

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Чумаченко Артем Васильович  
Приходько Олена Олександрівна  
Задорожна Лідія Володимирівна  
Яцимирський Андрій Віталійович  
Барабаш Олег Віталійович

Вибрані задачі з квантової механіки

частина 1

Методичний посібник для студентів фізичного факультету

Київ – 2015

# ЗМІСТ

<b>Вступ</b>	<b>4</b>
<b>Заняття 1</b> Означення і властивості лінійних операторів, комутатори, операторозначні функції	<b>7</b>
<b>Заняття 2</b> Власні числа і вектори. Спряжені, самоспряжені оператори	<b>14</b>
<b>Заняття 3</b> Хвильовий пакет	<b>20</b>
<b>Заняття 4</b> Частинка в нескінченно глибокій потенціальній ямі. $\delta$ -потенціал	<b>29</b>
<b>Заняття 5</b> Рух частинки у потенціальній ямі скінченної глибини	<b>36</b>
<b>Заняття 6</b> Періодичний потенціал. Модель Кроніга-Пені	<b>42</b>
<b>Заняття 7</b> Знаходження спектру частинки у потенціалі Морзе та Пешля-Теллера	<b>49</b>
<b>Заняття 8</b> Одновимірний квантовий гармонічний осцилятор	<b>57</b>
<b>Заняття 9</b> Гармонічний осцилятор в термінах операторів народження та знищення.	<b>61</b>
<b>Заняття 10</b> Обчислення коефіцієнтів відбиття і проходження через потенціальний бар'єр	<b>66</b>
<b>Заняття 11</b> Проходження частинки через бар'єр у формі потенціала Пешля-Теллера	<b>72</b>
<b>Заняття 12</b> Власні значення та власні функції операторів моментів кількості руху	<b>75</b>

<b>Заняття 13</b>	<b>Знаходження вигляду матриць оператору спіну.</b>	<b>82</b>
<b>Заняття 14</b>	<b>Рух у полях з циліндричною симетрією.</b>	<b>87</b>
<b>Заняття 15</b>	<b>Хвильові функції та енергетичний спектр для сферично-симетричного осциляторного потенціалу.</b>	<b>90</b>
<b>Заняття 16</b>	<b>Атом водню. Воднеподібні атоми</b>	<b>95</b>
<b>Додаток</b>		<b>103</b>
<b>Література</b>		<b>110</b>

## Вступ

Даний посібник являє собою збірку методичних рекомендацій з розв'язку основних задач курсу нерелятивістської квантової механіки для студентів фізичного факультету. Метою посібника є ознайомлення студентів з основними методами квантової механіки та необхідним математичним апаратом, використовуючи при цьому відомі точно розв'язувані задачі. Детальний розв'язок основних прикладів та наявність задач різного рівня складності, а також велика кількість задач, що пропонуються для самостійного розв'язку, дозволяють опанувати курс студентам з різним рівнем математичної підготовки.

За необхідності певний теоретичний мінімум, що потрібний для розв'язання задачі, подано на початку Заняття, а також у Додатку. Для більш детального ознайомлення з теорією автори пропонують звернутись до курсів квантової механіки А.М. Федорченка та І. О. Вакарчука. Розмірності та числові значення деяких необхідних фізичних величин подано нижче.

Постійна Планка	$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 6,62559 \cdot 10^{-27} / 2\pi$ ерг·сек;
число	$\pi = 3.14159265359$ ;
маса спокою електрона	$m_e = 9,10908 \cdot 10^{-28}$ г;
елементарний заряд	$e = 4,80298 \cdot 10^{-10}$ ;
Борівський радіус	$a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 5,2917720859(36) \cdot 10^{-11}$ м;
стала Рідберга	$R = 10973731,568539 \text{ м}^{-1}$ .

# ЧАСТИНА I

## Вибрані задачі нерелятивістської квантової механіки

# ЗАНЯТТЯ 1

## Лінійні оператори, комутатор, операторозначні функції

Короткі теоретичні відомості.

Одним з основних понять, яким оперує квантова механіка, є поняття лінійного оператора. Математичний апарат квантової механіки є теорією лінійних операторів у гільбертових просторах [1].

Під лінійним оператором мається на увазі правило  $\hat{A}$ , за яким кожному елементу  $\Psi_1$  лінійного простору <sup>1</sup> ставиться у відповідність деякий (єдиний) елемент  $\Psi_2$  лінійного простору

$$\Psi_2 = \hat{A}\Psi_1.$$

При цьому виконуються наступні умови лінійності оператора

$$\begin{aligned}\hat{A}(\Psi_1 + \Psi_2 + \dots + \Psi_n) &= \hat{A}\Psi_1 + \hat{A}\Psi_2 + \dots + \hat{A}\Psi_n; \\ \hat{A}(c\Psi) &= c\hat{A}\Psi, \quad c = \text{const}.\end{aligned}\quad (1.1)$$

**Завдання 1.** Перевірити лінійність операторів  $()^n, \frac{d}{dx}$ .

Оператор піднесення до степені  $()^n$  не є лінійним, в чому легко переконатись, використавши умови (1.1) для  $n = 2$ :

$$\begin{aligned}(\Psi_1 + \Psi_2)^2 &= \Psi_1^2 + \Psi_2^2 + 2\Psi_1\Psi_2 \neq \Psi_1^2 + \Psi_2^2; \\ (c\Psi)^n &= c^n(\Psi)^n \neq c(\Psi)^n.\end{aligned}\quad (1.2)$$

Оператор диференціювання задовольняє умови (1.1) і є лінійним

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}(\Psi_1 + \Psi_2) &= \frac{d\Psi_1}{dx} + \frac{d\Psi_2}{dx}; \\ \frac{d}{dx}(c\Psi) &= c\frac{d\Psi}{dx}.\end{aligned}\quad (1.3)$$

---

<sup>1</sup>Означення лінійного простору див. у Додатку

Кожній фізичній величині  $A$ , яку можна експериментально виміряти, у квантовій механіці ставиться у відповідність оператор цієї величини  $\hat{A}$ , такий що її середнє значення в стані, який визначається хвильовою функцією  $\Psi$ , дорівнює

$$\bar{A} = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dq, \quad (1.4)$$

де інтеграл обчислюється по всьому конфігураційному простору. Співвідношення (1.4) справедливе лише у випадку, коли стан системи задається хвильовою функцією, тобто коли маємо справу лише з так званим чистим станом.<sup>2</sup> При цьому хвильова функція  $\Psi$  є обмеженою ( $\Psi(\pm\infty) = 0$ ) та нормованою

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dq = 1. \quad (1.5)$$

Середні значення фізичних величин – дійсні величини, тобто

$$\bar{A} = \bar{A}^* \Rightarrow \int \Psi^* \hat{A} \Psi dq = \left( \int \Psi^* \hat{A} \Psi dq \right)^* = \int \Psi A^* \Psi^* dq. \quad (1.6)$$

В загальному випадку для лінійного оператора  $\hat{A}$  транспонований оператор  $\hat{A}^T$  визначається з рівності<sup>3</sup>:

$$\int \Psi_1^* \hat{A} \Psi_2 dq = \int \Psi_2 \hat{A}^T \Psi_1^* dq. \quad (1.7)$$

Порівнюючи (1.6) та (1.7), знаходимо, що для операторів фізичних величин  $\hat{A}^T = \hat{A}^* \rightarrow \hat{A} = (\hat{A}^*)^T = \hat{A}^\dagger$  – тобто оператори фізичних величин є ермітовими і самоспряженими [1].

**Завдання 2. Розкрити дужки в наступних операторних виразах.**

$$\left( \frac{d}{dx} + x \right)^2, \quad \left( x \frac{d}{dx} \right)^2, \quad (\hat{L} - \hat{M})(\hat{M} + \hat{L}). \quad (1.8)$$

<sup>2</sup>Середнє від оператора фізичної величини у загальному вигляді для чистих та мішаних станів визначається за допомогою статистичного оператора або матриці густини (Див. Додаток).

<sup>3</sup>Індекси біля хвильових функцій визначають лише їх положення у добутку (1.7), тобто  $\Psi_1 = \Psi_2$ .

Для отримання правильного вигляду результату дії оператора згадаємо, що оператор завжди діє на елемент лінійного простору в нашому випадку на хвильову функцію, тому подіємо для зручності заданим оператором на деяку хвильову функцію  $\Psi(x)$  і отримуємо:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dx} + x\right)^2 \Psi &= \left(\frac{d}{dx} + x\right) \left(\frac{d\Psi}{dx} + x\Psi\right) = \\ &= \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d}{dx}(x\Psi) + x\frac{d\Psi}{dx} + x^2\Psi = \\ &= \frac{d^2\Psi}{dx^2} + 2x\frac{d\Psi}{dx} + x^2\Psi + \Psi = \\ &= \left(\frac{d^2}{dx^2} + 2x\frac{d}{dx} + x^2 + 1\right)\Psi. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Тобто остаточною відповідь:

$$\left(\frac{d}{dx} + x\right)^2 = \frac{d^2}{dx^2} + 2x\frac{d}{dx} + x^2 + 1. \quad (1.10)$$

Аналогічно можна отримати явний вираз для другого та третього операторного виразів:

$$\left(x\frac{d}{dx}\right)^2 = \left(x\frac{d}{dx}\right) \left(x\frac{d}{dx}\right) = x^2\frac{d^2}{dx^2} + x\frac{d}{dx}, \quad (1.11)$$

$$(\hat{L} - \hat{M})(\hat{M} + \hat{L}) = \hat{L}^2 - \hat{M}^2 + \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}. \quad (1.12)$$

У виразі (1.12) два останні доданки, за визначенням, є комутатором операторів  $\hat{L}$  та  $\hat{M}$ :

$$[\hat{L}, \hat{M}] = \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}. \quad (1.13)$$

**Завдання для самостійної роботи:** розкрити операторні дужки

$$\left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{x}\right)^3, \left(\frac{d}{dx} \cdot x\right)^2, (i\hbar\nabla + \Delta(r))^2.$$

**Завдання 3. Обчислити комутатори операторів.**

$$[\hat{p}_x, x], [\hat{p}_y, x], [\hat{p}_x, \hat{p}_y], [\hat{L}_x, \hat{L}_y], \quad (1.14)$$



де  $\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$ ,  $\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$ ,  $\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$  – компоненти оператора кутового моменту,  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ ,  $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{d}{dy}$ ,  $\hat{p}_z = -i\hbar \frac{d}{dz}$  – оператори імпульсу.

Обчислимо комутатор  $[\hat{p}_x, \hat{x}]$ , для цього запишемо:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}]f = -i\hbar \frac{d}{dx}(xf) + i\hbar x \frac{df}{dx} = -i\hbar f, \quad (1.15)$$

тобто  $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar$ .

Обчислимо аналогічно інший комутатор

$$[\hat{p}_y, \hat{x}]f = -i\hbar \frac{d}{dy}(xf) + i\hbar x \frac{df}{dy} = 0. \quad (1.16)$$

Таким чином, в загальному вигляді можна виразити комутатори компонент вектора імпульсу та координат через символ Кронекера

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\hbar \delta_{ij}. \quad (1.17)$$

Комутатор компонент вектора імпульсу розраховується аналогічно

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y]f = (i\hbar)^2 \frac{d}{dx} \frac{d}{dy} f - (i\hbar)^2 \frac{d}{dy} \frac{d}{dx} f = 0. \quad (1.18)$$

Розглянемо комутатор компонент оператора моменту імпульсу:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = \\ &= (-i\hbar)^2 \left[ \left[ y \frac{d}{dz} - z \frac{d}{dy} \right] \left[ z \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dz} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \left[ z \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dz} \right] \left[ y \frac{d}{dz} - z \frac{d}{dy} \right] \right] = \\ &= (-i\hbar)^2 \left[ \left[ y \frac{d}{dz} \left( z \frac{d}{dx} \right) - y \frac{d}{dz} \left( x \frac{d}{dz} \right) - z \frac{d}{dy} \left( z \frac{d}{dx} \right) + z \frac{d}{dy} \left( x \frac{d}{dz} \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - \left[ z \frac{d}{dx} \left( y \frac{d}{dz} \right) - z \frac{d}{dx} \left( z \frac{d}{dy} \right) - x \frac{d}{dx} \left( y \frac{d}{dz} \right) + x \frac{d}{dx} \left( z \frac{d}{dy} \right) \right] \right], \end{aligned} \quad (1.19)$$

після відповідних скорочень отримаємо

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = (-i\hbar)^2 \left[ y \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dy} \right] = i\hbar \hat{L}_z. \quad (1.20)$$

**Завдання 3.1** Знайти комутатор операторів

$$[\hat{a}^+, \hat{a}], \quad \text{де} \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega\hat{x} - i\hat{p}), \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p}). \quad (1.21)$$

Використовуючи означення операторів  $a$  і  $a^+$ , отримаємо наступну операторну дужку

$$[\hat{a}^+, \hat{a}] \Psi = \frac{1}{2\hbar m\omega} ((m\omega\hat{x} - i\hat{p})(m\omega\hat{x} + i\hat{p}) - (m\omega\hat{x} + i\hat{p})(m\omega\hat{x} - i\hat{p})) \Psi. \quad (1.22)$$

Після відповідних скорочень отримаємо:

$$[\hat{a}^+, \hat{a}] = \frac{i}{\hbar} (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) = -1. \quad (1.23)$$

**Завдання для самостійної роботи.** Знайти комутатори:

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z], [\hat{p}_i, \hat{p}_j], [\hat{L}_i, \hat{L}_j], [i\hbar\nabla, \hat{A}(r)] \quad (1.24)$$

**Завдання 4.** Виразити комутатор  $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]$  через комутатори  $[\hat{A}, \hat{C}]$  і  $[\hat{B}, \hat{C}]$ .

Для розв'язку розпишемо початковий комутатор, а потім додамо та віднімемо добутки операторів  $\hat{A}\hat{C}\hat{B}$ :

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \\ &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

**Завдання 4.1.** Знайти  $[\hat{A}, \hat{B}^2]$ , якщо  $[\hat{A}, \hat{B}] = \Lambda = \text{const}$ .

Аналогічно до попереднього прикладу запишемо:

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}^2] &= \hat{A}\hat{B}\hat{B} - \hat{B}\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{B}\hat{A} = \\ &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}] = 2\Lambda\hat{B}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

**Завдання для самостійної роботи:** довести операторну тотожність Якобі

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (1.27)$$

**Завдання 5.** Знайти комутатор  $[f(\hat{L}), \hat{H}]$ , якщо  $[\hat{L}, \hat{H}] = \text{const}$ , а  $f(\hat{L})$  – операторозначна функція.

Функцію від оператора  $f(\hat{L})$  можна визначити за допомогою ряду, якщо

$$f(z) = \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} z^n = \sum_n C_n z^n, \quad f(\hat{L}) = \sum_n C_n \hat{L}^n. \quad (1.28)$$

Згідно з означенням (1.28), комутатор з операторозначною функцією можна записати у вигляді

$$[f(\hat{L}), \hat{H}] = \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} (\hat{L}^n \hat{H} - \hat{H} \hat{L}^n). \quad (1.29)$$

З умови задачі  $[\hat{L}, \hat{H}] \equiv C = \text{const}$ , тому:

$$\begin{aligned} \hat{L}^n \hat{H} &= \hat{L}^{n-1} (\hat{H} \hat{L} + C) = L^{n-2} \hat{L} \hat{H} \hat{L} + L^{n-1} C = \\ &= \hat{L}^{n-2} (\hat{H} \hat{L} + C) \hat{L} + \hat{L}^{n-1} C = \hat{L}^{n-3} \hat{L} (\hat{H} \hat{L} + C) \hat{L} + \hat{L}^{n-1} C = \\ &= L^{n-3} (\hat{H} \hat{L} + C) \hat{L}^2 + 2L^{n-1} C = \dots = \hat{H} \hat{L}^n + nC \hat{L}^{n-1}, \end{aligned} \quad (1.30)$$

тоді комутатор

$$\begin{aligned} [f(\hat{L}), \hat{H}] &= \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} (\hat{H} \hat{L}^n + nC \hat{L}^{n-1} - \hat{H} \hat{L}^n) = \\ &= C \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} n \hat{L}^{n-1} = C \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \frac{\partial \hat{L}^n}{\partial \hat{L}} = C f'(\hat{L}). \end{aligned} \quad (1.31)$$

**Завдання 5.1.** Використовуючи результат попереднього завдання, довести співвідношення  $e^{\zeta \hat{A}} \hat{B} e^{-\zeta \hat{A}} = \hat{B} + \zeta C$ , якщо  $[\hat{A}, \hat{B}] = C = \text{const}$ , а  $\zeta$  – довільне число.

Тут операторозначна функція  $f(\hat{A}) = e^{\zeta \hat{A}}$ , тому

$$[f(\hat{A}), \hat{B}] = C f'(\hat{A}) = C \zeta f(\hat{A}),$$

звідки

$$f(\hat{A}) \hat{B} = C \zeta f(\hat{A}) + \hat{B} f(\hat{A}),$$

після множення обох частин рівності зправа на  $f^{-1}(\hat{A}) = e^{-\zeta\hat{A}}$  отримуємо необхідне співвідношення:

$$e^{\zeta\hat{A}}\hat{B}e^{-\zeta\hat{A}} = (C\zeta f(\hat{A}) + \hat{B}f(\hat{A}))f^{-1}(\hat{A}) = \zeta C + \hat{B}.$$

**Завдання 5.2.** Знайти  $e^{a\hat{\sigma}}$ , якщо  $\hat{\sigma}^2 = 1$ ,  $a = \text{const}$ .

Розкладемо експоненту в ряд

$$\begin{aligned} e^{a\hat{\sigma}} &= 1 + a\hat{\sigma} + \frac{(a\hat{\sigma})^2}{2!} + \frac{(a\hat{\sigma})^3}{3!} + \dots = \\ &= 1 + \frac{a^2}{2!} + \dots + \hat{\sigma} \left( a + \frac{a^3}{3!} + \dots \right) = \text{ch } a + \hat{\sigma} \text{sh } a. \end{aligned} \quad (1.32)$$

**Завдання для самостійної підготовки.**

1. Довести співвідношення:

$$\hat{S}^{-1}f(\hat{A})\hat{S} = f(S^{-1}\hat{A}\hat{S}).$$

2. Перевірити лінійність наступних операторів

а) оператор зміни масштабу  $\hat{M}_c: \hat{M}_c\Psi(x)\sqrt{c}\Psi(cx)$  ( $c > 0$ );

б) оператор комплексного спряження  $\hat{K}: \hat{K}\Psi(x) = \Psi^*(x)$ .

3. Нехай комутатор операторів є числом  $[\hat{A}, \hat{B}] = ic$ . Доведіть співвідношення:

$$\exp[\lambda(\hat{A} + \hat{B})] = \exp(\lambda\hat{A})\exp(\lambda\hat{B})\exp(-ic\lambda^2/2).$$

Додаткові завдання: № 32–35 [3], № 1.8, 1.9, 1.11, 1.13, 1.14, 1.15, 1.17 [4].

## ЗАНЯТТЯ 2

### Власні числа і вектори. Спряжені, само- спряжені оператори.

Власні функції та власні значення оператора  $\hat{A}$  є розв'язками рівняння

$$\hat{A}\Psi = \lambda\Psi. \quad (2.1)$$

У загальному випадку це рівняння має розв'язок не для довільних значень  $\lambda$ , а лише для певних  $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ , сукупність яких може утворювати як дискретний ряд значень, так і неперервний у деякому інтервалі. Величини  $\lambda_1, \lambda_2, \dots$  називають власними значеннями оператора  $\hat{A}$ , а відповідні цим власним значенням функції  $\Psi_1(q), \Psi_2(q), \dots$  – власними функціями оператора  $\hat{A}$ . Сукупність власних значень оператора називають спектром цього оператора. Таким чином, рівняння на власні значення можна записати у вигляді:

$$\hat{A}\Psi_n = \lambda_n\Psi_n, \quad (2.2)$$

числа  $n$  називають квантовими числами.

**Завдання 1.** Знайти власні числа та власні функції операторів  $\hat{A}_1 = \frac{d}{dx}$ ,  $\hat{A}_2 = i\frac{d}{dx}$ ,  $\hat{A}_3 = x + \frac{d}{dx}$ ,  $\hat{A}_4 = \frac{d}{d\phi}$  та  $\hat{A}_5 = \sin \frac{d}{d\phi}$ , де  $\phi$  - азимутальний кут ( $\phi = \overline{0, 2\pi}$ ). Визначити умови, за яких власні функції цих операторів є скінченними в усій області визначення.

Розв'язком рівняння (2.1) для оператора похідної  $\hat{A}_1$  є функція

$$\Psi = Ce^{\lambda x}, \quad (2.3)$$

де  $\lambda$  – довільні числа. Спектр цього оператора є неперервним, а власні функції необмеженими для  $\lambda \in \mathbb{R}$  та  $x \rightarrow \infty$ . Функції (2.3) є обмеженими, коли власні значення оператора є уявними  $\lambda = i\beta$ , де  $\beta$  – довільні дійсні числа.

Розв'язуючи рівняння (2.1) для оператора  $\hat{A}_2$ , отримуємо скінченну функцію  $\Psi = Ce^{-i\lambda x}$ , де  $\lambda$  – довільні дійсні числа, що утворюють неперервний спектр.

Рівняння (2.1) для оператора  $\hat{A}_3$  можна записати у вигляді

$$\frac{d\Psi}{dx} = (\lambda - x)\Psi, \quad (2.4)$$

розв'язок цього рівняння шукаємо у вигляді функції  $\Psi = e^{\alpha x^2 + \beta x + \gamma}$ , після його підстановки у рівняння знаходимо значення невідомих коефіцієнтів  $\alpha = -\frac{1}{2}$ ,  $\beta = \lambda$  і  $\gamma = 0$  і маємо остаточну відповідь

$$\Psi = Ce^{-\frac{x^2}{2} + \lambda x}, \quad (2.5)$$

де  $\lambda$  – довільні числа, оскільки функція (2.5) є обмеженою.

Розв'язком рівняння (2.1) для оператора  $\hat{A}_4$  є функція  $\Psi(\phi) = Ce^{\lambda\phi}$ . Константу  $\lambda$  можна знайти з умов періодичності  $\Psi(\phi) = \Psi(\phi + 2\pi)$ :

$$e^{\lambda\phi} = e^{\lambda(\phi+2\pi)} \Rightarrow e^{2\pi\lambda} = e^{2\pi k i}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.6)$$

Отже, спектр оператора  $\hat{A}_4$  є дискретним  $\lambda = ik$ , а власні функції – періодичними  $\Psi_k = Ce^{ik\phi}$ .

Для оператора  $\hat{A}_5$  рівняння (2.1) може бути представлено в наступному вигляді:

$$\sin\left(\frac{d}{d\phi}\right)\Psi(\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \frac{d^{2n+1}}{d\phi^{2n+1}}\Psi(\phi) = \lambda\Psi(\phi), \quad (2.7)$$

знаючи спектр та власні функції для оператора  $d/d\phi$ , які утворюють повний базис, ми можемо розкласти власні функції  $\Psi$  оператора  $\hat{A}_5$  по власних функціях оператора  $\hat{A}_4$ , тоді рівняння (2.7) може бути переписане як

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \frac{d^{2n}}{d\phi^{2n}} ik\Psi_k(\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^{2n+1}}{(2n+1)!} \Psi_k(\phi) = \sin(ik)\Psi_k(\phi). \quad (2.8)$$

Отже, власними значеннями оператора  $\hat{A}_5$  є числа  $\sin(ik) = i \operatorname{sh}(k)$ , а власні функції співпадатимуть з власними функціями оператора  $\hat{A}_4$ .

**Завдання для самостійної підготовки:** знайти власні числа та власні значення операторів

$$i \frac{d}{d\phi}, \quad \exp \left[ ia \frac{d}{d\phi} \right], \quad \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} \right), \quad (2.9)$$

додаткові завдання: 23-28 [3].

**Завдання 2.** Перевірити, чи є ермітовими оператори

$$\frac{d}{dx}, \quad i \frac{d}{dx}, \quad \frac{d^n}{dx^n}, \quad \exp \left( i\alpha \frac{d}{d\phi} \right), \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (2.10)$$

Щоб визначити ермітовість оператора диференціювання, запишемо інтеграл для його середнього значення. Інтегруючи вираз (1.4) частинами та враховуючи обмеженість хвильової функції ( $\Psi(\pm\infty) = 0$ ), отримуємо:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{d}{dx} \Psi \, dx &= - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \frac{d}{dx} \Psi^* \, dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \left( -\frac{d}{dx} \Psi^* \right) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \left( -\frac{d}{dx} \Psi \right)^* \, dx, \end{aligned} \quad (2.11)$$

тобто отримуємо, що

$$\left( \frac{d}{dx} \right)^\dagger = -\frac{d}{dx} \neq \frac{d}{dx},$$

отже, оператор похідної є антиермітовим.

Для оператора  $i \frac{\hat{d}}{dx}$  доведення аналогічне. Знайдемо його середнє значення, враховуючи обмеженість хвильової функції ( $\Psi(\pm\infty) = 0$ )

$$\begin{aligned} i \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hat{d}}{dx} \Psi \, dx &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \frac{\hat{d}}{dx} \Psi^* \, dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \left( -i \frac{\hat{d}}{dx} \Psi^* \right) \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \left( i \frac{\hat{d}}{dx} \Psi \right)^* \, dx, \end{aligned} \quad (2.12)$$

з останнього співвідношення можна побачити, що оператор  $i\frac{d}{dx}$  є ермітовим:

$$\left(i\frac{d}{dx}\right)^\dagger = i\frac{d}{dx}. \quad (2.13)$$

Щоб перевірити ермітовість оператора  $\frac{d^n}{dx^n}$ , необхідно провести інтегрування частинами  $n$  разів:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{d^n}{dx^n} \Psi \, dx &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} \Psi^* \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} \Psi \, dx = \\ &= - \frac{d\Psi}{dx} \frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}} \Psi + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\Psi}{dx^2} \frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}} \Psi \, dx = \\ &= (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \frac{d^n}{dx^n} \Psi^* \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \left( (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} \Psi \right)^* \, dx, \end{aligned} \quad (2.14)$$

отже, маємо рівність

$$\left(\frac{d^n}{dx^n}\right)^\dagger = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n}. \quad (2.15)$$

Таким чином, при  $n = 2k$  (парних  $n$ ) оператор є ермітовим, при  $n = 2k + 1$  (непарні  $n$ ) оператор не ермітовий. У виразі (2.14) враховано, що похідні від хвильової функції також неперервні та обмежені.

Для знаходження оператора ермітово спряженого до  $\exp\left[i\alpha\frac{d}{d\phi}\right]$  розкладемо експоненту в ряд та візьмемо інтеграл  $n$  разів частинами

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \Psi^* \exp\left[i\alpha\frac{d}{d\phi}\right] \Psi \, d\phi &= \int_0^{2\pi} \Psi^* \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(i\alpha\frac{d}{d\phi}\right)^n \Psi \, d\phi = \dots = \\ &= \int_0^{2\pi} \Psi \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n!} (i\alpha)^n \frac{d^n}{dx^n} \Psi^* \, d\phi = \\ &= \int_0^{2\pi} \Psi \left( \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (-i)^n \frac{1}{n!} \left(\alpha\frac{d}{d\phi}\right)^n \Psi \right)^* = \int_0^{2\pi} \Psi \left( \exp\left[i\alpha\frac{d}{d\phi}\right] \Psi \right)^*, \end{aligned} \quad (2.16)$$



таким чином, отримуємо, що такий оператор є ермітовим

$$\left( \exp \left[ i\alpha \frac{d}{d\phi} \right] \right)^\dagger = \exp \left[ i\alpha \frac{d}{d\phi} \right]. \quad (2.17)$$

**Завдання 3.** З'ясувати, за яких умов добуток двох ермітових операторів є ермітовим.

Якщо оператори  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  є ермітовими, тобто  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  і  $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$ , тоді, за означенням,  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A}$ . Таким чином, для того, щоб добуток двох ермітових операторів був ермітовим, необхідно, щоб  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$  – оператори комутували між собою, тоді  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$ .

**Завдання 4.** Довести, що, якщо оператори  $\hat{A}$  та  $\hat{B}$  є ермітовими, то їхній симетризований добуток є також ермітовим.

Маємо  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  та  $\hat{B}^\dagger = \hat{B}$ , тоді, за означенням  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A}$ . Нехай

$$\hat{C} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2},$$

тоді треба знайти  $\hat{C}^\dagger$  і перевірити рівність  $\hat{C} = \hat{C}^\dagger$ .

Отже,

$$\begin{aligned} \hat{C}^\dagger &= \frac{1}{2} (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})^\dagger = \frac{1}{2} (\hat{A}\hat{B})^\dagger + \frac{1}{2} (\hat{B}\hat{A})^\dagger = \\ &= \frac{1}{2} \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger + \frac{1}{2} \hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger = \frac{1}{2} \hat{B}\hat{A} + \frac{1}{2} \hat{A}\hat{B} = \\ &= \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} = \hat{C}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

що і треба було довести.

**Завдання для самостійної підготовки.**

1. Знайти оператор ермітово спряжений до оператора  $\hat{A} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ .
2. Знайти оператор ермітово спряжений до оператора трансляцій  $\hat{A} = \exp[a \frac{d}{dx}]$ ,  $a$  – дійсне число.
3. Довести, що оператор  $i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$  є ермітовим.
4. Довести, що будь-який оператор може бути записаний як лінійна комбінація ермітових операторів.

5. Перевірити, чи є ермітовими оператори народження і знищення

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega\hat{q} - i\hat{p}); \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega\hat{q} + i\hat{p}),$$

де  $\hat{q}$  і  $\hat{p}$  відповідно оператори координати та імпульсу.

6. Знайти власні значення та власні функції фізичної величини оператор якої лінійною комбінацією одноіменних координати та імпульсу  $\hat{f} = \alpha\hat{p}_x + \beta\hat{x}$ .

Додаткові завдання: 1.2, 1.3, 1.4, 1.7, 1.19, 1.22, 1.24, 1.25, 1.26, 1.27, 1.29, 1.35, 1.39 [4].

## ЗАНЯТТЯ 3

### Хвильовий пакет.

Поняття хвильової функції як математичного об'єкту, що описує стан реальної вимірюваної квантовомеханічної системи історично виникло у зв'язку з дослідженнями дифракції електронів на щілинах. Спостереження ефектів підсилення та ослаблення ймовірності реєстрації частинок у цих експериментах є цілком аналогічним до інтерференційних ефектів у фізичній оптиці. Аналіз цих експериментів дозволив інтерпретувати плоскі хвилі як математичні образи станів частинок з певним імпульсом, а також глибше дослідити квантову природу світла. Даний принцип ліг у основу так званого корпускулярно-хвильового дуалізму, який математично відображається у співвідношеннях  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  та  $E = \hbar\omega$  та постульованому де Бройлем принципом, що стану вільної частинки з імпульсом відповідає хвильовий процес розповсюдження плоскої хвилі виду

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \exp\left(\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (3.1)$$

де  $n$  – кількість ступенів свободи частинки.

Враховуючи статистичну інтерпретацію результатів експерименту з дифракції електронів квадрат модуля хвильової функції визначає густину ймовірності знаходження частинки у даній області простору за умови багаторазового повторення експерименту з її визначення:

$$p(\vec{r}, t) = C|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \quad (3.2)$$

$i$  є фізично вимірюваною величиною, що у повній мірі також відповідає картині реєстрації світла на фотопластинці з урахуванням його корпускулярної (квантової) природи.

Фізичне існування частинки у певній області простору у даний момент часу виражається умовою нормування хвильової функції

$$\int_V p(\vec{r}, t) dV = 1, \quad C = \frac{1}{\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV}. \quad (3.3)$$

Як видно з (3.1) та (3.14) функції  $\Psi$  відповідає постійна густина ймовірності, що відповідає уявленням про однорідність вільного руху. Умова нормування (3.14) для хвилі де Бройля може бути виконана при накладанні додаткової умови про обмеженість об'єму, але при цьому рух частинки вже не є вільним і залежить від граничних умов. Але хвильова функція не обов'язково має бути лише функцією координат, і будь-який стан квантово-механічної системи може бути охарактеризовано не з точки зору просторового розташування, а з точки зору володіння частинками певних імпульсів. З математичної точки зору це означає існування хвильової функції  $C(\vec{p}, t)$  пов'язаної з (3.1) співвідношеннями:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \int_{\Lambda} C(\vec{p}, t) \Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) d\Lambda, \\ C(\vec{p}, t) &= \int_V \Psi(\vec{r}, t) \Psi_{\vec{p}}^*(\vec{r}, t) dV, \end{aligned} \quad (3.4)$$

де  $\Lambda$  – об'єм імпульсного простору.

Вимога квадратичної інтегровності функції (3.1) забезпечує існування як прямого так і оберненого перетворення Фур'є та приводить до існування рівності Планшереля:

$$\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \int_{\Lambda} |C(\vec{p}, t)|^2 \quad (3.5)$$

Існування оберненого перетворення Фур'є, що задовольняє умовам (3.14), означає еквівалентність координатного та імпульсного представлень, а той факт, що функція та її Фур'є перетворення не можуть бути визначеними у обмеженій множині своїх аргументів: чим більше зосереджена в просторі функція  $\Psi(\vec{r}, t)$  тим більш розмите у просторі її Фур'є перетворення  $\Psi(\vec{p}, t)$ ; приводить до існування співвідношення невизначеності між імпульсом та координатою, вперше введеному В. Гейзенбергом.

Хвилі де Бройля мають нелінійний закон дисперсії, отже для вільної частинки можемо визначити групову швидкість як

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}, \quad \omega(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}, \quad v = \frac{d\omega}{d\vec{k}} = \frac{\hbar \vec{k}}{m} = \frac{\vec{p}}{m} \quad (3.6)$$

що збігається зі швидкістю частинки. Крім того, видно, що пакет хвиль зіставлений з хвиль де Бройля з часом змінює свою форму, оскільки хвилі з різними  $k$  мають різну швидкість розповсюдження.

**Завдання 1.** Знайти загальний розв'язок одновимірного часового (нестационарного) рівняння Шредингера для вільної частинки

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (3.7)$$

та переконатись, що його розв'язки є хвилями де Бройля.

Хвильова функція  $\Psi$ , яка є розв'язком рівняння (3.7), має зміст амплітуди ймовірності і має бути скінченною, неперервною та однозначною функцією координат та часу.

Розв'язок рівняння шукатимемо у вигляді добутку  $\Psi(x, t) = V(x)\phi(t)$ . Після підстановки у рівняння (3.7) отримаємо

$$i\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{V(x)} \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} \equiv E, \quad (3.8)$$

де  $E$  – деяка константа. Координатну частину розв'язку знаходимо з рівняння

$$\frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0, \quad (3.9)$$

шукаючи його у вигляді  $V(x) = \exp[\lambda x]$ , де  $\lambda^2 = -2mE/\hbar^2$ . Оскільки функція  $V(x)$  при  $x \rightarrow \pm\infty$  повинна бути скінченною, обираємо розв'язки з  $E > 0$ , тоді

$$\frac{2mE}{\hbar^2} \equiv k^2 > 0 \Rightarrow \lambda = \pm ik,$$

тому  $V(x) = C \exp[ikx]$ .

Шукаючи розв'язок часового рівняння

$$i\hbar \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = \phi(t)E, \quad (3.10)$$

у вигляді  $\phi(t) = \exp[\lambda t]$ , знаходимо, що  $\lambda = -iE/\hbar$ , де  $E = \hbar^2 k^2/2m$ . Отже, маємо остаточну відповідь у вигляді

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk. \quad (3.11)$$

Інтеграл у виразі (3.11) відображає той факт, що константа  $E$  може приймати неперервний ряд значень в інтервалі від 0 до  $+\infty$  (відповідно для  $k$  від  $-\infty$  до  $+\infty$ ), що відповідає різним хвилям – розв’язкам рівняння (3.7). Оскільки лінійна комбінація таких розв’язків також є розв’язком рівняння (3.7), тому загальний розв’язок можна представити у вигляді інтегралу по всіх можливих значеннях параметра  $k$ , або іншими словами у вигляді суперпозиції хвиль де Бройля.

**Завдання 2.** Нехай в початковий момент часу  $t = 0$  поведінка вільної частинки описується хвильовою функцією

$$\Psi(x, 0) = A \exp \left[ -\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x \right], \quad a > 0, k_0 \in \mathbb{R}. \quad (3.12)$$

Знайти:

1. густину ймовірності знаходження частинки в певній частині простору в момент часу  $t = 0$ ;
2. нормуючий коефіцієнт;
3. густину струму.

Густина ймовірності визначається як добуток хвильової функції на її комплексно спряжену

$$\rho(x, 0) = |A|^2 \exp \left[ -\frac{x^2}{a^2} \right]. \quad (3.13)$$

Нормуючий коефіцієнт знаходимо з умови нормування хвильової функції

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1. \quad (3.14)$$

Після підстановки хвильової функції (3.12) в умову нормування отримуємо інтеграл Пуасона

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{x^2}{a^2} \right] dx = 1, \quad (3.15)$$

з якого знаходимо коефіцієнт нормування

$$A^2 = (a\sqrt{\pi})^{-1}. \quad (3.16)$$

Густина квантово-механічного струму визначається за формулою

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = |A|^2 \frac{\hbar k_0}{m} \exp \left[ -\frac{x^2}{a^2} \right] = \frac{\hbar k_0}{m} \rho(x, 0). \quad (3.17)$$

**Завдання 3.** Знайти коефіцієнти Фур'є  $C(k)$  для функції (3.12) і визначити ширину хвильового пакету в  $k$ -просторі.

Згідно з розв'язком (3.11) рівняння (3.7) для  $t = 0$ :

$$\Psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx} dk. \quad (3.18)$$

Коефіцієнт  $C(k)$  знайдемо провівши інтегрування

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-ik'x} dx &= \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx} e^{-ik'x} dk dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx dk = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \delta(k - k') dk = \\ &= 2\pi C(k'). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Таким чином, отримуємо Фур'є коефіцієнт у вигляді

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\pi^{5/4} a^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x} dx, \quad (3.20)$$

для розрахунку інтегралу (3.20) виділимо у показнику експоненти повний квадрат і отримаємо інтеграл Пуасона

$$\begin{aligned}
 C(k) &= \frac{1}{2\pi^{5/4}a^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \times \\
 &\times \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x}{a} - ia(k_0 - k) \right)^2 - \frac{a^2(k_0 - k)^2}{2} \right] = \\
 &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{a^2(k_0 - k)^2}{2} \right], \quad \text{де } A^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}.
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Півширину хвильового пакету в  $k$ -просторі, що визначається як "відстань"  $\Delta k = k - k_0$ , шукатимемо на половині висоти  $C(k)$ , тобто коли  $C(k) = 1/2C(k_0)$ . З виразу (3.21) знаходимо  $C(k = k_0) = aA/\sqrt{2\pi}$ , а отже

$$\Delta k = \frac{\sqrt{2 \ln 2}}{a} \sim \frac{1}{a}. \tag{3.22}$$

**Завдання 4.** Визначити поведінку пакету хвиль у часі, якщо при  $t = 0$  пакет визначається функцією (3.12). Розрахувати

1. хвильову функцію  $\Psi(x, t)$ ;
2. густину ймовірності  $\rho(x, t)$ ;
3. густину квантовомеханічного струму  $j(x, t)$ .

Згідно із Завданням 1, еволюція хвильової функції вільної частинки визначається інтегралом (3.11). Для хвильової функції  $\Psi(x, 0)$  коефіцієнт  $C(k)$  визначено у Завданні 3, тому для знаходження хвильової функції  $\Psi(x, t)$  потрібно обчислити наступний інтеграл:

$$\Psi(x, t) = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{a^2(k_0 - k)^2}{2} + ikx - \frac{i\hbar k^2}{2m}t \right] dk. \tag{3.23}$$

Для його розрахунку виділимо у показнику експоненти повний квадрат і зведемо (3.23) до інтегралу Пуасона

$$\Psi(x, t) = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} e^{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\alpha k - \frac{\beta}{2\alpha})^2} dk = \frac{aA}{\sqrt{2\pi}} e^{\gamma} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}, \tag{3.24}$$



де  $\alpha = \sqrt{\frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar t}{2m}}$ ,  $\beta = (a^2 k_0 + ix)$  і  $\gamma = \frac{\beta^2}{4\alpha^2} - \frac{a^2 k_0^2}{2}$ , підставляючи ці коефіцієнти в явному вигляді у (3.24) отримуємо:

$$\Psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}}} \exp \left[ -\frac{x^2 - 2ixa^2 k_0 + \frac{i\hbar a^2 k_0^2 t}{m}}{2a^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}\right)} \right]. \quad (3.25)$$

За визначенням, густина ймовірності визначається як:

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \frac{A^2}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}} \exp \left[ -\frac{\left(x - \frac{k_0 \hbar t}{m}\right)^2}{\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right) a^2} \right]. \quad (3.26)$$

Цей вираз свідчить про те, що максимум кривої ймовірності рухається зі швидкістю  $\hbar k_0/m$ , а ширина цієї кривої зростає з часом  $a' = a\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$  тобто пакет розпливається.

Густину струму розраховуємо за формулою (3.17)

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \Psi \frac{-ik_0 - \frac{x}{a^2}}{1 - \frac{i\hbar t}{ma^2}} - \Psi^* \Psi \frac{ik_0 - \frac{x}{a^2}}{1 + \frac{i\hbar t}{ma^2}} \right) = \rho(x, t) \frac{\hbar k_0}{m} \frac{1 + \frac{\hbar t x}{ma^4 k_0}}{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}. \quad (3.27)$$

**Завдання 5.** Для частинок, стан яких описується функцією (3.12) знайти

1.  $\bar{x}$  – середнє значення координати;
2.  $\bar{p}$  – середнє значення імпульсу;
3.  $\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(\hat{x} - \bar{x})^2}$  – середньоквадратичне відхилення за координатою;
4.  $\overline{(\Delta p)^2} = \overline{(\hat{p} - \bar{p})^2}$  – середньоквадратичне відхилення по імпульсах;
5. перевірити співвідношення невизначеності  $\overline{(\Delta p)^2} \overline{(\Delta x)^2} = \frac{\hbar^2}{4}$ .

Середнє значення координати шукаємо як

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, 0) x \Psi(x, 0) dx = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = 0. \quad (3.28)$$

Середнє значення імпульсу розраховуємо аналогічно, використовуючи оператор імпульсу  $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$  замість оператора координати; після відповідного диференціювання хвильової функції отримаємо

$$\bar{p} = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} \left(-i\hbar\frac{2x}{a} + \hbar k_0\right) dx = \hbar k_0. \quad (3.29)$$

Середньоквадратичне відхилення координати, враховуючи (3.28), можна отримати так:

$$\begin{aligned} \overline{\Delta x^2} &= \overline{(\hat{x} - \bar{x})^2} = \overline{x^2} = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \quad (3.30) \\ &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \left( -\frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx \right) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \left( -\frac{\partial}{\partial \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \right) = \\ &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\alpha^{3/2}}, \end{aligned}$$

де  $\alpha = 2/a^2$ , тому після підстановки отримуємо  $\overline{\Delta x^2} = a^2/2$ .

Для визначення  $\overline{\Delta p^2} = \overline{(\hat{p} - \bar{p})^2} = \hbar^2(k - k_0)^2$  скористаємося знайденим раніше виразом

$$C(k) = B e^{-(k-k_0)^2 \frac{a^2}{2}}.$$

Нормуючий коефіцієнт  $B$  знайдемо з інтегралу:

$$B^2 = \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(k-k_0)^2 a^2} dk \right)^{-1} = \frac{a}{\sqrt{\pi}}. \quad (3.31)$$

Відповідно середньоквадратичне відхилення по імпульсах знайде-

мо з виразу

$$\begin{aligned}
 \overline{\Delta p^2} &= \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hbar^2 (k - k_0)^2 e^{-(k - k_0)^2 a^2} dk = \\
 &= \frac{a}{\sqrt{\pi}} \hbar^2 \left( -\frac{\partial}{\partial a^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(k - k_0)^2 a^2} dk \right) = \\
 &= \frac{a}{\sqrt{\pi}} \hbar^2 \left( -\frac{\partial}{\partial a^2} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a^2}} \right) = \frac{\hbar^2}{2a^2}.
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

Співвідношення невизначеності знайдемо як добуток (3.30) та (3.32):

$$\overline{(\Delta x)^2} \overline{(\Delta p)^2} = \frac{\hbar^2}{4}. \tag{3.33}$$

Отримане співвідношення є характерним для когерентних станів <sup>4</sup>.

#### Завдання для самостійної роботи.

Для частинки, що у початковий момент часу  $t = 0$  описується хвильовою функцією

1.  $\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \sin\left(\frac{xp_0}{\hbar}\right),$
2.  $\Psi_0(x, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - x_0)^2\right], \quad x_0 > 0.$

Знайти хвильову функцію  $\Psi(x, t)$  та співвідношення невизначеностей для координати та імпульсу. В другому завданні переконатись, що хвильовий пакет з часом не розпливається.

---

<sup>4</sup>Див. Додаток: Когерентні стани

## ЗАНЯТТЯ 4

### Частинка в нескінченно глибокій потенціальній ямі

Завдання 1. Знайти розв'язок рівняння Шредінгера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \Psi(x) = E\Psi(x), \quad (4.1)$$

для частинки маси  $m$  в потенціалі у вигляді ями з нескінченними (непроникними) стінками

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \quad x \geq l, \\ 0, & 0 < x < l. \end{cases} \quad (4.2)$$

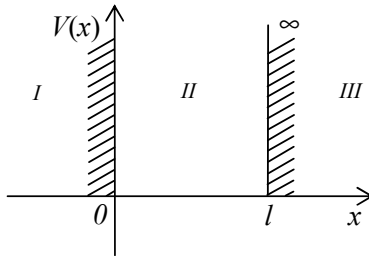


Рис. 1: Нескінченна потенціальна яма (4.2)

Розглянемо окремо розв'язок в ямі та поза нею. Поза ямою при  $V(x) \rightarrow \infty$  можливий лише тривіальний розв'язок:

$$\psi_I(x) = \psi_{III}(x) = 0, \quad x \leq 0, \quad x \geq l.$$

Всередині ями потенціал нульовий і рівняння є еквівалентним до рівняння для вільної частинки:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x), \quad (4.3)$$

що для додатних значень енергії  $E > 0$  має наступний розв'язок

$$\psi_{II}(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx), \quad 0 < x < l,$$

де  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ . З умови неперервності хвильової функції

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0, \quad \psi_{II}(l) = \psi_{III}(l) = 0$$

$$\Rightarrow A = 0, \quad kl = \pi n, \quad n = 1, 2, \dots$$

Оскільки рівняння (4.3) містить другу похідну по координаті, зазвичай, умови зшивки хвильової функції повинні бути доповнені граничними умовами на перші похідні функцій  $\Psi_I(x)$ ,  $\Psi_{II}(x)$  та  $\Psi_{III}(x)$ :

$$\Psi'_I(0) = \Psi'_{II}(0); \quad \Psi'_{II}(l) = \Psi'_{III}(l).$$

Але, як можна переконатись, використання цих умов у даному випадку не дає нових розв'язків. І отже остаточно хвильова функція всередині ями набуває вигляду

$$\psi_{II} = \psi_n(x) = B \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right), \quad (4.4)$$

а константу  $B$  можна знайти з умови нормування

$$\int_0^l \psi_n^2(x) dx = B^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi n}{l} x\right) dx = 1 \quad \Rightarrow \quad B = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Спектр задачі визначається з умови, що  $k = \pi n/l$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.5)$$

Стан, з  $n = 0$  відповідає нульовому значенню енергії та хвильової функції, що свідчить про відсутність частинки у потенціальної ямі і тому суперечить умові задачі.

**Завдання 2.** Знайти та проаналізувати відстань між сусідніми енергетичними рівнями для частинки у нескінченному потенціалі.

Відстань між сусідніми енергетичними рівнями знайдемо як:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} [(n+1)^2 - n^2] = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml} (2n+1).$$

Бачимо, що відстань між рівнями збільшується зі зменшенням маси частинки та розмірів потенційної ями. Відношення енергії до відстані між рівнями

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \propto \frac{1}{n} \quad \text{при } n \rightarrow \infty,$$

тобто дискретність квантових станів перестає проявлятися при великих значеннях квантового числа, тому при достатньо великих  $n$  можна вважати, що спектр стає неперервним.

**Завдання 3.** Знайти для частинки маси  $m$  в нескінченно глибокій потенційній ямі функції розподілу за координатами та імпульсами, середні значення координат та імпульсів та їхні флуктуації, виходячи з загального вигляду розв'язку (4.4).

Функція розподілу за координатами має вигляд:

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{l} x \right) = \frac{1}{l} \left[ 1 - \cos \left( \frac{2\pi n}{l} x \right) \right]. \quad (4.6)$$

Середнє значення координати:

$$\bar{x} = \int \psi_n^*(x) x \psi_n(x) dx = \frac{l}{2} \quad (4.7)$$

Середнє значення квадрату координати можна знайти як:

$$\overline{x^2} = \int \psi_n^*(x) x^2 \psi_n(x) dx = l^2 \left[ \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right]. \quad (4.8)$$

Середнє значення флуктуації координати:

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta x)^2} &= \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - 2\bar{x}\bar{x} + \bar{x}^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \\ &= \frac{l^2}{3} - \frac{l^2}{2\pi^2(n+1)^2} - \frac{l^2}{4} = l^2 \left[ \frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

Для знаходження функції розподілу за імпульсами потрібно спочатку знайти хвильову функцію в імпульсному представленні:

$$\begin{aligned}\phi_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) e^{-ipx/\hbar} dx = \frac{2}{\sqrt{\pi l \hbar}} \int_0^l \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) e^{-ipx/\hbar} dx \\ &= \sqrt{\frac{l}{\pi \hbar}} \frac{2\pi \hbar^2 n}{p^2 l^2 - \pi^2 \hbar^2 n^2} \left[ (-1)^n e^{-ipl/\hbar} - 1 \right], n = 1, 2, \dots\end{aligned}$$

Функція розподілу за імпульсами:

$$c(p) = |\phi_n(p)|^2 = \frac{8\pi l \hbar^3 n^2}{[p^2 l^2 - \pi^2 \hbar^2 n^2]^2} \left[ 1 - (-1)^n \cos\left(\frac{\pi l}{\hbar} p\right) \right]. \quad (4.10)$$

Середнє значення імпульсу:

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \hat{p} \psi_n(x) dx = 0 \quad (4.11)$$

Отже, середнє значення квадрату імпульсу і середня флуктуація в силу  $\bar{p} = 0$  співпадають:

$$\overline{p^2} = \overline{(\Delta p)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \hat{p}^2 \psi_n(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{p} \psi_n(x)|^2 dx = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{l^2}. \quad (4.12)$$

Перевіримо співвідношення невизначеності

$$\overline{(\Delta x)^2} \overline{(\Delta p)^2} = \hbar^2 \left[ \frac{\pi^2 n}{12} - \frac{1}{2} \right] \geq \frac{\hbar^2 (\pi^2 - 6)}{12} \approx \frac{\hbar^2}{4}. \quad (4.13)$$

**Завдання для самостійної підготовки.** Знайти спектр та хвильові функції частинки маси  $m$  в нескінченно глибокій тривимірній потенціальній ямі

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq l_x, 0 \leq y \leq l_y, 0 \leq z \leq l_z, \\ \infty, & x, y, z < 0; x > l_x, l_y, l_z. \end{cases} \quad (4.14)$$

## Потенціальна яма у вигляді $\delta$ -функції

**Завдання 4.** Знайти розв'язок рівняння Шредінгера для частинки маси  $m$ , що знаходиться у потенціалі у вигляді  $\delta$ -функції

$$V(x) = -\alpha\delta(x). \quad (4.15)$$

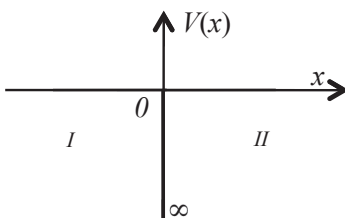


Рис. 2: Нескінченна потенціальна яма у вигляді дельта-функції (4.15).

Рівняння Шредінгера всюди, окрім точки  $x = 0$  має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi, \quad (4.16)$$

при будь-якому значенні енергії  $E > 0$  це рівняння має розв'язок у вигляді плоскої хвилі, що описує вільну частинку

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (4.17)$$

При  $E < 0$  загальний розв'язок (4.16) має наступний вигляд:

$$\psi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \quad (4.18)$$

Оскільки хвильова функція повинна бути обмеженою при  $x \rightarrow \pm\infty$ , то в області (I)

$$\psi_I(x) = Ae^{kx},$$

а в області (II)

$$\psi_{II}(x) = Be^{-kx}.$$



З умови неперервності хвильової функції в точці  $x = 0$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad \Rightarrow \quad A = B. \quad (4.19)$$

Оскільки рівняння Шредінгера містить похідну другого порядку по координаті, неперервність хвильової функції вимагає також граничних умов для першої похідної від функції  $\Psi(x)$  при  $x = 0$ . Для їхнього визначення запишемо рівняння Шредінгера, враховуючи потенціал, (4.15)

$$\psi'' + \frac{2\alpha m}{\hbar^2} \delta(x) \psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \quad (4.20)$$

та проінтегруємо його в околі початку координат

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi'' dx + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{2\alpha m \delta(x)}{\hbar^2} \psi(x) dx = -\frac{2mE}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx, \quad \varepsilon \rightarrow 0,$$

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) + \frac{2\alpha m}{\hbar^2} \psi(0) dx = -\frac{2mE}{\hbar^2} [\psi(-\varepsilon) - \psi(\varepsilon)]. \quad (4.21)$$

Спрямовуючи параметр  $\varepsilon$  до нуля, отримуємо, що похідна від хвильової функції при  $x = 0$  має стрибок

$$\psi'_{II}(0) - \psi'_{I}(0) = -\frac{2\alpha m}{\hbar^2} \psi(0). \quad (4.22)$$

Підставимо значення хвильової функції в нулі ( $\Psi(0) = \Psi_I(0) = \Psi_{II}(0)$ ) та її похідної ліворуч та праворуч від нуля та знайдемо умову існування нетривіального розв'язку рівняння (4.22)

$$-kA - kA = -\frac{2\alpha m}{\hbar^2} A \quad \Rightarrow \quad k = \frac{\alpha m}{\hbar^2}. \quad (4.23)$$

Прирівнюючи знайдене значення параметра  $k$  з (4.18), отримаємо, що спектр енергій частинки складається лише з одного рівня

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (4.24)$$

Константу  $A$  знайдемо з умови нормування хвильової функції:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_{-\infty}^0 \psi_I^*(x)\psi_I(x)dx + \int_0^{\infty} \psi_{III}^*(x)\psi_{III}(x)dx \\ &= A^2 \int_{-\infty}^0 e^{2kx} dx + A^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = \frac{A^2}{k}, \end{aligned}$$

звідки

$$A = \sqrt{k} = \sqrt{\frac{\alpha m}{\hbar^2}}. \quad (4.25)$$

**Завдання для самостійної підготовки.** Знайти середні значення операторів потенціальної та кінетичної енергій для частинки у  $\delta$ -потенціалі.

$$\begin{aligned} \bar{V} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)V(x)\psi(x)dx, \\ \bar{T} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x)dx. \end{aligned}$$

Отримані значення енергій повинні бути у відповідності зі співвідношенням  $\bar{T} + \bar{V} = E$ , яке можна отримати з загального вигляду рівняння Шредінгера, де  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ .

Через відносну простоту розв'язку задач про нескінченний потенціал та потенціал у вигляді дельта-функції розв'язки цих задач використовують для апроксимації розв'язків більш складних фізичних систем у яких частинка знаходиться у вузькій області з малим електричним потенціалом між двома високими потенціальними бар'єрами. Такі системи є важливими у оптоелектроніці та використовуються зокрема у таких приладах як квантово-розмірні лазери, інфрачервоні фотодетектори на основі квантових потенціальних ям та квантово-розмірний модулятор ефекту Штарка [6].

## ЗАНЯТТЯ 5

### Рух частинки у потенціальній ямі скінченної глибини

Знайти спектр енергій та хвильові функції зв'язаних станів частинки маси  $m$  у потенціальній ямі скінченної глибини

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a; \\ -V_0, & |x| < a. \end{cases} \quad (5.1)$$

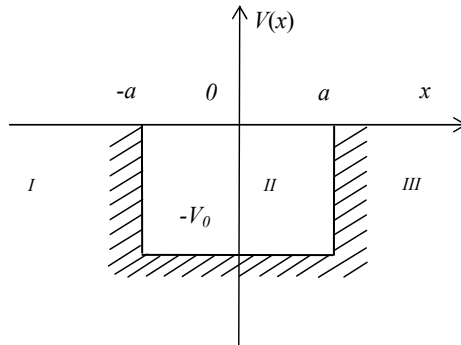


Рис. 3: Одновимірна потенціальна яма скінченної глибини  $V_0$  та ширини  $2a$ .

Спектр частинки, або зв'язані стани частинки у потенціальній ямі (5.1) знаходимо з розв'язку рівняння Шредінгера при  $E < 0$ ,  $|E| < |V_0|$ :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \Psi(x) = E\Psi(x), \quad (5.2)$$

де  $m$  – маса частинки. Розв’язки рівняння (5.2) для  $E > 0$  були знайдені у попередній задачі з дельта потенціалом і описуються плоскими хвилями.

Для знаходження зв’язаних станів частинки у потенціальній ямі отримуємо розв’язки рівняння (5.2) при  $E < 0$  для трьох областей, вказаних на Рис.5. Загальний вигляд розв’язку рівняння Шредінгера для першої області ( $x < -a$ ) має вигляд

$$\Psi_I(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}, \quad k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} > 0. \quad (5.3)$$

З умови скінченності хвильової функції при  $x \rightarrow -\infty$  покладемо коефіцієнт  $B = 0$ . Розв’язок рівняння в області  $x > a$  відрізняється лише коефіцієнтами

$$\Psi_{III}(x) = Ce^{kx} + De^{-kx}, \quad k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} > 0. \quad (5.4)$$

Умова скінченності (5.4) при  $x \rightarrow \infty$  в даному випадку вимагає покласти  $C = 0$ .

Розв’язок рівняння (5.2) в області  $|x| < a$ , тобто безпосередньо всередині потенційної ями, має вигляд:

$$\Psi_{II}(x) = K \cos \mu x + M \sin \mu x, \quad \mu^2 \equiv \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}. \quad (5.5)$$

Загальний розв’язок рівняння (5.2) є лінійною комбінацією розв’язків (5.3), (5.5) та (5.4) які згідно з властивостями хвильової функції мають бути неперервними і диференційовними в будь-якій точці. Тому необхідно провести “зшивку” вказаних розв’язків та їхніх перших похідних на границях різних областей, а саме в точках  $x = -a$  та  $x = a$ :

$$\begin{aligned} \Psi_I(-a) &= \Psi_{II}(-a); \\ \Psi'_I(-a) &= \Psi'_{II}(-a); \\ \Psi_{II}(a) &= \Psi_{III}(a); \\ \Psi'_{II}(a) &= \Psi'_{III}(a), \end{aligned} \quad (5.6)$$

Після підстановки хвильових функцій (5.3), (5.4) та (5.5) в систему рівнянь (5.6) отримуємо іншу систему відносно невідомих коефіцієнтів

$A$ ,  $D$ ,  $K$  та  $M$ :

$$Ae^{-ak} + K \sin \mu a - M \cos \mu a = 0, \quad (5.7)$$

$$Ake^{-ka} - K\mu \cos \mu a - M\mu \sin \mu a = 0,$$

$$De^{-ka} - K \sin \mu a - M \cos \mu a = 0,$$

$$Dke^{-ka} + K\mu \cos \mu a - M\mu \sin \mu a = 0.$$

Умовою існування нетривіального розв'язку системи рівнянь (5.7) є рівність нулю детермінанта цієї системи, яка може бути представлена у вигляді трансцендентного рівняння

$$k^2 - \mu^2 + 2k\mu \operatorname{ctg} 2\mu a = 0, \quad (5.8)$$

розв'язками якого є

$$k_1 = -\mu \operatorname{ctg} \mu a, \text{ та } k_2 = \mu \operatorname{tg} \mu a, \quad (5.9)$$

які дозволяють знайти нетривіальні розв'язки системи (5.6).

Далі необхідно по чергово підставити ці розв'язки в систему (5.7). Підстановка першого розв'язку (5.9) дозволяє визначити коефіцієнти  $D = -A$ ,  $K = Ae^{-k_1 a} / \cos \mu a$  та  $M = 0$ , що відповідають непарній хвильовій функції ( $\Psi_{II}(-x) = -\Psi_{II}(x)$ ):

$$\Psi_1(x) = Ae^{k_1 x}, \quad \Psi_2(x) = -Ae^{-ak_1} \frac{\sin \mu x}{\sin \mu a}, \quad \Psi_3(x) = -Ae^{-k_1 x}. \quad (5.10)$$

Аналогічно підстановка другого розв'язку (5.9) приводить до парної хвильової функції ( $\Psi_{II}(-x) = \Psi_{II}(x)$ ):

$$\Psi_1(x) = Ae^{k_2 x}, \quad \Psi_2(x) = Ae^{-k_2 a} \frac{\cos \mu x}{\cos \mu a}, \quad \Psi_3(x) = Ae^{-k_2 x}. \quad (5.11)$$

Коефіцієнт нормування  $A$  для парної та непарної хвильової функцій знаходимо з умови нормування

$$\int_{-\infty}^{-a} |\Psi_I(x)|^2 dx + \int_{-a}^a |\Psi_{II}(x)|^2 dx + \int_a^{\infty} |\Psi_{III}(x)|^2 dx = 1. \quad (5.12)$$

Після обрахування відповідних інтегралів для парної хвильової функції отримаємо

$$|A|^2 e^{-2ak_1} \left\{ \frac{1}{k_1} + \frac{a}{\cos^2 \mu a} + \frac{\sin 2\mu a}{2\mu \cos^2 \mu a} \right\} = 1, \quad (5.13)$$

де, використовуючи те, що  $k_1 = -\mu \operatorname{ctg} \mu a$ , отримаємо коефіцієнт нормування у вигляді

$$|A|^2 = e^{2k_1 a} \frac{1}{a} \left\{ 1 + \frac{1}{k_1 a} + \frac{k_1^2}{\mu^2} + \frac{k_1}{a\mu^2} \right\}^{-1}. \quad (5.14)$$

Для непарної хвильової функції після аналогічного інтегрування отримаємо

$$|A|^2 e^{-2ak_2} \left\{ \frac{1}{k_2} + \frac{a}{\sin^2 \mu a} - \frac{\sin 2\mu a}{2\mu \sin^2 \mu a} \right\} = 1, \quad (5.15)$$

де, використовуючи розв'язок  $k_2 = \mu \operatorname{tg} \mu a$ , з точністю до перепозначення  $k_1$  на  $k_2$  отримаємо результат (5.14).

Для знаходження спектру енергій частинки скористаємося тим, що параметри  $\mu$  та  $k$  пов'язані співвідношенням

$$k^2 + \mu^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \frac{C^2}{a^2}, \quad C^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}, \quad (5.16)$$

де  $C$  – безрозмірний параметр, що характеризує потенційну яму. Використовуючи (5.16), знаходимо, що  $k = \sqrt{C^2 - \mu^2 a^2}/a$ . Таким чином отримуємо два рівняння для знаходження спектру енергій зв'язаних станів, що відповідають парній та непарній хвильовим функціям:

$$\frac{\sqrt{C^2 - \mu^2 a^2}}{\mu a} = \operatorname{tg} \mu a, \quad \frac{\sqrt{C^2 - \mu^2 a^2}}{\mu a} = -\operatorname{ctg} \mu a, \quad (5.17)$$

де  $0 \leq \mu a \leq C$ .

При різних значеннях константи  $C$  з рівнянь (5.17) можна отримати значення параметру  $\mu$  та, відповідно, енергію

$$E = \frac{\mu^2 \hbar^2}{2m} - V_0. \quad (5.18)$$

На Рис. 4 вказано графічний розв'язок рівнянь (5.17) для різних діапазонів значень параметра  $C$ .

Розглянемо декілька випадків, коли  $C$  поступово збільшується. Для  $C < \pi/2$  існує лише один розв'язок для парного стану  $k = \mu \operatorname{tg} \mu a$  і жодного для непарного стану. Для значень параметру в

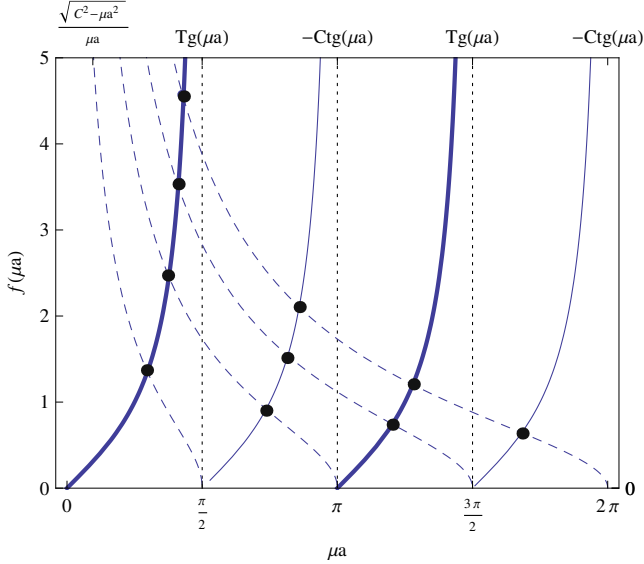


Рис. 4: Графічні розв'язки рівнянь (5.17) позначено точками.

межах  $\pi/2 < C < \pi$  існує по одному розв'язку для парної та непарної хвильових функцій. При подальшому збільшенні параметра  $C$  кількість зв'язаних станів пропорційно збільшуватиметься. При цьому енергії, що відповідають розв'язкам з різною парністю чергуватимуться.

Загалом, можна зробити наступні висновки:

1. Кількість енергетичних рівнів  $N_+$  для парного стану визначається умовою

$$(N_+ - 1)\pi < \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \leq N_+\pi, \quad (5.19)$$

тобто при будь-якому значенні параметру  $C$  існує хоча б один рівень енергії, який відповідає парному стану.

2. Кількість енергетичних рівнів  $N_-$  для непарного стану визна-

чається умовою

$$N_- \pi - \frac{\pi}{2} < \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}} \leq N_- \pi + \frac{\pi}{2}. \quad (5.20)$$

Тобто для існування хоча б одного непарного рівня ( $N_- = 1$ ) необхідно, щоб

$$\frac{\pi^2}{4} < \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \rightarrow V_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}.$$

3. По мірі збільшення енергій парні та непарні рівні чергуються, причому найнижчий рівень є парним.
4. Загальну кількість рівнів енергії  $N$  можна визначити з умови

$$(N - 1) \frac{\pi}{2} < \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}} \leq N \frac{\pi}{2}. \quad (5.21)$$

У випадку слабкого потенціалу  $V_0 \rightarrow 0$ , як було показано раніше, існує лише один рівень енергії, що відповідає парному розв'язку. Позначимо його як  $E_0$ . Рівнів енергій, які б відповідали непарному стану, в даному випадку не існує. Ця ситуація реалізується, коли виконується умова  $0 < C < \pi/2$ , тобто коли  $V_0 a^2 \leq \pi^2 \hbar^2 / 8m$ . Тоді з умови для парних станів  $k_2 = \mu \operatorname{tg} \mu a$ , враховуючи, що  $\operatorname{tg} x \approx x$  при  $x \rightarrow 0$ , отримаємо

$$|E_0| \cong \frac{\hbar^2 a^2}{2m} V_0^2 \ll V_0, \quad (5.22)$$

тобто глибина рівня завжди лежить набагато вище дна потенціалу.

#### **Завдання для самостійної підготовки.**

1. Визначити рівні енергій частинки в потенціалі

$$V(x) = \{V_1, x < 0; \quad 0, 0 < x < a; \quad V_2, x > a\}, \quad V_2 > V_1, \quad (5.23)$$

для енергій, що знаходяться в межах  $0 < E < V_1$ .

2. Знайти енергії зв'язаних станів частинки у тривимірному потенціалі скінченної глибини. Дослідити умови існування хоча б одного зв'язаного стану.



## ЗАНЯТТЯ 6

### Періодичний потенціал. Модель Кроніга-Пені.

Знайти значення, які може приймати енергія частинки маси  $m$ , у періодичному потенціалі:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } nl \leq x \leq nl + a; \\ V_0 & \text{при } nl - b \leq x \leq nl. \end{cases} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6.1)$$

Період потенціалу  $a + b = l$ .

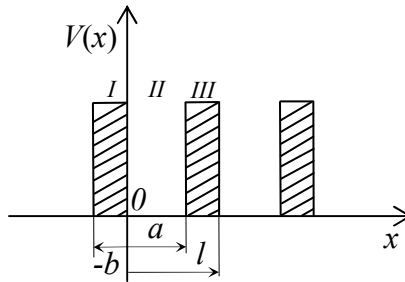


Рис. 5: Періодичний одномірний потенціал (6.1).

Запишемо рівняння Шредінгера для хвильових функцій  $\Psi(x)$  та  $\Psi(x + l)$ :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + V(x) \Psi(x) &= E \Psi(x), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x + l)}{dx^2} + V(x + l) \Psi(x + l) &= E \Psi(x + l), \end{aligned} \quad (6.2)$$

оскільки  $V(x) = V(x + l)$ ,  $\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d^2}{d(x+l)^2}$ , то одному й тому ж значенню енергії відповідають функції  $\Psi(x)$  та  $\Psi(x + l)$ . Оскільки  $E$  – просте власне значення, то  $\Psi(x)$  та  $\Psi(x + l)$  можуть відрізнятись тільки простим множником  $t$ , який з умови нормування хвильової функції  $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1$  рівний одиниці ( $|t| = 1$ ).

Для знаходження явного вигляду  $t$  означимо оператор зсуву  $\hat{T}_l$ , який зміщує хвильову функцію  $\Psi(x)$  на  $l$ . Згідно з (6.2), такий оператор комутує з гамільтоніаном даної задачі, тобто ці оператори мають спільну систему власних функцій

$$\hat{T}_l\Psi(x) = t\Psi(x) = \Psi(x + l), \quad (6.3)$$

де  $t$  – власне значення оператора зсуву. Діючи послідовно оператором  $\hat{T}_l$  на хвильову функцію  $\Psi(x)$ , отримаємо

$$\hat{T}_l^n\Psi(x) = t^n\Psi(x) = \Psi(x + nl). \quad (6.4)$$

Далі застосуємо наступні граничні умови: будемо вважати одинірний потенціал (6.1) кільцем, що містить  $N$  потенціальних стінок шириною  $b$ . Якщо  $N$  досить велике, впровадження таких нових граничних умов не матиме жодних фізичних наслідків. Застосовуючи такі граничні умови для (6.4), отримаємо

$$\hat{T}_l^N\Psi(x) = t^N\Psi(x) = \Psi(x + Nl) = \Psi(x). \quad (6.5)$$

Таким чином,  $t$  є одним з  $N$  коренів рівняння  $t^N = 1$ , або

$$t = \exp\left[\frac{2\pi ni}{N}\right], \quad n = 0, 1, 2, \dots, N - 1. \quad (6.6)$$

Якщо ввести величину  $k = 2\pi ni/Nl$ , яку називають квазіімпульсом, то можна записати

$$e^{ikl}\Psi(x) = \Psi(x + l). \quad (6.7)$$

Будь-яка функція, яка задовольняє рівнянню (6.7), може бути записана у вигляді

$$\Psi(x) = e^{ikx}U(x), \quad (6.8)$$

де  $U(x) = U(x + l)$  – періодична функція з періодом  $l$ . В цьому легко переконатись з наступних співвідношень

$$\Psi(x + l) = e^{ik(x+l)}U(x + l) = e^{ikl}U(x)e^{ikx} = e^{ikl}\Psi(x). \quad (6.9)$$

Рівняння (6.8) є фундаментальним рівнянням фізики твердого тіла і має назву теореми Блоха [5]. Будь-яка хвильова функція періодичного потенціалу повинна мати такий вигляд.

Розглянемо Рис. 5 та розіберемо нашу задачу на окремі області, що періодично повторюються. Так, область  $I$ :  $-b \leq x \leq 0$ , де  $V(x) = V_0$ ; область  $II$ :  $0 \leq x \leq a$ , для якої  $V(x) = 0$  та область  $III$ :  $a \leq x \leq l$ , де  $V(x) = V_0$ . Запишемо рівняння Шредінгера для області  $I$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} + V_0\psi_I(x) = E\psi_I(x), \quad (6.10)$$

перепишемо його наступним чином

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_I(x) = \lambda^2\psi_I(x), \quad (6.11)$$

де

$$\lambda^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0. \quad (6.12)$$

Тоді хвильова функція

$$\psi_I = C_1e^{\lambda x} + C_2e^{-\lambda x}, \quad (6.13)$$

де  $C_1, C_2$  – коефіцієнти нормування. Для області  $III$  рівняння Шредінгера виглядає аналогічно до рівняння для області  $I$ . Тому одразу можемо записати розв'язок

$$\psi_{III} = C_5e^{\lambda x} + C_6e^{-\lambda x}, \quad (6.14)$$

$C_5, C_6$  – коефіцієнти нормування. Рівняння Шредінгера для  $II$  області:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} = E\psi_{II}(x), \quad (6.15)$$

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{II}(x) = -\chi^2\psi_{II}(x), \quad (6.16)$$

де ми ввели позначення

$$\chi^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0. \quad (6.17)$$

Отримуємо розв'язок

$$\psi_{II} = C_3 e^{\lambda x} + C_4 e^{-\lambda x}, \quad (6.18)$$

тут  $C_3, C_4$  – коефіцієнти нормування.

Якщо позначити  $\psi_I(x) = \psi(x)$ , то  $\psi_{III}(x) = \psi(x + l)$ , тобто коли вибране нами певне значення  $x$  лежить в області  $I$ , то значення  $x + l$  потрапляє в область  $III$ . Звідси, згідно з (6.7) бачимо, що ці розв'язки пов'язані наступним чином

$$\psi_{III}(x + l) = e^{ikl} \psi_I(x),$$

підставляючи отримані вирази для хвильових функцій, отримуємо

$$C_5 e^{\lambda(x+l)} + C_6 e^{-\lambda(x+l)} = e^{ikl} (C_1 e^{\lambda x} + C_2 e^{-\lambda x}),$$

звідки одержуємо, що

$$C_5 = C_1 e^{(ik-\lambda)l},$$

$$C_6 = C_2 e^{(ik+\lambda)l},$$

тобто хвильова функція в області  $III$ :

$$\psi_{III} = e^{ikl} \left( C_1 e^{\lambda(x-l)} + C_2 e^{-\lambda(x-l)} \right), \quad (6.19)$$

що задовольняє теоремі Блоха (6.8).

Хвильові функції  $\psi_I(x)$ ,  $\psi_{II}(x)$  та  $\psi_{III}(x)$  повинні бути неперервними разом зі своїми першими похідними при переході в точці  $x = 0$  з області  $I$  в область  $II$  та в точці  $x = a$  з області  $II$  в область  $III$ . З цих умов маємо таку систему рівнянь:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0); \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0); \\ \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a); \\ \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a). \end{cases} \quad (6.20)$$

Підставляємо вирази для функцій та їхніх похідних та отримуємо

$$\begin{cases} C_1 + C_2 - C_3 - C_4 = 0; \\ \lambda_1 - \lambda_2 - i\chi C_3 + i\chi C_4 = 0; \\ e^{-\lambda b + ikl} C_1 + e^{\lambda b + ikl} C_2 - e^{i\chi a} C_3 - e^{-i\chi a} C_4 = 0; \\ \lambda e^{-\lambda b + ikl} C_1 - \lambda e^{\lambda b + ikl} C_2 - i\chi e^{i\chi a} C_3 + i\chi e^{-i\chi a} C_4 = 0, \end{cases} \quad (6.21)$$

систему чотирьох лінійних однорідних рівнянь відносно чотирьох невідомих  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  та  $C_4$ . Для існування нетривіального розв'язку потрібно, щоб визначник цієї системи дорівнював нулю:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \lambda & -\lambda & -i\chi & i\chi \\ e^{-\lambda b + ikl} & e^{\lambda b + ikl} & -e^{i\chi a} & -e^{-i\chi a} \\ \lambda e^{-\lambda b + ikl} & -\lambda e^{\lambda b + ikl} & -i\chi e^{i\chi a} & i\chi e^{-i\chi a} \end{vmatrix} = 0. \quad (6.22)$$

Розкривши визначник, отримуємо

$$\operatorname{ch}(\lambda b) \cos(\chi a) + \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \operatorname{sh}(\lambda b) \sin(\chi a) - \cos(kl) = 0. \quad (6.23)$$

Це рівняння визначає енергію частинки у заданому періодичному потенціалі. Виділимо в лівій частині (6.23) доданки, що є функцією енергії  $f(E)$ :

$$f(E) = \operatorname{ch}(\lambda b) \cos(\chi a) + \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \operatorname{sh}(\lambda b) \sin(\chi a) = \cos(kl). \quad (6.24)$$

Оскільки  $\cos(kl)$  є обмеженою функцією, то для того, щоб ця рівність виконувалась, необхідно, аби  $|f(E)| \leq 1$ . Проте при  $\chi a = \pi n$  рівність порушується, оскільки  $f(E) = \pm \operatorname{ch}(\lambda b)$  та  $|f(E)| > 1$ . Отже, ми отримали заборонені рівні енергії системи у періодичному потенціалі:

$$E = \frac{\hbar^2 \chi^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}. \quad (6.25)$$

Знайти інші крім (6.25) аналітичні розв'язки рівняння (6.23) не можливо, тому дослідимо асимптотичний випадок, коли  $V = 0$  всюди,

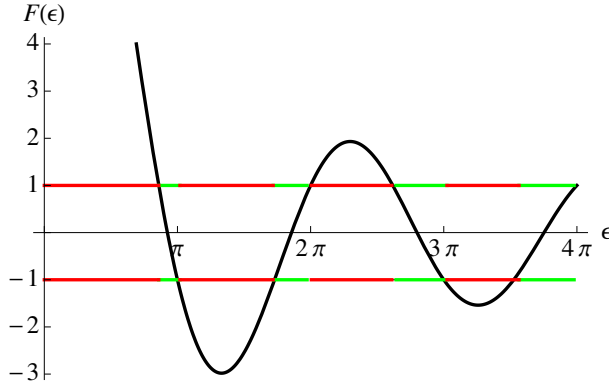


Рис. 6: Графік функції (6.29) для значень параметрів  $C = 12$  та  $l = 1$ . Заборонені (червоні) та дозволені (зелені) зони енергій для моделі Кроніга-Пені.

крім точок  $x = nl$ , в яких  $V_0 \rightarrow \infty$ . При цьому ширина бар'єру  $b \rightarrow 0$  таким чином, що  $\lim_{V_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0} \frac{mV_0 b}{\hbar^2} = \text{const}$  (модель Кроніга - Пенні).

Проаналізуємо рівняння  $f(E) - \cos(kl) = 0$ .

Так як  $\lim_{V_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0} \frac{mV_0 b}{\hbar^2} = \text{const} \equiv C$ , то

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0} \lambda b = \lim_{V_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0} \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} b =$$

$$= \lim_{V_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0} \sqrt{2b} \sqrt{\frac{mV_0 b}{\hbar^2} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} = 0,$$

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0} \frac{\text{sh}(\lambda b)}{\lambda b} = \lim_{V_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0} \frac{e^{\lambda b} - e^{-\lambda b}}{2\lambda b} = 1,$$

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0} \text{ch}(\lambda b) = \lim_{V_0 \rightarrow \infty, b \rightarrow 0} \frac{e^{\lambda b} + e^{-\lambda b}}{2} = 1.$$

Тоді рівняння  $f(E) - \cos(kl) = 0$  переходить в

$$\cos(\chi l) + \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \lambda b \sin(\chi l) = \cos(kl), \quad (6.26)$$

введемо позначення  $\operatorname{tg} \beta = \frac{\lambda^2 - \chi^2}{2\lambda\chi} \lambda b$ , тоді

$$\cos(\chi l) + \operatorname{tg} \beta \sin(\chi l) = \cos(kl), \quad (6.27)$$

або перепишемо інакше

$$\frac{\cos(\chi l - \beta)}{\cos \beta} = \cos(kl) \leq 1. \quad (6.28)$$

Останнє рівняння визначає енергію частинки в заданому потенціалі. Оскільки  $|\cos(kl)| \leq 1$ , границі енергетичних зон лежатимуть поблизу  $\cos(\chi l - \beta) = \pm \cos \beta$ , тобто при  $\chi l = \pi n$  та при  $\chi l = \pi n + 2\beta$ .

Графічно функцію

$$\frac{\cos(\chi l - \beta)}{\cos \beta} = \frac{\cos(\epsilon l - \operatorname{arctg}(C/\epsilon))}{\cos(\operatorname{arctg}(C/\epsilon))} = F(\epsilon), \quad \epsilon = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (6.29)$$

досліджено на Рис. 6, звідки бачимо зонну структуру спектру частинки у періодичному потенціалі. Дозволені рівні енергії, де виконується умова  $|F(\epsilon)| \leq 1$ , відмічено зеленим, а заборонені – червоним.

## ЗАНЯТТЯ 7

### Знаходження спектру частинки у потенціалі Морзе та Пешля-Теллера.

**Завдання 1.** Знайти енергетичний спектр частинки маси  $m$ , що знаходиться в потенціалі Морзе

$$V(x) = V_0(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}). \quad (7.1)$$

Побудуємо графік потенціалу, для цього дослідимо його поведінку на нескінченності. При  $x \rightarrow \pm\infty$  потенціал прямує до  $V(+\infty) \rightarrow -0$  та  $V(-\infty) \rightarrow +\infty$  відповідно.

Знайдемо мінімуми та максимуми потенціалу. Для цього дослідимо його першу похідну  $\frac{dV(x)}{dx} = 2\alpha V_0(e^{-\alpha x} - e^{-2\alpha x})$ . Бачимо, що  $\frac{dV(x)}{dx} = 0$  при  $x = 0$ . Якщо  $x > 0$ ,  $\frac{dV(x)}{dx} = 2\alpha V_0 \left( \frac{e^{2\alpha x} - e^{\alpha x}}{e^{\alpha x} e^{2\alpha x}} \right) > 0$ , тобто для всіх значень аргументу на додатній піввісі  $V(x)$  зростає. Якщо  $x < 0$ , то  $\frac{dV(x)}{dx} = 2\alpha V_0(e^{-\alpha x} - e^{-2\alpha x}) < 0$ , тобто для всіх від'ємних значень аргументу  $V(x)$  спадає. Отже, потенціал має лише один мінімум  $-V_{min} = -V_0$  при  $x = 0$ . З умови  $V(x) = 0$  знайдемо точку перетину графіку потенціала з віссю абсцис:  $x = -\ln 2/\alpha$ .

Для знаходження спектру  $E < 0$  частинки у потенціалній ямі необхідно розв'язати рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})\psi = E\psi. \quad (7.2)$$

Для цього зробимо наступну заміну змінних  $e^{\alpha x} = y$ , тоді рівняння (7.2) у нових змінних:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \alpha^2 y \frac{d\psi}{dy} + \alpha^2 y^2 \frac{d^2\psi}{dy^2} \right] + V_0(y^2 - 2y)\psi = E\psi. \quad (7.3)$$



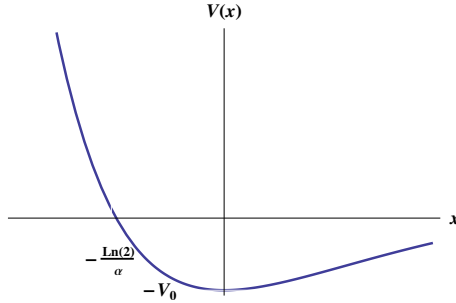


Рис. 7: Потенціал Морзе.

Обезрозміримо рівняння (7.3). Оскільки розмірність сталої Планка, енергії та константи  $\alpha$  відповідно рівні:

$$[\hbar] = \text{Дж} \cdot \text{сек} = \frac{\text{кг} \cdot \text{м}^2}{\text{сек}} \cdot \text{м} \cdot \text{сек} = \frac{\text{кг} \cdot \text{м}^2}{\text{сек}},$$

$$[E] = [V_0] = \frac{\text{кг} \cdot \text{м}^2}{\text{сек}^2}, [\alpha] = \frac{1}{\text{м}},$$

то наступна комбінація буде безрозмірною

$$\left[ \frac{mE}{\alpha^2 \hbar^2} \right] = 1.$$

Отримаємо обезрозмірене рівняння

$$y^2 \frac{d^2 \psi}{dy^2} + y \frac{d\psi}{dy} - \beta^2 (y^2 - 2y) \psi + \varepsilon \psi = 0, \quad (7.4)$$

де  $\beta^2 = 2mV_0/\alpha^2 \hbar^2$ ,  $\varepsilon = 2mE/\alpha^2 \hbar^2$  – безрозмірні параметри.

Дослідимо асимптотику розв'язків рівняння (7.4), використовуючи граничні умови  $\Psi(y \rightarrow 0, y \rightarrow +\infty) \rightarrow 0$ . При  $y \rightarrow +\infty$  диференціальне рівняння (7.4) за умови скінченності похідної хвильової функції спрощується до вигляду

$$\frac{d^2 \psi}{dy^2} - \beta^2 \psi = 0.$$

Його розв'язок  $\psi_\infty = C_1 e^{-\beta y} + C_2 e^{\beta y}$ . Проте другий доданок тут потрібно відкинути, оскільки хвильова функція мусить спадати на нескінченності, тому  $\psi_\infty \sim e^{-\beta y}$ .

При  $y \rightarrow 0$  шукаємо хвильову функцію у вигляді  $\psi_0 \sim y^k$ , тоді з (7.4) отримаємо:

$$k(k-1)y^k + ky^k - \beta^2 y^{k+2} + 2\beta^2 y^{k+1} + \varepsilon y^k = 0.$$

Нехтуючи доданками більшого порядку малості ніж  $y^k$ , маємо:

$$k^2 + \varepsilon = 0, \quad k = \pm\sqrt{-\varepsilon},$$

звідки  $\psi_0 \sim y^{\pm\sqrt{-\varepsilon}}$ . Якщо  $\varepsilon > 0$ , то  $\psi_0 \sim y^{\pm i\sqrt{\varepsilon}} = e^{\pm i\sqrt{\varepsilon}x}$  – такий розв'язок забезпечує "правильну" поведінку; спектр енергій неперервний. Але з умови задачі, оскільки ми шукаємо енергії зв'язаних станів,  $\varepsilon \equiv -\lambda^2 < 0$ , тоді  $\psi_0 \sim y^{\pm\lambda}$ , проте значення  $-\lambda$  нас не влаштовує, адже не виконується умова скінченності хвильової функції  $\psi \sim y^{-\lambda} \rightarrow +\infty$ . Тому обираємо розв'язок  $\psi_0 \sim y^\lambda$  при  $\lambda > 0$ .

Отже, для знаходження загального розв'язку представимо хвильову функцію у вигляді

$$\psi(y) = y^\lambda e^{-\beta y} F(y), \quad (7.5)$$

де  $F(y)$  – невідома функція. Після підстановки (7.5) у рівняння (7.4), використовуючи

$$\frac{d\psi}{dy} = y^\lambda e^{-\beta y} F'(y) + [\lambda y^{\lambda-1} - \beta y^\lambda] F(y) e^{-\beta y},$$

$$\frac{d^2\psi}{d^2y} = y^\lambda e^{-\beta y} F''(y) + [2\lambda y^{\lambda-1} - 2\beta y^\lambda] F'(y) e^{-\beta y} +$$

$$+ [-\beta\lambda y^{\lambda-1} + \beta^2 y^\lambda + \lambda(\lambda-1)y^{\lambda-2} - \beta\lambda y^{\lambda-2}] F(y) e^{-\beta y},$$

$$-\beta^2(y^2 - 2y)\psi + \varepsilon\psi = (-\beta^2 y^{\lambda+2} + 2\beta^2 y^{\lambda+1} - \lambda^2 y^\lambda) e^{-\beta y} F(y),$$

отримаємо нове рівняння:

$$y^2 \frac{d^2 F}{dy^2} + [(1 + 2\lambda)y - 2\beta y^2] \frac{dF}{dy} + 2\beta y \left[ \beta - \lambda - \frac{1}{2} \right] F(y) = 0. \quad (7.6)$$

Шукаючи розв'язок останнього рівняння у вигляді ряду  $F(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k$ , маємо:

$$\begin{aligned} & \sum_{k \geq 1} \{k(k-1) + (1+2\lambda)k\} a_k y^{k-1} + \\ & + \sum_{k \geq 0} \left\{ -2\beta k + 2\beta \left[ \beta - \lambda - \frac{1}{2} \right] \right\} a_k y^k = 0. \end{aligned}$$

У перших двох доданках можемо покласти  $k-1 = k'$ , потім  $k'$  знову перепозначити як  $k$ . Перепишемо наступним чином:

$$\begin{aligned} & \sum_{k \geq 0} \{k(k+1) + (1+2\lambda)(k+1)\} a_{k+1} y^k + \\ & + \sum_{k \geq 0} \left\{ -2\beta k + 2\beta \left[ \beta - \lambda - \frac{1}{2} \right] \right\} a_k y^k = 0. \end{aligned}$$

Вся сума рівна нулю лише при умові, що сума коефіцієнтів при однакових степенях  $y$  рівна нулю, звідки отримуємо:

$$k(k+1)a_{k+1} + (1+2\lambda)(k+1)a_{k+1} - 2\beta k a_k + 2\beta \left[ \beta - \lambda - \frac{1}{2} \right] a_k = 0, \quad (7.7)$$

отже рекурентне співвідношення між коефіцієнтами:

$$a_{k+1} = a_k \frac{2\beta(k - \beta + \lambda - 1/2)}{(k+1)(k+1+2\lambda)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (7.8)$$

При великих  $k$  рекурентне співвідношення перетворюється на  $a_{k+1} \approx a_k 2\beta/k$ , що означає, що функція  $F(y)$  буде експоненційно розбігатися  $F_{\infty}(y) \sim e^{2\beta y}$  (так як  $e^{2\beta y} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\beta y)^k}{k!}$ ). Тому ряд  $F(y)$  необхідно

обірвати, тобто після деякого  $k = n$  коефіцієнти ряду  $a_{n+1} = 0$ ,  $a_{n+2} = 0$  і так далі, рівні нулю. З цієї умови отримуємо, що

$$2\beta[\lambda + 1/2 + n - \beta] = 0,$$

тобто

$$\lambda = \beta - \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.9)$$

Після підстановки параметрів  $\varepsilon = -\lambda^2$  і  $\beta$  отримуємо дискретний набір енергій  $E = E_n$ :

$$E_n = -V_0 \left[ 1 - \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2mV_0}} \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.10)$$

Оскільки  $\lambda = \beta - (n + 1/2) > 0$ , то дискретний спектр обмежений певною кількістю рівнів і залежить від глибини ями  $V_0$ :

$$\beta = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\alpha\hbar} > n + \frac{1}{2}.$$

Якщо  $\beta < \frac{1}{2}$ , тобто якщо  $V_0 < \frac{\alpha^2\hbar^2}{8m}$ , то дискретний спектр взагалі відсутній.

**Завдання 2.** Знайти енергетичний спектр та хвильові функції частинки маси  $m$ , що знаходиться у потенціальному полі (модифікованому потенціалі Пешля-Теллера)

$$V(x) = -\frac{V_0}{\operatorname{ch}^2(\alpha x)}. \quad (7.11)$$

Спектр та хвильові функції частинки у потенціалі (8.10) знайдемо з розв'язку рівняння Шредінгера при  $E < 0$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{|V_0|}{\operatorname{ch}^2(\alpha x)} \psi = -|E| \psi. \quad (7.12)$$

Введемо наступну заміну  $y = \operatorname{th}(\alpha x)$ . Тоді в силу того, що  $-\infty < x < +\infty$ , область визначення нових змінних  $-1 < y < 1$ . Після такої заміни

$$\frac{1}{\operatorname{ch}^2(\alpha x)} = \frac{\operatorname{ch}^2(\alpha x) - \operatorname{sh}^2(\alpha x)}{\operatorname{ch}^2(\alpha x)} = 1 - \operatorname{th}^2(\alpha x) = 1 - y^2,$$

співвідношення для похідних:

$$\frac{d}{dx} = \frac{dy}{dx} \frac{d}{dy} = \frac{\alpha}{\operatorname{ch}^2(\alpha x)} \frac{d}{dy},$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} &= \frac{d^2 y}{dx^2} \frac{d}{dy} + \left( \frac{dy}{dx} \right)^2 \frac{d^2}{dy^2} = \frac{-2\alpha^2 \operatorname{sh}(\alpha x)}{\operatorname{ch}^3(\alpha x)} \frac{d}{dy} + \left( \frac{\alpha}{\operatorname{ch}^2(\alpha x)} \right)^2 \frac{d^2}{dy^2} = \\ &= -2\alpha^2 y (1 - y^2) \frac{d}{dy} + \alpha^2 (1 - y^2)^2 \frac{d^2}{dy^2}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Підставимо (7.13) у рівняння (7.12):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \alpha^2 (1 - y^2)^2 \frac{d^2 \psi}{dy^2} - 2\alpha^2 y (1 - y^2) \frac{d\psi}{dy} \right] - |V_0| (1 - y^2) \psi = -|E| \psi$$

і поділимо на  $-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$ :

$$(1 - y^2)^2 \frac{d^2 \psi}{dy^2} - 2y(1 - y^2) \frac{d\psi}{dy} + \frac{2m|V_0|}{\alpha^2 \hbar^2} (1 - y^2) \psi - \frac{2m|E|}{\alpha^2 \hbar^2} \psi = 0. \quad (7.14)$$

Ввівши у (7.14) наступні позначення для безрозмірних параметрів  $\beta = 2m|V_0|/\alpha^2 \hbar^2 > 0$  та  $\varepsilon = 2m|E|/\alpha^2 \hbar^2 > 0$  та поділивши усі доданки на  $1 - y^2$ , отримаємо рівняння Шредінгера у вигляді:

$$\frac{d}{dy} \left( (1 - y^2) \frac{d\psi}{dy} \right) + \left[ \beta - \frac{\varepsilon}{(1 - y^2)} \right] \psi = 0. \quad (7.15)$$

Функція  $\psi(y)$  з умов скінченності та неперервності хвильової функції повинна бути обмеженою на інтервалі  $-1 < y < 1$ , а також в особливих точках рівняння (7.15), тобто  $|\psi(\pm 1)| < \infty$ .

Перепишемо (7.15) іншим чином, для чого введемо заміну  $y = \cos \theta$ , ( $\theta = \arccos y$ ), де  $\theta$  – кут сферичної системи координат  $0 < \theta < \pi$ . Така заміна виправдана, оскільки  $y$  лежить у проміжку  $(-1, +1)$ .

Запишемо співвідношення між похідними в нових та старих координатах:

$$\frac{d}{dy} = \frac{d\theta}{dy} \frac{d}{d\theta} = -\frac{1}{\sqrt{1-y^2}} \frac{d}{d\theta} = -\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta},$$

та підставимо його в рівняння (7.15):

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\psi}{dy} \right) + \left[ \beta - \frac{\varepsilon}{\sin^2\theta} \right] \psi = 0. \quad (7.16)$$

Бачимо, що останнє рівняння співпадає з відомим рівнянням для приєднаних функцій Лежандра  $P_l^m$ , якщо перепозначити  $\beta = l(l+1)$  та  $\varepsilon = m^2$ :

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{dP_l^m}{d\theta} \right) + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] P_l^m = 0, \quad (7.17)$$

де  $l = 0, 1, 2, \dots$ ;  $m = 0, 1, 2, \dots, l$ , або  $m - l = -n$ , де  $n = 0, 1, 2, \dots$ .

Приєднані функції Лежандра  $P_l^m$  отримуються з поліномів Лежандра  $P_l$  наступним чином:

$$dP_l^m = \sin^m\theta \frac{d^m P_l(\cos\theta)}{d(\cos\theta)^m}. \quad (7.18)$$

Формула для  $P_l(\cos\theta)$ :

$$P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d(\cos\theta)^l} (\cos^2\theta - 1)^l. \quad (7.19)$$

Диференціальне рівняння, розв'язком якого є поліноми Лежандра:

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{dP_l}{d\theta} \right) + l(l+1)P_l = 0. \quad (7.20)$$

Отже, умовою існування нетривіального обмеженого розв'язку рівняння Шредінгера (7.15) є умова  $m - l = -n$ . Після підстановки параметрів з рівняння (7.16) отримаємо умову для визначення спектру

$$m - l = \sqrt{\varepsilon} + \frac{1}{2} \mp \sqrt{\frac{1}{4} + \beta} = -n, \quad (7.21)$$

звідки

$$\sqrt{\varepsilon_{1,2}} = \frac{-(2n+1) \pm \sqrt{1+4\beta}}{2}.$$

Проте оскільки  $\varepsilon > 0$ , обираємо розв'язок зі знаком "+" і після підстановки явного вигляду параметрів  $\beta$  та  $\varepsilon$ , отримаємо дискретний спектр енергій, який залежить від номеру рівня  $n$ :

$$E_n = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m} \left[ -(2n+1) + \sqrt{1 + \frac{8mV_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right]^2. \quad (7.22)$$

Оскільки  $\sqrt{\varepsilon} > 0$ , то  $\beta > n(n+1)$ , звідки отримуємо нерівність:

$$|V_0| > \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} (n+1)n.$$

Тобто хоча б один дискретний рівень  $n = 1$  існує, коли глибина ями

$$|V_0| > \frac{\alpha^2 \hbar^2}{m}.$$

## ЗАНЯТТЯ 8

### Одновимірний квантовий гармонічний осцилятор.

**Завдання 1.** Знайти рівні енергії  $E$  та хвильові функції  $\Psi$  для одновимірного гармонічного осцилятора  $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ .

Рівняння Шредінгера для одновимірного квантового гармонічного осцилятора має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E\psi. \quad (8.1)$$

Згідно з властивостями хвильової функції при  $x \rightarrow \pm\infty$  повинна виконуватись умова  $\psi(x) \rightarrow 0$ . Обезрозміримо рівняння, для цього зробимо заміну  $x = \alpha\zeta$  та перепишемо рівняння Шредінгера наступним чином:

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} + \frac{2mE\alpha^2}{\hbar^2} \psi - \frac{m^2\omega^2\alpha^4\zeta^2}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (8.2)$$

Визначимо розмірність та вигляд константи  $\alpha$ , покладаючи розмірність  $\left[\frac{m^2\omega^2\alpha^4}{\hbar^2}\right] = 1$ , тоді  $\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  і має розмірність довжини. Введемо позначення  $\lambda = \frac{2mE\alpha^2}{\hbar^2} = \frac{2E}{\hbar\omega}$  для безрозмірної енергії. Тоді отримаємо безрозмірне рівняння (8.1) у вигляді:

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} + (\lambda - \zeta^2)\psi = 0. \quad (8.3)$$

Для того щоб задовольнити граничним умовам  $\Psi(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$  знайдемо асимптотичний вигляд рівняння при  $\zeta \rightarrow \infty$ :

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\zeta^2} - \zeta^2\psi_\infty = 0. \quad (8.4)$$



Його розв'язок  $\psi_\infty \sim e^{\pm \frac{\zeta^2}{2}}$ . Проте з граничних умов  $\psi_\infty \rightarrow 0$ , при  $\zeta \rightarrow \pm\infty$ , маємо обрати асимптотику хвильової функції у вигляді  $\psi_\infty \sim e^{-\frac{\zeta^2}{2}}$ .

Отже, шукаємо розв'язок рівняння (8.3) у вигляді

$$\psi(\zeta) = v(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}}. \quad (8.5)$$

Підставивши (8.5) у (8.3), та враховуючи

$$\frac{d\psi}{d\zeta} = \psi' = -\zeta v(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}} + v'(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}},$$

$$\frac{d^2\psi}{d\zeta^2} = \psi'' = -v(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}} + \zeta^2 v(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}} - \zeta v'(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}} + v''(\zeta)e^{-\frac{\zeta^2}{2}},$$

отримуємо:

$$v''(\zeta) - 2\zeta v'(\zeta) + (\lambda - 1)v(\zeta) = 0. \quad (8.6)$$

Розв'язок рівняння (8.6) шукаємо у вигляді степеневого ряду

$$v(\zeta) = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \zeta^p. \quad (8.7)$$

Після підстановки у (8.6) у отримаємо

$$\sum_{p \geq 2} p(p-1)a_p \zeta^{p-2} - \sum_{p \geq 0} 2pa_p \zeta^p + (\lambda - 1) \sum_{p \geq 0} a_p \zeta^p = 0,$$

де у першому доданку покладемо  $p - 2 = p'$ , потім  $p'$  знову перепозначимо як  $p$  оскільки індекс сумування не має значення:

$$\sum_{p=0}^{\infty} \{(p+2)(p+1)a_{p+2} - 2pa_p + (\lambda - 1)a_p\} \zeta^p = 0.$$

За умови нетривіального розв'язку вираз рівний нулю лише тоді, коли сума коефіцієнтів при однакових степенях  $\zeta$  рівна нулю, звідки отримуємо рекурентне співвідношення між коефіцієнтами ряду (8.7):

$$a_{p+2} = a_p \frac{2p+1-\lambda}{(p+2)(p+1)}. \quad (8.8)$$

Дослідимо збіжність ряду (8.7). Для цього візьмемо відношення коефіцієнтів

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{p+2}}{a_p} \right| = \lim_{p \rightarrow \infty} \left| \frac{2p+1-\lambda}{(p+2)(p+1)} \right| \sim \frac{2}{p} \rightarrow 0.$$

Отже, ряд (8.7) має нескінченний радіус збіжності, а функція, яку він описує, буде експоненційно розбігатися  $v(\zeta) \sim e^{\zeta^2}$  (так як  $e^{\zeta^2} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\zeta^{2p}}{p!}$ ). Тому потрібно обірвати ряд, інакше не задовольнятимуться граничні умови  $\psi \rightarrow 0$  при  $\zeta \rightarrow \pm\infty$ . Обірвемо ряд коли  $p = n$ , тобто  $a_n \neq 0$  але  $a_{n+2} = 0$ . З цієї умови отримуємо, що  $2n+1-\lambda = 0$ , тобто

$$\lambda = 2n+1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.9)$$

Необхідно зауважити, що оскільки рівняння (8.6) є інваріантним відносно заміни  $\zeta \rightarrow -\zeta$ , то його розв'язки можуть бути парними  $v(\zeta) = a_0 + a_2\zeta^2 + a_4\zeta^4 + \dots$ ; або непарними  $v(\zeta) = a_1\zeta + a_3\zeta^3 + a_5\zeta^5 + \dots$ . Отже, рекурентне співвідношення (8.8) пов'язує лише парні, або непарні коефіцієнти ряду, тому, якщо розв'язки рівняння (8.6) є парними, то умова обриву ряду застосовується лише до парних коефіцієнтів, а усі непарні покладаються рівними нулю. Аналогічно робимо у випадку, коли обираємо непарні розв'язки.

Отже, скориставшись введеним раніше позначенням  $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$  та умовою обриву ряду (8.9), маємо дискретний набір енергій  $E = E_n$ :

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.10)$$

Таким чином, квантування енергії є наслідком обмеженості хвильової функції. Для гармонічного осцилятора спектр енергій є серією еквідистантних рівнів:  $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$ . Цікавою особливістю спектру гармонічного осцилятора є ненульове значення енергії основного стану  $E_0 = \hbar\omega/2$ .

Для знаходження хвильових функцій одновимірного осцилятора підставимо значення  $\lambda$  з рівняння (8.9) у (8.6):

$$v''(\zeta) - 2\zeta v'(\zeta) + 2nv(\zeta) = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.11)$$

Бачимо, що це рівняння Ерміта для поліномів Чебишева - Ерміта  $H_n$ . Звідки можемо одразу записати загальний розв'язок рівняння (8.3)

$$\psi_n(\zeta) = A_n e^{-\frac{\zeta^2}{2}} H_n(\zeta), \quad (8.12)$$

де  $A_n$  - коефіцієнт нормування. Пригадуємо, що  $x = \alpha\zeta = \sqrt{\hbar/m\omega} \zeta$ , тоді

$$\psi_n(x) = A'_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right), \quad (8.13)$$

$A'_n$  - коефіцієнт нормування. Поліноми Чебишева - Ерміта складають повну ортогональну систему з вагою  $e^{-x^2}$  на інтервалі  $(-\infty, +\infty)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = \begin{cases} 0, & m \neq n; \\ 2^n n! \sqrt{\pi}, & m = n, \end{cases}$$

а їхня диференціальна форма запису

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

Отже, з врахуванням сталої нормування, хвильова функція гармонічного осцилятора:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right), \quad (8.14)$$

Для основного стану гармонічного осцилятора  $n = 0$ :

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2},$$

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

З останнього співвідношення видно, що хвильова функція основного стану є симетричною (не містить вузлів), скінченною та додатньою. Хвильові функції наступних рівнів можна так само знайти з виразу (8.14).

## ЗАНЯТТЯ 9

### Гармонічний осцилятор в термінах операторів народження та знищення.

**Завдання 1.** Використовуючи метод операторів народження та знищення, знайти рівні енергії та хвильові функції для одновимірного гармонічного осцилятора  $V = \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$ .

Гамільтоніан рівняння Шредингера для гармонічного осцилятора в термінах операторів імпульсу та координати має вигляд:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad (9.1)$$

та є квадратичною формою, отже, можемо розкласти його на множники. Для цього запишемо наступні оператори:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right), \quad (9.2)$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} - i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right). \quad (9.3)$$

Порахуємо добуток

$$\hat{a}^+ \hat{a} = \frac{1}{2} \left( \frac{m\omega}{\hbar} \hat{x}^2 + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} i(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) + \frac{\hat{p}^2}{m\hbar\omega} \right),$$

тобто

$$\hat{a}^+ \hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} - \frac{1}{2}.$$

Аналогічно отримаємо

$$\hat{a} \hat{a}^+ = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{1}{2}.$$

З отриманих добутків бачимо, що комутатор цих операторів рівний  $\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1$ .

Гамільтоніан, виписаний через введені оператори, матиме вигляд

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right), \quad (9.4)$$

тому рівняння Шредінгера набуває вигляду

$$\hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi. \quad (9.5)$$

Знайдемо фізичний зміст операторів  $\hat{a}^+$  і  $\hat{a}$ . Для цього подіємо на (9.5) зліва оператором  $\hat{a}^+$ :

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

Використавши  $\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}\hat{a}^+ - 1$  для першого доданку, перенесемо в праву частину рівності  $\hbar\omega\hat{a}^+\psi$  та винесемо за дужки з обох сторін рівності оператор  $\hat{a}^+$  і отримаємо рівняння на власні функції та власні значення, лише з хвильовою функцією  $\psi_1 = \hat{a}^+\psi$  та енергією  $E_1 = E + \hbar\omega$

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

Аналогічно діючи  $n$  разів оператором  $\hat{a}^+$  на (9.5), отримаємо хвильові функції та значення енергії вищих енергетичних рівнів

$$\psi_n = (\hat{a}^+)^n \psi_0, \quad E_n = E_0 + n\hbar\omega. \quad (9.6)$$

Якщо подіємо на (9.5) зліва оператором  $\hat{a}$  отримаємо:

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

Провівши перетворення аналогічні до попередніх, матимемо

$$\hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hat{a}\psi = (E - \hbar\omega)\hat{a}\psi,$$

тобто знову отримали рівняння на власні функції та власні значення, лише з хвильовою функцією  $\psi'_1 = \hat{a}\psi$ , енергією  $E_1 = E - \hbar\omega$ . Діючи  $n$  разів оператором  $\hat{a}$  на (9.5), одержуємо

$$\psi_0 = (\hat{a})^n \psi_n, \quad E_0 = E_n - n\hbar\omega, \quad (9.7)$$

де  $\psi_0$  деякий початковий стан з енергією  $E_0$ .

З рівнянь (9.6) та (9.7) видно, що оператор  $\hat{a}^+$  при дії на деякий стан  $\psi_n$  збільшує квантове число  $n$  цього стану на одиницю. При цьому енергія частинки збільшується на квант  $\hbar\omega$ . Якщо уявити, що ми маємо справу з багаточастинковою системою, в якій кожна частинка має фіксовану енергію  $\hbar\omega$ , то збільшення енергії такої системи на  $\hbar\omega$  відповідає “народженню” частинки з такою ж енергією, виходячи з такої аналогії  $\hat{a}^+$  називають оператором народження. Оператор  $\hat{a}$  при дії на деяку хвильову функцію  $n$ -того стану зменшує енергію системи на  $\hbar\omega$ , тобто “знищує” частинку з енергією  $\hbar\omega$  і тому є оператором знищення.

Нехай,  $\psi_0$  – хвильова функція основного (вакуумного) стану з найнижчою енергією, тоді за визначенням:

$$\hat{a}\psi_0 = 0. \quad (9.8)$$

Енергію основного стану знайдемо з рівняння

$$\hbar\omega \left( \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi_0 = E_0 \psi_0, \quad (9.9)$$

тоді використовуючи (9.8) отримуємо

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Отже, в загальному випадку діючи оператором народження на (9.9)  $n$  разів отримаємо вираз для спектру енергії гармонічного осцилятора:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (9.10)$$

Хвильові функції вищих станів гармонічного осцилятора знайдемо з умови:

$$\psi_n = C_n (\hat{a}^+)^n \psi_0, \quad (9.11)$$

$C_n$  – сталі нормування, які шукаються з умови  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n dq = 1$ .

Для знаходження явного вигляду хвильової функції основного стану запишемо безрозмірний гамільтоніан рівняння Шредингера (9.1):

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left( \frac{d^2}{d\zeta^2} + \zeta^2 \right), \quad (9.12)$$

де  $\zeta = x/\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

Оператори знищення та народження в безрозмірених змінних мають вигляд:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{d}{d\zeta} + \zeta \right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -\frac{d}{d\zeta} + \zeta \right). \quad (9.13)$$

Можна пересвідчитись, що заміна змінних не змінює значення комутатора  $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ . З означення функції основного стану  $\hat{a}\psi_0 = 0$ , використовуючи явний вигляд оператора  $\hat{a}$ , отримаємо рівняння

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{d\psi_0}{d\zeta} + \zeta\psi_0 \right) = 0, \quad (9.14)$$

розв'язок якого

$$\psi_0 = C_0 e^{-\frac{\zeta^2}{2}},$$

де  $C_0$  – постійна нормування, яку знаходимо з умови

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0| dx = 1, \quad \text{тоді} \quad C_0 = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}. \quad (9.15)$$

Повертаючись до розмірних змінних, отримаємо хвильову функцію основного стану у вигляді:

$$\psi_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (9.16)$$

Хвильову функцію  $\psi_n$  вищих станів знайдемо як:

$$\psi_n(\zeta) = C_n (\hat{a}^+)^n \psi_0 = C_n \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left( \zeta - \frac{d}{d\zeta} \right)^n e^{-\frac{\zeta^2}{2}}, \quad (9.17)$$

що можна виразити через поліноми Чебишева - Ерміта:

$$H_n(\zeta) = e^{\frac{\zeta^2}{2}} \left( \zeta - \frac{d}{d\zeta} \right)^n e^{-\frac{\zeta^2}{2}} = e^{\zeta^2} \left( -\frac{d}{d\zeta} \right)^n e^{-\zeta^2}, \quad (9.18)$$

отже,

$$\psi_n(x) = C_n \frac{1}{\sqrt{2^n}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right),$$

де значення констант нормування  $C_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4}$  знаходимо з умови нормування хвильової функції, використовуючи умову ортогональності поліномів Чебишева - Ерміта

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}.$$

Остаточно хвильова функція гармонічного осцилятора  $n$ -того стану:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right). \quad (9.19)$$

### Завдання для самостійної роботи.

1. Набір хвильових функцій  $\psi_n$  є ортонормованим. В цьому легко переконатись з інтегралу

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx = 0, \quad \text{де } m \neq n. \quad (9.20)$$

2. За допомогою операторів народження та знищення доведіть, що при певному нормуванні виконується тотожність для поліномів Ерміта  $2xH_n = H_{n+1} + 2nH_{n-1}$ .

3. Методом операторів народження та знищення розгляньте задачу про спектр частинки у нескінченній потенціальній ямі. (Використати метод факторизації, де обрати у вигляді  $\hat{a}_0 = \hat{p} + i\alpha_0 f_0(x)$ , де  $f_0(x)$  - деяка гладка функція. [1])



## ЗАНЯТТЯ 10

### Обчислення коефіцієнтів відбиття і проходження через потенціальний бар'єр

**Завдання 1.** Знайти коефіцієнти проходження і відбиття для бар'єру:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > a \\ V_0, & 0 \leq x \leq a. \end{cases} \quad (10.1)$$

Розглянути випадки, коли  $0 < E < V_0$  та  $0 < V_0 < E$ .

Існування нетривіального розв'язку цієї задачі при знаходженні коефіцієнта проходження частинки пов'язано з тим, що у квантовій механіці, на відміну від класичної, можливий рух в областях, де  $E - U < 0$ . Це приводить до того, що існує ненульова імовірність проходження частинки через бар'єр. В класичній механіці кінетична енергія є додатною величиною  $E - U > 0$ , тому, коли частинка з енергією  $E$  налітає на потенціальний бар'єр (стінку), потенційна енергія якої  $U$  більша за енергію частинки ( $U > E$ ), вона відбивється від бар'єра. Тобто рух частинки в області простору, де  $U > E$ , не можливий.

Для знаходження розв'язку розіб'ємо задачу на три області, так, як це вказано на Рис.8.

Для кожної з областей, підставляючи відповідне значення потенціалу до рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_I(x)}{dx^2} + V(x) \Psi_I(x) = E \Psi_I(x), \quad (10.2)$$

знайдемо відповідні розв'язки

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= A_1 e^{ik_0 x} + A_2 e^{-ik_0 x}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}; \\ \Psi_{II}(x) &= B_1 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}; \\ \Psi_{III}(x) &= C_1 e^{ik_0 x} + C_2 e^{-ik_0 x}. \end{aligned} \quad (10.3)$$

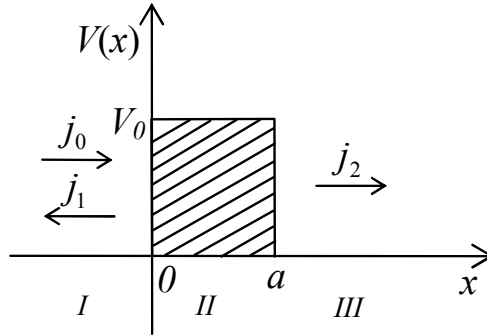


Рис. 8: Одновимірний потенціальний бар'єр шириною  $a$ . Тут  $j_0$  – густина потоку імовірності падаючої хвилі (потоку частинок),  $j_1$  – відбитої хвилі,  $j_2$  – хвилі, що пройшла крізь бар'єр.

Отримані розв'язки описують обидва випадки, коли  $E < V_0$  та  $E > V_0$ . В першому випадку частинка налітає на стінку бар'єра при цьому коефіцієнт  $k$  є комплексним і хвиля частково відбивається, а частково тунелює через бар'єр. В другому випадку частинка пролітає над бар'єром і  $\Psi_{II}$  є періодичною функцією. На відміну від класичної механіки в другому випадку  $E > V_0$  існує не нульова ймовірність того, що частинка відіб'ється від бар'єру. Таке явище називатимемо надбар'єрним відбиттям.

Коефіцієнти проходження  $R$  та відбиття  $D$ , які є фізично вимірюваними величинами, знаходимо як відношення відповідно потоків хвилі, що пройшла  $j_2$  та відбилася  $j_1$  до потоку налітаючих частинок  $j_0$ . При цьому виконується закон збереження потоку у вигляді співвідношень:  $D + R = 1$ ,  $j_0 = j_1 + j_2$ .

Потік ймовірності в одновимірному випадку є скалярною величиною і пов'язаний з хвильовою функцією наступним співвідношенням:

$$j(x) = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^*(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} - \Psi(x) \frac{d\Psi^*(x)}{dx} \right). \quad (10.4)$$

Густину потоку імовірності падаючої хвилі  $j_0$  (потоку частинок) вважаємо відомою величиною. Тому знайдемо потоки імовірності у областях  $I$  та  $III$ . Зауважимо, що для області  $III$  в хвильовій функції коефіцієнт  $C_2 = 0$ , оскільки немає відбиття всередині бар'єра. Повний

потік імовірності зліва від бар'єра (в області  $I$ ):

$$\begin{aligned}
 j &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi_I^*(x) \frac{d\psi_I(x)}{dx} - \psi_I(x) \frac{d\psi_I^*(x)}{dx} \right) \\
 &= \frac{\hbar}{2mi} [(A_1^* e^{-ik_0x} + A_2^* e^{ik_0x}) (A_1 ik_0 e^{ik_0x} + A_2 (-ik_0) e^{-ik_0x}) \\
 &\quad - (A_1 e^{ik_0x} + A_2 e^{-ik_0x}) (A_1^* (-ik_0) e^{-ik_0x} + A_2^* ik_0 e^{ik_0x})] \\
 &= \frac{\hbar}{2mi} (|A_1|^2 ik_0 - |A_2|^2 ik_0 + |A_1|^2 ik_0 - |A_2|^2 ik_0) \\
 &= \frac{\hbar k_0}{m} (|A_1|^2 - |A_2|^2).
 \end{aligned}$$

Оскільки повний потік є різницею між потоками падаючої та відбитої хвилі

$$j = j_0 - j_1 \quad \Rightarrow \quad j_0 = |A_1|^2 \frac{\hbar k_0}{m}, \quad j_1 = |A_2|^2 \frac{\hbar k_0}{m}.$$

Потік імовірності справа від бар'єра (в зоні  $III$ ) є потоком хвилі, що пройшла крізь бар'єр:

$$\begin{aligned}
 j_2 &= \frac{\hbar}{2mi} [(C_1^* e^{-ik_0x}) (ik_0 C_1 e^{ik_0x}) - (C_1 e^{ik_0x}) (-ik_0 C_1^* e^{-ik_0x})] \\
 &= \frac{\hbar}{2mi} (|C_1|^2 ik_0 + |C_1|^2 ik_0) = |C_1|^2 \frac{\hbar k_0}{m}.
 \end{aligned}$$

Тепер можемо записати коефіцієнти проходження та відбиття як відношення коефіцієнтів хвильових функцій

$$D = \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2}, \quad R = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2}.$$

Коефіцієнт  $A_1$  можна вважати відомим, оскільки відомий потік імовірності  $j_0$ , а для знаходження коефіцієнтів  $A_2$  та  $C_1$  використаємо умову неперервності хвильової функції та її похідної на границях областей

$$\begin{aligned}
 \psi_I(0) &= \psi_{II}(0), & \psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a), \\
 \psi'_I(0) &= \psi'_{II}(0), & \psi'_{II}(a) &= \psi'_{III}(a).
 \end{aligned}$$

Отримаємо наступну систему рівнянь:

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = B_1 + B_2, \\ k_0(A_1 - A_2) = k(B_1 - B_2), \\ B_1 e^{ika} + B_2 e^{-ika} = C_1 e^{ik_0 a}, \\ k(B_1 e^{ika} - B_2 e^{-ika}) = k_0 C_1 e^{ik_0 a}. \end{cases} \quad (10.5)$$

Поділимо в системі (10.5) всі рівняння на відомий коефіцієнт  $A_1$  та введемо нові позначення:

$$\frac{A_2}{A_1} = A, \quad \frac{B_1}{A_1} = B, \quad \frac{B_2}{A_1} = B', \quad \frac{C_1}{A_1} = C,$$

і відповідно

$$D = |C|^2, \quad R = |A|^2.$$

Маємо

$$\begin{cases} 1 + A = B + B', \\ \frac{k_0}{k}(1 - A) = B - B', \\ B e^{ika} + B' e^{-ika} = C e^{ik_0 a}, \\ \frac{k}{k_0}(B e^{ika} - B' e^{-ika}) = C e^{ik_0 a}. \end{cases} \quad (10.6)$$

**Завдання для самостійної підготовки.** Знайти розв'язок неоднорідної системи лінійних рівнянь (10.6) відносно коефіцієнтів  $A$ ,  $B$ ,  $B'$  та  $C$  двома способами.

З розв'язку системи (10.6)

$$C = \frac{e^{ik_0 a}}{\cos(ka) - \frac{i}{2} \left( \frac{k_0}{k} + \frac{k}{k_0} \right) \sin(ka)}.$$

Коефіцієнт проходження через бар'єр:

$$D = |C|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right)^2 \sin^2(ka)}.$$

Якщо підставити явні вирази для  $k$  та  $k_0$ ,

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(E - V_0)}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}},$$

отримаємо

$$D = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2(ka)}. \quad (10.7)$$

Коефіцієнт відбиття від бар'єру знайдемо як

$$R = 1 - D = \frac{\left(1 - \frac{k_0^2}{k^2}\right)^2 \sin^2(ka)}{4\frac{k_0^2}{k^2} + \left(1 - \frac{k_0^2}{k^2}\right)^2 \sin^2(ka)} = \frac{\sin^2(ka)}{\frac{4E(E-V_0)}{V_0^2} + \sin^2(ka)}. \quad (10.8)$$

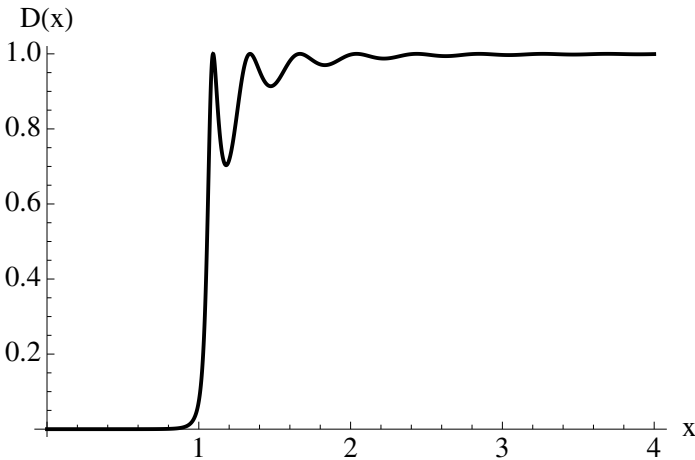


Рис. 9: Залежність коефіцієнту проходження  $D$  від параметра  $x = \sqrt{\frac{E}{V_0}}$

Коефіцієнти (10.7) та (10.8) зручно використовувати для випадку  $E > V_0$ , оскільки  $k$  тоді є дійсною величиною. З цих виразів можна проаналізувати граничний випадок  $E \rightarrow \infty$ . Бачимо, що в такому випадку  $D \rightarrow 1$ , а  $R \rightarrow 0$ , тобто бар'єр стає майже повністю прозорим. Протилежною є ситуація коли  $E \rightarrow V_0$ , тоді коефіцієнт прозорості  $D$  прямує до нуля. Але, коли енергія частинки  $E > V_0$  є скінченною величиною, можемо бачити що у загальному випадку  $D \neq 1$  тобто

маємо ненульову ймовірність того, що частинка відіб'ється від бар'єру. Більш того з вигляду залежності (10.7) можна побачити, що при  $ka = \pi n, n = 1, 2, \dots \Rightarrow \sin ka = 0$  і  $D = 1$ , тобто бар'єр стає повністю прозорим (Див. Рис. 9). Ці значення енергії

$$k^2 = n^2 \frac{\pi^2}{a^2}, \quad E_n = V_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

є резонансними станами системи. В такому випадку на довжині бар'єра вкладається ціле число напівхвиль і резонансні рівні, як це можна помітити, збігаються з рівнями енергії частинки в нескінченній прямокутній ямі ширини  $a$ , але зсунутими на величину  $V_0$ .

У випадку, коли  $E < V_0$ , хвильове число є уявною величиною, а оскільки коефіцієнти проходження та відбиття є завжди дійсними величинами, то їх зручно виразити для такого випадку через дійсну величину  $\chi$ , введено наступним чином:

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(E - V_0)} = i\chi, \quad \chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}|E - V_0|}.$$

В такому випадку

$$D = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_0}{\chi} + \frac{\chi}{k_0} \right)^2 \operatorname{sh}^2(\chi a)} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2(\chi a)},$$

$$R = \frac{\left( 1 + \frac{k_0^2}{\chi^2} \right)^2 \operatorname{sh}^2(\chi a)}{4 \frac{k_0^2}{\chi^2} + \left( 1 + \frac{k_0^2}{\chi^2} \right)^2 \operatorname{sh}^2(\chi a)} = \frac{\operatorname{sh}^2(\chi a)}{\frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2} + \operatorname{sh}^2(\chi a)}.$$

З цих співвідношень можна побачити, що в граничному випадку  $V_0 \rightarrow \infty$  (або  $E \rightarrow 0$ ) бар'єр стає повністю непрозорим, тобто  $R \rightarrow 1$ ,  $D \rightarrow 0$ . Так само при  $a \rightarrow \infty$  та  $E < V_0$  бар'єр також стає непрозорим, оскільки  $\operatorname{sh}^2(\chi a) \rightarrow \infty$  і відповідно  $R \rightarrow 1$ .

## ЗАНЯТТЯ 11

### Проходження частинки через бар'єр у формі потенціала Пешля-Теллера.

**Завдання 1.** Знайти коефіцієнти проходження та відбиття потоку частинок через потенціал Пешля-Теллера, який має вигляд

$$U(x) = \frac{U_0}{\operatorname{ch}^2 \alpha x}. \quad (11.1)$$

Для розв'язку задачі необхідно розв'язати рівняння Шредінгера

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{U_0}{\operatorname{ch}^2 \alpha x} \right) \Psi = 0. \quad (11.2)$$

Для зручності зробимо у рівнянні (11.1) заміну змінних  $z = \operatorname{th} \alpha x$ . При цьому після перетворень отримаємо рівняння на узагальнені поліноми Лежандра:

$$(1 - z^2) \frac{d^2 \Psi}{dz^2} - 2z \frac{d\Psi}{dz} + s(s + 1) \Psi - \frac{\varepsilon^2 \Psi}{(1 - z^2)} = 0, \quad (11.3)$$

де  $\varepsilon^2 = -2mE/\hbar^2 \alpha^2$ , а

$$s = \frac{1}{2} \left( -1 + \sqrt{1 - \frac{8mU_0}{\alpha^2 \hbar^2}} \right),$$

є розв'язком рівняння

$$s(s + 1) = -\frac{2mU_0}{\alpha^2 \hbar^2}. \quad (11.4)$$

Використовуючи заміни

$$\frac{1}{2}(1 - z) = u, \quad \Psi = (1 - z^2)^{\varepsilon/2} \omega(z), \quad (11.5)$$

зводимо (11.3) до гіпергеометричного виду

$$u(1-u)\frac{d^2\omega(z)}{dz^2} + (\varepsilon+1)(1-2u)\frac{d\omega}{dz} - (\varepsilon-s)(\varepsilon+s+1)\omega = 0. \quad (11.6)$$

Розв'язком рівняння (11.6) є гіпергеометрична функція, тому для  $E > 0$  хвильову функцію можна записати як:

$$\Psi = (1-z^2)^{-\varepsilon/2} F(-\varepsilon-s, -\varepsilon+s+1, -\varepsilon+1, (1-z)/2). \quad (11.7)$$

Отриманий розв'язок має потрібну асимптотику ( $\Psi \rightarrow 0$ ) при  $x \rightarrow \infty$  ( $z \rightarrow 1$ ). Для отримання асимптотики хвильової функції при  $x \rightarrow -\infty$  ( $z \rightarrow -1$ ) скористаємося аналітичним продовженням для гіпергеометричної функції  $F(1-y)$ :

$$\begin{aligned} F(\alpha, \beta, \gamma, y) &= \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)} F(\alpha, \beta, \alpha+\beta+1-\gamma, 1-y) + \\ &+ \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha+\beta-\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} (1-y)^{\gamma-\alpha-\beta} F(\gamma-\alpha, \gamma-\beta, \gamma+1-\alpha-\beta, 1-y). \end{aligned} \quad (11.8)$$

Таким чином, отримаємо хвильову функцію у вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi &= (1-z^2)^{-\varepsilon/2} \times \\ &\times \left[ \frac{\Gamma(1-\varepsilon)\Gamma(\varepsilon)}{\Gamma(s+1)\Gamma(-s)} F(-\varepsilon-s, -\varepsilon+s+1, 1-\varepsilon, (1+z)/2) + \right. \\ &\left. + \left( \frac{1+z}{2} \right)^\varepsilon \frac{\Gamma(1-\varepsilon)\Gamma(-\varepsilon)}{\Gamma(-\varepsilon-s)\Gamma(-\varepsilon+s+1)} F(s+1, -s, \varepsilon+1, (1+z)/2) \right]. \end{aligned} \quad (11.9)$$

Враховуючи те, що гіпергеометричну функцію можна представити у вигляді ряду

$$F(\alpha, \beta, \gamma, y) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma} \frac{y}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{y^2}{2!} + \dots, \quad (11.10)$$

хвильову функцію (11.9) при  $x \rightarrow -\infty$  можна записати у більш зручному вигляді

$$\Psi = e^{-ikx} \frac{\Gamma(ik/\alpha)\Gamma(1-ik/\alpha)}{\Gamma(-s)\Gamma(1+s)} + e^{ikx} \frac{\Gamma(-ik/\alpha)\Gamma(1-ik/\alpha)}{\Gamma(-ik/\alpha-s)\Gamma(-ik/\alpha+s+1)}, \quad (11.11)$$



де  $k^2 = 2mE/\hbar$ .

Коефіцієнт відбиття можна знайти з останнього виразу, якщо розрахуємо відношення модулів коефіцієнтів хвильвої функції:

$$R = \frac{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{1 - \frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}}\right)}{\sin^2\frac{\pi k}{\alpha} + \cos^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{1 - \frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}}\right)}, \quad \frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} < 1, \quad (11.12)$$

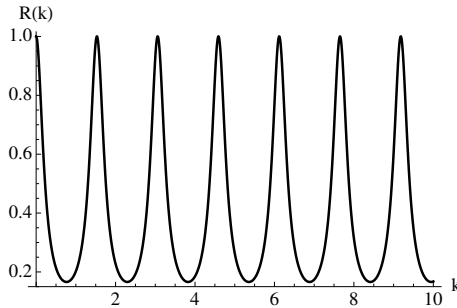


Рис. 10: Залежність коефіцієнту відбиття  $R$ , що задається виразом (11.12) від параметра  $k$ .

$$R = \frac{\operatorname{ch}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} - 1}\right)}{\operatorname{sh}^2\frac{\pi k}{\alpha} + \operatorname{ch}^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} - 1}\right)}, \quad \frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} > 1. \quad (11.13)$$

Коефіцієнт проходження можна знайти зі співвідношення  $D = 1 - R$ . Тоді з рівняння (11.12) можна бачити, що частинка вільно проходить через бар'єр, коли виконується співвідношення  $\frac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2} = 1 - (2n + 1)^2$ .

## ЗАНЯТТЯ 12

### Власні значення та власні функції операторів моментів кількості руху

**Завдання.** Знайти власні значення і власні функції оператора моменту кількості руху та оператора будь-якої його проекції, виходячи лише з комутаційних співвідношень:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y, \quad (12.1)$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_x] = [\hat{J}^2, \hat{J}_y] = [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0, \quad (12.2)$$

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

Оскільки  $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$ , то існує спільна система власних функцій, яку позначимо як  $|j, m\rangle$ , де  $j$  та  $m$  — числа, що нумерують власні значення операторів  $\hat{J}^2$  та  $\hat{J}_z$  відповідно.

По-перше, доведемо, що спектр власних значень оператора  $\hat{J}_z$  є обмеженим. Оскільки середні значення операторів, знайдені за їхніми власними функціями, відповідають власним значенням цього оператора, тому для середніх оператора  $\hat{J}^2$  справедлива рівність:

$$\overline{J^2} = \overline{J_x^2} + \overline{J_y^2} + \overline{J_z^2}$$

звідки

$$\overline{J^2} - \overline{J_z^2} = \overline{J_x^2} + \overline{J_y^2} \geq 0, \quad \Rightarrow \quad \overline{J^2} \geq \overline{J_z^2}.$$

Отже,

$$-\sqrt{\overline{J^2}} \leq |\overline{J_z}| \leq \sqrt{\overline{J^2}},$$

це означає, що спектр оператора  $\hat{J}_z$  завжди є обмеженим.

Для знаходження спектру власних значень оператора  $J_z$  введемо оператори:

$$\hat{J}^+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}^- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y. \quad (12.3)$$

Для них виконуються наступні комутаційні співвідношення:

$$[\hat{J}^+, \hat{J}^-] = 2\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}^-] = -\hbar\hat{J}^-, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}^+] = \hbar\hat{J}^+, \quad (12.4)$$

тобто

$$\begin{aligned} \hat{J}^+ \hat{J}^- &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z, \\ \hat{J}^- \hat{J}^+ &= \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z. \end{aligned} \quad (12.5)$$

Дослідимо результати дії операторів  $\hat{J}^\pm$  на рівняння

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = j_z |j, m\rangle.$$

З одного боку

$$\hat{J}^\pm \hat{J}_z |j, m\rangle = \hat{J}^\pm j_z |j, m\rangle = j_z \hat{J}^\pm |j, m\rangle,$$

з іншого боку, з комутаційних співвідношень (12.4), маємо

$$(\hat{J}^\pm \hat{J}_z) |j, m\rangle = (\mp\hbar\hat{J}^\pm + \hat{J}_z \hat{J}^\pm) |j, m\rangle,$$

або

$$\hat{J}_z (\hat{J}^\pm |j, m\rangle) = (j_z \pm \hbar) (\hat{J}^\pm |j, m\rangle). \quad (12.6)$$

Отже, функція  $\hat{J}^\pm |j, m\rangle$  також є власною функцією оператора  $\hat{J}_z$  із власним значенням  $j_z \pm \hbar$ . Враховуючи, що проекція моменту імпульсу може бути рівною нулю  $j_z = 0$ , бачимо, що власні значення оператора  $\hat{J}_z$  є кратними  $\hbar$ . Це означає, що зручно прийняти  $j_z = m\hbar$ , де  $m$  – ціле додатне число, яке може збільшуватись, або зменшуватись на одиницю. Отже,

$$\hat{J}_z \hat{J}^\pm |j, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{J}^\pm |j, m\rangle$$

і можна прийти до висновку, що

$$\hat{J}^\pm |j, m\rangle = C_\pm |j, m \pm 1\rangle,$$

тобто оператори  $\hat{J}^\pm$  діють аналогічно до операторів народження та знищення.

Припускаючи, що власні функції операторів  $J^2$  та  $J_z$  є ортогональними:

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}, \quad (12.7)$$

можна записати

$$\langle j', m' | \hat{J}^\pm | j, m \rangle = C_\pm \langle j', m' | j, m \pm 1 \rangle = C_\pm \delta_{jj'} \delta_{mm' \pm 1}, \quad (12.8)$$

тобто ненульовими є тільки матричні елементи

$$\langle j, m + 1 | \hat{J}^+ | j, m \rangle \quad \text{та} \quad \langle j, m - 1 | \hat{J}^- | j, m \rangle.$$

Для знаходження власних значень операторів  $J^\pm$  розглянемо комутатор  $[\hat{J}^+, \hat{J}^-] = 2\hbar \hat{J}_z$  і обчислимо його діагональний матричний елемент на функціях  $|j, m\rangle$ . Діагональний матричний елемент  $\langle j, m | J_z | j, m \rangle$  легко обчислити, оскільки ми припустили, що власні значення цього оператора рівні  $\hbar m$ . Тому можемо записати:

$$\langle j, m | (\hat{J}^+ \hat{J}^- - \hat{J}^- \hat{J}^+) | j, m \rangle = 2\hbar \langle j, m | \hat{J}_z | j, m \rangle = 2\hbar^2 m.$$

З іншого боку, матричний елемент добутку операторів можна записати як:

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{J}^+ \hat{J}^- | j, m \rangle &= \sum_{j', m'} \langle j, m | \hat{J}^+ | j', m' \rangle \langle j', m' | \hat{J}^- | j, m \rangle \\ &= \langle j, m | \hat{J}^+ | j, m - 1 \rangle \langle j, m - 1 | \hat{J}^- | j, m \rangle; \end{aligned}$$

аналогічно для іншої частини комутатора:

$$\langle j, m | \hat{J}^- \hat{J}^+ | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}^- | j, m + 1 \rangle \langle j, m + 1 | \hat{J}^+ | j, m \rangle.$$

Якщо ввести скорочені позначення

$$\langle j, m + 1 | \hat{J}^+ | j, m \rangle = \hbar \lambda_m, \quad \langle j, m | \hat{J}^- | j, m + 1 \rangle = \hbar \lambda_m^*, \quad (12.9)$$

діагональний матричний елемент від комутатора набуває вигляду:

$$\langle j, m | [\hat{J}^+, \hat{J}^-] | j, m \rangle = \lambda_{m-1} \lambda_{m-1}^* - \lambda_m \lambda_m^* = |\lambda_{m-1}|^2 - |\lambda_m|^2 = 2\hbar^2 m.$$

Маємо рекурентне співвідношення для величин  $\lambda_m$ , яке можна розв'язати за допомогою степеневого ряду

$$|\lambda_m|^2 = C_0 + C_1 m + C_2 m^2 + C_3 m^4 + \dots$$

Тоді рекурентне співвідношення набуває вигляду:

$$\begin{aligned} |\lambda_{m-1}|^2 - |\lambda_m|^2 &= C_0 + C_1(m-1) + C_2(m-1)^2 + C_3(m-1)^3 + \dots \\ &\quad - C_0 - C_1m - C_2m^2 - C_3m^3 - \dots \\ &= -C_1 - 2C_2m + C_2 + 3C_3m^2 - 3C_3m - C_3 + \dots = 2m. \end{aligned}$$

В результаті отримуємо наступну систему рівнянь на коефіцієнти  $C_i$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} -C_1 + C_2 - C_3 + \dots = 0, \\ 2C_2 + 3C_3 + 4C_4 + \dots = -2, \\ -3C_3 + 6C_4 - 10C_5 + \dots = 0, \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots = 0. \end{array} \right.$$

Дана система має єдиний розв'язок з обмеженим числом ненульових коефіцієнтів:

$$C_1 = -1, \quad C_2 = -1, \quad C_3 = C_4 = \dots = 0,$$

а  $C_0$  залишається довільною константою. Таким чином,

$$|\lambda_m|^2 = C_0 - m(m+1). \quad (12.10)$$

Оскільки  $|\lambda_m|^2 \geq 0$ , то  $m(m+1) \leq C_0$ , тобто спектр є обмеженим і існують екстремальні значення  $m$ , які визначаються розв'язками квадратного рівняння  $C_0 = m^2 + m$ :

$$\begin{aligned} m_1 &= -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1+4C_0}, \\ m_2 &= -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1+4C_0}. \end{aligned}$$

Значення  $m = m_1$  і є максимальним значенням числа  $m$ ,  $m_1 = m_{max}$ , для якого  $|\lambda_{m_1}|^2 = 0$ , при чому  $m_1 \geq 0$ , тому що  $C_0 \geq 0$ . Оскільки  $m_1$  є максимальним, то власні числа  $|\lambda_m|^2$ , які позначаються  $m > m_{max}$ , повинні бути рівними нулю. Це можна забезпечити умовою

$$\hat{J}^+ |j, m_1\rangle = 0.$$

Власні числа  $|\lambda_m|^2$ , які будуть позначатися  $m < m_{min} = -m_1$ , також повинні бути рівними нулю:

$$\hat{J}^- |j, m_2 + 1\rangle = 0.$$

Ці умови фіксують той факт, що спектр оператора  $\hat{J}_z$  є обмеженим як зверху, так і знизу, тобто

$$-m_1 \leq m \leq m_1.$$

І, як наслідок, можна записати:

$$C_0 = m_1(m_1 + 1), \quad |\lambda_m|^2 = m_1(m_1 + 1) - m(m + 1). \quad (12.11)$$

Знайдемо власні значення оператора  $\hat{J}^2$ . Для цього скористаємось співвідношеннями (12.5)

$$\hat{J}^2 = \hat{J}^+ \hat{J}^- + \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z.$$

Діагональний матричний елемент від обох частин цього співвідношення має вигляд:

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{J}^2 | j, m \rangle &= \langle j, m | \hat{J}^+ \hat{J}^- | j, m \rangle + \langle j, m | \hat{J}_z^2 | j, m \rangle - \hbar \langle j, m | \hat{J}_z | j, m \rangle \\ &= \langle j, m | \hat{J}^+ \hat{J}^- | j, m \rangle + \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m \\ &= \langle j, m | \hat{J}^+ | j, m - 1 \rangle \langle j, m - 1 | \hat{J}^- | j, m \rangle + \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m \\ &= \hbar^2 |\lambda_{m-1}|^2 + \hbar^2 m(m - 1). \end{aligned}$$

Якщо тепер підставити явний вигляд  $|\lambda_{m-1}|^2$  з (12.11), то отримаємо

$$\langle \hat{J}^2 \rangle = \hbar^2 [m_1(m_1 + 1) - m(m - 1)] + \hbar^2 m(m - 1) = \hbar^2 m_1(m_1 + 1).$$

Власні значення оператора  $J^2$  нумеруються числом  $j$ . Отже, будемо вважати  $m_1 = m_{max} = j$ . Остаточню маємо:

$$\langle j, m | \hat{J}^2 | j, m \rangle = \hbar^2 j(j + 1).$$

Враховуючи, що квантове число  $m$  може змінюватись лише на ціле число (оператори  $\hat{J}^\pm$  змінюють його на одиницю), а максимальна зміна цього числа  $(\Delta m)_{max} = m_{max} - m_{min} = 2m_1 = 2j$ , то число  $2j$  також повинно бути цілим. Це означає, що  $j$  може бути напівцілими. Таким чином, остаточний розв'язок задачі на власні значення для операторів  $J_z$  та  $J^2$ :

$$\langle \hat{J}^2 \rangle = \hbar^2 j(j + 1), \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

$$\langle \hat{J}_z \rangle = \hbar m, \quad m = -j, -j + 1, -j + 2, \dots, j - 1, j.$$

## Додавання моментів

Встановимо правило додавання моментів кількості руху. Нехай квантовомеханічна система складається з двох підсистем. Момент першої підсистеми задається оператором  $\hat{J}_1$ , і відповідні власні значення квадрату та  $z$ -проекції цього оператора:

$$\langle \hat{J}_1^2 \rangle = \hbar^2 j_1(j_1 + 1), \quad \langle \hat{J}_{1z} \rangle = \hbar m_1.$$

Друга підсистема характеризується моментом  $\hat{J}_2$  з власними значеннями:

$$\langle \hat{J}_2^2 \rangle = \hbar^2 j_2(j_2 + 1), \quad \langle \hat{J}_{2z} \rangle = \hbar m_2.$$

Момент всієї системи задається оператором  $\hat{J}$  з власними значеннями

$$\langle \hat{J}^2 \rangle = \hbar^2 j(j + 1), \quad \langle \hat{J}_z \rangle = \hbar m.$$

Необхідно знайти зв'язок між  $j, m$  та  $j_1, m_1, j_2, m_2$ , якщо самі оператори пов'язані наступними співвідношеннями

$$\hat{J}^2 = (\hat{J}_1 + \hat{J}_2)^2, \quad \hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}.$$

Для проекцій кутового моменту можна одразу знайти:

$$J_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z} \quad \Rightarrow \quad \hbar m = \hbar m_1 + \hbar m_2 \quad \Rightarrow \quad m = m_1 + m_2.$$

Відповідно максимальне значення числа  $j = j_{max}$  буде визначатись максимальними значеннями чисел  $m_1 = m_{1_{max}} = j_1$  та  $m_2 = m_{2_{max}} = j_2$ , тобто  $j_{max} = j_1 + j_2$ .

Мінімальне значення  $j_{min}$  знайдемо, використовуючи той факт, що кількість квантових чисел залишається незмінною, незалежно від того, яким набором квантових чисел будемо описувати систему – як дві окремі підсистеми  $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ , чи систему як ціле  $|j, m, j_1, j_2\rangle$ . Кількість функцій в обох базисах повинна бути однаковою, оскільки одні є лінійними комбінаціями інших. Цю кількість функцій легко знайти як кількість різних значень  $m_1$  та  $m_2$  в першому базисі:  $N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ . Для другого базису кількість функцій в базисі виражається як

$$N = \sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} \sum_{m=-j}^j 1 = \sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} (2j + 1). \quad (12.12)$$

Тому для знаходження  $j_{min}$  спочатку зробимо заміну:

$$j = j_{min} + n - 1, \quad n = 1, 2, \dots, n_{max},$$

де

$$n_{max} = j_{max} - j_{min} + 1 = j_1 + j_2 - j_{min} + 1.$$

Отримаємо з (12.12):

$$\begin{aligned} N &= \sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} (2j+1) = \sum_{n=1}^{n_{max}} [2(j_{min} + n - 1) + 1] = \sum_{n=1}^{n_{max}} (2j_{min} - 1) + 2 \sum_{n=1}^{n_{max}} n \\ &= (2j_{min} - 1)n_{max} + \frac{2n_{max}(n_{max} + 1)}{2} = n_{max}(2j_{min} + n_{max}) \\ &= (j_{max} + 1 - j_{min})(j_{max} + 1 + j_{min}) = (j_{max} + 1)^2 - j_{min}^2 \\ &= (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{min}^2. \end{aligned}$$

Тепер згадаємо значення  $N$  з першого базису і отримаємо

$$(j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{min}^2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad \Rightarrow \quad j_{min}^2 = (j_1 - j_2)^2.$$

Тобто  $j_{min} = |j_1 - j_2|$  і можливі значення  $j$  в такому випадку змінюються в межах:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2.$$



## ЗАНЯТТЯ 13

### Знаходження вигляду матриць оператора власного моменту кількості руху частинки

**Завдання 1.** Встановити вигляд матриць оператора моменту кількості руху для випадку  $j = \frac{1}{2}$ .

В попередньому підрозділі було встановлено, що власні числа оператора повного кутового моменту  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$  можуть приймати значення  $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ . Цілі значення можуть відповідати як спектру оператора орбітального кутового моменту  $\hat{L}$ , так і власним значенням  $s$  оператора магнітного моменту частинки  $\hat{S}$ , який ще називають спіном. Напівцілі ж значення квантового числа  $j$  відповідають лише спіну частинки. Отже, значення  $j = l + s = \frac{1}{2}$  відповідає нульовому значенню квантового числа  $l$  та напівцілому значенню числа  $s$ .

Як відомо з Заняття 12, при  $j = \frac{1}{2}$  квантове число  $m$  може приймати лише два значення  $m = \pm \frac{1}{2}$ . Отже, матричне представлення оператора  $\hat{J}$  в такому випадку це:

$$|j, m\rangle \hat{J} \langle j, m| = |j, m\rangle \hat{S} \langle j, m|, \quad (13.1)$$

матриці розмірності  $2 \times 2$ .

Оскільки функції  $|j, m\rangle$  є власними функціями  $\hat{J}_z$ , то матричне представлення цього оператора з врахуванням (12.7) має наступний вигляд:

$$|j, m'\rangle \hat{J}_z \langle j, m| = \hbar m \delta_{m, m'} = \hbar \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \delta_{1/2, 1/2} & -\frac{1}{2} \delta_{1/2, -1/2} \\ \frac{1}{2} \delta_{-1/2, 1/2} & -\frac{1}{2} \delta_{-1/2, -1/2} \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Тепер, виходячи з (12.8) та (12.9), можемо встановити вигляд матриць операторів  $\hat{J}^\pm$ . Матричні елементи оператора  $\hat{J}^+$  отримаємо зі співвідношення:

$$\langle j, m' | \hat{J}^+ | j, m \rangle = \hbar \lambda_m \langle j, m' | j, m + 1 \rangle = \hbar \lambda_m \delta_{m', m+1}, \quad (13.2)$$

де  $\lambda_m = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$ .

Отже, як видно з (13.2), у випадку з  $j = \frac{1}{2}$  ненульовим є лише один матричний елемент де  $m = -\frac{1}{2}$ ,  $m' = \frac{1}{2}$ :

$$\langle j, m' | \hat{J}^+ | j, m \rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \frac{3}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right) \frac{1}{2}} = \hbar.$$

Остаточно вигляд матриці оператора  $\hat{J}^+$ :

$$\hat{J}^+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Аналогічно з матричних елементів

$$\langle j, m' | \hat{J}^- | j, m \rangle = \hbar \lambda_{m-1} \langle j, m' | j, m-1 \rangle = \hbar \lambda_{m-1} \delta_{m', m-1},$$

де  $\lambda_{m-1} = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$ , а ненульовим є лише елемент з  $m = \frac{1}{2}$ ,  $m' = -\frac{1}{2}$ :

$$\langle j, m' | \hat{J}^- | j, m \rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\right)} = \hbar.$$

Отримаємо матричне представлення оператора  $\hat{J}^-$  у вигляді:

$$\hat{J}^- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Тепер, знаючи явний вигляд  $\hat{J}^\pm$ , можемо з (12.3) виразити оператори інших двох проекцій  $\hat{J}_x$  та  $\hat{J}_y$

$$\hat{J}_x = \frac{\hat{J}^+ + \hat{J}^-}{2} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{\hat{J}^+ - \hat{J}^-}{2i} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}.$$

Таким чином, векторний оператор спіну  $\hat{J} \equiv \hat{S}$  для випадку  $j = \frac{1}{2}$  має вигляд

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \left( \vec{i} \hat{\sigma}_x + \vec{j} \hat{\sigma}_y + \vec{k} \hat{\sigma}_z \right) \quad \text{або} \quad \hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}},$$

де  $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$  – матриці Паулі, а

$$\hat{\sigma} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \right\} \text{ — оператор Паулі.}$$

**Завдання 2.** Знайти явний вигляд власних функцій оператора  $\hat{J}_z$  використовуючи оператори  $\hat{J}^\pm$  для випадку  $j = 1/2$ .

Знайдемо явний вигляд власних функцій  $|j, m\rangle = |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$  оператора  $\hat{J}_z$ , використовуючи матричне представлення та означення вакуумного стану для операторів  $J^\pm$ :

$$\hat{J}^+|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 0, \quad \text{або} \quad \hat{J}^-|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = 0.$$

Оскільки функції  $|j, m\rangle$  в нашому випадку є двокомпонентними векторами-стовпчиками, то нехай

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix},$$

тоді

$$0 = \hat{J}^+|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \hbar \begin{bmatrix} \beta \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \beta = 0,$$

а значення параметру  $\alpha$  знайдемо з умови нормування

$$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = |\alpha|^2 = 1, \quad \text{і можемо прийняти} \quad \alpha = 1.$$

Тепер, якщо на знайдену функцію

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

подіяти оператором  $\hat{J}^-$ , то згідно з означенням для такого оператора отримаємо іншу власну функцію  $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ :

$$|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\hbar} \hat{J}^-|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\hbar} \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Власні функції  $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$  часто для скорочення позначають наступним чином:

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle, \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle.$$

**Завдання 3.** Знайти явні вирази для операторів повороту на довільний кут навколо координатних осей для частинки з  $j = 1/2$ .

Оператор повороту на кут  $\varphi$  навколо вісі  $z$ , враховуючи матричне представлення оператора  $J_z$ , можна записати як:

$$\hat{R}_\varphi^z = e^{i\frac{\varphi}{\hbar}J_z} = e^{i\frac{\varphi}{\hbar}\sigma_z}, \quad (13.3)$$

де  $\sigma_z$  – матриця Паулі. Згідно з означенням операторозначної функції маємо

$$\begin{aligned} \hat{R}_\varphi^z &= \hat{I} + \frac{i\varphi}{2}\hat{\sigma}_z + \frac{1}{2!}\left(\frac{i\varphi}{2}\right)^2\hat{\sigma}_z^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{i\varphi}{2}\right)^3\hat{\sigma}_z^3 + \dots = \\ &= \hat{I}\left(1 + \frac{1}{2!}\left(\frac{i\varphi}{2}\right)^2 + \dots\right) + \hat{\sigma}_z\left(\frac{i\varphi}{2} + \frac{1}{3!}\left(\frac{i\varphi}{2}\right)^3 + \dots\right) = \\ &= \hat{I}\left(1 - \frac{1}{2!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^2 + \dots\right) + i\hat{\sigma}_z\left(\frac{\varphi}{2} - \frac{1}{3!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^3 + \dots\right) = \\ &= \hat{I}\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + i\hat{\sigma}_z\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) = \\ &= \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + i\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) - i\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Аналогічно знайдемо оператори повороту навколо інших осей.

$$\hat{R}_\varphi^y = e^{i\frac{\varphi}{2}\hat{\sigma}_y} = \dots = \hat{I}\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + i\hat{\sigma}_y\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) & \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \end{bmatrix}$$

$$\hat{R}_\varphi^x = e^{i\frac{\varphi}{2}\hat{\sigma}_x} = \dots = \hat{I}\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) + i\hat{\sigma}_x\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) & i\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \\ i\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \end{bmatrix}$$

**Завдання 4.** Розглянути безлептонний розпад  $\Lambda^0$ -частинок.

Безлептонний розпад адронів відбувається за рахунок слабкої взаємодії. Для  $\Lambda^0$ -частинки це

$$\Lambda^0 \longrightarrow p + \pi^-.$$

Частинка  $\Lambda^0$  має спінін  $\frac{1}{2}$ , і якщо проекція спіну направлена догори, то спінову функцію будемо записувати наступним чином:

$$|\Lambda_{\uparrow}^0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Оскільки  $\pi^-$  — безспінова частинка, то проекція спіну протона буде такою самою, як і в  $\Lambda^0$ . Нехай амплітуда імовірності розпаду  $|\Lambda_{\uparrow}^0\rangle \rightarrow |p_{\uparrow}\rangle$  дорівнює  $a$ , а імовірність розпаду  $|\Lambda_{\downarrow}^0\rangle \rightarrow |p_{\downarrow}\rangle$  дорівнює  $b$ . Знайдемо імовірність того, що протон вилетить під кутом  $\theta$ . Для відповіді на це питання подіємо на спінову функцію  $|\Lambda_{\uparrow}^0\rangle$  оператором повороту на кут  $\theta$  навколо вісі  $y$ .

$$\begin{aligned} |\Lambda_{\uparrow}^0\rangle' &= R_{\theta}^y |\Lambda_{\uparrow}^0\rangle = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{bmatrix} \\ &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\Lambda_{\uparrow}^0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\Lambda_{\downarrow}^0\rangle \end{aligned}$$

Амплітуда імовірності вильоту протона зі спіном  $|\uparrow\rangle$  під кутом  $\theta$  є  $a \cos \frac{\theta}{2}$ , а для протона з  $|\downarrow\rangle$  —  $b \sin \frac{\theta}{2}$ . Повна імовірність вильоту протона під кутом  $\theta$  до вісі  $z$ :

$$W(\theta) = |a|^2 \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + |b|^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = A(1 + B \cos \theta),$$

$$\text{де } A = \frac{a^2 + b^2}{2}, \quad B = \frac{|a|^2 - |b|^2}{|a|^2 + |b|^2}.$$

## ЗАНЯТТЯ 14

### Рух у полях з циліндричною симетрією

**Завдання 1.** Отримати рівняння Шредінгера у випадку циліндричної симетрії потенціалу ( $U = U(r, \varphi, z)$ )

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y, z) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi(x, y, z) + U(x, y) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z). \quad (14.1)$$

В силу того, що  $[\hat{p}_z, \hat{H}] = 0$ , то власна функція оператора  $\hat{p}_z$  є власною і для  $\hat{H}$ , тобто залежність хвильової функції від  $z$  можна виділити в явному вигляді:

$$\Psi(x, y, z) = e^{ikz} \tilde{\Psi}(x, y).$$

Підставивши хвильову функцію в такому вигляді в рівняння (14.1) отримаємо:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \tilde{\Psi}(x, y) + U(x, y) \tilde{\Psi}(x, y) = \left( E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \tilde{\Psi}(x, y). \quad (14.2)$$

Переходимо в полярну систему координат і користуємось тим, що  $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$  (потенціал циліндрично-симетричний  $U = U(\rho)$ ).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \Psi(\rho, \phi) + U(\rho, \phi) \Psi(\rho, \phi) = E' \Psi(\rho, \phi),$$

де  $E' = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Оскільки потенціал циліндрично-симетричний  $U = U(\rho)$ , то  $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$  і хвильова функція може бути далі спрощена

$$\Psi(\rho, \phi) = e^{i\tilde{m}\phi} R(\rho), \quad \text{де } \tilde{m} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Після підстановки в (14.2) отримаємо загальний вигляд рівняння для радіальної компоненти хвильової функції:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\tilde{m}^2}{\rho^2} \right) R(\rho) + U(\rho)R(\rho) = E' R(\rho). \quad (14.3)$$

**Завдання 2.** Двовимірний осцилятор. Розглянемо частинний випадок поля з циліндричною симетрією — двовимірну осциляторну яму

$$U(x, y) = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2) = \frac{m\omega^2}{2}\rho^2.$$

Рівняння (14.3) в такому випадку набуває наступного вигляду:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} + \frac{\hbar^2 \tilde{m}^2}{2m} \frac{R(\rho)}{\rho^2} + \frac{m\omega^2}{2} \rho^2 R(\rho) = E' R(\rho).$$

Перейдемо в цьому рівнянні до безрозмірних змінних  $r = \rho \sqrt{m\omega/\hbar}$  та  $\varepsilon = E'/\hbar\omega$ . В результаті отримаємо

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR(r)}{dr} \right) - \left( \frac{\tilde{m}^2}{r^2} + r^2 - 2\varepsilon \right) R(r) = 0.$$

Зробимо заміну  $r^2 = \xi$ , отримаємо

$$4 \frac{d}{d\xi} \left( \xi \frac{dR(\sqrt{\xi})}{d\xi} \right) - \left( \frac{\tilde{m}^2}{\xi} + \xi - 2\varepsilon \right) R(\sqrt{\xi}) = 0.$$

Дане рівняння можна розв'язувати аналогічно до попередньої задачі дослідженням асимптотик та обриву степеневого ряду, але ми для скорочення будемо одразу шукати розв'язок у вигляді

$$R(\sqrt{\xi}) = \xi^{\tilde{m}/2} e^{-\xi/2} W(\xi).$$

Отримаємо рівняння для функції  $W(\xi)$  у вигляді

$$\xi W''(\xi) + (1 + \tilde{m} - \xi) W'(\xi) + \left( \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\tilde{m}}{2} - \frac{1}{2} \right) W(\xi) = 0, \quad (14.4)$$

що є еквівалентним до рівняння на узагальнені поліноми Лагерра:

$$x \frac{d^2 L_n^{(s)}(x)}{dx^2} + (s + 1 - x) \frac{dL_n^{(s)}(x)}{dx} + n L_n^{(s)}(x) = 0, \quad (14.5)$$

$$L_n^{(s)}(x) = x^{-s} e^x \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{s+n}),$$

при умові, що  $(\varepsilon - \tilde{m} - 1)/2 = n$ , де  $n$  – ціле додатне число. Отже, радіальна компонента хвильової функції буде:

$$R(\rho) = \rho^{\tilde{m}} e^{-\rho^2/2} L_n^{(\tilde{m})}(\rho^2),$$

а спектр знаходимо з умови  $n = (\varepsilon - \tilde{m} - 1)/2$

$$E' = \hbar\omega(2n + \tilde{m} + 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots; \quad \tilde{m} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

### Завдання для самостійної підготовки.

1. Розв'язати задачу для  $U(x, y) = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2)$  способом обриву ряду.

2. Знайти розв'язок рівняння Шредінгера для сферично-симетричного потенціалу

$$U(r) = Ar^2 + \frac{B}{r^2}, \quad A > 0, B > 0.$$



## ЗАНЯТТЯ 15

### Хвильові функції та енергетичний спектр для сферично–симетричного осциляторного потенціалу

Потенціал тривимірного гармонічного осцилятора є сферично–симетричним

$$U(x, y, z) = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{M\omega^2}{2}r^2 = U(r),$$

тому тривимірне рівняння Шредінгера з таким потенціалом зручно розглядати в сферичній системі координат

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\Psi(r, \theta, \phi) + U(r)\Psi(r, \theta, \phi) = E\Psi(r, \theta, \phi),$$

де  $\nabla^2$  — оператор Лапласа, який в сферичних координатах має вигляд:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right].$$

Вираз в квадратних дужках є пропорційним до квадрату оператора кутового моменту  $\hat{L}^2$ . Таким чином, загальне тривимірне рівняння Шредінгера може бути переписане в наступному вигляді:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} \hat{L}^2 + U(r) \right) \Psi(r, \theta, \phi) = E\Psi(r, \theta, \phi)$$

Оскільки  $U$  є функцією однієї змінної, то можна шукати хвильову функцію у вигляді

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{l,m}(\theta, \phi),$$

де  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  — сферичні гармоніки, що є власними функціями операторів  $\hat{L}^2$  та  $\hat{L}_z$ . Тоді рівняння на радіальну частину хвильової функції має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) + U(r)R(r) = ER(r) \quad (15.1)$$

Оскільки дане рівняння не залежить від проекції кутового моменту, то енергетичні рівні будуть вироджені із кратністю виродження  $2l+1$ . Далі в рівнянні (15.1) зробимо заміну  $rR(r) = \chi(r)$ , отримаємо

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} + U(r) \right] \chi(r) = E\chi(r).$$

Тепер згадаємо, що  $U(r) = M\omega^2 r^2/2$ , і перейдемо до безрозмірних змінних  $\xi = r\sqrt{M\omega/\hbar}$  та  $\varepsilon = E/\hbar\omega$

$$\chi''(\xi) - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \chi(\xi) - \xi^2 \chi(\xi) + 2\varepsilon \chi(\xi) = 0 \quad (15.2)$$

Проаналізуємо асимптотику розв'язків цього рівняння при  $\xi \rightarrow 0$  та  $\xi \rightarrow \infty$ .

При  $\xi \rightarrow \infty$  в рівнянні (15.2) можна знехтувати відцентровим доданком і доданком з енергією в порівнянні з осциляторним потенціалом

$$\chi''(\xi) - \xi^2 \chi(\xi) = 0,$$

що має простий розв'язок

$$\chi(\xi) = Ae^{\xi^2/2} + Be^{-\xi^2/2}.$$

Оскільки хвильова функція зв'язаного стану повинна бути квадратично інтегрованою, то перший доданок в цьому загальному розв'язку не є фізичним. Таким чином, асимптотика хвильової функції при  $\xi \rightarrow \infty$ :  $\chi(\xi) \propto e^{-\xi^2/2}$ .

При  $\xi \rightarrow 0$  в рівнянні (15.2) можна знехтувати осциляторним потенціалом і доданком з енергією в порівнянні з відцентровим доданком

$$\chi''(\xi) - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \chi(\xi) = 0$$

Розв'язок можна шукати у вигляді  $\chi(\xi) = C\xi^k$ . Підставивши в рівняння, отримуємо умову на  $k$ :

$$-k(k-1) + l(l+1) = 0,$$

що має розв'язки  $k_1 = -l$  та  $k_2 = l+1$ . Оскільки хвильова функція повинна бути обмежена в нулі, то залишається лише другий розв'язок, отже, при  $\xi \rightarrow 0$ :  $\chi(\xi) \propto \xi^{l+1}$ .

Тепер, знаючи асимптотики, можемо просунутись далі в дослідженні рівняння (15.2). Будемо шукати розв'язок у вигляді, що задовольняє обом асимптотикам:

$$\chi(\xi) = e^{-\xi^2/2} \xi^{l+1} f(\xi),$$

де  $f(\xi)$  — невідома функція. Тоді рівняння на функцію  $f(\xi)$  має наступний вигляд

$$f''(\xi) + 2\left(\frac{l+1}{\xi} - \xi\right) f'(\xi) + 2\left(\varepsilon - l - \frac{3}{2}\right) f(\xi) = 0. \quad (15.3)$$

Шукаємо розв'язок цього рівняння у вигляді

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k. \quad (15.4)$$

Підставивши в рівняння (15.3) отримуємо наступне рекурентне співвідношення для коефіцієнтів  $a_k$ :

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{2k-2(\varepsilon-l-3/2)}{(k+2)(k+2l+3)}. \quad (15.5)$$

Нескінченна сума (15.4) з такими коефіцієнтами є розбіжною при  $\xi \rightarrow \infty$ . Це видно, якщо записати (15.5) при  $k \rightarrow \infty$ .

$$a_{k+2} \approx a_k \frac{2}{k},$$

тобто

$$a_{2k} \approx \frac{2}{(2k-2)} \frac{2}{(2k-4)} \frac{2}{(2k-6)} \cdots = \frac{2^k}{(2k-2)!!} = \frac{1}{(k-1)!} \approx \frac{1}{k!}$$

а це означає, що

$$f(\xi) \approx \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi^{2k}}{k!} = e^{\xi^2},$$

що є зростаючою функцією і, очевидно, не підходить в якості розв'язку рівняння Шредінгера. Це означає, що весь нескінченний ряд (15.4) використовувати не можна і потрібно, щоб він обривався при певному  $k$ . Для цього потрібно задовольнити умову

$$2k - 2 \left( \varepsilon - l - \frac{3}{2} \right) = 0.$$

Ця умова визначає енергетичний спектр задачі:

$$\varepsilon = 2n + l + \frac{3}{2}, \quad \Rightarrow \quad E = \hbar\omega(2n + l + \frac{3}{2}) \quad (15.6)$$

Оскільки умова (15.6) задає значення ідексу  $k = 2n$  при якому ряд (15.4) обривається, то в результаті розв'язок  $f(\xi)$  є поліномом  $2n$ -го порядку, що містять лише парні ступені  $\xi$ , тобто якщо зробити в рівнянні (15.3) заміну  $\xi^2 = \eta$ , тоді, ввівши нову функцію

$$f(\xi) = g(\eta),$$

$$f' = 2\xi g',$$

$$f'' = 4\xi^2 g'' + 2g',$$

рівняння перетворюється наступним чином (тут в останньому доданку використано співвідношення (15.6))

$$4\xi^2 g'' + 2g' + 4\xi g' \left( \frac{l+1}{\xi} - \xi \right) + 4ng = 0,$$

або

$$\eta g'' + \left( l + \frac{3}{2} - \eta \right) g' + ng = 0. \quad (15.7)$$

Як відомо, диференційне рівняння на узагальнені поліноми Лагерра  $L_n^{(\alpha)}(x)$  в загальному випадку має вигляд

$$xy'' + (\alpha + 1 - x)y' + ny = 0,$$

а

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{x^{-\alpha} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^x x^{n+\alpha}),$$

і є еквівалентним до (15.7) при  $x = \eta$ ,  $\alpha = l + 1/2$ . Остаточно функція  $f(\xi)$  буде визначатись через поліном Лагерра як  $f(\xi) = L_n^{l+1/2}(\xi^2)$ , а загальний розв'язок задачі можна записати у вигляді

$$\Psi_{n,l,m}(\xi, \theta, \phi) = N_{n,l} e^{-\xi^2/2} \xi^l L_n^{l+1/2}(\xi^2) Y_{l,m}(\theta, \phi),$$

де константа нормування

$$N_{n,l} = (-1)^n \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{8/4} \sqrt{\frac{2n!}{\Gamma(n+l+3/2)}}.$$

## ЗАНЯТТЯ 16

### Атом водню. Воднеподібні атоми.

**Завдання 1.** Знайти загальний розв'язок рівняння Шредингера для атома водню, воднеподібних іонів та атомів, що містять один валентний електрон.

Розглянемо задачу про рух взаємодіючих електрона та ядра. Гамільтоніан ядра та електрона, що взаємодіють за певним законом  $U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = -\frac{Ze^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$  записується наступним чином:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|),$$

де  $m_1$  – маса ядра,  $m_2$  – маса електрона,  $\Delta_1$  – оператор Лапласа по координаті ядра,  $\Delta_2$  – оператор Лапласа по координаті електрона,  $\vec{r}_1$  – радіус-вектор, що описує положення ядра по відношенню до деякої точки відліку,  $\vec{r}_2$  – радіус-вектор електрона. Введемо наступну заміну координат  $\vec{r}$  – радіус-вектор взаємної відстані ядра та електрона,  $\vec{R}$  – радіус-вектор центра мас системи:

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1, \quad (16.1)$$

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (16.2)$$

В таких змінних Гамільтоніан системи переписеться наступним чином:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} + U(\vec{r}), \quad (16.3)$$

де  $\Delta_{\vec{R}}$ ,  $\Delta_{\vec{r}}$  – оператори Лапласа по компонентам відповідних векторів,  $M = m_1 + m_2$  – повна маса системи,  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  – приведена маса. Бачимо, що Гамільтоніан розбивається на дві незалежні частини, одна

з яких є оператором кінетичної енергії системи як цілого і описує вільний рух центру мас, а інша – відносний рух

$$\hat{H}(\vec{R}, \vec{r}) = \hat{H}_{\text{Ц.м.}}(\vec{R}) + \hat{H}_{\text{в.р.}}(\vec{r}).$$

Так як координати незалежні, отримані оператори комутують між собою і мають спільну систему власних функцій. Можемо запровадити метод розділення змінних для хвильової функції оператора  $\hat{H}$ , представивши її як добуток власних функцій відповідних операторів. Отже, маємо:

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \Phi(\vec{R})\psi(\vec{r}),$$

де  $\Phi(\vec{R})$  – власна функція оператора  $\hat{H}_{\text{Ц.м.}}$ , що є хвильовою функцією вільного руху атома як цілого

$$\Phi(\vec{R}) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P} \cdot \vec{R})}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

Власні значення оператора  $\hat{H}$ , тобто енергія атома – сума енергій руху атома як цілого та енергії руху електрона відносно ядра  $\tilde{E} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + E$ , де  $\vec{P}$  – повний імпульс системи.

Далі розглядатимемо відносний рух електрона та ядра, тобто фактично задачу про рух електрона в центральному (кулонівському) полі ядра. Рівняння Шредінгера такої задачі:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \quad (16.4)$$

Перейдемо в сферичну систему координат

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi(r, \theta, \varphi) = 0.$$

Гамільтоніан відносного руху комутує з оператором квадрату кутового моменту та  $z$ -ї проекції моменту

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right], \quad (16.5)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi},$$

тому можна застосувати метод розділення змінних, відділити радіальну частину від кутової

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (16.6)$$

Умова нормування хвильової функції

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi = 1. \quad (16.7)$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$  – сферична функція, що є власною функцією оператора квадрату кутового моменту та записується наступним чином:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^{|m|} \left( \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right)^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (16.8)$$

$P_l^{|m|}(\cos\theta)$  – приєднані функції Лежандра. Використовуючи (16.5) та знаючи, що  $\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$ , можемо записати рівняння для радіальної частини хвильової функції

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right) R(r) = 0. \quad (16.9)$$

Робимо заміну  $R(r) = \frac{W(r)}{r}$  і отримуємо

$$\frac{d^2 W(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right) W(r) = 0, \quad (16.10)$$

тут  $\int_0^\infty W(r)^2 dr = 1$ . Дане рівняння можна інтерпретувати як таке, що описує рух електрона в деякому ефективному потенціалі  $V_{\text{еф.}} =$



$-\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ . Область енергій  $E < 0$  – область дискретного спектру,  $E > 0$  – область неперервного спектру.

Введемо в якості одиниці довжини величину  $a = \frac{\hbar^2}{\mu Z e^2}$ . Для атома водню  $Z = 1$  і так як  $\mu \approx m_e$ , де  $m_e$  – маса електрона, то  $a = a_B = 0.529 \text{ \AA}$  – борівський радіус. В якості одиниці енергії введемо  $E_0 = \frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2}$ , для атома водню  $E_0 = \frac{e^2}{2a_B} = Ry = 13.6 \text{ eV}$  (постійна Рідберга).

Зробимо в рівнянні (16.10) таку заміну:  $\rho = r/a_B$ ,  $\varepsilon = -E/E_0$ , тобто обезрозміримо його. Далі розглядатимемо випадок  $\varepsilon > 0$ , так як нас цікавить область дискретного спектру.

$$\frac{d^2 W(\rho)}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} W(\rho) + \frac{2}{\rho} W(\rho) - \varepsilon W(\rho) = 0. \quad (16.11)$$

Досліджуємо поведінку розв'язків цього рівняння при  $\rho \rightarrow +\infty$  і  $\rho \rightarrow 0$ :

1) при  $\rho \rightarrow +\infty$ , рівняння (16.11) перетворюється на  $\frac{d^2 W(\rho)}{d\rho^2} \cong \varepsilon W(\rho)$ . Розв'язок рівняння

$$W_{1,2}(\rho) = e^{\pm\sqrt{\varepsilon}\rho}. \quad (16.12)$$

Вибираємо розв'язок з “-” для того, щоб задовільнити умову скінченності хвильової функції.

2) при  $\rho \rightarrow 0$ , шукаємо розв'язок рівняння (16.11) у вигляді  $W(\rho) \sim \rho^k$ . Після підстановки в рівняння (16.11), отримаємо

$$k(k-1)\rho^{k-2} - l(l+1)\rho^{k-2} + 2k\rho^{k-1} - \varepsilon\rho^k = 0.$$

Відкидаючи члени, пропорційні  $\rho^{k-1}$  і  $\rho^k$  як члени вищого ступеню малості, отримуємо рівняння для знаходження  $k$ :

$$k(k-1) - l(l+1) = 0,$$

звідки  $k_1 = l+1$ ,  $k_2 = -l$ . Вибираємо  $k = l+1$  (при  $k = -l$ ,  $W(\rho) = \frac{1}{\rho^l} \rightarrow +\infty$  при  $\rho \rightarrow 0$ ). Таким чином, шукаємо  $W(\rho)$  у вигляді

$$W(\rho) = e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho} \rho^{l+1} L(\rho), \quad (16.13)$$

де  $L(\rho)$  – невідома функція. Знайдемо рівняння для функції  $L(\rho)$ .

$$\frac{dW(\rho)}{d\rho} = e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho} \rho^{l+1} \left[ \frac{dL(\rho)}{d\rho} + \left( \frac{l+1}{\rho} - \sqrt{\varepsilon} \right) L(\rho) \right]$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 W(\rho)}{d\rho^2} &= e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho} \rho^l \left[ \rho \frac{d^2 L(\rho)}{d\rho^2} + (2(l+1) - 2\sqrt{\varepsilon}) \frac{dL(\rho)}{d\rho} \right] + \\ &+ e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho} \rho^l \left[ (l+1 - \sqrt{\varepsilon}\rho) \left( \frac{l+1}{\rho} - \sqrt{\varepsilon} \right) \right] L(\rho) \end{aligned}$$

Підставляючи ці вирази в рівняння (16.11) і скорочуючи на  $e^{-\sqrt{\varepsilon}\rho} \rho^l$ , отримуємо рівняння для визначення функції  $L(\rho)$

$$\rho \frac{d^2 L(\rho)}{d\rho^2} + [2(l+1) - 2\sqrt{\varepsilon}\rho] \frac{dL(\rho)}{d\rho} + [-2\sqrt{\varepsilon}(l+1) + 2] L(\rho) = 0. \quad (16.14)$$

Зробимо ще одну заміну змінної:  $2\sqrt{\varepsilon}\rho = x$ , тоді  $\rho \frac{d^2 L(\rho)}{d\rho^2} = 2\sqrt{\varepsilon}x \frac{d^2 L(x)}{dx^2}$  і  $\frac{dL(\rho)}{d\rho} = 2\sqrt{\varepsilon} \frac{dL(x)}{dx}$ , отримуємо

$$x \frac{d^2 L(x)}{dx^2} + [(2l+1) + 1 - x] \frac{dL(x)}{dx} + \left[ \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} - (l+1) \right] L(x) = 0. \quad (16.15)$$

Порівняємо це рівняння з рівнянням для узагальнених поліномів Лагерра

$$x \frac{d^2 L_k^s(x)}{dx^2} + [s + 1 - x] \frac{dL_k^s(x)}{dx} + k L_k^s(x) = 0, \quad (16.16)$$

де  $k = 0, 1, 2, \dots$ , рівняння має нетривіальний розв'язок в області  $0 < x < \infty$ ,  $s$  – ціле число, але не більше ніж  $k$ , тобто для деякого фіксованого  $k$ ,  $s = 0, 1, \dots, k$ .

Узагальнені поліноми Лагерра є поліномами  $n$  степені, їхня диференціальна формула:

$$L_n^s(x) = x^{-s} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+s} e^{-x}). \quad (16.17)$$

Поліноми утворюють ортогональну з вагою  $e^{-x} x^s$  систему функцій:

$$\int_0^\infty L_n^s(x) L_k^s(x) e^{-x} x^s dx = \frac{(n!)^3}{(n-s)!} \delta_{nk}. \quad (16.18)$$

Приходимо до висновку, що  $L(x) = L_k^s(x)$ , де  $s = 2l + 1$ , а  $k \equiv n_r = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} - (l + 1)$ ,  $\varepsilon = \frac{1}{(n_r + l + 1)^2}$  – шуканий дискретний спектр, тобто

$$E = E_{n_r l} = -\frac{Ry}{(n_r + l + 1)^2},$$

покладемо  $n = n_r + l + 1$ , отримуємо значення енергії  $E_n$ , що будуть залежати від номера рівня  $n$

$$E_n = -\frac{Ry}{n^2}. \quad (16.19)$$

$n = 1, 2, 3, \dots$  називається головним квантовим числом,  
 $n_r = 0, 1, 2, \dots$  – радіальне квантове число,  
 $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$  – орбітальне (азимутальне) квантове число,  
 $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$  – магнітне квантове число. Кожному певному значенню орбітального квантового числа  $l$  відповідає  $2l + 1$  магнітних квантових чисел.

Якщо покласти енергію рівною енергії кванта світла  $E = h\nu$ , то для атома водню отримаємо  $\nu = \frac{Ry}{hn^2} = \frac{R}{n^2}$ , де  $R = \frac{Ry}{h}$  – постійна Рідберга. Знайдемо частоти деяких спектральних ліній атома водню. Спостережувана в спектрі лінія випромінюється при переході електрона з енергетичного рівня  $E_n$  на рівень  $E_{n_1}$ . Частота кванта  $\nu_{nn_1}$  при такому переході

$$\nu_{nn_1} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (16.20)$$

Для  $n_1 = 1$  та  $n = 2, 3, 4, \dots$ , отримуємо ряд ліній, що складають серію Лаймана

$$\nu_{n1} = R \left( 1 - \frac{1}{n^2} \right), \quad (16.21)$$

для  $n_1 = 2$ ,  $n = 3, 4, 5, \dots$  – серію Бальмера

$$\nu_{n2} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (16.22)$$

для значень  $n_1 = 3$ ,  $n = 4, 5, 6, \dots$  – серію Пашена

$$\nu_{n3} = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (16.23)$$

та інші.

Повернемося знову до визначення радіальної частини хвильової функції. Виразимо  $L(x) = L_k^{2l+1}(x)$  через квантове число  $n$ . Для цього скористаємось наступною властивістю узагальнених поліномів Лагерра  $L_m^s(x) = \frac{(-1)^s}{(m+s)!} L_{m+s}^s(x)$ , тому

$$L_{n+l-(2l+1)}^{2l+1}(x) = \frac{(-1)^{2l+1}}{(n+l)!} L_{n+l}^{2l+1}(x),$$

звідки отримуємо

$$L(x) = L_k^{2l+1}(x) = \frac{(-1)^{2l+1}}{(n+l)!} L_{n+l}^{2l+1}(x) = \frac{(-1)^{2l+1}}{(n+l)!} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_B n}\right),$$

так як  $x = 2\sqrt{\varepsilon}\rho$ ,  $\rho = \frac{r}{a_B}$  і  $\sqrt{\varepsilon} = \frac{1}{n}$ .

Повний вираз для хвильової функції електрона в атомі водню:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = C_{nl} \left(\frac{2r}{a_B n}\right)^l e^{-\frac{r}{a_B n}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_B n}\right) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (16.24)$$

де  $C_{nl}$  знаходиться з умови нормування хвильової функції (16.7), що переписється наступним чином

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \sin\theta d\theta \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1.$$

Умова нормування радіальної частини хвильової функції:

$$\int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^2 dr = 1,$$

звідки отримуємо, що

$$C_{nl} = -\sqrt{\frac{4}{n^4 a_B^3} \frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}.$$

Отже, радіальна частина хвильової функції запишеться як:

$$R_{nl}(r) = -\sqrt{\frac{4}{n^4 a_B^3} \frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{a_B n}\right)^l e^{-\frac{r}{a_B n}} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_B n}\right). \quad (16.25)$$

Повна нормована хвильова функція електрона в атомі водню

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = Y_{lm}(\theta, \varphi)R_{nl}(r). \quad (16.26)$$

В загальному випадку, енергія електрона залежить лише від одного квантового числа –  $n$ , тоді як хвильова функція залежить від  $n$ ,  $l$  та  $m$ . Деякому рівню енергії відповідає певна кількість станів електрона, що описуються своїми хвильовими функціями. Тобто існує певна кратність виродження енергетичного рівня. В залежності від номеру рівня, кратність виродження

$$g = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (16.27)$$

Розглянемо основний стан електрона в атомі водню. Квантові числа, що відповідають основному стану  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $m = 0$ . Хвильова функція рівна

$$\psi_{100}(\vec{r}) = Y_{00}(\theta, \varphi)R_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-\frac{r}{a_B}},$$

де  $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ . Розглянувши розподіл хвильової функції по кутам, знаходимо кутовий розподіл густини ймовірності даного електронного стану. Тобто для основного стану  $W_{00} = |Y_{00}|^2 = 1/4\pi$  – електронна хмара сферично-симетрична (s-стан).

Енергія основного стану електрона в атомі водню

$$E_1 = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}.$$

## Додаток

**Лінійний простір.** Різні математичні об'єкти, для яких визначені операції додавання та множення на число (комплексне у загальному випадку) називаються векторами. Множина векторів утворює лінійний векторний (комплексний) простір, якщо будь-яка лінійна комбінація векторів цієї множини є вектором цієї ж множини. При цьому задовольняються наступні аксіоми для елементів лінійного векторного простору

1.  $\psi_1 + \psi_2 = \psi_2 + \psi_1$
2.  $(\psi_1 + \psi_2) + \psi_3 = \psi_1 + (\psi_2 + \psi_3)$
3.  $c(\psi_1 + \psi_2) = c\psi_1 + c\psi_2$
4.  $(c_1 + c_2)\psi = c_1\psi + c_2\psi$
5.  $(ab)\psi = a(b\psi)$
6.  $\exists 0 : \psi + 0 = \psi$

### Унітарний та гільбертовий простір.

Лінійний комплексний простір є унітарним якщо у ньому визначена операція скалярного добутку, яка кожній парі векторів  $\psi$  та  $\phi$  ставить у відповідність (у загальному випадку) комплексне число.

Постулюються наступні властивості скалярного добутку:

- $(\psi, \phi)^* = (\phi, \psi)$  – ермітова симетрія;
- $(\psi, \phi_1 + \phi_2) = (\psi, \phi_1) + (\psi, \phi_2)$  – закон дистрибутивності;
- $(\psi, \alpha\phi) = \alpha(\psi, \phi)$  – закон асоціативності;
- $(\phi, \psi) \geq 0$  – додатність норми вектора.

З наведених властивостей наслідком є лінійність скалярного добутку по другому співмножнику

$$\left(\psi, \sum c_i \phi_i\right) = \sum c_i (\psi, \phi_i)$$

та антилінійності за першим співмножником

$$\left(\sum c_i \psi_i, \phi\right) = \sum c_i^* (\psi_i, \phi),$$

де сукупність чисел  $c_i$  – координати вектора  $\psi$  у системі координат із базисом  $\phi_i$ . Скалярний квадрат вектора називають нормою або квадратом модуля вектора:

$$(\psi, \psi) = |\psi|^2,$$

який є дійсною величиною.

Нескінченновимірні повні унітарні простори зі скінченною нормою для всіх векторів називають гільбертовими просторами. Повнота простору означає, що воно утримує у собі усі необхідні вектори для розкладу будь-якого свого вектора у суму  $\Psi = \sum c_n \phi_n$  для дискретної множини базисних векторів або у інтеграл

$$\Psi = \int dq c(q) \phi_q$$

для неперервної множини базисних векторів.

### Середнє значення оператора фізичної величини.

Якщо стан квантово-механічної системи повною мірою описується хвильовою функцією  $\Psi$  його можна записати у довільному - представленні. Для цього треба розкласти хвильову функцію за власними функціями оператора  $\hat{A}$ , а саме:

$$\hat{A}\phi_n = a_n \phi_n, \quad \Psi = \sum c_n \phi_n.$$

Тоді для середнього значення деякого оператора  $\hat{L}$  фізичної величини у чистому стані  $\Psi$  можемо записати:

$$\overline{\hat{L}} = (\Psi, \hat{L}\Psi) = \sum_{m,n} (c_m \phi_m, \hat{L} c_n \phi_n) = \sum_{m,n} c_m^* c_n L_{mn},$$

де  $L_{mn} = (\phi_m, \hat{L}\phi_n)$  – матричний елемент оператора у  $A$ -представленні.

Якщо ж квантовомеханічна система знаходиться у мішаному стані, тобто нам відомо лише те, що згальна хвильова функція  $\Psi$  системи це певна суперпозиція чистих станів  $\Psi_i$  із статистичною вагою  $\omega_i$  при чому  $\sum_i \omega_i = 1$ . Тоді середнє значення оператора  $\langle \hat{L} \rangle$  по такому мішаному ансамблю

$$\langle \hat{L} \rangle = \sum_i \omega_i \overline{\hat{L}}_i = \sum_i \omega_i \sum_{m,n} L_{mn} c_m^{*(i)} c_n^{(i)} = \rho_{mn} L_{mn},$$

де

$$\rho_{mn} = \sum_i \omega_i c_m^{*(i)} c_n^{(i)}$$

матричний елемент деякого ермітового оператора  $\hat{\rho}$ . Діагональні матричні елементи такого оператора визначають ймовірності (або густини ймовірностей) вимірів деякої фізичної величини. Очевидно, що сума діагональних матричних елементів матриці густини рівна одиниці:

$$Tr(\rho) = 1.$$

Тоді вираз для середнього від оператора  $\hat{L}$  у стані  $\Psi$  (чистому або мішаному) можна представити як

$$\langle \hat{L} \rangle = \bar{\hat{L}} = \sum_{m,n} \rho_{mn} L_{mn} = \sum_n (\rho L)_{nn} = Tr(\hat{\rho} \hat{L}).$$

Використовуючи термінологію проєкційних операторів статистичний оператор  $\hat{\rho}$  можна записати як  $\hat{\rho} = \sum_n \omega_n \hat{P}_n$ , де  $\hat{P}_n = |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$  – проєкційний оператор на стан  $\Psi_n$ , а  $\omega_n$  – статистична вага стану. Таким чином коли  $\omega_n = \delta_{ni_0}$ , де  $\Psi_{i_0}$  – деякий чистий стан в якому знаходиться вся система, стає оператор  $\hat{\rho}$  перетворюється на оператор проєктування на стан  $\Psi_{i_0}$ . Враховуючи те, що  $(\Psi_{i_0}, \Psi_{i_0}) = 1$  знайдемо:

$$\hat{\rho}^2 = |\Psi_{i_0}\rangle\langle\Psi_{i_0}| |\Psi_{i_0}\rangle\langle\Psi_{i_0}| = \hat{\rho},$$

тому для чистого стану

$$Tr \hat{\rho}^2 = 1.$$

Останнє співвідношення є необхідною і достатньою умовою чистоти стану. Для мішаного стану  $Tr \hat{\rho}^2 < 1$ .

### Спектр операторів народження та знищення.

Оператори народження та знищення не є ермітовими, в цьому легко переконатись із загального вигляду цих операторів:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}). \quad (16.28)$$

Використання цих операторів для знаходження спектру гармонічного осцилятора було вже розглянуто раніше, а зараз розглянемо їх спек-



тральні властивості. Власні функції оператора знищення, використовуючи означення (16.28) знайдемо з рівняння:

$$\hat{a}\psi = \lambda\psi \quad \Rightarrow \quad \hat{a}\psi = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left( \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi(x) = \lambda\psi(x), \quad (16.29)$$

де

$$\psi_\lambda(x) = C(\operatorname{Re}\lambda) \exp \left( \lambda x \sqrt{2 \frac{m\omega}{\hbar}} - \frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right), \quad (16.30)$$

або у безрозмірних змінних  $x^2 = (\hbar/m\omega)\xi^2$ :

$$\psi_\lambda = C \exp \left( -\frac{1}{2}(\lambda\sqrt{2} - \xi)^2 \right), \quad \text{де } C = \pi^{-4}. \quad (16.31)$$

Спектром оператора знищення є уся комплексна площина, що можна зрозуміти оскільки  $\hat{a}$  не ермітовий. Власні вектори  $\psi_\lambda$ , що відповідають різним власним значенням не є ортогональними:

$$(\psi_{\lambda_1}, \psi_{\lambda_2}) = C\sqrt{\pi} \exp \left( -\frac{1}{2}(\lambda_1^* - \lambda_2)^2 \right). \quad (16.32)$$

Лише для випадку  $|\lambda_1^* - \lambda_2| \gg 1$  вектори з різними  $\lambda$  наближено ортогональні.

Оператор народження навпаки не має власних векторів, оскільки отримані функції є необмеженими:

$$\hat{a}^+\psi = \lambda\psi \quad \Rightarrow \quad \psi_\lambda = C \exp \left( \frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}\lambda)^2 \right). \quad (16.33)$$

### Когерентні стани.

Когерентні стани були відкриті Шредінгером у 1926 році при розгляді гармонічного осцилятора. Виявилось, що таку властивість мають отримані вище чисті стани гармонічного осцилятора, що є власними векторами оператора знищення і як це буде показано далі мають мінімальну невизначеність. Когерентні стани знайшли застосування у квантовій оптиці оскільки хвильова функція, яка використовується для класичного опису електромагнітного поля повинна мати мінімальну невизначеність для усіх моментів часу.

З класичної точки зору електромагнітне поле складається з хвиль з певними визначеними значеннями амплітуди та фази. Але це не так

при квантовомеханічному описі поля. В цьому випадку мають місце флуктуації як амплітуди так і фази поля. Електромагнітне поле у стані з певним визначеним числом частинок має цілком визначену амплітуду але повністю невизначену фазу, тоді як поле у когерентному стані має однакові значення невизначеностей для цих двох змінних [7].

Отриманий вище власний вектор оператора знищення  $\psi_\lambda$  можна виразити через стан з певною кількістю частинок  $\psi_n$

$$\psi_\lambda = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n \Rightarrow \hat{a} \psi_\lambda = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{n} \psi_{n-1} = \lambda \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n.$$

З останнього рівняння отримуємо рекурентне співвідношення для коефіцієнтів  $C_n$

$$C_{n+1} = \frac{\lambda}{\sqrt{n+1}} C_n \Rightarrow C_n = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} C_0,$$

де  $C_0$  знаходимо з умови нормування. Враховуючи ортонормованість хвильових функцій осцилятора  $\psi_n$  маємо

$$(\psi_\lambda, \psi_\lambda) = 1 = C_0^2 \sum_{n,n'} \frac{(\lambda^*)^n \lambda^{n'}}{\sqrt{n!n'}} (\psi_{n'}, \psi_n) = C_0^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(|\lambda|^2)^n}{n!},$$

де

$$C_0 = e^{-|\lambda|^2/2}.$$

Таким чином отримаємо:

$$\psi_\lambda = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \psi_n. \quad (16.34)$$

Тобто ймовірність того, що у когерентному стані  $\psi_\lambda$  знаходиться  $n$  частинок задається розподілом Пуасона

$$w_n = |(\psi_n, \psi_\lambda)|^2 = \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}, \quad (16.35)$$

а фізичний зміст параметра  $|\alpha|^2 = \langle n \rangle$ .

Враховуючи означення операторів народження

$$\psi_n = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}\psi_0$$

когерентний стан можна виразити через основний стан гармонічного осцилятора  $\psi_0$ :

$$\psi_\lambda = e^{(-|\lambda|^2/2 + \lambda\hat{a}^+)}\psi_0. \quad (16.36)$$

Враховуючи те, що  $\exp(-\lambda^*\hat{a})\psi_0 = 0$  вираз (16.36) можна переписати як

$$\psi_\lambda = D(\lambda)\psi_0, \quad (16.37)$$

де

$$D(\lambda) = e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda\hat{a}^+}e^{-\lambda^*\hat{a}}.$$

Використовуючи формулу Бейкера-Хаусдорфа<sup>5</sup>, можна показати, що унітарний оператор  $D(\lambda)$  можна записати як

$$D(\lambda) = e^{\lambda\hat{a}^+ - \lambda^*\hat{a}}, \quad (16.38)$$

а також, що  $D(\lambda)$  діє як оператор зсуву на амплітуди  $\hat{a}$  та  $\hat{a}^+$ , тобто<sup>6</sup>:

$$D^{-1}(\lambda)\hat{a}D(\lambda) = \hat{a} + \lambda, \quad (16.39)$$

$$D^{-1}(\lambda)\hat{a}^+D(\lambda) = \hat{a}^+ + \lambda^*.$$

Таким чином когерентний стан  $\psi_\lambda$  являє собою зміщений основний стан гармонічного осцилятора для якого співвідношення невизначеностей для координати та імпульсу приймає мінімальне значення

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2}. \quad (16.40)$$

Якщо розглянути еволюцію в часі хвильового пакету, що в початковий момент задається хвильовою функцією  $\psi_0$ , яку зміщено у додатньому напрямку на величину  $x_0$ ,

$$\psi_0(x, t = 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x - x_0)^2\right], \quad (16.41)$$

<sup>5</sup>Для двох довільних операторів таких, що  $[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{A}] = [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}] = 0$  виконується тотожність  $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{-[\hat{A}, \hat{B}]/2}e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ .

<sup>6</sup>Доведення співвідношень (16.39) залишаємо у якості вправи для самостійного опрацювання.

то вона відбуватиметься без розпливання ( $\Delta x = x_0/\sqrt{2}$ ) такого пакету в просторі, а густина ймовірності у наступні моменти часу задаватиметься виразом

$$|\psi(x, t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^2 \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x - x_0 \cos \omega t)^2\right]. \quad (16.42)$$

При цьому можна показати що хвильовий пакет (16.41) є координатним представленням когерентного стану (16.34), де  $\lambda = (m\omega/2\hbar)^{1/2}x_0$ . Енергія у такому хвильовому пакеті розподілятиметься за законом Пуасона (16.35).

## ЛІТЕРАТУРА

1. *Вакарчук І.О.* Квантова механіка. Львів.: ЛНУ ім. Івана Франка, 2007.-848 с.
2. *Федорченко А.М.* Основы квантовой механики. К. Вища школа, 1979.- 271 с.
3. *Гречко Л.Г., Сугаков В.И., Томачевич О.Ф., Федорченко А.М.* Сборник задач по теоретической физике. М.: Высш.школа, 1972.-336 с.
4. *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1981.-881 с.
5. *Tinkham M.* Group Theory and Quantum Mechanics. McGraw-Hill:NewYork, 1964.
6. *M.Belloni, R.W.Robinett* The infinite well and Dirac delta function potentials as pedagogical, mathematical and physical models in quantum mechanics. PhysicsReports 540, (2014) 25–122.
7. *М.О. Скалли, М.С. Зубайри* Квантовая оптика. М.: Физматлит, 2003. -512 с.