^2$ были введены в главе 3 – это сферические функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ (3.29):

$$Y(\theta,\varphi)=Y_{lm}(\theta,\varphi),\quad \lambda=l(l+1),\quad l=0,1,2,\ldots,\quad m=-l,-l+1,\ldots,l.$$

Чтобы найти радиальные функции $R(r)$, являющиеся решениями первого уравнения (7.5), необходимо задать конкретный вид потенциала $U(r)$ в атоме водорода (заметим, что мы фактически полагаем массу ядра водорода бесконечно большой и переходим от задачи двух тел к задаче (7.1) движения электрона в центральном поле). Электрон заряда $-e$ в атоме водорода находится в электрическом поле ядра заряда $+e$, так что

$$U(r)=-\frac{e^2}{r}.$$

Можно показать, что в этом случае общий вид решения при $E<0$ имеет вид

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=Y_{lm}(\theta,\varphi)R_{nl}(r),\quad R_{nl}(r)=Q_{n-1}^{(l)}(r)e^{-\frac{r}{na}},\quad E_n=-\frac{e^2}{2n^2a},$$
$$n=0,1,2,\ldots,+\infty,\quad l=0,1,2,\ldots,n-1,\quad m=-l,-l+1,\ldots,l, \tag{7.6}$$

где $Q_{n-1}^{(l)}(r)$ – действительный полином $(n-1)$-го порядка по $r$, $a=\dfrac{\hbar^2}{me^2}\approx 0,53$ Å – радиус атома Бора. Радиальные функции $R_{nl}(r)$ для $n=1,2,3$ приведены в Приложении. Величины $n,l,m$ называются *главным*, *орбитальным* и *магнитным* квантовыми числами, соответственно. Как следует из (7.6), при отрицательных энергиях спектр атома водорода дискретный, а энергия собственного состояния $E_n$ зависит только от главного квантового числа $n$. Спектр атома водорода при положительных энергиях – непрерывный, каждое значение энергии электрона бесконечно-кратно вырождено.

Из нормировки сферических функций (3.31) и радиальных функций

$$\int_0^{+\infty} r^2drR_{nl}(r)R_{n'l}(r)=\delta_{nn'} \tag{7.7}$$

следует нормировка функций $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$:

$$\int_0^{+\infty} r^2dr\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\psi_{nlm}^*(r,\theta,\varphi)\psi_{n'l'm'}(r,\theta,\varphi)=\delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}. \tag{7.8}$$

Часто для обозначения орбитального квантового числа используют буквы латинского алфавита: $s,p,d,f,\ldots$ соответственно для $l=0,1,2,3,\ldots$ К примеру, совокупность состояний с $n=2$ и $l=1$ называют $2p$-оболочкой атома, $n=3$ и $l=0$ – $3s$-оболочкой и т. п.

*Примечание*: для функции $\psi_{nlm}$ мы будем часто использовать сокращенное обозначение $|nlm\rangle$.

**Задача 1.**

Проверить выполнение соотношения неопределенности $\sqrt{\left\langle \Delta x^2 \right\rangle \left\langle \Delta p_x^2 \right\rangle} \geq \frac{\hbar}{2}$ для основного состояния атома водорода.

*Решение:*

Волновую функцию $\left|100\right\rangle = R_{10}\left(r\right)Y_{00}\left(\theta,\varphi\right)$ основного состояния атома водорода мы возьмем из Приложения: $\left|100\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot \frac{2}{\sqrt{a^3}} e^{-\frac{r}{a}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$.

Переходя к сферическим координатам, вычислим среднее значение координаты $x = r\sin\theta\cos\varphi$ в этом состоянии:

$$\left\langle x \right\rangle = \left\langle 100 \right| \hat{x} \left| 100 \right\rangle =$$

$$= \int_0^{+\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left( \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \right)^* \cdot r\sin\theta\cos\varphi \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} =$$

$$= \frac{1}{\pi a^3} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{2r}{a}} r^3 dr \cdot \int_0^{\pi} \sin^2\theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} \cos\varphi d\varphi = 0.$$

Матричный элемент выражается через произведение трех интегралов по сферическим координатам $r, \theta, \varphi$, последний из которых равен нулю. Этот результат можно было предвидеть заранее: так как волновая функция основного состояния сферически симметрична, то среднее значение любой координаты ($x, y, z$) в этом состоянии должно быть равно нулю. Аналогично для $p_x$:

$$\left\langle p_x \right\rangle = \int_0^{+\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left( \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \right)^* \cdot \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}.$$

Производную по $x$ можно взять как производную от сложной функции, заметив, что $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left( e^{-\frac{r}{a}} \right) = \frac{\partial}{\partial r}\left( e^{-\frac{r}{a}} \right) \cdot \frac{\partial r}{\partial x} = -\frac{1}{a} e^{-\frac{r}{a}} \cdot \frac{2x}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = -\frac{x}{ar} e^{-\frac{r}{a}} = -\frac{\sin\theta\cos\varphi}{a} e^{-\frac{r}{a}}.$$

Тогда

$$\left\langle p_x \right\rangle = -\frac{i\hbar}{\pi a^3}\int\limits_0^{+\infty} e^{-\frac{r}{a}} r^2 dr \int\limits_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \left( -\frac{\sin\theta\cos\varphi}{a} e^{-\frac{r}{a}} \right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{\pi a^4}\int\limits_0^{+\infty} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr \cdot \int\limits_0^{\pi} \sin^2\theta d\theta \cdot \int\limits_0^{2\pi} \cos\varphi d\varphi = 0.$$

Средний квадрат координаты:

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \int\limits_0^{+\infty} r^2 dr \int\limits_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi \left( \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} \right)^* \cdot \left( r\sin\theta\cos\varphi \right)^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}} =$$

$$= \frac{1}{\pi a^3}\int\limits_0^{+\infty} e^{-\frac{2r}{a}} r^4 dr \cdot \int\limits_0^{\pi} \sin^3\theta d\theta \cdot \int\limits_0^{2\pi} \cos^2\varphi d\varphi = \frac{J_1 \cdot J_2 \cdot J_3}{\pi a^3}.$$

Интеграл $J_1$ заменой переменной $\dfrac{2r}{a} = \zeta$ сводится к гамма-функции Эйлера натурального аргумента $\Gamma(k) = (k-1)!, \quad k \in \mathbb{N}$ (см. Приложение, (8.4)):

$$J_1 = \int\limits_0^{+\infty} e^{-\frac{2r}{a}} r^4 dr = \left( \frac{a}{2} \right)^5 \int\limits_0^{+\infty} \zeta^4 e^{-\zeta} d\zeta = \left( \frac{a}{2} \right)^5 \Gamma(5) = \left( \frac{a}{2} \right)^5 \cdot 4! = \frac{3}{4} a^5.$$

Вычисление интегралов $J_2$ и $J_3$ дает:

$$J_2 = \int\limits_0^{\pi} \sin^3\theta d\theta = -\int\limits_0^{\pi} \left( 1 - \cos^2\theta \right) d\left( \cos\theta \right) = \frac{4}{3},$$

$$J_3 = \int\limits_0^{2\pi} \cos^2\varphi d\varphi = \frac{1}{2}\int\limits_0^{2\pi} \left( 1 + \cos 2\varphi \right) d\varphi = \pi.$$

Получаем для $\left\langle x^2 \right\rangle$:

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{1}{\pi a^3} \cdot \frac{3}{4} a^5 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi = a^2.$$

Для нахождения $\left\langle p_x^2 \right\rangle$ воспользуемся следующим приемом. Пусть требуется вычислить среднее значение квадрата некоторого эрмитова оператора $\hat{F}$ в состоянии $\left| \psi \right\rangle$. Путем тождественных преобразований можно получить следующее правило:

$$\left\langle F^2\right\rangle=\int\psi^*\hat F^2\psi dV=\int\psi^*\hat F\left(\hat F\psi\right)dV=\int\left(\hat F\psi\right)\hat{\tilde F}\psi^*dV=\int\left(\hat F\psi\right)\left(\hat{\tilde F}^*\psi\right)^*dV=$$

$$=\int\left(\hat F\psi\right)\left(\hat F^+\psi\right)^*dV=\int\left(\hat F\psi\right)\left(\hat F\psi\right)^*dV=\int\left|\hat F\psi\right|^2dV,$$

то есть выразить это среднее через однократное действие оператора $\hat F$ на волновую функцию. В нашем случае

$$\left\langle p_x^2\right\rangle=\frac{\left|-i\hbar\right|^2}{\pi a^3}\int_0^{+\infty}e^{-\frac{r}{a}}r^2dr\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\left|-\frac{\sin\theta\cos\varphi}{a}e^{-\frac{r}{a}}\right|^2=$$

$$=\frac{\hbar^2}{\pi a^5}\int_0^{+\infty}e^{-\frac{2r}{a}}r^2dr\cdot\int_0^{\pi}\sin^3\theta d\theta\cdot\int_0^{2\pi}\cos^2\varphi d\varphi=\frac{\hbar^2}{\pi a^5}\cdot\left(\frac{a}{2}\right)^3 2!\cdot\frac{4}{3}\cdot\pi=\frac{\hbar^2}{3a^2}.$$

Дисперсия $x$-проекций координаты и импульса:

$$\left\langle\Delta x^2\right\rangle=\left\langle x^2\right\rangle-\left\langle x\right\rangle^2=a^2,\quad\left\langle\Delta p_x^2\right\rangle=\left\langle p_x^2\right\rangle-\left\langle p_x\right\rangle^2=\frac{\hbar^2}{3a^2}.$$

Соотношение неопределенности выполняется:

$$\sqrt{\left\langle\Delta x^2\right\rangle\left\langle\Delta p_x^2\right\rangle}=\frac{\hbar}{\sqrt3}\geq\frac{\hbar}{2}.$$

*Примечание*: есть более быстрый способ решения данной задачи – см. указание к задаче 7.3. ▲

**Задача 2.**

Атом водорода находится в основном состоянии. Найти среднее значение потенциала электрического поля на расстоянии $R$ от ядра атома водорода (потенциал бесконечно удаленной точки полагается равным нулю).

*Решение:*

Электрическое поле в пространстве будут создавать как ядро с зарядом $+e$, так и электрон с зарядом $-e$. Ядро можно считать точечным зарядом, расположенным в начале координат. Заряд электрона «размазан» в пространстве с объемной плотностью $\rho(r)=-e\left|\psi_{100}(r)\right|^2$, равной произведению полного заряда электрона на плотность вероятности его обнаружения в данной точке. Так как волновая функция основного состояния

$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$ сферически симметрична, то плотность заряда будет зависеть только от переменной $r$. Это позволяет нам найти напряженность $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ электрического поля атома с помощью интегральной теоремы Остроградского-Гаусса:

$$\oiint_{S_R} \mathbf{EdS} = 4\pi Q_R = 4\pi \left( e - e \iiint_{V_R} \left| \psi_{100}(r) \right|^2 dV \right), \tag{7.9}$$

где интегрирование слева ведется по сфере $S_R$ радиуса $R$ и центром в начале координат, $Q_R$ – полный заряд, заключенный в сфере, $V_R$ – объем сферы. Из сферической симметрии задачи следует, что $\mathbf{EdS} = EdS$, и $\oiint_{S_R} \mathbf{EdS} = 4\pi R^2 E$. Интеграл по $V_R$ в правой части (7.9) берется два раза по частям, что дает

$$\iiint_{V_R} \left| \psi_{100}(r) \right|^2 dV = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^R e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr \cdot 4\pi = 1 - \left( \frac{2R^2}{a^2} + \frac{2R}{a} + 1 \right) e^{-\frac{2R}{a}}.$$

Находим модуль напряженности электрического поля на расстоянии $R$ от ядра:

$$4\pi R^2 E = 4\pi e \left( \frac{2R^2}{a^2} + \frac{2R}{a} + 1 \right) e^{-\frac{2R}{a}}, \quad E(R) = e \left( \frac{2}{a^2} + \frac{2}{aR} + \frac{1}{R^2} \right) e^{-\frac{2R}{a}}.$$

Потенциал электрического поля связан с напряженностью соотношением

$$\varphi(R) = \int_R^{+\infty} E(r) dr = e \int_R^{+\infty} \left( \frac{2}{a^2} + \frac{2}{ar} + \frac{1}{r^2} \right) e^{-\frac{2r}{a}} dr = e \left( \frac{1}{R} + \frac{1}{a} \right) e^{-\frac{2R}{a}}.$$

Как мы видим, при больших $R$ потенциал убывает приблизительно по экспоненциальному закону $\sim e^{-\frac{2R}{a}}$. Это связано с тем, что поле электрона экранирует поле ядра. На больших расстояниях ($R \gg a$) размерами электронной оболочки атома водорода можно пренебречь, и, так как атом в целом электрически нейтрален, поле стремится к нулю. На малых расстояниях от ядра ($R \ll a$) можно пренебречь полем, создаваемым электронной оболочкой, и $\varphi(R) \approx \frac{e}{R}$. ▲

**Задачи для самостоятельного решения**

7.1. Найти кратность вырождения уровня энергии атома водорода, характеризуемого главным числом $n$. (Напомним, что кратность вырождения уровня энергии – это число ортогональных состояний с данной энергией, см. главу 3).

7.2. Найти $\langle r \rangle$ – среднее значение радиуса орбиты электрона в атоме водорода. Электрон находится в оболочке

а) $1s$; б) $2s$; в) $2p$; г) $3d$.

7.3. Решить задачу 1, сначала вычислив $\langle r^2 \rangle$ и $\langle p^2 \rangle$ в сферических координатах, а после воспользовавшись соотношениями $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle + \langle p_y^2 \rangle + \langle p_z^2 \rangle$ и тем, что для сферически-симметричного основного состояния атома водорода $\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$, $\langle p_x^2 \rangle = \langle p_y^2 \rangle = \langle p_z^2 \rangle$.

7.4. Решить задачу 1, считая, что электрон в атоме водорода находится в оболочке

а) $2s$; б) $2p$.

7.5. Решить задачу 2, считая, что электрон в атоме водорода находится в оболочке $2s$.

7.6. Вычислить плотность электронного тока в состоянии $|nlm\rangle$ атома водорода. Используя выражения классической электродинамики, рассчитать магнитный момент атома в этом состоянии.

7.7.* Найти плотность вероятности $\rho_\psi(\mathbf{p})$ (см. (4.17)) для основного состояния атома водорода.

# ПРИЛОЖЕНИЕ

***Комплексные числа***

Модуль комплексного числа: $|a+ib|=\sqrt{a^2+b^2}$. Заметим, что $(a+ib)(a+ib)^*=|a+ib|^2$. Формула Эйлера: $e^{i\varphi}=\cos\varphi+i\sin\varphi$.

***Сферические координаты***

Выражение декартовых координат $(x,y,z)$ через сферические координаты $(r,\theta,\varphi)$:

$$\begin{cases} x=r\sin\theta\cos\varphi \\ y=r\sin\theta\sin\varphi \\ z=r\cos\theta. \end{cases} \tag{8.1}$$

Приведем выражения градиента и лапласиана некоторой функции, записанные в декартовых и сферических координатах:

$$\nabla f=\mathbf{e}_x\frac{\partial f}{\partial x}+\mathbf{e}_y\frac{\partial f}{\partial y}+\mathbf{e}_z\frac{\partial f}{\partial z}=\mathbf{e}_r\frac{\partial f}{\partial r}+\frac{1}{r}\mathbf{e}_\theta\frac{\partial f}{\partial \theta}+\frac{1}{r\sin\theta}\mathbf{e}_\varphi\frac{\partial f}{\partial \varphi},$$

$$\Delta f=\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}= \tag{8.2}$$

$$=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}.$$

***Цилиндрические координаты***

Выражение декартовых координат $(x,y,z)$ через цилиндрические координаты $(\rho,\varphi,z)$:

$$\begin{cases} x=\rho\cos\varphi \\ y=\rho\sin\varphi \\ z=z. \end{cases} \tag{8.3}$$

***Некоторые определенные интегралы***

$$\int_0^{+\infty}\zeta^{k-1}e^{-\zeta}d\zeta=\Gamma(k), \tag{8.4}$$

где $\Gamma(k)$ – гамма-функция Эйлера. Для натурального значения аргумента $\Gamma(k)=(k-1)!$.

Интеграл Эйлера-Пуассона:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} \,. \tag{8.5}$$

***Сферические функции***

В таблице приведены сферические функции $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ для $l = 0,1,2$. Примечание: в различных источниках сферические функции определяются с разной комплексной фазой. В данном пособии принят выбор фаз, как в книгах [1], [3] – в противоположность выбору, сделанному в [2].

| $l$ | $m$ | $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ |
|---|---|---|
| 0 | 0 | $\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$ |
| 1 | 0 | $i\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$ |
| 1 | $\pm1$ | $\mp i\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot e^{\pm i\varphi}$ |
| 2 | 0 | $\sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\left(1-3\cos^2\theta\right)$ |
| 2 | $\pm1$ | $\pm\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\cdot e^{\pm i\varphi}$ |
| 2 | $\pm2$ | $-\sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\cdot e^{\pm 2i\varphi}$ |

***Радиальные функции атома водорода***

В таблице приведены радиальные функции $R_{nl}\left(r\right)$ для $n=1,2,3$.

| $n$ | $l$ | $R_{nl}\left(r\right)$ |
|---|---|---|
| 1 | 0 | $\frac{2}{\sqrt{a^3}}e^{-\frac{r}{a}}$ |
| 2 | 0 | $\frac{1}{\sqrt{2a^3}}\left(1-\frac{r}{2a}\right)e^{-\frac{r}{2a}}$ |
| 2 | 1 | $\frac{1}{2\sqrt{6a^3}}\frac{r}{a}e^{-\frac{r}{2a}}$ |
| 3 | 0 | $\frac{2}{3\sqrt{3a^3}}\left(1-\frac{2r}{3a}+\frac{2r^2}{27a^2}\right)e^{-\frac{r}{3a}}$ |
| 3 | 1 | $\frac{8}{27\sqrt{6a^3}}\frac{r}{a}\left(1-\frac{r}{6a}\right)e^{-\frac{r}{3a}}$ |
| 3 | 2 | $\frac{4}{81\sqrt{30a^3}}\frac{r^2}{a^2}e^{-\frac{r}{3a}}$ |

# ОТВЕТЫ И УКАЗАНИЯ К ЗАДАЧАМ

1.1. а) 2; б) $2\sqrt{2}$; в) 11; г) 1; д) 1; е) $1/e$.

1.4. $(-1)^n \dfrac{\partial^n}{\partial x^n}$.

1.5. а) $2\sin x + 4x\cos x - x^2 \sin x$ и $\sin x + 3x\cos x - x^2 \sin x$, соответственно;

б) $2e^{2x} + 8xe^{2x} + 4x^2 e^{2x}$ и $e^{2x} + 6xe^{2x} + 4x^2 e^{2x}$, соответственно.

1.6. $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.

1.7. а) да; б) да; в) да; г) нет; д) да, если число $\alpha$ вещественное; е) да; ж) нет.

1.8. Указание: воспользоваться разложением $e^{i\theta\hat{\sigma}}$ в ряд Маклорена.

1.14. $\psi(x)\operatorname{ch} e - \psi(-x)\operatorname{sh} e.$

1.15. а) $\dfrac{\partial}{\partial r}^{+} = -\dfrac{2}{r} - \dfrac{\partial}{\partial r}$, б) $\dfrac{\partial}{\partial \varphi}^{+} = -\dfrac{\partial}{\partial \varphi}$,

в) $\dfrac{\partial}{\partial \theta}^{+} = -\operatorname{ctg}\theta - \dfrac{\partial}{\partial \theta}$, г) $\dfrac{\partial}{\partial \rho}^{+} = -\dfrac{1}{\rho} - \dfrac{\partial}{\partial \rho}$.

Указание: учесть, что в определении транспонирования (1.5) $d\xi$ обозначает элемент объема и включает в себя якобиан перехода от декартовых координат к криволинейным координатам.

1.16.* Если в равенство $\dfrac{\partial^2}{\partial \rho^2}^{+} = \left(\dfrac{\partial}{\partial \rho}^{+}\right)^2$ напрямую подставить результат пункта г) предыдущей задачи, получим

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2}^{+} = \frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2}. \tag{О.1}$$

Этот результат, однако, неточен. Для произвольных волновых функций $\varphi(\rho)$ и $\psi(\rho)$ запишем, опуская для краткости аргумент $\rho$ у волновых функций:

$$\int_0^{+\infty}\rho d\rho\psi\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}^{+}\varphi=\int_0^{+\infty}\rho d\rho\varphi\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\psi=\int_0^{+\infty}\rho\varphi d\frac{\partial\psi}{\partial\rho}=$$

$$=\left(\rho\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right)\Big|_0^{+\infty}-\int_0^{+\infty}d\psi\left(\varphi+\rho\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\right)=$$

$$=\left(\rho\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right)\Big|_0^{+\infty}-\left(\rho\psi\frac{\partial\varphi}{\partial\rho}\right)\Big|_0^{+\infty}-(\varphi\psi)\big|_0^{+\infty}+\int_0^{+\infty}\rho d\rho\psi\left(\frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\right)\varphi. \quad (О.2)$$

Для волновых функций выполняется условие нормировки вида $\int_0^{+\infty}\rho d\rho\left|\psi(\rho)\right|^2=1$, из которого следует $\lim_{\rho\to+\infty}\rho\left|\psi(\rho)\right|^2=0$. Отсюда последняя строчка (О.2) сводится к виду

$$-\varphi(0)\psi(0)+\int_0^{+\infty}\rho d\rho\psi\left(\frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\right)\varphi.$$

Первое слагаемое полученного результата может быть существенно отлично от нуля и определяет отличие правильного ответа от (О.1). Причина неверности выражения (О.1) заключается в том, что при его выводе использовалось равенство $\frac{\partial}{\partial\rho}^{+}=-\frac{1}{\rho}-\frac{\partial}{\partial\rho}$, справедливое в классе нормированных волновых функций, не обращающихся в бесконечность при $\rho=0$, так что $(\rho\varphi\psi)\big|_0^{+\infty}=0$. Но при рассмотрении оператора $\frac{\partial}{\partial\rho}^{+}\cdot\frac{\partial}{\partial\rho}^{+}$ левый операторный сомножитель будет действовать уже на функцию, в общем случае обращающуюся в бесконечность при $\rho=0$ и, следовательно, не принадлежащую классу функций, для которых справедливо равенство $\frac{\partial}{\partial\rho}^{+}=-\frac{1}{\rho}-\frac{\partial}{\partial\rho}$.

Попробуйте самостоятельно провести подобное рассмотрение для операторов $\frac{\partial^2}{\partial r^2}^{+}$ и $\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}^{+}$.

1.17.* Для произвольной волновой функции $\varphi(\xi)$ выполняется $\int d\xi\varphi\hat{F}^n\psi = 0$ (опустим для краткости аргументы у волновых функций). Преобразуем интеграл в данном равенстве:

$$\int d\xi\varphi\hat{F}^n\psi = \int d\xi\varphi\hat{F}\left(\hat{F}^{n-1}\psi\right) = \int d\xi\left(\hat{F}^{n-1}\psi\right)\tilde{\hat{F}}\varphi = \int d\xi\left(\hat{F}^{n-1}\psi\right)\left(\hat{F}\varphi^*\right)^* = 0.$$

Применим теперь полученное равенство для волновой функции $\varphi(\xi)$, равной $\left(\hat{F}^{n-2}\psi(\xi)\right)^*$:

$$\int d\xi\left(\hat{F}^{n-1}\psi\right)\left(\hat{F}\hat{F}^{n-2}\psi\right)^* = \int d\xi\left|\hat{F}^{n-1}\psi\right|^2 = 0.$$

Отсюда следует $\hat{F}^{n-1}\psi(\xi) = 0$. Для $n > 2$ будем и дальше понижать степень оператора в данном равенстве, повторяя рассуждения; в итоге получим искомый результат $\hat{F}\psi(\xi) = 0$.

2.2. 1.

2.3. $-i\hbar\dfrac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}$.

2.4. $i\hbar e_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\gamma$ ($e_{\alpha\beta\gamma}$ – тензор Леви-Чивиты).

2.5. $i\hbar e_{\alpha\beta\gamma}\hat{p}_\gamma$ ($e_{\alpha\beta\gamma}$ – тензор Леви-Чивиты).

2.8. $\hat{l}_+ = e^{i\varphi}\left(\dfrac{\partial}{\partial\theta} + ictg\theta\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)$, $\hat{l}_- = e^{-i\varphi}\left(-\dfrac{\partial}{\partial\theta} + ictg\theta\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)$.

2.10. Указание: рассмотреть оператор $\hat{f}(\lambda) = \mathrm{e}^{\lambda\hat{G}}\,\hat{F}\,\mathrm{e}^{-\lambda\hat{G}}$, где $\lambda$ – численный параметр. Рассмотреть разложение $\hat{f}(\lambda)$ в ряд Маклорена по $\lambda$, учитывая (2.23), и вычислить таким образом значение $\hat{f}(1)$.

2.11. Указание: воспользоваться результатом предыдущей задачи.

2.12. а) нет; б) да.

2.15.* Рассмотрим оператор $\hat{f}(\lambda) = \mathrm{e}^{\lambda\hat{G}}\,\mathrm{e}^{\lambda\hat{F}}$, где $\lambda$ – численный параметр. Используя результат задачи 2.10, можно записать

$$\frac{d\hat{f}(\lambda)}{d\lambda} = \left(\hat{G} + \mathrm{e}^{\lambda\hat{G}}\,\hat{F}\,\mathrm{e}^{-\lambda\hat{G}}\right)\hat{f}(\lambda) = \left(\hat{G} + \hat{F} + \left[\hat{G},\hat{F}\right]\lambda\right)\hat{f}(\lambda).$$

Учитывая, что $\hat{f}(0) = \hat{E}$ – тождественный оператор, запишем решение данного дифференциального уравнения: $\hat{f}(\lambda) = \mathrm{e}^{\left(\hat{G}+\hat{F}\right)\lambda}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\left[\hat{G},\hat{F}\right]\lambda^2}$. Полагая $\lambda = 1$, придем к тождеству Вейля.

3.1. б) Собственные функции: $\psi_\lambda(x) = C\exp\left(-\dfrac{\lambda}{\alpha}\exp(-i\alpha x)\right)$, где собственное значение $\lambda$ – любое комплексное число.

в) Собственные функции: $\psi_\lambda(x) = C\exp\left(a\lambda x - \dfrac{ax^2}{2}\right)$, где собственное значение $\lambda$ – любое комплексное число.

г) Собственные значения $\lambda_k = i\,\mathrm{sh}(k)$, собственные функции $\psi_k(x) = C\exp(ikx)$, где $k$ – любое вещественное число. *Указание*: искать решение с помощью подстановки $\psi(x) = C\exp(\gamma x)$; предварительно доказать на основании определения функции от оператора (1.18) следующее свойство: если $\hat{F}\psi(\xi) = \lambda\psi(\xi)$, то $f\left(\hat{F}\right)\psi(\xi) = f(\lambda)\psi(\xi)$, где $f\left(\hat{F}\right)$ – некоторая функция от оператора. *Альтернативное решение*: заметить, что $\sin\left(\dfrac{\partial}{\partial x}\right) = i\,\mathrm{sh}\dfrac{\hat{p}_x}{\hbar}$.

д) Собственные функции: $\psi_m(\varphi) = C\exp(im\varphi)$, собственные значения $\lambda_m = \cos m$, где $m$ – произвольное целое число.

е) Собственные функции: $\psi_\lambda(x) = C\dfrac{\sin\left(\sqrt{-\lambda}x\right)}{x}$, где собственные значения $\lambda$ – отрицательные вещественные числа. Указание: искать решение в виде $\psi_\lambda(x) = \dfrac{\chi_\lambda(x)}{x}$, затем потребовать конечность предела $\lim\limits_{x\to 0}\psi_\lambda(x)$.

3.2. Да, является; ей соответствует собственное значение $-1$. Указание: перейти к цилиндрическим или сферическим координатам.

3.3. Да, если $\lambda$ – невырожденное собственное значение оператора $\hat{A}$. Если же $\lambda$ – вырожденное собственное значение оператора $\hat{A}$, то однозначный ответ дать нельзя.

3.4. Однозначный ответ дать нельзя: может как являться, так и не являться. Теорема о коммутирующих операторах не запрещает некоммутирующим операторам иметь отдельные общие собственные функции. Однако совокупность таких функций не может образовывать базис в пространстве волновых функций.

3.5. Переходя к цилиндрическим координатам, получим ответ, объединяя (3.13) и (3.18):

$$\psi_{m,p}(\rho,\varphi,z) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}pz\right)\exp(im\varphi)f(\rho),$$

где $f(\rho)$ – любая функция, удовлетворяющая общим требованиям для волновых функций (нормировочный множитель здесь включен в $f(\rho)$).

3.6. Собственные значения: $\lambda=\sqrt{2}$ и $\lambda=-\sqrt{2}$. Собственные функции: $\psi_{\lambda=\sqrt{2}}(\xi)=\frac{1-i}{2}\psi_1(\xi)+\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2(\xi)$ и $\psi_{\lambda=-\sqrt{2}}(\xi)=\frac{1-i}{2}\psi_1(\xi)-\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2(\xi)$, или в матричном формализме, соответственно, $\left|\psi_{\lambda=\sqrt{2}}\right\rangle=\begin{pmatrix}\frac{1-i}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$ и $\left|\psi_{\lambda=-\sqrt{2}}\right\rangle=\begin{pmatrix}\frac{1-i}{2}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$. *Замечание*: следует помнить, что векторы состояния (и волновые функции) определяются в квантовой механике с точностью до фазового множителя, и, в частности, с точностью до знака. Например, можно было получить $\left|\psi_{\lambda=\sqrt{2}}\right\rangle$ в виде такого столбца: $\begin{pmatrix} \dfrac{i-1}{2} \\ -\dfrac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$.

3.7. а) В базисе $\left\{Y_{11}(\theta,\varphi), Y_{10}(\theta,\varphi), Y_{1-1}(\theta,\varphi)\right\}$ матрицы операторов $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$ имеют соответственно вид $\begin{pmatrix} 0 & \dfrac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \dfrac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 & -\dfrac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \dfrac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\dfrac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \dfrac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$.

3.8. $\langle lm|\hat{l}_x|lm\rangle = \langle lm|\hat{l}_y|lm\rangle = 0, \quad \langle lm|\hat{l}_z|lm\rangle = m$,

$$\langle lm|\hat{l}_x^2|lm\rangle = \langle lm|\hat{l}_y^2|lm\rangle = \frac{l(l+1)-m^2}{2}, \quad \langle lm|\hat{l}_z^2|lm\rangle = m^2.$$

3.9. *Замечание*: подчеркнем, что полученный результат означает, что для оператора $\hat{F}$, удовлетворяющего условию задачи, степень $\hat{F}^n$ линейно выражается через операторы $\hat{E}$, $\hat{F} \ldots \hat{F}^{n-1}$.

3.10. $\lambda\mu = 0$. В качестве примера рассмотрим операторы импульса $\hat{p}_x$ и инверсии $\hat{I}$. Они антикоммутируют, а в задаче 6 было показано, что собственные значения оператора инверсии $\hat{I}$ – числа +1 и −1 (см. (3.26)). Из полученного в настоящей задаче результата следует, что общая собственная функция операторов $\hat{p}_x$ и $\hat{I}$ должна быть собственной функцией $\hat{p}_x$ с собственным значением 0. Действительно, из волновых функций (3.14) только функция с $p = 0$ является собственной функцией оператора инверсии. Проведите самостоятельно подобное рассмотрение для операторов $\hat{x}$ и $\hat{I}$.

3.11. Легко показать, что собственная функция оператора $\hat{C}$, отвечающая невырожденному собственному значению, является также собственной функцией операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Если бы у $\hat{C}$ были только невырожденные

собстсвенные значения, такие волновые функции образовывали бы полный базис в пространстве волновых функций, что означало бы, что операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют (см. пункт «Одновременно измеримые величины»)
*Замечание*: в некоторых учебниках (например, [1]) ошибочно утверждается, что вообще все собственные значения $\hat{C}$ должны быть в таком случае вырожденными, иначе операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют какие-то общие собственные функции, что якобы невозможно. Однако некоммутирующие операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ могут иметь отдельные общие волновые функции (см. задачу 3.4).

3.12. Нужно заметить, что указанный оператор – линейный, но неэрмитов. Решая уравнение $\hat{F}\psi_\lambda(x) = \lambda\psi_\lambda(x)$, получим «собственные функции» вида $\psi_\lambda(x) = C\exp\left(\lambda x + \dfrac{x^2}{2}\right)$, при любом значении $\lambda$ бесконечно растущие по модулю при $x \to \pm\infty$. Таким образом, указанный оператор не имеет физически значимых собственных волновых функций.

4.2. Оба средних значения равны нулю.

4.3. Указание: см. решение задачи 1 главы 7.

4.4. $\langle l_x \rangle_\psi = 0$, $\langle l_y \rangle_\psi = 0$, $\langle l_z \rangle_\psi = m$. Рассмотрим, например, $\langle l_x \rangle_\psi = \int\limits_0^{+\infty} r^2 dr \int\limits_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi\, f^*(r,\theta)\exp(-im\varphi)\, \hat{l}_x f(r,\theta)\exp(im\varphi)$. Подставляя $\hat{l}_x$ в сферических координатах из (2.16), получим

$$\langle l_x \rangle_\psi = \int\limits_0^{+\infty} r^2 dr \int\limits_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int\limits_0^{2\pi} d\varphi\, f^*(r,\theta)\, i\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\cos\varphi\, im\right) f(r,\theta),$$

что равно нулю за счет интегралов по углу $\varphi$ от $\sin\varphi$ и $\cos\varphi$.

Рассмотрим еще один способ решения, основанный на коммутационном соотношении $\left[\hat{l}_y, \hat{l}_z\right] = i\hat{l}_x$ (2.12) и свойстве (3.35) матричных элементов эрмитова оператора:

$$\langle l_x\rangle_\psi=\langle\psi|\hat{l}_x|\psi\rangle=-i\left(\langle\psi|\hat{l}_y\hat{l}_z|\psi\rangle-\langle\psi|\hat{l}_z\hat{l}_y|\psi\rangle\right)=-i\left(\langle\psi|\hat{l}_y m|\psi\rangle-\left\langle\psi\middle|\hat{l}_z\middle|\hat{l}_y\psi\right\rangle\right)=$$

$$=-i\left(m\langle\psi|\hat{l}_y|\psi\rangle-\left\langle\hat{l}_y\psi\middle|\hat{l}_z\middle|\psi\right\rangle^*\right)=-i\left(m\langle\psi|\hat{l}_y|\psi\rangle-\left\langle\hat{l}_y\psi\middle|m\psi\right\rangle^*\right)=$$

$$=-i\left(m\langle\psi|\hat{l}_y|\psi\rangle-m\langle\psi|\hat{l}_y|\psi\rangle\right)=0.$$

Примечательно, что в данном способе решения не потребовалось представлять матричный элемент в виде интеграла по каким-либо переменным.

4.5. $P_\psi(l_z=1)=P_\psi(l_z=-1)=\dfrac{9}{20}$, $P_\psi(l_z=3)=P_\psi(l_z=-3)=\dfrac{1}{20}$, $\langle l_z\rangle_\psi=0$, $\left\langle l_z^2\right\rangle_\psi=\dfrac{9}{5}$.

4.6. $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=12\right)=\dfrac{8}{15}$, $P_\psi(l_z=1)=\dfrac{1}{2}$.

4.7. $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=2\right)=\dfrac{1}{2}$, $P_\psi\left(\mathbf{l}^2=6\right)=\dfrac{1}{2}$, $\left\langle\mathbf{l}^2\right\rangle_\psi=4$.

4.9. $j_x(x)=|A|^2\dfrac{\hbar k}{m}\exp\left(-\dfrac{2x^2}{a^2}\right)$.

5.5. $\psi(x,t)=(2\pi\hbar)^{-1/2}\,e^{\frac{i}{\hbar}\left(px-\frac{p^2}{2m}t\right)}$.

5.6. $\psi(x,t)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1t}+\psi_2(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2t}\right)$. Пользуясь определением среднего значения физической величины (4.1), получаем $\langle E\rangle(t)=\langle\psi(x,t)|\hat{H}|\psi(x,t)\rangle=\dfrac{1}{2}(E_1+E_2)$.

5.7. $2iA=\sqrt{2/a}$.

5.8. а) $\rho_{\psi_1}(p_x=p)=\dfrac{2a}{\pi^3\hbar}\left(1+\cos\dfrac{pa}{\hbar}\right)\dfrac{1}{\left(1-\left(\dfrac{pa}{\pi\hbar}\right)^2\right)^2}$;

б) $\rho_{\psi_2}\left(p_x = p\right) = \dfrac{a}{2\pi^3\hbar}\left(1-\cos\dfrac{pa}{\hbar}\right)\dfrac{1}{\left(1-\left(\dfrac{pa}{2\pi\hbar}\right)^2\right)^2}$.

5.9. $P_\psi\left(E = E_1\right) = \dfrac{96}{\pi^4}$.

5.10. Волновая функция частицы $\psi\left(x\right) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x \le 0, \\ Ce^{i\lambda x}, & x > 0, \end{cases}$ где $k = \sqrt{2mE}\big/\hbar$, $\lambda = \sqrt{2m\left(E-U_0\right)}\big/\hbar$ (рис. 5.3). Коэффициенты $B = \dfrac{k-\lambda}{k+\lambda}A$ и $C = \dfrac{2k}{k+\lambda}A$ находятся из условия непрерывности волновой функции и ее производной в точке $x = 0$ (см. замечание к задаче 2). $R = \left(\dfrac{k-\lambda}{k+\lambda}\right)^2$, $D = \dfrac{4k\lambda}{\left(k+\lambda\right)^2}$. Очевидно, что $R + D = 1$. Таким образом, в отличие от классической механики, есть ненулевая вероятность отражения частицы от барьера, несмотря на то, что энергия частицы больше высоты барьера.

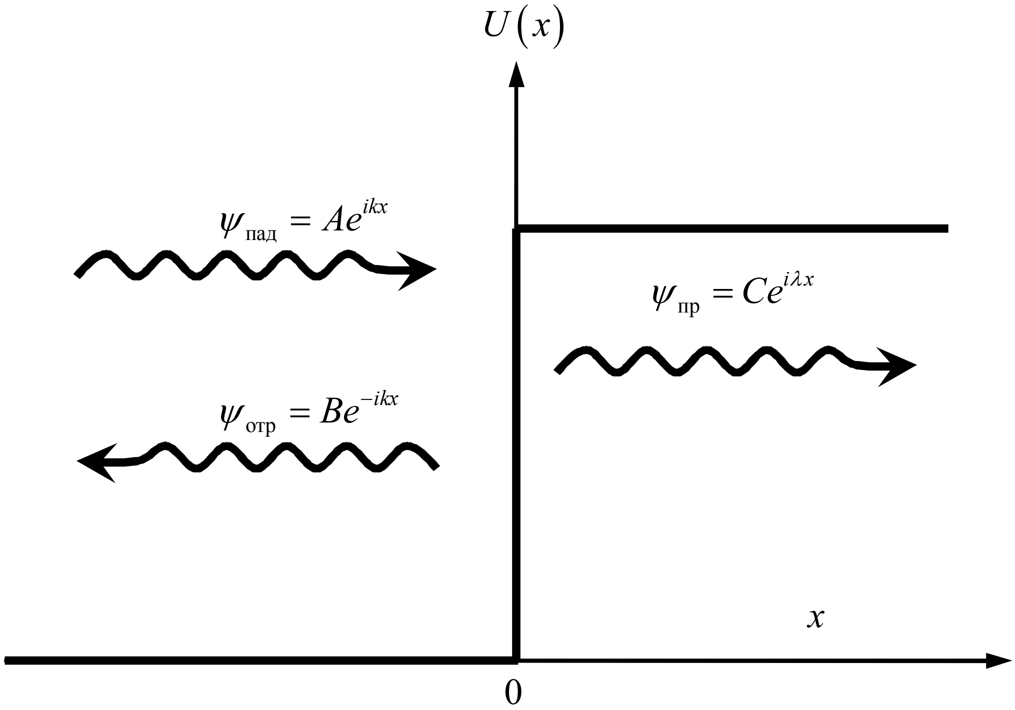


Рис. 5.3. Потенциальная «ступенька». Схематически показаны падающая ($Ae^{ikx}$), отраженная ($Be^{-ikx}$) и проходящая ($Ce^{i\lambda x}$) волна

5.11. Отличие от предыдущей задачи в том, что энергия частицы $E$ оказывается меньше высоты барьера $U_0$. Волновое число в области за барьером становится мнимым: $\lambda = \sqrt{2m(E-U_0)}\big/\hbar = \pm i\sqrt{2m(U_0-E)}\big/\hbar = \pm i|\lambda|$. Мы должны отбросить решение со знаком «–», так как оно соответствует не имеющему физического смысла неограниченному росту волновой функции $\psi_{\text{пр}} = Ce^{|\lambda|x}$ при $x \to +\infty$. Знак «+» соответствует волне $\psi_{\text{пр}} = Ce^{-|\lambda|x}$, затухающей на характерном расстоянии $\delta = 1/\lambda$ справа от барьера. Таким образом, в отличие от классической механики, существует вероятность обнаружить частицу справа от барьера; в классическом пределе $(\hbar \to 0)$ глубина подбарьерного прохождения $\delta = 0$. Далее, находим $j_{\text{пр}} = 0$, $D = 0$, и, следовательно, $R = 1$.

5.12. $D = \left|\dfrac{C}{A_1}\right|^2 = \dfrac{4E(E-U_0)}{4E(E-U_0) + U_0^2 \sin^2\left(\sqrt{2m(E-U_0)}a\big/\hbar\right)}$ (см. рис. 5.4).

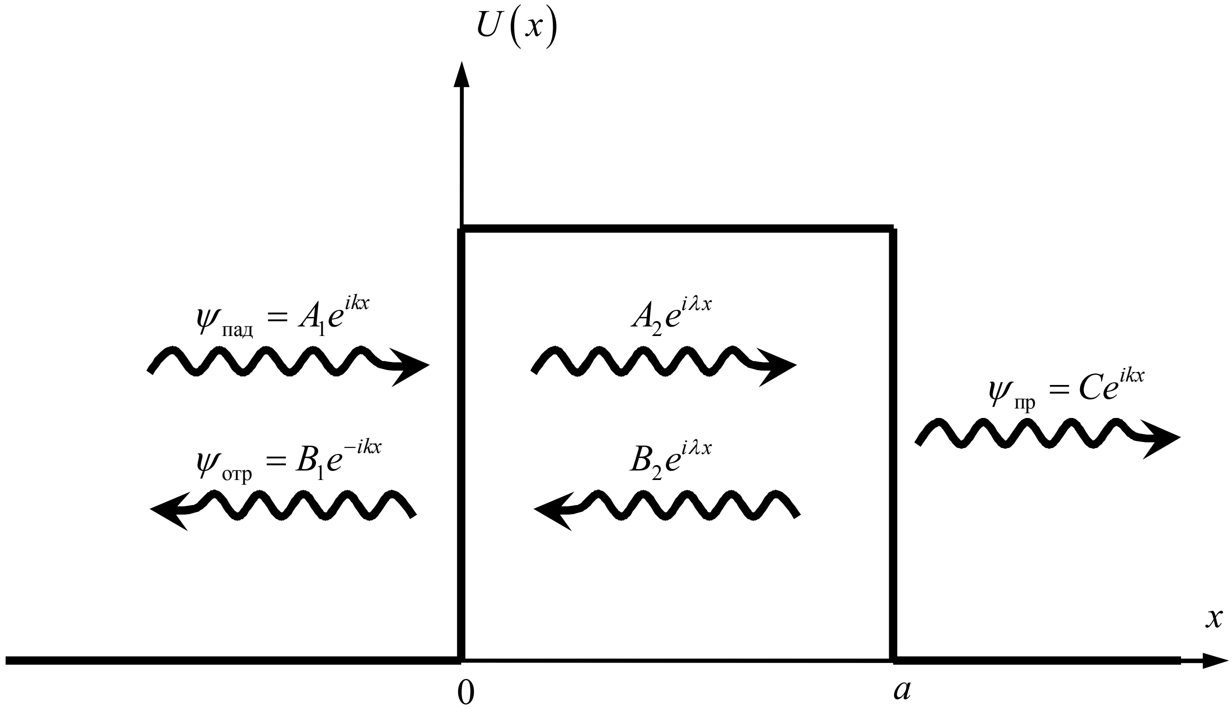


Рис. 5.4. Прямоугольная потенциальная яма

5.13. $D = \dfrac{4E\left(U_0 - E\right)}{4E\left(U_0 - E\right) + U_0^2 \operatorname{sh}^2\left(\sqrt{2m\left(U_0 - E\right)}a/\hbar\right)}$. Таким образом, в отличие от классической механики, возможен туннельный эффект – прохождение через потенциальный барьер конечной ширины частицы с энергией, меньшей высоты барьера.

5.14.* Пользуясь правилом вычисления матричного элемента произведения операторов (3.37), запишем указанное среднее (опустим аргумент у волновых функций):

$$\left\langle \psi_k \left| \left[ \hat{x}, \left[ \hat{H}, \hat{x} \right] \right] \right| \psi_k \right\rangle = \left\langle \psi_k \left| 2\hat{x}\hat{H}\hat{x} - \hat{x}^2 \hat{H} - \hat{H}\hat{x}^2 \right| \psi_k \right\rangle =$$

$$= 2\sum_n \left\langle \psi_k \left| x \right| \psi_n \right\rangle E_n \left\langle \psi_n \left| x \right| \psi_k \right\rangle - 2\sum_n \left\langle \psi_k \left| x \right| \psi_n \right\rangle \left\langle \psi_n \left| x \right| \psi_k \right\rangle E_k.$$

Учитывая теперь, что для гамильтониана (5.4) коммутатор $\left[ \hat{x}, \left[ \hat{H}, \hat{x} \right] \right]$ равен постоянной $\dfrac{\hbar^2}{m}$, получим требуемое равенство.

6.2. Непосредственная подстановка $\psi_0(\xi) = Ae^{-\beta\xi^2}$ в уравнение (6.5) и приравнивание нулю коэффициентов при функциях $e^{-\beta\xi^2}$ и $\xi^2 e^{-\beta\xi^2}$ так, чтобы уравнение удовлетворялось тождественно, дают $\beta = 1/2$ и $\varepsilon_0 = 1$.

6.3. $\langle\psi|\psi\rangle = 2|C|^2 = 1$, откуда $C = \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2}}$. Вычисление интеграла $\langle x\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}|C|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi\left(\psi_n + i\psi_{n+1}\right)^* \cdot \xi\left(\psi_n + i\psi_{n+1}\right)$ дает $\langle x\rangle = 0$. Аналогичным образом получается $\langle p_x\rangle = 0$.

6.4. $\langle x^4\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2\left(6n^2 + 6n + 3\right)$, $\langle p_x^4\rangle = \left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^2\left(6n^2 + 6n + 3\right)$.

6.6. 1.

6.9. Потенциал осциллятора в поле силы $F = \text{const}$: $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} - F \cdot x$. Выделить полный квадрат по координате $x$, после чего перейти к новой переменной $\tilde{x} = x - \frac{F}{m\omega^2}$. Собственные функции совпадают с функциями линейного осциллятора со смещенным центром равновесия: $\psi_n(\tilde{x}) = \psi_n\left(x - \frac{F}{m\omega^2}\right)$. Уровни энергии сдвинуты относительно уровней осциллятора на величину $-\frac{F^2}{2m\omega^2}$: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{F^2}{2m\omega^2}$, $n = 0, 1, 2, \ldots$

6.10. При выполнении хотя бы одного из следующих условий:

а) $k < |n - m|$,

б) $n + k + m$ – нечетное число.

7.1. $\sum\limits_{l=0}^{n-1}(2l + 1) = n^2$.

7.2. а) $\frac{3}{2}a$; б) $6a$; в) $5a$; г) $\frac{21}{2}a$.

7.3. Воспользовавшись указанием, имеем:

$$\left\langle x^2\right\rangle = \frac{1}{3}\left\langle r^2\right\rangle = \frac{1}{3\pi a^3}\int_0^{+\infty} r^4 e^{-\frac{2r}{a}}dr\cdot 4\pi = a^2,$$

$$\left\langle p_x^2\right\rangle = \frac{1}{3}\left\langle p^2\right\rangle = -\frac{\hbar^2}{3\pi a^3}\int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{r}{a}}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}e^{-\frac{r}{a}}\right)dr\cdot 4\pi = \frac{\hbar^2}{3a^2},$$

после чего получаем результат задачи 1.

7.5. $\varphi(R) = e\left(\frac{1}{R}+\frac{3}{4a}+\frac{R}{4a^2}+\frac{R^2}{8a^3}\right)e^{-\frac{R}{a}}$.

7.6. Плотность электронного тока в атоме находится как произведение заряда электрона на плотность потока вероятности (4.19): $\mathbf{j}_{nlm} = -\frac{ie\hbar}{2m_e}\left(\psi_{nlm}\cdot\nabla\psi_{nlm}^* - \psi_{nlm}^*\cdot\nabla\psi_{nlm}\right)$, где $m_e$ – заряд электрона. Используя выражение для оператора $\nabla$ в сферических координатах (см. Приложение, (8.2)), мы получим $\mathbf{j}_{nlm} = -\frac{me\hbar}{m_e r\sin\theta}\mathbf{e}_\varphi$. Магнитный момент атома (без учета спина электрона) оказывается равным $\mathbf{M}_{nlm} = \frac{1}{2c}\iiint_\infty\left[\mathbf{r},\mathbf{j}_{nlm}\right]dV = -m\mu_B\mathbf{e}_z$, где $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ – магнетон Бора.

7.7.* $\rho_\psi(\mathbf{p}) = \frac{8\hbar^5}{\pi^2 a^5}\left(p^2+\frac{\hbar^2}{a^2}\right)^{-4}$.

# ЛИТЕРАТУРА


1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика, т. 3, Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2008. 800 с.
2. Кочелаев Б.И. Квантовая теория: конспект лекций. Казань: Казанский ун-т, 2013. 222 с.
3. Колоскова Н.Г., Ларионов А.Л., Царевский С.Л. Учебные задания по квантовой механике. Казань: Казанский ун-т, 1990. 38 с.
4. Колоскова Н.Г., Ларионов А.Л., Царевский С.Л. Методические указания по квантовой механике. Казань: Казанский ун-т, 1990. 40 с.
5. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: ГИФМЛ, 1963.
6. Борисёнок С.В., Кондратьев А.С. Квантовая статистическая механика. М.: Физматлит, 2011. 136 с.
7. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. СПб.: Лань, 2004. 672 с.
8. Флюгге З. Задачи по квантовой механике, т. 1. М.: ЛКИ, 2008. 344 с.
9. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике, т. 2. М.: ЛКИ, 2008. 320 с.
10. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1992. 880 с.
11. Друкарев Г.Ф. Квантовая механика. Л.: ЛГУ, 1988. 200 с.
12. Боум А. Квантовая механика: основы и приложения. М.: Мир, 1990. 720 с.
13. Кемпфер Ф. Основные положения квантовой механики. М.: Мир, 1967. 392 с.
14. Фон Нейман Дж. Математические основы квантовой механики. М.: Наука, 1964. 366 с.

*Учебное издание*

**Соловьев** Олег Валерьевич
**Байбеков** Эдуард Ильдарович
**Белов** Сергей Иванович

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ
(ПРАКТИЧЕСКИЙ КУРС)

Задачник для физиков

Часть I