ДОНСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

УПРАВЛЕНИЕ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ И ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ

Кафедра «Физика»

Учебное пособие

к решению задач
по дисциплине

«Квантовая механика»

Авторы
Благин А. В.,
Попова И. Г.

Ростов-на-Дону, 2018

Аннотация

Пособие предназначено для обучающихся направлений, связанных с электроникой и нанотехнологиями.

Изложенные в пособии материалы могут служить методической основой изучения раздела «Основы квантовой механики» курса физики, изучаемого студентами всех технических направлений и курсов «Физика. Спецглавы».

Авторы

д.ф.-м.н., профессор кафедры «Физика»
Благин А.В.
ст. преподаватель кафедры «Физика»
Попова И.Г.

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ

Квантовой механикой называется теория, исследующая движение микрочастиц, и других квантовых объектов (атомов, молекул, систем микрочастиц, например, кристаллов и т.д.).

Согласно квантовой механике состояние микрочастиц и других квантовых объектов полностью описывается волновой функцией. Описание состояния микрообъекта с помощью волновой функции носит статистический характер, т.к. при этом делается возможным вычисление лишь вероятности того или иного значения физической величины микрообъекта. В этом состоит основная особенность квантовой механики.

Вторая особенность микромира и, таким образом, квантовой механики состоит в дискретности для определенных микрообъектов ряда физических величин – энергии, импульса и т.д. Важную роль в изучении микромира играет постоянная Планка

h= 6,62.10-34 Дж·с – так называемый квант действия.

С помощью постоянной Планка определяются значения основных дискретных величин в микромире: в формулы, выражающие значения этих величин обязательно входит постоянная h.

Квантовая механика содержит в себе классическую механику в качестве предельного случая, соответствующего h → 0.

Движение микрочастиц нельзя представить себе, как движение по какой-то определенной траектории. Это вытекает, например, из опытов по дифракции электронов. А это значит, что и понятие скорости нельзя определить так, как это мы делаем для обычных частиц. Можно лишь утверждать, что в той или иной точке пространства частица может находиться с некоторой вероятностью.

Вероятность нахождения микрочастицы в элементе объема в окрестности данной точки равна

$$dW = |\psi|^2\, dV = \psi\psi^*\, dV,$$

(1)

где V – волновая функция микрочастицы. Из (1) следует, что квадрат модуля волновой функции есть плотность вероятности распределения частицы в

пространстве,

$$\frac{dW}{dV} = |\psi|^2.$$

Здесь ψ^* означает функцию, комплексно-сопряженную по отношению к ψ.

Запись $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ вместо ψ^2 применяется потому, что ψ может быть комплексной величиной, и тогда ψ^2 также будет комплексной. Но вероятность есть действительная положительная величина.

Поскольку вероятность того, что частица находится где-то в пространстве равна единице, ψ - функция, квадрат модуля которой выражает плотность вероятности, должна быть нормирована на единицу.

$$\int \psi\psi^* \, dV = 1.$$

(2)

Здесь интегрирование производится по всему пространству. Т.к. $\psi = \psi(x, y, z, t)$, то условие нормировки должно выполнятся для любого момента времени.

Функция $\psi(x, y, z, t)$ называется волновой, так как позволяет описывать волновые свойства микрочастиц. Волновая функция яволяется решение дифференциального уравнения (уравнения Шредингера), являющегося аналогом основного закона динамики в классической теории.

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

В большинстве задач квантовой механики основная проблема сводится к нахождению решений уравнения Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi, \qquad (3)$$

где $\hbar = h / 2\pi$ = 1,05·1034 Дж·с. Часто постоянную $\hbar$ называют, как и h, постоянной Планка; $\partial\psi / \partial t$ – производная волновой функции и по времени;

$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа; U=U(x, y, z) – потенциальная энергия частицы; m - масса частицы.

Условия, налагаемые на функцию ψ

Для того, чтобы решение уравнения, Шредингера имело смысл, необходимо, чтобы волновая функция ψ удовлетворяла следующим условиям:

1) Однозначность: ψ должна быть однозначной функцией координат и времени, в противном случае мы получим, что для одной и той же точки с радиусом-вектором r имеются две или более вероятности, что лишено всякого физического смысла.

2) Конечность: чтобы вероятность была конечной (с учетом нормировки) необходимо, чтобы ψ была всюду конечной и вместе со своими первыми производными обращалась в 0 на бесконечности.

3) Непрерывность: состояние квантовой системы в пространстве и времени должно меняться непрерывно (в отличие от самих физических величин). А это значит, что ψ и её производные должны быть непрерывными.

Среднее значение координаты и функции от координаты

Если известна вероятность того или иного значения координаты (например, для x в интервале (x, x+dx) W(x)= ψ*(x) ψ(x)dx), то ее среднее значение определяется следующим образом:

$$\langle x\rangle = \int W(x)x\,dx = \int \psi^*(x)\psi(x)x\,dx \quad * \qquad (4)$$

Пусть задана произвольная функция координаты F(x). Вероятность того, что координата частицы находится в малом интервале dx вокруг точки x1 равна ψ*(x1) ψ(x1)dx. Тогда среднее значение функции F(x) равно

$$\langle F \rangle = \int W(x)F(x)\,dx = \int \psi^*(x)\psi(x)F(x)\,dx \qquad (5)$$

---

*) Здесь и далее интегрирование ведётся по всей области существования переменной интегрирования, если пределы интегрирования не указаны. Под параметром интегрирования x следует понимать совокупность координат квантовой системы.

ОПЕРАТОРЫ

В квантовой механике важную роль играют операторы. Оператор есть символическая запись тех действий, которые необходимо проделать над произвольной функцией для получения некоторой другой функции.

Понятие оператора, таким образом, есть обобщение понятия функции, т.е. закона, по которому одной величине (x) ставится в соответствие другая величина (y): y = f(x).

Операторы обозначаются следующим образом: $\hat{F}, \hat{L}, \hat{M} \ldots$. Тогда

$$\hat{F}f = g; g(x) = \hat{F}f(x) \qquad (6)$$

Примеры операторов

1) Оператор дифференцирования: $\hat{F} = \frac{d}{dx}$; $g(x) = \hat{F}f(x) = \frac{df}{dx}$.

2) Оператор интегрирования: $\hat{F} = \int \ldots dx$ $g(x) = \hat{F}f(x) = \int f\,dx$.

3) Оператор возведения в степень: $\hat{F} = (\ldots)^*; g(x) = \hat{F}f(x) = (f)^* = f^*$.

4) Оператор инверсии: $\hat{F} = -(\ldots)$. $g(x) = \hat{F}f(x) = -f$.

Оператор называется линейным, если он удовлетворяет условию:

$$\hat{F} = [af(x) + bg(x)] = \hat{F}[af(x)] + \hat{F}[bg(x)] = a\hat{F}f(x) + b\hat{F}g(x) \qquad (7)$$

Умножение операторов

Оператор $\hat{C}$ будет называться произведением операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ если

$$\hat{C} = \hat{A}\hat{B} \text{ если } \hat{C}f = \hat{A}f\left(\widehat{Bf}\right). \qquad (10)$$

Произведение операторов зависит от порядка сомножителей. Введем оператор $\hat{C}' = \hat{A}\hat{B}$. Если $\hat{C}' = \hat{C}$, то операторы называются коммутирующими или перестановочными. Для коммутирующ операторов величина

$$[\hat{A},\hat{B}] = (\hat{A}\hat{B}) - (\hat{B}\hat{A}) = \hat{C} - \hat{C}'. \qquad (11)$$

Соответственно, если $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$, операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называются некоммутирующими.

Оператор, обратный данному

Оператор $\hat{F}^{-1}$ называется обратным к оператору $\hat{F}$, если

$$g = \hat{F} f,\ \text{а}\ \hat{F}^{-1} g = f. \qquad (12)$$

Очевидно, что $\hat{F}^{-1}\hat{F} = \hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{I}$.

Оператор, комплексно сопряженный данному

Такой оператор $\hat{F}^{*}$ получается из данного оператора $\hat{F}$ заменой всех знаков перед мнимой единицей на противоположные.

Возведение оператора в степень

По определению, $\hat{F}^{*} = \underbrace{\hat{F}\cdot\hat{F}\cdot\hat{F}\cdot\ldots\hat{F}}_{n\ \text{раз}}$. (13)

Следовательно, можно определить произвольную функцию от оператора.

Обоснованием этого является возможность разложить данную функцию в ряд Тейлора с заменой переменной на степень оператора, например,

$$exp(\hat{F}) = \{1 + \hat{F} + \frac{1}{2}\hat{F}^2 + \ldots\}$$

Собственные функции и собственные значения операторов

Собственными функциями оператора $\hat{F}$ называют такие функции f, которые удовлетворяют уравнению

$$\hat{F} f = \lambda f, \qquad (14)$$

где λ –постоянная величина (может быть, как комплексной, так и действительной).

Число λ называется в этом случае собственным значением оператора $\hat{F}$.

Собственным значениям λ_1, λ_2, … будут соответствовать собственные

функции f1' f2' f3'…: $\hat{\hat{F}} f_i = \lambda_i f_i$. Одному собственному значению может соответствовать несколько собственных функций (случай вырождения).

Набор собственных значений λ_i оператора $\hat{F}$ называется его спектром.

Понятие эрмитова оператора

Самосопряженным, или эрмитовым, называется оператор $\hat{F}$, удовлетворяющий условию

$$\int g^*(x)\hat{F}f(x)\,dx = \int f(x)\hat{F}^*g^*(x)\,dx. \qquad (15)$$

Таким образом, операция самосопряжения сводится к перестановке местами функций f и g* и замене $\hat{F}$ на $\hat{F}^*$.

В квантовой механике показывают, что собственные значения эрмитовых операторов всегда вещественные.

Ортонормированные функции

Функции $g(x)$ и $f(x)$ называются ортогональными, если

$$\int g^*(x)f(x)\,dx = \int f^*(x)g(x)\,dx = 0. \qquad (16)$$

Различные собственные функции оператора всегда ортогональны.

Если собственные значения оператора изменяются непрерывно, то собственные функции зависят параметрически от собственных значений так, что их записывают в виде

$$\psi(x,\lambda) \text{ или } \psi_1(x).$$

(17)

И в этом случае собственные функции нормируются к так называемой δ-функции, которая определяется ниже:

$$\int \psi_\lambda^*(x)\psi_\lambda(x)\,dx = \delta(\lambda' - \lambda) = \begin{cases} \infty \text{ при } \lambda' = \lambda; \\ 0 \text{ при } \lambda' \neq \lambda \;. \end{cases}$$

(18)

Свойства δ-функции

а) $$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1\,;$$

б) $$\delta(x-a) = \begin{cases} 0 \text{ при } x \neq a; \\ \infty \text{ при } x = a. \end{cases}$$

в) $$\int_{0}^{d} f(x)\delta(x-a)dx = \begin{cases} f(a) \quad \text{при } c < a < d; \\ 0 \text{ при } a < c \text{ или } a > d. \end{cases}$$

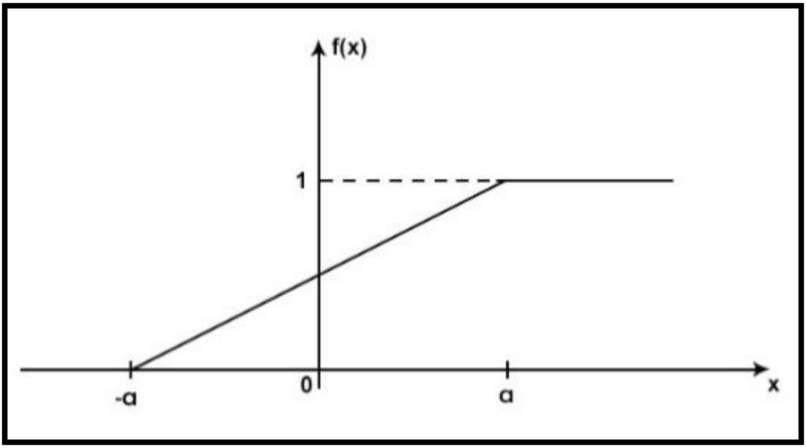


Рисунок 1. ¯ График функции f(x)

Определить δ-функцию можно как предел при а → 0 производной от функции f(x), имеющей вид, изображенный на рисунке.

$$f(x) = \begin{cases} 0 \qquad\qquad \text{при } x < \ -a; \\ 1 \qquad\qquad\quad \text{при } x > a\,; \\ 0{,}5 + \frac{x}{2a} \text{ при } |x| < a. \end{cases}$$

Полнота собственных функций оператора

Собственные функции образуют полную систему в том смысле, что любую функцию того же класса можно разложить по ним, т.е. представить эту функцию в виде линейной комбинации собственных функций:

$$f(x) = \sum_n C_m \Psi_m(x).$$

(19)

Коэффициенты разложения Cm определяются из условия

$$\int \Psi_m^*(x) f(x)\, dx = \int \Psi_m^* \sum_n C_n \Psi_n\, dx = \sum_n C_n \delta_{mn} = C_m,$$

(20)

где δ_{mn} – символ Кронекера, определяемый выражением

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

(21)

Разложение по собственным функциям непрерывного спектра

Произвольную функцию $\Psi(x)$ можно представить в виде

$$\Psi(x) = \int C(\lambda) \Psi_\lambda(x)\, d\lambda,$$

где

$$C(\lambda) = \int \Psi^*(x) \Psi_\lambda(x)\, d\lambda,$$

что вытекает из условия нормировки.

Изображение физических величин операторами

В квантовой механике физические величины изображаются линейными эрмитовыми операторами. Такое ограничение на класс операторов вытекает из требования вещественности физических величии.

Квантовомеханические операторы имеют следующий вид:

а) ***координаты*** $\hat{x}$:

$$\hat{x}\psi = x\psi \quad \text{или} \quad \hat{x} = x.$$

(22)

Собственная функция оператора x, соответствующая собственному значению a, удовлетворяет равенству

$$\hat{x}\psi_a(x) = x\psi_a(x) = a\psi_a(x).$$

Т.к. x - переменная величина, a - произвольная фиксированная, то

равенство справедливо только в том случае, если $\psi_a(x) = 0$ при $x \neq a$ т.е.

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

И для оператора радиус-вектора частицы $\hat{r} = r$ имеем

$$\psi_{(r)} = \delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0);$$

б) ***импульса*** $\widehat{P}_x$ **:** В общем случае

$$\widehat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad (23)$$

$$\widehat{P} = -i\hbar\nabla,$$

где ∇ – оператор «набла»

$$\nabla = n_x\frac{\partial}{\partial x} + n_y\frac{\partial}{\partial y} + n_z\frac{\partial}{\partial z},$$

где n_x, n_y, n_z – единичные векторы, направленные по осям координат x, y, z.

Заметим, что такой вид оператора импульса вытекает из необходимости выполнения особого перестановочного соотношения для операторов $\widehat{x}$ и $\widehat{P}_x$ по аналогии с классической механикой;

в) ***кинетической энергии***:

$$\widehat{T} = \frac{\widehat{P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \quad (24)$$

Его собственные функции совпадают с собственными функциями оператора импульса(они коммутируют):

$$\psi_P(x) = \psi_r(x).$$

Собственные функции ψ_p находятся из уравнений для них:

$$\widehat{P}_x\psi_p(x) = i\hbar\frac{d}{dx}\psi_{px}(x) = P_x\psi_{Px}.$$

Откуда $\psi_{p_x}(x) = A\exp(iP_x x/\hbar)$

Нормированные функции для трехмерного случая

$$\psi_p(x,y,z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_r)\right\} = \psi_r(x).$$

Собственные значения оператора кинетической энергии:

$T = \frac{p^2}{2m}$;

г) ***полной энергии*** $\hat{H}$.

Этот оператор называют оператором Гамильтона или гамильтонианом он определяется как сумма операторов кинетической $\hat{T}$ и потенциальной $\hat{U}$:

$$\hat{H}(P,r) = \hat{T} + \hat{U}(r) = \frac{n^2}{2m}\Delta + U(x,y,z); \qquad (25)$$

д) ***момента импульса*** $\hat{L}_x$.

Поскольку момент импульса определяется как $L = P \times r$, для компонент $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ оператора $\hat{L}$ имеем выражение:

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right); \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right); \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \qquad (26)$$

Примеры решения задач

Пример 1. Показать, что если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то

$$\left(\hat{A} + \hat{B}\right)^2 = \hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2$$

Решение. По условию $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$, отсюда $\left(\hat{B}\hat{A}\right) = \left(\hat{A}\hat{B}\right)$. Далее подействуем оператором $\left(\hat{A} + \hat{B}\right)^2$ на произвольную функцию ψ:

$$(\hat{A}+\hat{B})^2\psi = (\hat{A}+\hat{B})[(\hat{A}\psi+\hat{B}\psi)]$$
$$= \hat{A}\hat{A}\psi+\hat{A}\hat{B}\psi+\hat{B}\hat{A}\psi+\hat{B}\hat{B}\psi =$$
$$= \hat{A}^2\psi+\hat{B}^2\psi+(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})\psi$$
$$= \hat{A}^2\psi+2\hat{A}\hat{B}\psi+\hat{B}^2\psi.$$

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

Пример2. Найти коммутатор операторов $\hat{x}$ и $\frac{\hat{d}}{dx}$.

Решение. Подействуем поочерёдно операторами $\hat{x}\frac{\hat{d}}{dx}$ и $\frac{\hat{d}}{dx}\hat{x}$ на прозвольную функцию $\psi(x)$:

$$\hat{x}\frac{\hat{d}}{dx}\psi = x\frac{d\psi}{dx},$$
$$\frac{\hat{d}}{dx}\psi\hat{x} = \frac{dx}{dx}\psi(x)+x\frac{d\psi}{dx} = \psi(x)+x\frac{d\psi}{dx}.$$

Тогда

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

Отсюда $\left[\hat{x},\frac{\hat{d}}{dx}\right] = \hat{I}$ (единичный оператор).

Пример 3. Найти собственные функции и собственные значения оператора $-i\frac{\hat{d}}{dx}$.

Решение. Запишем уравнение (14) на собственные значения:

$\hat{F}\psi = \lambda\psi$, то есть, $-i\frac{\hat{d}}{dx}\psi = \lambda\psi, \quad \frac{d\psi}{dx} = i\lambda\psi$.

Решение уравнения имеет вид $\psi = Ce^{i\lambda x}$, где С – произвольное число.

Таким образом, собственные значения - произвольные числа λ. Собственные функции $\psi_\lambda = Ce^{i\lambda x}$.

Пример 4. Показать, что произвольный оператор $\hat{F}$ можно представить в виде $\hat{F} = \hat{A} + i\hat{B}$, где $\hat{A}$ и $\hat{B}$ – линейные эрмитовы операторы.

Решение. Возьмём операторы

$$\hat{A} = \frac{\hat{F} + \hat{F}^*}{2}, \hat{B} = \frac{\hat{F} - \hat{F}^*}{2i}.$$

Эти операторы эрмитовы. Далее получим

$$\hat{F} = \frac{\hat{F}}{2} + \frac{\hat{F}^*}{2} + i\frac{\hat{F}}{2i} - i\frac{\hat{F}^*}{2i} = \hat{F} + \frac{1}{2}\hat{F}^* - \frac{1}{2}\hat{F}^* = \hat{F},$$

т.о., $\hat{F} = \hat{A} + i\hat{B}$.

Задачи

Найти общую собственную функцию операторов $\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ и $\hat{P}_x^2$.

Проверить следующие правила коммутации:

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

где $\hat{L}_i$ – оператор проекции момента импульса (j=x,y,z).

Доказать, что, если коммутатор $[\hat{A}, \hat{B}]=\hat{I}$, то $[\hat{A}, \hat{B}^2] = 2\,\hat{B}$ и

$$[\hat{A}^2, \hat{B}^2] = 2(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}).$$

Проверить следующие правила коммутации:

а) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -i\hbar\hat{L}_z$; б) $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = -i\hbar\hat{L}_x$; в $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = -i\hbar\hat{L}_y$,

где $\hat{L}_j$ – оператор проекции момента импульса (j=x,y,z).

Показать, что операторы $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ коммутируют с оператором $\hat{L}^2$.

Найти результат действия операторов $\frac{d^2}{dx^2}x^2$ и $\left(\frac{d}{dx}x\right)$ на функцию:

а) cos x; б) ex.

7. Найти собственные функции и собственные значения следующего

оператора: $-\frac{d^2}{dx^2}x^2$, если $\psi=$ 0 при x=0 и x=1 .

8. Показать, что если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то они имеют общие собственные функции.

9. Проверить выполнение следующих равенств:

а) $\frac{\hat{d}}{dx}x=1+x\frac{d}{dx}$; б) $x^2\frac{d}{dx}\frac{1}{x}=x\frac{d}{dx}-1$;

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

10. Найти результат действия оператора $\frac{d^2}{dx^2}x^2-3x^2$ на функцию sin x.

11. Найти собственные значения оператора $\hat{A}$, принадлежащие собственной функции ψ_A, если

а) $\hat{A}=-\frac{d^2}{dx^2}$; $\psi_A=sin2x$

б) $\hat{A}=-\frac{d^2}{dx^2}x^2+x^2$; $\psi_A=e^{-\frac{x^2}{2}}$;

в) $\hat{A}=\frac{d^2}{dx^2}x^2+\frac{2}{x}\frac{d}{dx}$; $\psi_A=\frac{\sin\alpha x}{x}, \alpha=const$.

12. Найти собственные функции и собственные значения следующих операторов:

а) $-i\frac{d}{dx}$, причём $\psi(x)=\psi(x+a)$, где a=const;

б) $-\frac{d}{dx}$, если $\psi=0$, при x= ± a.

13. Доказать, что если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то $\left[(\hat{A}+\hat{B}),(\hat{A}-\hat{B})\right]=0$.

14. Проверить выполнение следующих равенств:

а) $\left[f(x),\hat{P}_x\right]=i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}$. Здесь $f(x)$ - произвольная функция координаты x.

б) $\left[\hat{x}^2,[\hat{x},\hat{p}_x^2]\right]=-4\hbar x$.

15. Найти общую собственную функцию операторов:

а) $\hat{x}$ и $\hat{P}_y$; б) $\hat{P}_x$ и $\hat{P}_y$; в) $\hat{P}_x$ и $\hat{P}_x^2$.

16. Проверить выполнение следующего равенства: $\left[\hat{H},\hat{x}\right] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{P}_x$.

17. Показать, что $\left[\hat{H},\hat{P}_x^2\right] = 2i\hbar\frac{dU}{dx}\hat{P}_x + \hbar^2\frac{d^2U}{dx^2}$,

где $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + U(x,y,z)$ – гамильтониан системы.

ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1.Если квантовая система находится в состояниях, описываемых функциями ψ_1, и ψ_2, то она может находиться и в состоянии $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$, где a и b – произвольные числа (принцип суперпозиции состояний).

2.Каждой механической величине F в квантовой механике ставится в соответствие линейный самосопряженный оператор $\hat{F}$:

$$F \to \hat{F}$$

При этом между операторами должны иметь место тс же соотношения, что и между соответствующими классическими величинами.

3.Среднее значение любой физической величины в состоянии, описываемом волновой функцией ψ, определяется соотношением:

$$\bar{F} = \int \psi^* \hat{F}\, dV.$$

(27)

4.Физическая величина может иметь только такие значения, которые содержатся в спектре собственных значений её оператора.

5.Значение волновой функции в произвольный момент времени t определяется уравнением Шредингера.

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

где $\hat{H}$ – оператор Гамильтона.

ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

Если потенциальная энергия частицы зависит только от одной координаты x, то волновую функцию $\psi(x,y,z)$ можно искать в виде:

$$\psi = \psi_1(x)\psi_2(y,z).$$

Здесь функция ψ_2 определяется уравнением Шредингера для свободного движения частицы. А функция $\psi_1(x)$ находится из одномерного уравнения Шредингера.

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi_2 = 0.$$

(29)

К таким же одномерным уравнениям приводится задача о движении в поле с потенциальной энергией.

$$U_1(x,y,z) = U(x) + U_2(y) + U_3(z).$$

Движение частицы в потенциальной яме

В качестве примера одномерного движения рассмотрим движение в прямоугольной потенциальной яме - в поле с потенциальной энергией U(x),

изображённой на рисунке 2.

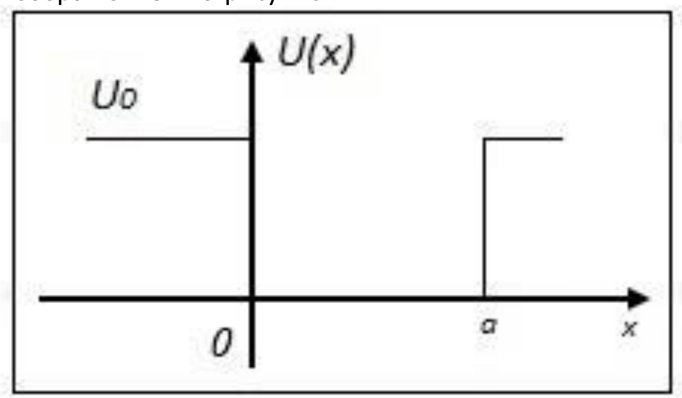


Рисунок 2. ‒ Движение в прямоугольной потенциальной яме ‒ в поле с потенциальной энергией U(x)

$$U(x) = \begin{cases} 0 \text{ при } 0 < x < a, \\ U_0 \text{ при } x \notin (0, a). \end{cases}$$

В области $0 < x < a$ имеем уравнение Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0,$$

(30)

а при $x \notin (0, a)$

$$\frac{d^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0.$$

(31)

Обозначим через ψ_{I}, ψ_{II}, ψ_{III} волновую функцию при $x < 0$, $0 \le x \le a$ и $x > a$ соответственно. Удовлетворяя условиям непрерывности и конечности волновой функции, запишем:

$$\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0); \left.\frac{d\psi_{\text{I}}}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial\psi_{\text{II}}}{dx}\right|_{x=0},$$

$$\psi_{\text{II}}(a) = \psi_{\text{III}}(a); \left.\frac{d\psi_{\text{II}}}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{\partial\psi_{\text{III}}}{dx}\right|_{x=a},$$

где ψ_{I}, ψ_{III} – решения уравнения (30), ψ_{II} – решение уравнения (31).

$\psi = 0$ при x=$\pm\infty$ и $E < U_0$.

(32)

Уравнению (31) удовлетворяет функция $\psi = Ce^{\pm Dx}$, где

$$D = \frac{1}{\hbar}[2m(U_0 - E)]^{\frac{1}{2}}$$

Знаки «-» и «+» в показателе степени соответствуют областям x > 0 и x < 0.

Таким образом имеем:

$$\psi_{\text{I}} = C_1 e^{Dx};$$

(33)

$$\psi_{\text{II}} = C_3 e^{-Dx}.$$

(34)

Внутри потенциальной ямы ищем волновую функцию ψ в виде:

$$\psi_{II} = C_2 \sin(kx + \delta),$$

(35)

где $k = \frac{(2mE)^{1/2}}{\hbar}$; δ – произвольное число.

Учитывая вид решений (33)-(35), удобно требовать непрерывности $\psi_{(x)}$ и $\frac{1}{\psi}\frac{d\psi}{dx}$ вместо непрерывности ψ и $\frac{d\psi}{dx}$.

Условие непрерывности $\frac{1}{\psi}\frac{d\psi}{dx}$ на границах потенциальной ямы дает уравнения

$$k\,ctg\delta = D = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\,U_0 - k^2\right]^{1/2};$$

$$k\,ctg(ak+\delta) = -D = -\left[\frac{2m}{\hbar^2}\,U_0 - k^2\right]^{1/2};$$

или

$$sin\delta = \frac{k\hbar}{(2mU_0)^{1/2}}; \qquad sin(ak+\delta) = -\frac{k\hbar}{(2mU_0)^{1/2}}.$$

Исключая δ, получим трансцендентное уравнение

$$ka = n\pi - 2arcsin\frac{k\hbar}{(2mU_0)^{1/2}},$$

(36)

где n = 1, 2, 3..., а значения arcsin(...) берутся между 0 и $\pi/2$.

Введя переменную $b = \frac{ka}{2}$, получим при нечётном n уравнение

$$cosb = \pm db; \quad d = \frac{\hbar}{a}\left(\frac{2}{mU_0}\right)^{1/2};$$

(36′)

и в силу условий, непрерывности и конечности надо брать те корни, для которых tg b>0.

Для чётных n получим уравнение

$$\sin b = \pm db;$$

(36″)

корни – только те, для которых tgb<0.

По этим корням графически или численно можно отыскать дискретные уровни энергии

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

(37)

Потенциальный барьер

Рассмотрим движение частиц в потенциальном поле с функцией U(x),
изображённой на рисунке 3.

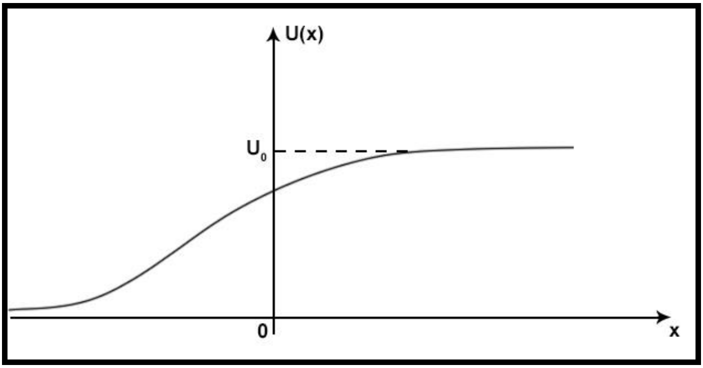


Рисунок 3. – Движение частиц в потенциальном поле с функцией U(x)

Согласно классической механике, частица с энергией E < U0 , движущаяся «слева направо», дойдя до потенциальной стенки, «отражается» от неё и начинает двигаться в противоположном направлении, а при E > U0 продолжает двигаться в том же направлении с меньшей скоростью.

В квантовой механике наблюдаются, новые явления: даже при E > U0 частица может отразиться от стенки, а при E < U0 имеется отличная от нуля вероятность прохождения частицы через барьер.

Пусть частица движется слева направо. Ассимптотика волновой функции при $x \to \infty$

$\psi \approx Ae^{ik'x}$,

где $k' = \frac{1}{\hbar}[2m(E - U_0)]^{1/2}$, A=const (волновая функция описывает частицу, прошедшую «над стенкой»).

Найдя решение уравнения Шредингера, удовлетворяющее этому предельному условию, выясняем ассимптотику решения при $x \to \infty$; она является линейной комбинацией двух решений уравнения свободного движения, т.е. при $x \to \infty$:

$$\psi = e^{ik''x} + Be^{ik''x},$$

Здесь $k'' = \frac{1}{\hbar}(2mE)^{1/2}$.

Первое слагаемое соответствует падающей на стенку частице (считаем ψ нормированной так, чтобы коэффициент при этом члене был равен 1).

Второе слагаемое изображает отраженную от стенки частицу.

Определим плотность потока вероятности посредством выражения

$$J = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right). \quad (38)$$

Плотность потока вероятности в падающей волне пропорциональна k", в отраженной – $k'|B|^2$, а в прошедшей $k'|A|^2$.

Коэффициентом прохождения D частицы называется отношение плотности потока вероятности в прошедшей волне к плотности потока в падающей волне:

$$D = \frac{k\prime}{k\prime\prime}|A|^2. \quad (39)$$

Аналогично можно определить коэффициент отражения R – как отношение плотности потока в отраженной волне к плотности потока в падающей волне:

$$R = |B|^2 = 1 - \frac{k\prime}{k\prime\prime}|A|^2, \quad (40)$$

поскольку R=1-D.

Если частица движется слева направо с энергией E < U0, то k'– чисто мнимая величина, и волновая функция экспоненциально затухает при $x \to +\infty$.

Отражённый поток равен падающему и R = 1. Но при этом в области E < 0, вероятность нахождения частицы отлична от нуля, хотя и быстро затухает с ростом x.

Линейный гармонический осциллятор

Рассмотрим частицу, совершающую малые колебания под действием квазиупругой силы, направленной к центру, пропорциональной расстоянию r от точки приложения силы до центра:

$$F = -fr,$$

где f – постоянная. Потенциальная энергия частицы $U = -\frac{1}{2}fr^2$.

Для одномерного осциллятора квазиупругая сила имеет вид: F = -kx, и потенциальная энергия

$$U = -\int_0^x F\,dx = k\int_0^x x\,dx = \frac{1}{2}kx^2. \qquad (41)$$

Из механики известно, что собственная частота колебаний осциллятора:

$$\omega_0 = (k/m)^{\frac{1}{2}}.$$

Тогда потенциальную энергию можно записать в виде:

$$U_{(x)} = \frac{m\omega_0^2}{2}x^2. \qquad (41')$$

Уравнение Шредингера для данного случая

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2\psi = E\psi. \qquad (42)$$

Введем новые переменные

$$x_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^{1/2}; \ \xi = \frac{x}{x_0}; \ \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega_0}.$$

Тогда (42) преобразуется к хорошо известному уравнению математической физики:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0. \qquad (43)$$

Это уравнение имеет однозначные и непрерывные решения только при $\lambda = 2n + 1$ (n=0, 1, 2,…) Эти решения имеют вид:

$$\psi_n(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)\cdot H_n(\xi), \quad (44)$$

где

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\left[2^n n!(\pi)^{1/2}\right]} exp(\xi^2)\frac{d^n}{d\xi^n}\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \quad (45)$$

– полиномы Чебышева-Эрмита. Они нормированы так, что:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2(\xi)\,d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} exp(-\xi^2)H_n^2(\xi)\,d\xi = 1.$$

Дискретные уровни энергии E_n можно получить, обратившись к принятым новым обозначениям и условию на λ:

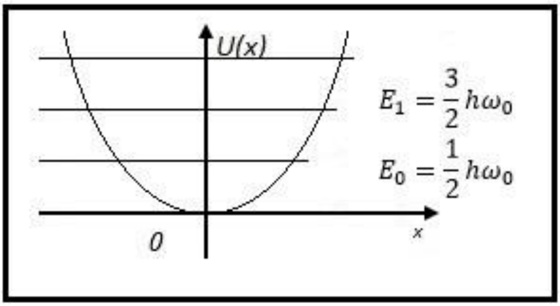
$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (46)$$

Волновые функции, соответствующие основному состоянию и первому уровню энергии

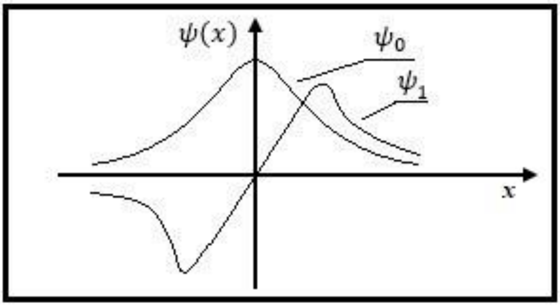
$$\psi_0 = \frac{1}{\left[x_0(\pi)^{1/2}\right]^{1/2}} exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right),$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\left[2x_0(\pi)^{1/2}\right]^{1/2}}\frac{x}{x_0} exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right).$$

Уровни энергии и волновые функции можно графически представить с помощью графиков, приведённых на рисунках 4 а, б соответственно:



а)



б)

Рисунок 4. ‾ Уровни энергии и волновые функции

Примеры решения задач

Пример 1. Определить выражения для уровней энергии En и волновые функции частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме, изображённой на рисунке 5.

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 \text{ при } & 0 < x < a, \\ \infty & \text{при } x > a. \end{cases}$$

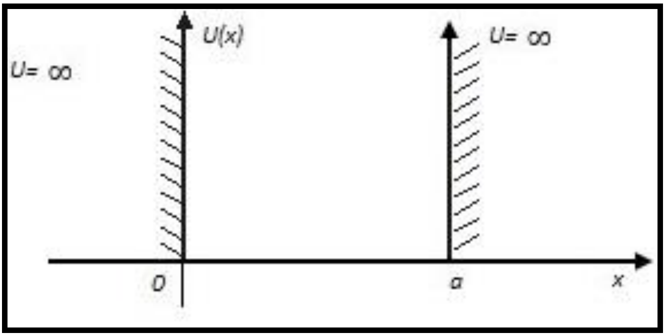


Рисунок 5. ‾ Частица, находящаяся в бесконечно глубокой потенциальной яме

Решение. Уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi(x) = 0.$$

В области $U = \infty$ функция $\psi(x) = 0$; для области $0 < x < a$ уравнение может быть записано в виде

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \xi^2\psi(x) = 0,$$

где $\xi^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Решив это уравнение, получим:

$$\psi(x) = A\sin\xi x + B\cos\xi x.$$

Условие непрерывности $\psi(x) = 0$ даст B=0, а $\psi(a) = 0$ дает $\xi a = \pm n\pi$, где n=1, 2, … . Отсюда

$$E = \frac{n^2\xi^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2 = En.$$

Нормированные собственные функции

$$\psi_n = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} sin\frac{\pi n}{a}x.$$

Пример 2. Потенциальный барьер конечной высоты.

Пусть $U(x) = \begin{cases} 0 \text{ при } x < 0; \\ U_0 \text{ при } x > 0. \end{cases}$

Найти выражение для коэффициентов R и D, а также для вероятности нахождения частицы справа от x=0.

Решение. Уравнение Шредингера для области $x < 0$:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0,$$

где $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

Для области $x > 0$ $\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0,$

где $k_2^2 = 2\frac{m(E-U_0)}{\hbar^2}$.

Их решения

$$\psi_1 = C_1e^{ik_1x} + C_2e^{ik_1x},$$

$$\psi_2 = C_3e^{ik_2x} + C_4e^{-ik_2x}.$$

Если частица движется слева, то $C_4 = 0,$ т.к. e^{-ik_2x} соответствует волне, идущей справа налево.

Условие непрерывности ψ и $\frac{d\psi}{dx}$ в точке x=0 позволяет найти связь между коэффициентами. Тогда

$$\psi_1 = C_1(e^{ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{ik_1x}),$$

$$\psi_2 = C_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x}.$$

Плотность потока вероятности

$$j_1 = \frac{hk_1}{m} C_1 C_1^* - \frac{hk_1}{m} C_2 C_2^* = j_0 - j_r,$$

где j_1 – плотность суммарного потока вероятности в области 1;

j_0-плотность падающего потока; j_r – плотность отраженного потока.

Коэффициент отражения

$$R = \frac{j_r}{j_0} = \left|\frac{k_1 - k_z}{k_1 + k_2}\right|^2 = \left|\frac{1 - [(E-U)/E]^{1/2}}{1 + [(E-U)/E]^{1/2}}\right|.$$

Коэффициент прохождения

$$D = \frac{j_d}{j_0} = \frac{C_3^* C_3 k_2^2}{C_1^* C_1} = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}; R + D = 1,$$

т.е. сумма интенсивностей отраженного и прошедшего потоков равно интенсивности падающего потока. Если E<U, то R=1, D – мнимая величина, но и $k_2 = i\xi$ – мнимая величина. Тогда

$$\omega_2(x) = \psi_2^* \psi_2 = \omega(0) e^{-4m/n[(U-E)/E]^{1/2} \cdot x},$$

т.е. вероятность найти частицу справа от x=0 всё же отлична от нуля.

Пример 3. Потенциальный барьер конечной ширины.

Пусть
$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ U_0 & \text{при } 0 < x < a, \\ \infty & \text{при } x > a. \end{cases}$$

Найти коэффициент прохождения через барьер.

Решение. Анализ показывает, что:

а) при E > U_0, возможно отражение (в классической физике частица проходит свободно);

б) при E < U_0, существует вероятность, что частица пройдет сквозь барьер. Коэффициент прозрачности барьера определяется величиной

$$D = \frac{j_D}{j_0} = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2^2} e^{-2k_2}$$

$$\approx D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}[2m(U-E)]^{\frac{1}{2}}\right);\ D_0 \approx 1.$$

Если барьер имеет произвольную форму, то прозрачность барьера определяется соотношением

$$D \approx D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}[2m(U-E)]^{1/2}dx\right)$$

Смысл обозначений здесь тот же, что и в примере 2.

Переход из области x < 0 в область x > a происходит через лежащую между ними область, где полная энергия E меньше потенциальной, что с точки зрения классической физики невозможно, ибо это означает отрицательность кинетической энергии и мнимость скорости.

Но вместе с этим частица и не «поднимается» над потенциальным барьером, т.к. это противоречит закону сохранения энергии. Частица проходит сквозь барьер «туннельным» переходом («туннельный эффект»).

Туннельный эффект играет большую роль в таких явлениях, как а - распад, движение электронов в кристаллах, автоэлектронная (холодная) эмиссия и др.

Пример 4. Найти уровни энергии и волновые функции гармонического осциллятора, помещенного в однородное электростатическое поле напряженностью E, заряд частицы q.

Решение. В данном случае в оператор потенциальной энергии U(x) добавляется энергия частицы в электростатическом поле $-q|E|x$. И уравнение Шредингера имеет вид:

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

Произведем замену переменных

$$x_1 = x - \frac{q|E|}{m\omega^2};\ \xi = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} x_1;\ E_1 = E + \frac{q^2|E|^2}{2m\omega^2}.$$

В результате получим уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar\, d^2\Psi}{2m\,dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x_1^2 \Psi = E_1 \Psi.$$

Используя общее решение уравнения Шредингера для линейного осциллятора (см. п. 4.3) можно получить собственные функции

$$\Psi_n = C_n\, exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) H_n(\xi)$$

И собственные значения оператора энергии

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \cdot \frac{q^2|E|^2}{2m\omega^2}.$$

Задачи

1. Найти уровни энергии и волновые функции для частицы в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины (одномерный случай). Поле $U(x)$ задается следующим образом:

$$U(x) = \begin{cases} 0 \text{ при } x < -a, \\ - \text{ при } -a < x < a, \\ 0 \text{ при } x > a. \end{cases}$$

2. Решить уравнение Шредингера для частицы, находящейся в потенциальном поле

$$U(x) = \bigcup_0([exp(-2\alpha x) - 2\, exp(-\alpha x)]).$$

3. Найти энергии и волновые функции частицы в одномерной кулоновской яме, задаваемой потенциалом $U(x) = -e^2 / |x|$.

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

5. Частица массы m находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Найти энергию частицы в стационарном состоянии:

а) описываемом волновой функцией $\Psi \approx sin\, kx$, где k

– заданная постоянная, x – расстояние от одного из краев ямы;

б) если ширина ямы l и число узлов волновой функции $\Psi(x)$ равно N.

6. Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы l. Найти нормированные Ψ – функции стационарных состояний частицы, взяв начало отсчета координаты x в середине ямы.

7. Частица находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Найти: а) массу частицы, если ширина ямы l и разность энергии 3-го и 2-го энергетических уровней равна ΔE; б) квантовое число энергетического уровня частицы, если интервалы энергии до соседних с ним уровней (верхнего и нижнего) относятся как $\eta:1$, где $\eta = 1{,}4$.

8. Частица массы m находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Найти число dN энергитических уровней в интервале энергии $(E\ \ , E + dE)$, если уровни расположены весьма густо.

9. Частица массы m находится в основном состоянии в одномерной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками. Найти: а) силу давления, которую оказывает частица на стенку; б) работу, которую необходимо совершить, чтобы медленно сжать яму в N раз.

10 Частица находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной l с бесконечно высокими стенками. Найти вероятность пребывания частицы в области $l/3 < x < 2l/3$.

11. Частицы массы m находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Максимальное значение плотности вероятности местонахождения частицы равно p_m. Найти ширину ямы l и энергии частицы E в данном состоянии.

12. Частица массы m находится в одномерном потенциальном поле $U(x)$, показанном на рисунке 6: $U(0) = \infty$. Найти уравнение, определяющее возможное значение энергии частицы в области $E < U_0$ и привести его к виду $sin\, kx = \pm kl\left(h^2 l(2m^2 U_0)\right)^{1/2}$,

где $k = 2mE/h\gamma^{1/2}$. Показать с помощью графического решения, что возможные значения энергии частицы дискретны.

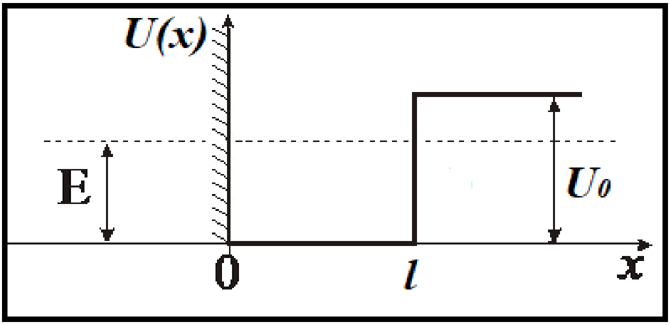


Рисунок 6. ‾ Частица массы m в одномерном потенциальном поле $U(x)$

13. Стационарный поток частиц, имеющих массу m и энергию E, падает на абсолютно непроницаемую стенку: $U(x) = 0$ при $x > 0$ и $U(x) \to \infty$ при $x \leq 0$. Найти распределение плотности вероятности местонахождения частиц $W(x)$. Найти координаты точек, в которых $W(x)$ максимальна. Изобразить примерный график зависимости $W(x)$.

14. Частица массы m падает слева на прямоугольный барьер высотой U_0

Энергия частицы равна E, причем E<U_0 (см. рис. 7 а). Найти эффективную глубину x_ω проникновения частицы под барьер, т. е. расстояние от границы барьера до точки, в которой плотность вероятности $W(x)$ местонахождения частицы уменьшается *e* раз. Вычислить x_ω для электронов, если *U0* - E = 1 *эВ.*

15. Частица массы m падает на прямоугольный потенциальный барьер высотой U0. Энергия частицы равна £, причем E>U_0.Найти коэффициент отражения R и коэффициент прозрачности D этого барьера. Убедиться, что они не зависят от направления движения падающей частицы (слева направо или справа налево).

16.Частица массы т движется слева направо в потенциальном поле, которое в точке x = 0 испытывает скачок U_0. Слева от точки x = 0 энергия частицы равна E (см. рис. 7 б). Найти коэффициент отражения R для случаев: а)$E << U_0$, б)E$>>$U0.

17. Частица массы т падает на прямоугольный потенциальный барьер, причем ее энергия E > U0 (см. рис. 7 в). Найти: а) коэффициент прозрачности D барьера в данном случае и выражение для D при E$\rightarrow$ U_0 б) первые 2- значения E, при которых электрон будет беспрепятственно проходить через такой барьер, если U_0= 10 эВ и $l =$ 0,5 мм.

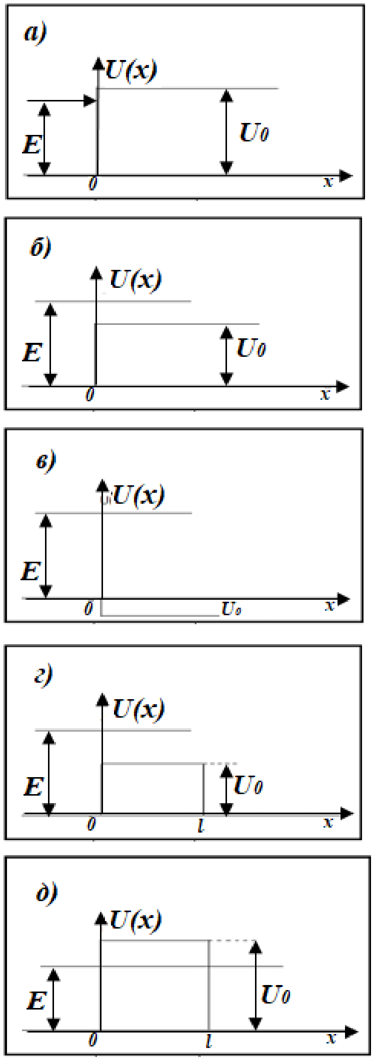


Рисунок 7. —Частица в потенциальных полях

18.Частица массы т падает на прямоугольный потенциальный барьер (см. рис. 7 г, д), причем ее энергия E<U0. Найти: а)коэффициент прозрачности D барьера; б) упростить полученное выражение при $D << l;$ в) вероятность прохождения электрона и протона с энергией $E = 5$ эВ сквозь этот барьер, если $U_0 = 10$ эВ и $l = 0{,}1$ мм.

19. Найти среднее значение квадрата координаты $\langle x \rangle^2$ и среднюю потенциальную энергию одномерного гармонического осциллятора, находящегося на n-м уровне энергии.

20. Для одномерного гармонического осциллятора, энергия которого равна $7\hbar\omega / 2$, вычислить среднюю кинетическую энергию.

21. Рассчитать среднее значение $\langle p_x \rangle$- компоненты импульса равна

$5\hbar\omega / 2$.

22. Вычислением показать, что для одномерного гармонического осциллятора, находящегося на уровне с $E = 7\hbar\omega / 2$ волновая функция

$$\Psi(\xi) = exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)(8\xi^3 - 12\xi).$$

23. Найти уровни энергии электрона, находящегося под действием квазиупругой силы $F = -kx$ в постоянном электрическом поле с напряжённостью E . Считать k и E заданными.

ПРОСТЕЙШИЕ СЛУЧАИ ТРЕХМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ

Если рассматривать двумерные и трехмерные задачи, то решение резко усложняются. Однако в некоторых случаях можно применить аппарат одномерного движения.

Этот относится к движению в центрально – симметрическом поле и другим задачам, в которых волновая функция представима в виде произведения сомножителей каждый из которых – функция только одной координаты.

Примеры решения задач

Пример1. Частица массой m находится в трёхмерной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Длина ребра ямы равна а. Найти собственные значения энергии E_n.

Решение. Внутри ямы уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+k^2\Psi=0,$$

$$k=(2mE/\hbar)^{1/2}.$$

Решение его удобно искать в виде:

$$\Psi(x,y,z)=A\sin(k_1x)\sin(k_2y)\sin(k_3z).$$

Т.к. при $x=0, y=0, z=0$ волновая функция должна обращаться в 0, то

$$\Psi(a,y,z)=0;\ \Psi(x,a,z)=0;\ \Psi(x,y,a)=0.$$

Из этих граничных условий найдем k_1:

$$k_1=n_1\pi/a;\ k_2=n_2\pi/a;\ k_3=n_3\pi/a.$$

После подстановки в уравнение Шредингера получим

$$k^2=\sum_i k_i^2$$

или

$$E_{n_1n_2n_3}=(\pi^z\hbar^2/2ma^2)/(n_1^2+n_2^2+n_3^2),$$

где n_1, n_2, n_3 – целые числа, отличные от 0. Постоянная А определяется из условия нормировки. В результате

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x,y,z) : (8/a^3)^{1/2} \sin\frac{n_1\pi}{a}x \sin\frac{n_2\pi}{a}y \sin\frac{n_3\pi}{a}z$$

.

Пример 2. Найти уровни энергии E_n электрона, совершающего движение в кулоновском поле положительно заряженного яда с зарядом $+Ze$.

Решение. Потенциальная энергия кулоновского поля $U(x) = -\frac{Ze^2}{r}$.

Задача состоит в решении уравнения для собственных функций и собственных значений оператора энергии, т.е. уравнения Шредингера $\hat{H}\Psi = E\Psi$.

Поскольку в данном случае поле центрально-симметричное, естественно использовать сферическую систему координат. Оператор Лапласа в этой системе:

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

.

Решим задачу только для основного состояния. В курсах квантовой механики (см., например, [1]) показывают, что собственное значение момента импульса равны $[l(l+1)]^{1/2}\hbar$, где l – целое число. Для основного состояния $l = 0$. Отсюда следует, что решение уравнения Шредингера не будет зависеть от углов («вращательной части») θ и φ, и в операторе Лапласа останется только член с производными по r . Тогда уравнение Шредингера будет иметь вид

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{d\Psi}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\Psi = 0 .$$

Обозначив $k = \frac{2m}{\hbar^2}E;\ a = \frac{Zm^4e^2}{\hbar^2}$, получим: $E = \frac{k\hbar^2}{2m};\ Ze^2 = \frac{a\hbar^2}{m^4}$.

Отсюда

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d\Psi}{dr}+\left(k+\frac{2a}{r}\right)\Psi=0\,.$$

Решение будем искать в виде $\Psi(r)=exp(-Ar)$, где A = const. Подставив его в уравнение, получим: $A^2+k+2(\alpha-A)\frac{1}{r}=0$. А так как последнее соотношение должно выполняться при любом r, каждый из коэффициентов должен равняться нулю:

$$A^2=-k;\;\; A=\alpha\,.$$

Раскрыв k и α, найдём

$$E=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\,.$$

Эта формула получена для n = 1, и она подчиняется известному из общего курса физики выражению для уровней энергии в водородобободобном атоме (формула Бора):

$$E_n=-\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2}.$$

Задачи

1.Решить уравнение Шредингера для сферически симметричного трёхмерного осциллятора с потенциальной энергией

$$\mathrm{U}(x)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2\,.$$

2.Решить уравнение Шредингера для частицы в бесконечно глубокой сферически симметричной яме, задаваемой потенциалом

$$U(x)=\begin{cases}0 \text{ при } |r|<a,\\ \infty \text{ при } |r|>a.\end{cases}$$

3.Частица массы m находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Координаты x y частицы лежат в пределах $0<x<a, 0<y<b$, где a и b – стороны ямы. Найти собственные значения энергии и нормированные собственные функции частоты.

4.Частица массы m находится в двумерной квадратной яме с бесконечно высокими стенками. Сторона ямы равна l.

Найти значения энергии E частицы для первых четырех уровней.

5.Частица массы m находится в основном состоянии в двумерной квадратной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Найти энергию E частицы, если максимальное значение плотности вероятности местонахождения частицы равно P_m .

6.Частица массы m находится в трёхмерной прямоугольной

Потенциальной яме с абсолютною непроницаемыми стенками. Длина ребер ямы равна a, b, c. Найти собственные значения энергии частицы.

7. Частицы массы m находится в кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Используя решение предыдущей задачи, найти: а) разности энергии 3 и 4-го уровней, если длина ребра ямы равна a; б) число состояний, существующих 6-му уровню.

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квазиклассический случай (метод ВКБ)

Решение стационарного уравнения Шредингера можно искать в виде

$$\Psi = exp\left(\frac{i}{\hbar}S(x)\right) \quad (47)$$

(ограничимся здесь одномерным случаем). $S(x)$ должно удовлетворять уравнению:

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{ds}{dx}\right)^2 - \frac{i\hbar}{2m}\frac{d^2s}{dx^2} = E - U(x) \quad (48)$$

Разлагая функцию $S(x)$ в ряд по степеням параметра $\left(\frac{\hbar}{i}\right)$

$$s = s_0 + \frac{\hbar}{i}s_l + \left(\frac{\hbar}{l}\right)^2 s_2 + \cdots \quad (49)$$

Получаем в нулевом приближении для S_0 стационарное уравнение Гамильтона-Якоби, в первом и следующих приближениях-поправки разного порядка. В этом суть метода Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ).

Ряд (49) вообще говоря плохо сходится, что создает трудности при отыскании приближений достаточно высокого порядка. Но для большинства задач возникает необходимость только в первых приближениях

В первом приближении положив $S \approx S_0$ и опустив в (48) член, содержащий $\hbar$, получим

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{ds_0}{dx}\right)^2 = E - U(x).$$

Отсюда

$$S_0 = \pm\int \{2m[E - U(x)]\}^{1/2}\,dx.$$

Подынтегральное выражение есть классический импульс. Определив функцию $p(x)$ со знаком «+» перед корнем, получим

$$\delta_0 = \pm\int p\,dx\,,\ p = [2m(E-U)]^{1/2}.$$

Сделанное выше приближение справедливо только тогда, когда

$$\hbar\left(\frac{d^2S}{dx^2}\right)\left(\frac{dS}{dx}\right)^{-2} << 1 \quad .$$

(50)

(см. уравнение (48)).

Поскольку в первом приближении $dS/dx = p$, то получим

$$\frac{dp}{dx} = \frac{d}{dx}[2m(E-U)]^{1/2} = -\frac{m}{p}\frac{dU}{dx} = \frac{mF}{p}\ ,$$

где $F = -\,dU/dx$ - классическая сила, действующая на частицу во внешнем поле. Тогда (50) преобразуется к виду

$$\frac{m\hbar|F|}{p} << 1 \quad .$$

(51)

- условию применимости метода ВКБ.

Отсюда видно, что квазиклассическое приближение становится неприменимым при слишком малом импульсе частицы. В частности, оно заведомо неприменимо вблизи точек поворота (тех точек, в которых классическая частица меняет направление скорости на противоположное).

Вдали от точек поворота, $x > a$, где a – такая точка, при $U > E$ волновая функция имеет вид

$$\Psi = \frac{c}{2|p|^{1/2}} exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_a^x p\,dx\right|\right),\quad x > a \qquad (52)$$

$$\Psi = \frac{c_1}{p^{1/2}} exp\left(\frac{i}{\hbar}\int\limits_{n}^{x} p\,dx\right)$$

$$+\frac{c_2}{p^{1/2}} exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{a}^{x} p\,dx\right), x < a\,.$$

В том случае, когда классически доступная область ограничена при $x = a$ бесконечно высокой стенкой, ВКБ – решение справедливо вплоть до самой стенки и волновая функция

$$\Psi = \frac{c}{p^{1/2}} sin\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_{a}^{x} p\,dx\right), \text{при } x < a,$$

$\Psi = 0$, при $x > a$.

Если микрочастица может совершать циклическое движение в потенциальной яме, то условия однозначности метода ВКБ приводят к соотношениям

$$\frac{1}{\pi\hbar}\int\limits_{b}^{a} p\,dx = n + \frac{1}{2}\,, n$$

$$= 0,1,2. \qquad (53)$$

(Имеется в виду финитное одномерное движение частицы в яме – классически доступная область $b \le x \le a$ ограничена двумя точками поворота).

Уравнение (53) называют правилом квантования Бора-Зоммерфельда.

Нормированная волновая функция для частицы, совершающей такое движение, имеет вид

$$\Psi = \left(\frac{2\omega m}{\pi p}\right)^{1/2} cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right). \qquad (54)$$

Если $\text{U}(x)$ изображает потенциальный барьер (т.е. $\text{U}(x) > E$ в области $a \leq x \leq b$), то внутри барьера функция S оказывается мнимой и Ψ – функция содержит множитель

$$exp\left\{-\frac{(2m)^{1/2}}{\hbar}\int_a^b [\text{U}(x) - E]^{1/2}\,dx\right\}, \qquad (55)$$

где D_0 – постоянная.

Стационарная теория возмущений

Многие задачи квантовой механики приводят к сложным уравнениям, решать которые бывает очень сложно. Но если члены, входящие в них, могут сильно отличаться по величине, малыми членами можно пренебречь, и задача становится такой, что оказывается возможным её точное решение.

Тогда решение состоит из 2-х этапов:

1)Точное решение упрощенной задачи.

2) Приближённое вычисление поправок, учитывающих влияние отброшенных членов.

Гамильтониан физической системы необходимо представить в виде:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}, \qquad (56)$$

где $\widehat{H}_0$ – оператор в точно решаемом уравнении Шредингера:

$$\hat{H}_0\Psi^0 = E^0\Psi^0. \qquad (57)$$

«Добавка» $\hat{V}$ к Гамильтониану $\hat{H}_0$ носит название оператора возмущения. Если предположить, что возмущение мало, то можно искать приближенное решение в виде ряда по степеням возмущения.

Понятие вырождения. Если какому-либо собственному значению энергии E_n (или другой величины) соответствуют несколько различных

собственных функций $\Psi_{n1}, \Psi_{n2}, \dots, \Psi_{nk}$, то состояние с энергией E_n называется вырожденным, а k – кратностью вырождения. Например, в атоме водорода энергия зависит только от главного квантового числа и не зависит от орбитальных и квантовых чисел m и l.

При одном и том же n и E_n существуют n различных значений l, а при каждом l существует $(2l+1)$ различных значений m так что существует $\sum_{l=1}^{n}(2l+1)=n^2$ различных собственных функций и состояние E_n $k = n^2$ раз вырождено.

Невырожденные состояния. Решения уравнения $(\hat{H}_0+\hat{V})\Psi = E\Psi$ при известном $\hat{H}_0\Psi^0 = E^0\Psi^0$ производится путём разложения искомой функции Ψ в ряд по собственным функциям невозмущенной задачи:

$$\Psi(x) = \sum_m C_m \Psi_m^0(x) \qquad (58)$$

Тогда

$$\hat{H}\Psi = \sum_m (\hat{H}_0 + \hat{V}) C_m \Psi_m^0 = \sum_m (E_m^0 + \hat{V}) \Psi_m^o$$
$$= E \sum_m C_m \Psi_m^0.$$

Умножая на Ψ_n^0 и интегрируя по всей области существования переменной, можно получить связь между коэффициентами в виде

$$(E_n^0 + V_m - E) C_n + \sum_{n \neq m} V_{nm} C_m = 0,$$

где $V_{nm} = \int \Psi_n^0 \hat{V} \Psi_m^0 \, dx$ – матричный элемент оператора возмущения (в одномерном случае, т.е. когда $\Psi_n = \Psi_n(x)$).

Приближённое решение приводит к следующему результату

$$E_n = E_n^0 + V_m + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} \Psi_m^0 + \cdots \qquad (59)$$

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \sum_{m \neq n} \frac{v_{mn}}{E_m^0 - E_n^0} \Psi_m^0 + \cdots \qquad (60)$$

Таким образом, первая поправка к энергии равна диагональному матричному элементу оператора возмущения и так далее.

Условие применимости теории возмущений. Результаты теории возмущения будут верны тогда, когда поправка мала, т.е. когда

$$|V_{mn}| << |E_n^0 - E_m^0|.$$

Теория возмущений для вырожденных состояний. Пусть E_n соответствует несколько собственных функций: $\Psi_{n1}, \Psi_{n2}, \ldots, \Psi_{nk}$. Тогда

$$\Psi = \sum_{m_j} C_{m_j} \Psi_{m_j}^0$$

и уравнение $(H_0 + \hat{V})\Psi = E\Psi$ после подстановки даёт

$$(H_0 + \hat{V}) \sum_{m_j} C_{m_j} \Psi_{m_j}^0 = \sum_{m_j} \left(C_{m_j} + E_m^0 + C_{m_j} \hat{V} \right) \Psi_{m_j}^0$$
$$= \sum E C_{m_j} \Psi_{m_j}^0$$

После умножения на ψ_{nl}^0 и интегрирования получим

$$\left[E_n^0 + V_{n_l, m_j} - E \right] C_{n_l} + \sum_{n \neq m_l} \sum_{\neq j} V_{n_l, m_j} C_{m_j}$$

$$V_{n_l, m_j} = \int \Psi_{n_l}^0 \hat{V} \Psi_{m_j} \, dx.$$

В нулевом приближении для уравнения

$$E^0 = E_a^0; \;\; C_{a_j} = C_{a_j}^0 (\neq 1);$$

$$C_{a_j} = 0; \;\; (n \neq \alpha).$$

Выбрав те члены, которые содержат отличные от нуля C_{a_j} получим

$$\left(E_a^0 + V_{a_l, m_l} - E \right) C_{a_l}^0 + \sum_{j \neq l} V_{a_l, a_j} C_{a_j}^0 = 0.$$

Если эти уравнения разрешить относительно C_{aj}^0, то тем самым решение будет найдено. Для этого достаточно приравнять нулю детерминант системы.

Примеры решения задач

Пример 1. Определить коэффициент прохождения через потенциальный барьер, изображенный на рисунке 8.

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{при } x < 0; \\ U_x - F_x, & \text{при } x > 0 \end{cases}$$

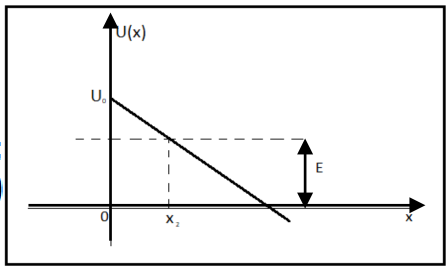


Рисунок 8. – Потенциальный барьер

Решение. Определим точки поворота т.е. границы барьера. Это та область изменения x, в которой $U(x) > 0$. Из рисунка видно, что левая точка $x_1 = 0$. Первая точка $U(x) = E$;

$U_0 - F_x = E$, откуда $X = \frac{U_0 - F}{F} = x_2$. Найдём D, используя ВКБ-формулу (55)

$$D = D_0 \, exp\left\{-2\frac{(2m)^{1/2}}{\hbar}\int_{x_1}^{x}[U(x) - E]^{1/2}\,dx\right\}$$

Найдем значение интеграла:

$$\int_{x_1}^{x_2}[U(x) - E]^{1/2}\,dx = -\frac{1}{F}\int_{\xi_1}^{\xi_2}\xi^{1/2}\,d\xi$$

$$= -\frac{1}{F}\frac{2}{3}\xi^{3/2}\Big|_{\xi_1}^{\xi_2}$$

где $\xi = U_0 - Fx;\ d\xi = -F\,dx;\ dx = -\frac{1}{F}d\xi$.

Таки образом, интеграл равен выражению $-\frac{2}{3F}(\mathrm{U}_0 - E - Fx)^{3/2}$ в пределах от $x_1 = 0$ по $X_2 = (U_0 - E)\,/\,F$. Представив их, получим окончательно

$$D = D_0 \, exp\left\{-\frac{4(2m)^{1/2}}{3\hbar F}(U_0 - E)^{3/2}\right\}.$$

Пример 2. Для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины a $(0 < x < a)$ найти в первом порядке теории возмущений смещение энергетических уровней под действием возмущения (см. рисунок 9)

$$\mathrm{U}(x) = \begin{cases} U_0, & b < x < a - b; \\ 0, \quad 0 < x < b, & a - b < x < a. \end{cases}$$

Указать условия применимости результата.

Решение. Считаем известной волновую функцию для бесконечно глубокой потенциальной яме (см. разд. 4)

$$\Psi_n^0(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/}$$

$$E_n^0 = \frac{\hbar^2\pi^2(n+1)^2}{2ma^2},$$

$n = 0,1,2\ldots$

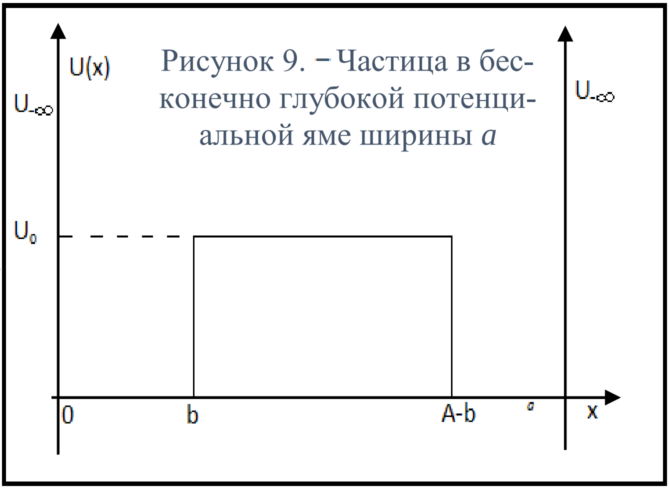


Рисунок 9. – Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины *a*

Тогда

$$E_n = V_m = \int \Psi_n^{0*}\hat{V}\Psi_n^o\,dx$$

$$= \frac{2}{a}\int_{-\infty}^{+\infty} V(x)\,sin^2\frac{\pi(n+1)}{a}x\,dx =$$

$$\frac{V_0}{a}\int_b^{a-b}\left(1 - cos\frac{2\pi(n+1)x}{a}\right)dx$$

$$= \frac{V_0}{a}x|_b^{a-b}$$

$$+ \frac{a}{2\pi(n+1)}\sin\frac{2\pi(n+1)x}{a}\bigg|_b^{a-b} =$$

$$\frac{V_0}{a}\left[a - 2b + \frac{a}{\pi(n+1)}sin\frac{2\pi(n+1)(a-2b)}{a}\right]$$

Здесь оператор возмущения $\hat{V} = V(x) = U(x)$; $V_0 = U_0$.

Условие применимости

$$|V_0| << |E_n^0 - E_m^0| = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}[(n+1)^2 - n^2] = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}(2n+1)$$

Задачи

1.Получить квазиклассическое выражение для уровней энергии линейного гармонического осциллятора. Указать условие применимости полученного результата. Сравнить ВКБ – результат с точным решением.

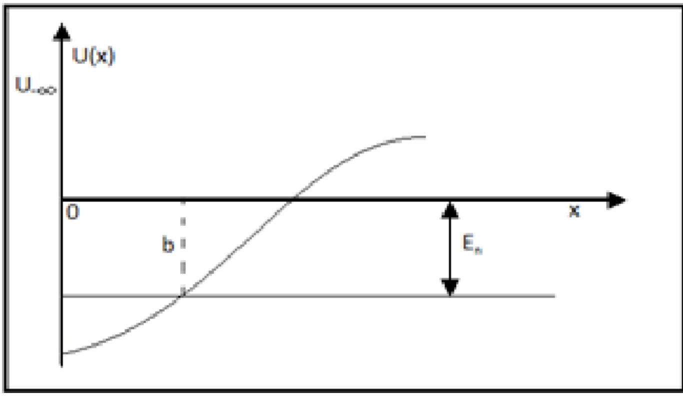


Рисунок 10. – Частица в потенциальном поле $U(x)$

2.Получить правило квантования энергетических уровней и найти соответствующее им волновые функции в случае потенциала вида, приведенного на рисунке.

3.Для частицы, находящейся в поле $U(x) = U_0 \left|\frac{x}{a}\right|$, $U_0 > 0$, $v > 0$ найти в квазиклассическом случае, как изменится расстояние между соседними уровнями энергии с ростом n в зависимости от параметра v.

4.Получить квазиклассическое выражение для E_n частицы в однородном поле тяжести, в случае, когда ее движение ограничено снизу идеально отражающей плоскостью. Указать условия применимости.

5.Найти в первом порядке теории возмущений сдвиг энергетических уровней частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме под действием возмущения $V(x) = a\delta(x - a/r)$, где $\delta(x - a/r)$ – δ – функция

Дирака. Указать условие применимости полученного результата.

6. Частица находится в центральном поле вида $U(r) = -U_0 / (exp(r/a) - 1)$, причём, $\frac{ma^2 U_0}{\hbar^2} >> 1$.

В первом порядке теория возмущения найти отличие энергетических уровней нижней части спектра от уровней энергии в кулоновском поле $U(r) = -U_0 a / r$. Указать условие применимости.

7. То же, что в задаче 6, для потенциала Юкавы $U(r) = -\frac{a}{r} exp\left(-\frac{r}{a}\right)$ при условии $\frac{m\alpha a}{\hbar^2} >> 1$.

8. Для частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины $l(0 < x < l)$ найти в первом порядке теории возмущений смещение энергетических уровней под действием возмущения, вид которого указан на рисунке.

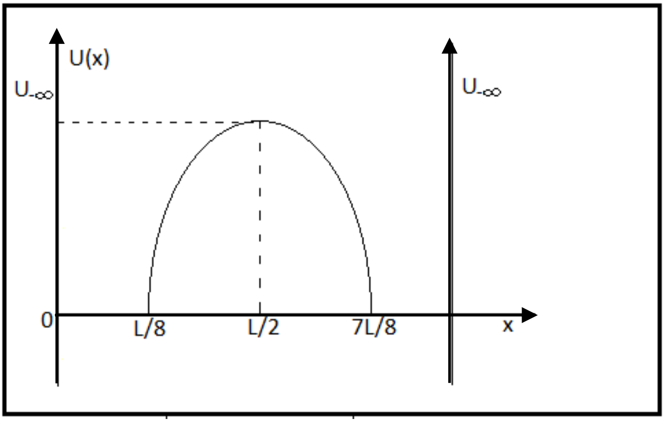


Рисунок 11. — Частица в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины l с возмущением

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Таблица вариантов самостоятельных семестровых заданий				
Вариант	Номер задач по разделам			
	I	II	III	IV
1	1	1	1	1
2	2	2	2	2
3	3	3	3	3
4	4	4	4	4
5	5	5а	5	5
6	6	5б	6	6
7	7	6	7	7
8	8	7а	1	8
9	9а	7б	2	1
10	9б	8	3	2
11	9в	9	4	3
12	10	10	5	4
13	11а	11	6	5
14	11б	12	7	6
15	11в	13	1	7
16	12а	14	2	8
17	12б	15	3	1
18	13	16	4	2
19	14а	17	5	3
20	14б	18	6	4
21	15а	19	7	5
22	15б	20	1	6
23	15в	21	2	7
24	16	22	3	8
25	17	23	4	3

ПРИЛОЖЕНИЕ 2. НЕКОТОРЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Дифференциальные операции в криволинейных координатах

Для перехода от декартовой системы координат в криволинейные координаты ((x, y, z) $\rightarrow$ (q1, q2, q3)) необходимо вычислить так называемые коэффициенты Ламе

$$H_i = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i}\right)^2\right]^{1/2}, i = 1,2,3.$$

Тогда новый базис (e_1, e_2, e_3) будет связан с прежним (i, j, k) формулой

$$e_1 = \frac{1}{H_i}\frac{\partial r}{\partial q_i},$$

где $r = x_i + y_j + z_k$.

Так, связь между декартовым базисом с базисом сферической системы координат (ССК) имеет вид

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

Оператор «набла» в криволинейных координатах

$$\nabla f = \frac{1}{H_1}\frac{\partial f}{\partial q_1}e_1 + \frac{1}{H_2}\frac{\partial f}{\partial q_2}e_2 + \frac{1}{H_3}\frac{\partial f}{\partial q_3}e_3.$$

Так, для ССК

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r}e_r + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}e_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial \varphi}e_\varphi.$$

Оператор Лапласа

$$\Delta f = div\nabla f = \frac{1}{H_1H_2H_3}\left[\frac{\partial\left(\frac{H_2H_3}{H_1}\frac{\partial f}{\partial q_1}\right)}{\partial q_1} + \frac{\partial\left(\frac{H_3H_1}{H_2}\frac{\partial f}{\partial q_2}\right)}{\partial q_2} + \frac{\partial\left(\frac{H_1H_2}{H_3}\frac{\partial f}{\partial q_3}\right)}{\partial q_3}\right].$$

В ССК

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

.

Вычисление интегралов вида

$$J(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m\,exp(-\alpha x^n)\,dx;\ m = 0,1,2,\ldots;\ n = 2,4,6,\ldots$$

В случае нечётных m $J(\alpha) = 0$; при чётных m

$$J(\alpha) = 2\int_0^{\infty} x^m\,exp(-\alpha x^n)\,dx.$$

Такой интеграл сводится заменой $y = \alpha x^n$ к гамма-функции:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^m\,exp(-\alpha x^n)\,dx = \frac{2}{n}\Gamma\left(\frac{m+1}{m}\right) / \alpha^{(m+1)/n}$$

Гамма-функция Эйлера $\Gamma(\alpha)$ определяется как

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} e^{-x}x^{\alpha-1}\,dx\ ,(\alpha > 0)$$

Так,

$$\Gamma(1) = 1;\ \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi};\ \Gamma(\alpha+1) = \alpha\Gamma(\alpha)$$

Воспользовавшись выражением для нашего интеграла, получим:

$$1)\ \int_0^{\infty} x\,exp(-\alpha x^2)\,dx = \frac{1}{2\alpha};$$

$$2)\ \int_0^\infty x^2 \exp(-\alpha x^2)\,dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha^{3/2}};$$

$$3)\ \int_0^\infty x^2 \exp(-\alpha x^2)\,dx = \alpha^2;$$

$$4)\ \int_0^\infty x^4 \exp(-\alpha x^2)\,dx = \frac{1}{4}\frac{\Gamma(3/2)}{\alpha^{3/2}}$$

Интеграл ошибок

Интеграл ошибок определяется по формуле

$$\Phi(x) = erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x exp(-t^2)\,dt$$

В случае $x << 1$ в последней формуле подынтегральную функцию можно разложить в ряд, тогда

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(x - \frac{x^3}{3\cdot 1!} + \frac{x^3}{5\cdot 2!} + \cdots\right)$$

Тогда

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} = \int_{1x}^{\infty} exp(-t^2)dt = 1 \pm \Phi(x);$$

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{\pm x}^{\infty} t^2\, exp(-t^2)dt$$

$$= \frac{1}{2} \pm \left\{\frac{x}{\sqrt{\pi}} exp(-x^2) - \frac{1}{2}\Phi(x)\right\};$$

$$\Phi(1) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^1 exp(-t^2)\,dt \approx 0{,}84.$$

Полиномы Чебышева-Эрмита

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

или

$$H_n(\chi) = (2x)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2x)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2x)^{n-4} - \cdots$$

Последняя формула позволяет вычислить любой из них. В частности,

$$H_0(x) = 1;\ H_1(x) = 2x;\ H_2(x) = 4x^2 - 2;\ H_3 = 8x^3 - 12x$$

и т.д.

Список литературы

1. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика. Квантовая механика (Нерелятивистская теория). / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – 4-е изд., испр. -М.: Наука.- 2003.

2. Иродов, И. Е. Задачи по квантовой физике. / И. Е. Иродов. – Изд.: Лаборатория знаний. – 2015.

3. Кронин, Дж. Теоретическая физика. Сборник задач с решениями. / Дж. Кронин, Д. Гринберг, В.Телегди. – 2005.

4. Благин, А.В. Основы квантовой механики и ее приложения. Учебное пособие по дисциплине «Квантовая механика». / А.В. Благин, И.Г. Попова http://de.donstu.ru/CDOCourses/316a08df-970e-4de0-b5da-8d58852ef906/3947/562/3832.pdf