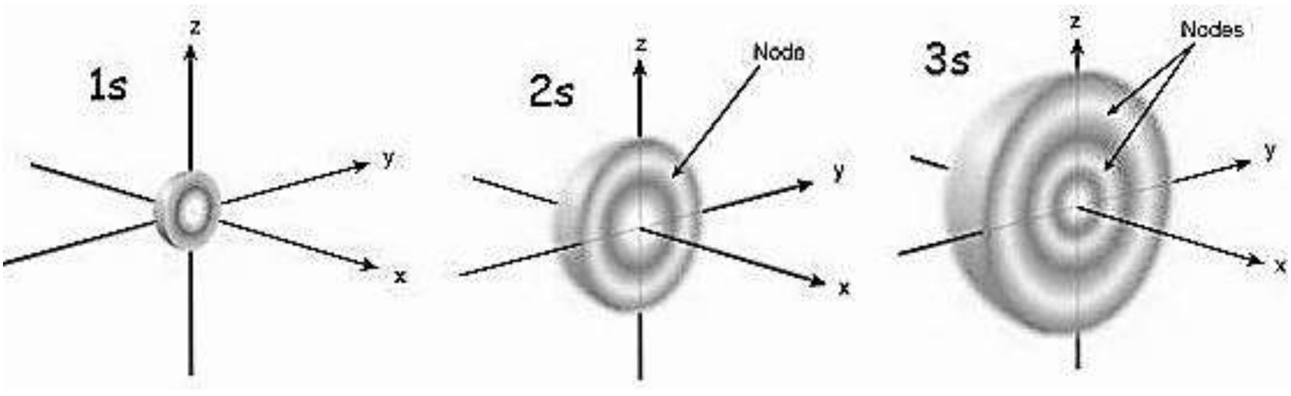
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ПОЛТАВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В. Г. КОРОЛЕНКА

В.В. Іванко, О.В.Саєнко, Т.Д. Дідора

ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Методичні рекомендації для студентів фізико-математичного факультету

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - U(r)\big)\psi = 0$$



Полтава 2021

УДК 53.01

Рецензенти:

Л. О. Флегантов, кандидат фізико-математичних наук, професор кафедри загально технічних дисциплін Полтавського державного аграрного університету;

В. І. Шинкаренко, доцент кафедри хімії і методики викладання хімії Полтавського національного педагогічного університету ім. В.Г. Короленка

Затрерджено та рекомендовано до друку вченою радою Полтавського національного педагогічного університету ім. В.Г. Короленка. Протокол №1 від 30 серпня 2021 року

Іванко В.В., Саєнко О.В. Дідора Т.Д.

Ф 12 Основи квантової механіки Методичні рекомендації для студентів фізико- математичного факультету . Полтава : ПНПУ імені В.Г. Короленка, 2021 . 74 с.

Методичні рекомендації до практичних занять та організації самостійної роботи з дисципліни «Теоретична фізика. Квантова механіка» Структура і зміст рекомендацій індивідуалізувати навчання студентів, реалізувати ефективні підходи до вивчення дисципліни, організувати самостійну роботу майбутніх учителів фізики.

Для студентів фізико-матетичного факультету педагогічного університету.

ПЕРЕДМОВА

Пропоновані методичні рекомендації до проведення практичних занять та організації самостійної роботи студентів фізико-математичного факультету при вивченні розділу теоретичної фізики «Квантова механіка».

Мета вивчення дисципліни: оволодіння студентами основними поняттями і математичним апаратом квантової теорії; формування загальнонаукового світогляду і виховання фізичної культури, необхідної майбутньому вчителю, а також для проведення наукових досліджень.

Посібник містить матеріали до змістових модулів робочої навчальної програми дисципліни, яку опановують студенти предметної спеціальності «014.08 Середня освіта (Фізика)» в Полтавському національному педагогічному університеті імені В. Г. Короленка. Кожний параграф складається із теоретичного матеріалу та підпунктів, що містять приклади розв’язань типових задач та вправи для самостійної роботи.

Перед тим, як користуватися посібником, студент має опрацювати відповідний теоретичний матеріал.

Наведені приклади розв’язань задач і розв’язування студентами завдань для самостійної роботи сприяють формуванню необхідних знань та вмінь для успішного проходження поточного і підсумкового контролю.

1. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

ХВИЛЬОВІ ВЛАСТИВОСТІ КОРПУСКУЛ

В кінці 19 ст. Томпсоном було відкрито електрон. Цю частинку він вважав атомом електрики, тобто корпускулою, яка володіє елементарним електричним зарядом, має певну масу.

Електрон як корпускула повинен мати чітку локалізацію в просторі, певні розміри, а під час руху описувати цілком визначену траєкторію $r=r(t)$.

В 1913 році Резерфорд довів, що атом складається з ядра, навколо якого по колових орбітах рухаються електрони. Бор у 1915 році створює квантову модель атома, тобто електрони можуть рухатись лише по тих орбітах, для яких момент імпульсу набирає певні дискретні значення: $L=nh$.

Оскільки вектори $\boldsymbol{v}$ і $\boldsymbol{r}$ перпендикулярні, то $pr=nh$.

1925-1926 роки — Луї де Бройль робить наступні перетворення:$pr=nh./2\pi,$

$$p = h/(2\pi r/n). \tag{1}$$

З механіки відомо, що стояча хвиля між двома стінками, віддаль між якими l, може існувати, якщо $l=n$.

Якби хвиля поширювалась по замкненому кільцю, то умова існування стоячої хвилі набула б вигляду

$$2\pi r = n\lambda$$

або

$$\lambda = 2\,\pi r\,/n. \tag{2}$$

Можна помітити, що вираз (2) співпадає із знаменником виразу (1), тоді отримаємо, що

$$\lambda = h/p. \tag{1'}$$

Довгий час в світлі не помічали корпускулярних властивостей. Після того, як довели, що електромагнітна хвиля має корпускулярні властивості, виникло питання чи матеріальні частинки не мають хвильових властивостей.

Луї де Бройль висуває гіпотезу про те, що ***будь-який об'єкт, незалежно від природи, володіє хвильовими і корпускулярними властивостями.*** Кожному об'єкту відповідає хвиля (хвиля де Бройля).Якщо це правильно, то будь-якому об'єкту властива інтерференція, дифракція.

Але перевірка наявності цих властивостей можлива лише для мікрооб'єктів.Тому що з (1) випливає, що для звичайних об'єктів l досить мале і не існує пристрою, який би її зафіксував.

Дослідимо, чи можлива дифракція електрона.

Знайдемо довжину хвилі де Бройля для електрона, який прискорений $U = 10 \div 100B$.

З закону збереження енергії — кінетична енергія, яку отримує електрон, дорівнює роботі електричного поля, тобто $K = A_{\varepsilon n}$.

$$\mathrm{K} = \mathrm{mv}^2/2 = \mathrm{p}^2/2\mathrm{m} \quad \text{і} \quad A_{\varepsilon n} = \mathrm{eU}, \Rightarrow \quad \mathrm{p}^2/2\mathrm{m} = \mathrm{eU},$$

звідки

$$p = \sqrt{2meU} \text{ і } \lambda_Б = \frac{h}{\sqrt{2meU}}.$$

Розрахунок дає $l \approx 1 \div 2\mathring{A}$. А це співвимірно із відстанню між атомами (іонами) в кристалі.Подібний дослід був проведений Девіссоном і Джермером. Вони спостерігали відбивання електронного пучка від поверхні кристала. Наявність хвильових властивостей перевіряли Томпсон і Тартаковський. Вони пускали на тонку металеву фольгу пучок електронів, прискорених напругою порядку декількох десятків кВ, за якою знаходився фотопапір. В результаті ними на фотопапері було отримано інтерференційну картину (кільця Ньютона).

Отже, частинки мікросвіту не корпускули і не хвилі, хоча володіють корпускулярними та хвильовими властивостями.

Математично хвиля будь-якої природи може бути описана рівнянням $\psi = \psi^{i(kr-\omega t)}$ Якщо врахувати те, що $p = \hbar k$ і $W = \hbar\omega$, то рівняння набуде вигляду

$$\psi = \psi\, exp((i/\hbar)(pr - Wt)).$$

Як бачимо, хвиля описується за допомогою дискретних і неперервних величин.

СПІВВІДНОШЕННЯ НЕВИЗНАЧЕНОСТЕЙ ГАЙЗЕНБЕРҐА

Принцип невизначеності бере початок у теорії перетворень Дірака-Іордана. Вони розуміли, що в квантовій механіці, на противагу класичній фізиці, задання точного значення координати q несумісне із завданням точного значення імпульсу p. Гейзенберг досліджував кількісний зв'язок між теоретично припустимими розподілами подібних величин. Іншими словами, він задався питанням про те, яку інформацію про зв'язок між статистичними розподілами значень qі значень p можна витягти з теорії перетворень.

Добуток невизначеностей δq і δp дорівнює $h/(2\pi)$, тобто

$$\delta q \delta p = h/(2p).$$

Аналізуючи аналогічним чином експеримент Штерна-Герлаха, Гейзенберг показав, що точність виміру енергії тим менше, чим коротше проміжок часу, проведений атомом у полі, що відхиляє, тобто $\delta E \delta t \sim h$.

2. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Квантова механіка – фізична теорія, яка описує і пояснює основні властивості атомів, молекул і ряд властивостей атомних ядер. ***Вона вивчає процеси, що відбуваються в елементах об'єму з лінійними розмірами порядку $10^{-6}10^{-13}$ см.***

Виникнення і розвиток квантової механіки пов'язані з переборенням тих труднощів, з якими зустрілася класична фізика при вивченні атомних процесів і супроводжувалася радикальними змінами основних положень класичної фізики.

1. Першою спробою подолання цих труднощів була теорія Бора, але вона справилася з цим завданням лише частково.

2. Теорія де Бройля, яка прийшла їй на зміну, була по суті рядом зауважень про хвильову природу мікрочастинок. Вона не мала загальної послідовної бази.

3. На початку 1926р. Е. Шредінгер (1887 – 1961) дав новий напрям хвильовій механіці. Ідея Шредінгера полягала в тому, що «квантування», тобто виділення стійких рухів атомів є задачею того *ж* типу, що й задача знаходження стоячих хвиль в акустиці. Стаціонарні стани атома відповідають хвильовому процесу, що утворює стоячі хвилі. Шредінгер запропонував описувати рух мікрочастинок за допомогою хвильового рівняння.

4. В. Гейзенберг у 1925р., незалежно від Шредінгера сформулював принцип так званої матричної механіки, в якій замість визначення координат та імпульсів, що характеризують стан у класичній механіці, вводиться нескінчена матриця. З появою теорій Гейзенберга і Шредінгера склалася дивна ситуація коли дві, на перший погляд різні теорії однаково бездоганно розв'язують одні і ті ж задачі. Але незабаром було показано математичну еквівалентність обох теорій, які після певного синтезу дали те, що нині називають "Квантова механіка".

5. У 1928р. П. Дірак створив релятивістську квантову механіку, застосувавши до квантової механіки співвідношення теорії відносності.

6. М. Борн (1882 – 1970) дав імовірнісне тлумачення квантової механіки. До цієї ідеї М. Борн прийшов на підставі зауваження Ейнштейна про те, що подвійну природу світла можна зрозуміти на основі імовірнісних уявлень, а саме: коли припустити, що середня густина фотонів у світловому потоці пропорційна квадрату амплітуди електромагнітної

хвилі. За розробку імовірнісного тлумачення квантової механіки М. Борн був удостоєний Нобелівської премії у 1954р.

7. У подальших роботах учених досягнуто сучасного формулювання основних принципів квантової механіки. Серед вчених, які внесли значний вклад у подальший розвиток квантової механіки слід відмітити таких: Л.І. Мандельштам, В.О. Фок, І.Є. Тамм, Л.Д. Ландау, Д.І. Блохінцев, Д.Д. Іваненко та інші.

8. Квантово механічна картина будови і руху матерії по суті справи зайняла панівне положення в сучасній фізиці і поряд з теорією.

Основні принципи квантової механіки зручно сформулювати з допомогою хвильової функції:

1) ***Стан системи в квантовій механіці можна задати за допомогою хвильової функції стану***, причому ця функція задає максимально можливу інформацію про стан системи. Функція

$$|\Psi(x,y,z,t)|^{2}\, dxdydz,$$

задає імовірність знайти частинку в елементі об'єму *dxdydz* біля точки *x,y,г* в момент часу *t*.

На хвильову функцію накладаються певні умови: вона ***однозначна, неперервна і скінченна разом із своїми першими похідними*** в усіх точках простору і задовільняє певні граничні умови.

На хвильову функцію накладається умова нормування:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x,y,z,t)|^{2}\, dxdydz\ . \tag{1}$$

Оскільки $|\Psi(x,y,z,t)|^{2}$ має зміст імовірності, то інтеграл (1) – це імовірність знайти частинку в довільній точці простору – подія достовірна.Рівність нулю хвильової функції у всіх точках простору означає відсутність стану.

2) Принцип суперпозиції станів.

Нехай в деякій системі реалізується стан, що описується хвильовою функцією Ψ_1 і стан, що описується хвильовою функцією Ψ_2. Тоді в системі буде реалізований стан, що описується лінійною суперпозицією станів Ψ_1 і Ψ_2,тобто

$$\Psi = \mathrm{c}_1\Psi_2 + \mathrm{c}_1\Psi_2, \tag{2}$$

де c_1, c_2 – довільні константи.

Узагальнимо. Допустимо, що реалізується *n* станів $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$ тоді буде реалізований і стан

$$\Psi = \sum c_k \Psi_k \quad (3)$$

Для опису руху мікрооб'єктів використовують відомі з класичної фізики величини: радіус-вектор r**,** імпульс p**,** енергія *E,* момент кількості руху *L* і т.д.

Стан мікрооб'єкта у фіксований момент часу задається деякою кількістю фізичних величин – **повним набором змінних**, який аналогічний сукупності канонічних змінних класичної механіки.

1. Істотною ***особливістю*** квантово-механічного опису є те, що в повний набір входить менше число змінних**,** ніж у сукупність класичних змінних. Стан однієї точкової частинки задається в квантовій механіці трьома змінними, в той час, як у класичній механіці для цього вимагається 6 змінних — по 3 проекції *r* і p**.** Звичайно, як змінні повного набору змінних, для мікрооб'єкта обирають координати. У цьому випадку говорять, що опис стану робиться в ***координатному представленні.*** Протилежним описом є представлення імпульсів частинки — імпульсне представлення. У квантовій механіці неможливо одночасно вказати координату та імпульс частинки. Це суперечить співвідношенню невизначеностей. З фізичної точки зору це еквівалентно відсутності траєкторії у частинки. Для довільного процесу є зміст говорити тільки про ймовірність виявлення тих чи інших значень заданої фізичної змінної, тобто ***квантово- механічний опис є імовірнісним.***

2. Іншою особливістю мікропроцесів є те, що ***деяких значень змінних взагалі не можливо виявити при вимірюванні,*** оскільки вони не сумісні з законами квантової механіки; ці значення є нібито „забороненими,,.

Сукупність усіх значень, яких може набувати задана змінна, називається **спектром.** Залежно від типу змінної і конкретних фізичних умов руху спектр може бути *неперервним, перервним або змішаним.* ***Перервний*** (***дискретний***) спектр складається з окремих значень, між якими є інтервали „заборонених»значень. ***Неперервний*** спектр — це всі значення на числовій осі або деякій її частині. Такий спектр мають (при певних умовах) **r** і ***p. Змішаний*** спектр складається з дискретних і неперервних частин на числовій осі. Прикладом такого спектру є система, що складається з протона і електрона (атом водню).

Енергія системи в області *E>0* утворює неперервну частину спектру і відповідає розпаду атома (протон і електрон). На від'ємній півосі *(E<0)* є рівні енергії E_n, які відповідають зв'язаним станам протона і електрона. Теоретичні обчислення спектрів фізичних змінних є найважливішим завданням квантової механіки.

3. Принцип доповненості

Бажаючи дати послідовну і несуперечливу інтерпретацію квантової механіки, Н. Бор у 1928р. ввів так званий принцип **доповненості,** згідно з яким ***атомні явища не можна описувати з тією повнотою, яка вимагається класичною механікою.*** Ряд фізичних величин, які дають повний опис системи у класичній механіці, у квантовій механіці фактично взаємно виключають одна одну.

Після тривалої дискусії Бора з Гейзенбергом, вони прийшли до висновку, що їх погляди на квантову механіку збігаються і що принцип невизначеності є окремим випадком більш загального принципу — принципу доповненості.

4. Принципи суперпозиції станів і закон композиції амплітуд

Одним з основних положень квантової механіки є ***принцип суперпозиції станів,*** який у найпростішому випадку зводиться до наступного:

1. Нехай в деякій системі реалізується стан, що описується хвильовою функцією Ψ_1 і стан, що описується хвильовою функцією Ψ_2. Тоді в системі буде реалізованийстан, що описується лінійною суперпозицією станів Ψ_1 і Ψ_2,т.т.

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 \tag{1}$$

де c_1, c_2 — довільні константи, які не залежать від часу.

2. Якщо хвильову функцію помножити на довільне, відмінне від нуля (може бути і комплексним) число, то нова хвильова функція буде відповідати тому *ж* стану системи: $\Psi(\xi) = c\Psi(\xi)$.

Цей принцип, обґрунтований результатами експериментів з вільними частинками, також поширюється на рух у силових полях.

Суперпозиція станів у квантовій механіці істотно відрізняється від суперпозиції коливань у класичній механіці, в якій суперпозиція коливань приводить до нового коливання з більшою або меншою амплітудою. Крім цього, в класичній теорії коливань існує стан спокою, в якому всюди амплітуда коливань дорівнює нулю. У квантовій механіці рівність нулю хвильової функції в усіх точках простору відповідає відсутності стану.

Необхідно також відмітити статистичну інтерпретацію хвильової функції Згідно цієї інтерпретації інтенсивність хвильової функції ¥ (хвилі де Бройля) в деякому місці простору в даний момент часу пропорційна ймовірності знаходження частинки в цьому місці простору.

З математичної точки зору ***безпосередній зміст має не сама хвильова функція Ψ*** яка взагалі кажучи може бути величиною комплексною, ***а квадрат модуля $|\Psi|^2$.***

ВЛАСНІ ФУНКЦІЇ ТА ВЛАСНІ ЗНАЧЕННЯ ОПЕРАТОРІВ

Використовуючи правило відшукання середніх значень, можна шукати не лише середні значення фізичних величин, але і середньоквадратичні відхилення від середніх значень у даному стані Ψ. Дійсно, введемо

$\Delta F = F - \bar{F}$,

і відповідний ермітовий оператор:

$$\Delta\hat{F} = \hat{F} - \bar{F} \tag{1}$$

можна написати

$$\langle\langle\Delta F\rangle^2\rangle = \overline{(\Delta F)^2} = \int \Psi^*\big(\Delta\hat{F}\big)\big(\Delta\hat{F}\big)\Psi d\xi = \int(\Delta\hat{F}\Psi)(\widehat{\Delta F^*}\Psi^*)d\xi \tag{2}$$

або

$$\langle\langle\Delta F\rangle^2\rangle = \int(\Delta\hat{F}\Psi)(\Delta\hat{F}\Psi)^* d\xi = \int\left|(\Delta\hat{F}\Psi)\right|^2 d\xi. \tag{3}$$

Формула (3) дозволяє обчислювати середньоквадратичне відхилення від середнього значення довільної фізичної величини в довільному стані, який описується хвильовою функцією $\Psi(\xi)$.

З допомогою (3) також можна визначити невідомі стани, в яких середнє квадратичне відхилення дорівнює нулю, тобто $< (\Delta F)^2 > = 0$, ***тобто визначити такі стани, в яких величина F має певне значення (тобто F=<F>).***

Для таких станів Ψ рівняння (3) зводиться до рівності

$\int\left|(\Delta\hat{F}\Psi)\right|^2 d\xi = 0.$

Оскільки під інтегралом стоїть істотно додатна величина, то рівність нулю можлива при умові

$$\big(\Delta\hat{F}\big)\Psi = 0. \tag{4}$$

Враховуючи, що в стані Ψ, який задовільняє рівняння (4), величина F має певне значення, тобто $< (\Delta F) >$, перепишемо (4), підставляючи (1), в такому вигляді:

$$\big(\hat{F} - \bar{F}\big)\Psi = \big(\hat{F} - F\big)\Psi = 0 \tag{5}$$

або

$$\hat{F}\Psi = F\Psi. \tag{5'}$$

Хвильову функцію тих станів, в яких $< (\Delta F)^2 > = 0$ ми позначаємо $\Psi_F(x, y, z)$. Хвильові функції тих станів, в яких фізична величина *F* має певне значення <*F*> повинні задовольняти рівнянню (5’). Рівняння (5') – однорідне, лінійне рівняння відносно невідомої функції Ψ. У зв’язку з тим, що хвильова функція повинна зображати реальні стани фізичних систем, нас будуть цікавити розв’язки цього рівняння, які відповідають відмінним від нулянеперервним, однозначним функціям Ψ.

У загальному випадку рівняння (5) або (5’) має розв’язки лише при деяких певних значеннях фізичної величини F, яка є параметром рівняння (5). Ці значення можуть пробігати або дискретний ряд значень F_1, F_2,…, або непервний ряд значень в деякому інтервалі. Ці особливі значення параметра *F* називаються **власними значеннями (ВЗ)** оператора ***F***, а відповідні їм розв’язки рівняння (5) та (5’) називаються **власними хвильовими функціями (ВХФ).** Сукупність власних значень оператора називають його спектром. Можуть бути вападки:

1. Рівняння (5') має однозначні, неперервні та диференційовані розв'язки при будь-яких значеннях параметра F. Іншими словами, якщо оператор має власні значення, які пробігають неперервний ряд в деякому інтервалі, то говорять, що він має **неперервний** або **суцільний** спектр, в цьому випадку величині F відповідає хвильова функція $\Psi_F(x, y, z)$.

2. Розв'язки існують лише при певних значеннях параметра F, які можна пронумерувати: F_1, F_2,…, (може бути і нескінченна кількість), тобто, якщо оператор має дискретні власні значення, то говорять, що він має **дискретний** спектр. У цьому випадку в якості індексу біля власної хвильової функції часто пишуть не власне значення, а його номер $\Psi_{F_n} = \Psi_n$. Цілі числа, які визначають власні значення і власні хвильові функції, називають **квантовими числами.**

3. Для оператора Гамільтона може реалізуватися така ситуація, коли в зонах енергія змінюється неперервно, а самі зони змінюються дискретно. Такий спектр називається **змішаним** (або смугастим).

Згідно вищесказаного, ***в стані, який описується власною функцією $\boldsymbol{\Psi_n}$ оператора F фізична величина має певне значення, яке дорівнює власному значенню цього оператора.*** Цей висновок має дуже велике значення для інтерпретації фізичних наслідків квантової механіки. Результати вимірювання фізичної величини F у стані Ψ_F буде з достовірністю значення F. Якщо стан системи описується хвильовою функцією Ψ,яка співпадає ні з однією з власних хвильових функцій оператора ***F***, то при вимірюванні величини F у цьому стані ми будемо отримувати різні значення, які дорівнюють одному із власних значень оператора ***F***. Т.ч., сукупність власних значень оператора ***F*** вказує можливі результати вимірювань величини F у довільних станах. Цими твердженнями визначається фізичний зміст власних значень операторів квантової механіки.

В деяких випадках одному власному значенню оператора F відповідає декілька лінійно незалежних власних хвильових функцій; тоді відповідна фізична величина має певне значення в кожному із станів, які описуються цими власними хвильовими функціями:

$$\Psi_{n1} \qquad \hat{F}\Psi_{n1} = F\Psi_{n1};$$

$$\Psi_{n2} \qquad \hat{F}\Psi_{n2} = F\Psi_{n2};$$

$$\Psi_{ns} \qquad \hat{F}\Psi_{ns} = F\Psi_{ns}.$$

Такий спектр називається **виродженим**. Число незалежних власних хвильових функцій, які відповідають даному ВЗ, називається **кратність виродження** цього власного значення. Спектр називається **не виродженим**, якщо кожному власному значенню відповідає одна власна хвильова функція.

Приклад

Знайдемо власні значення і власні хвильові функції оператора проекції імпульсу

$$\widehat{P_X} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial X}.$$

Задача зводиться до розв'язку рівняння

$$\widehat{P_X}\Psi(X) = -i\hbar\frac{\partial\Psi(X)}{\partial X} = P_X\Psi(X)$$

або

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi_{P_X}(X)}{\partial X} = P_X\Psi_{P_X}(X).$$

Розв'язок цього рівняння:

$$\Psi_P(\mathrm{X}) = \mathrm{Ae}^{\frac{\hbar}{i}P_X X}.$$

Неперервні, однозначні та скінченні розв'язки цього рівняння можливі для всіх дійсних значень P_X, які знаходяться в інтервалі $-\infty < P_X < +\infty$. Таким чином, оператор P_X має неперервний спектр ВЗ. Кожному ВЗ $P_X = P$ відповідає одна власна хвильова функція (виродження відсутнє).

Якщо частинка знаходиться в необмеженій частині простору, то імпульс буде неперервний.

Імпульс може бути дискретний, якщо частинку помістити в необмежену частину простору розмірами L, тоді на власні хвильові функції накладаються граничні умови, зокрема ці умови вибирають такими: $\Psi_{P_X}(X) = \Psi_{P_X}(X+L)$. (Ця умова називається циклічною умовою Борна-Кармана). Тоді повинна виконуватися умова:

$$\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{i}P_X X} = \mathrm{e}^{\frac{\hbar}{i}P_X(X+L)}$$

або

$$\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{i}P_X L} = 1.$$

Це може бути лише у випадку,

$$\frac{P_X L}{\hbar} = 2\pi n$$

або

$$P_X = \frac{2\pi\hbar}{L}n = \frac{h}{L}n.$$

Квантування буде істотним, коли лінійні розміри L дуже малі, тому в звичайних умовах практично можна вважати імпульс неперервним.

ВЛАСТИВОСТІ ВЛАСНИХ ХВИЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ

1) Нехай оператор F має не вироджений дискретний спектр власних значень P_n. Тоді власні хвильові функції цього оператора задовольняють рівняння:

$$\hat{F}\Psi_n = F_n\Psi_n. \qquad (1)$$

Запишемо рівняння, комплексно спряжене до нього для квантового числа m

$$\hat{F}^*\Psi_m{}^* = F_m\Psi_m{}^*. \qquad (2)$$

Помножимо рівняння (1) і (2) зліва відповідно на $\Psi_m{}^*$ і Ψ_n. Інтегруючи потім праві та ліві частини нових рівнянь по всій області зміни змінних і віднімаючи одне від другого, знайдемо:

$$\int \Psi_m^*\hat{F}\Psi_n d\xi - \int \Psi_n\hat{F}^*\Psi_m^* d\xi = \int \Psi_m^* F_n \Psi_n d\xi - \int \Psi_n F_m \Psi_m^* d\xi$$

або, використовуючи умову спряженості,

$$0 = (F_n - F_m) \int \Psi_m^*\Psi_n d\xi \qquad (3)$$

Якщо $n \neq m$, то з цієї рівності випливає ортогональність власних хвильових функцій, які відносяться до різних власних значень, тобто

$$0 = \int \Psi_m^*\Psi_n d\xi \qquad (3')$$

Фізичний зміст ортогональності власних хвильових функцій Ψ_m і Ψ_n оператора ***F*** полягає в тому, що ***при вимірюванні фізичної величини F у цих станах ми з достовірністю отримаємо різні значення:*** $\boldsymbol{F_n}$ ***у стані*** $\boldsymbol{\Psi_n}$ ***і*** $\boldsymbol{F_m}$ ***у стані*** $\boldsymbol{\Psi_m}$***.*** Оскільки власна хвильова функція нормована, то

$$\int |\Psi_m|^2 d\xi = \int \Psi_m^*\Psi_m d\xi = 1 \qquad (4)$$

Тому, об'єднуючи (3') і (4), одержимо умову **ортонормованост**і, тобто

$$\int \Psi_m^*\Psi_n d\xi = \delta_{nm}, \qquad (5)$$

де

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, n = m \\ 0, n \neq m \end{cases}$$ ***– символ Кронекера.***

При доведенні формули (3') ми використали $n \neq m$, тобто спектр – не вироджений. Якщо спектр вироджений, то власні хвильові функції можуть бути не ортогональні ($n = m$ і інтеграл може дорівнювати нулю за рахунок множника $(F_n - F_m)$), але, виявляється, над ним можна провести ортогоналізацію.

2) Іншою властивістю власних хвильових функцій операторів, які мають дискретний спектр, є те, що ***сукупність всіх власних хвильових функцій утворює повну (замкнуту) систему функцій***, тобто довільна інша функція Ψ (Ψ - не є власна функція оператора)), яка залежить від тих же змінних і задовольняє ті ж граничні умови, для якої існує інтеграл $\int |\Psi|^2 d\xi$, може бути представлена у вигляді

$$\Psi(\xi) = \sum_n c_n \Psi_n(\xi)\ , \qquad (6)$$

де сумування поширено по всіх значеннях квантового числа n.

Щоб знайти коефіцієнт розкладу c_n, скористаємося умовою ортонормованості: (6) помножимо на Ψ_m^* і про інтегруємо по $d\xi$:

$$\int \Psi(\xi)\,\Psi_m^*(\xi)d\xi = \sum_n C_n \int \Psi_m^*\Psi_n d\xi = \sum_n C_n\,\delta_{mn} = \sum_{n\neq m} C_n\,\delta_{mn} + C_m\delta_{mm} = C_m$$

Таким чином

$$C_m = \int \Psi(\xi)\,\Psi_m^*(\xi)d\xi, \tag{7}$$

тобто коефіцієнт розкладу єдиний.

У випадку власних хвильових функцій оператора, що має ***неперервний спектр***, властивість повноти записується у такому вигляді:

$$\Psi(X) = \int C(P)\,\Psi_P(X)dP, \tag{8}$$

C(P) – повинно бути аналогом формули (7), тобто

$$\boxed{C(P) = \int \Psi(\xi)\,\Psi_P^*(\xi)d\xi}$$

Властивість ***ортонормованості***:

$$\boxed{\int \Psi(\xi)\,\Psi_{p'}^*(\xi)d\xi = \delta(p-p')}$$

Функції нормованості не на 1, а на δ-функцію (δ- функція Дірака).

ДОДАТОК 1.

Властивості $\boldsymbol{\delta}$-функції.

1. $\delta(p-p') = \begin{cases} 0, p \neq p'; \\ \infty, p = p'. \end{cases}$

2. $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(p-p')f(p')dp' = f(p)$;

3. $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(p-p')dp' = 1$;

4. $\delta(p-p') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p-p')x}dx$;

5. $\delta[a(k-k')] = (\frac{1}{a})\delta(k-k')$.

ДОДАТОК 2.

Щоб від оператора з дискретним спектром перейти до оператора з неперервним спектром треба:

1.Суму Σ замінити на інтеграл $\int$,

2. δ-символ Кронекера замінити на δ-функцію Дірака.

ЙМОВІРНОСТІ МОЖЛИВИХ ЗНАЧЕНЬ ФІЗИЧНОЇ ВЕЛИЧИНИ

При заданій хвильовій функції стану $\Psi(\xi)$ шукаємо ймовірності можливих значень фізичної величини, оператор якої має дискретний спектр. Позначимо ймовірність $W(A_n)$. Напишемо вираз для середнього значення <A> з теорії ймовірності:

$$\bar{A} = \sum_n W(A_n)A_n. \quad (1)$$

Причому

$$\sum_n W(A_n) = 1. \quad (2)$$

У квантовій механіці відомо, середнє значення фізичної величини у квантовому стані Ψ визначається співвідношенням:

$$\bar{A} = \int \Psi^*(\xi)\, \hat{A}\Psi(\xi)d\xi. \quad (3)$$

Формулу (3) перетворимо таким чином, щоб її можна було порівняти з формулою (1).

Використаємо властивість повноти:

$$\bar{A} = \int \sum_m C_m^* \Psi_m^*(\xi)\hat{A} \sum_n C_n \Psi_n =$$

поміняємо порядок сумування та інтегрування і використаємо той факт, що Ψ_n- власні хвильові функції оператора ***A***:

$$= \sum_{m,n} C_m^* C_n \int \Psi_m^* \hat{A}\Psi_n d\xi = \sum_{m,n} C_m^* C_n \int \Psi_m^* A_n \Psi_n d\xi = \sum_{m,n} C_m^* C_n A_n \int \Psi_m^* \Psi_n d\xi == \sum_{m,n} C_m^* C_n A_n \delta_{mn} = \sum_{m,n} C_m^* C_n A_n.$$

Таким чином,

$$\bar{A} = \sum_n |C_n|^2 \mathrm{A}_n. \quad (4)$$

Порівнюючи (1) і (4), одержимо

$$\boxed{W(A_n) = |C_n|^2}$$

Щоб знайти ймовірність $W(A_n)$ у стані, що описується хвильовою функцією $\Psi(\xi)$ потрібно розв'язати рівняння

$$\hat{A}\Psi_n = A_n \Psi_n,$$

потім розкласти $\Psi(\xi)$ по власних хвильових функціях $\Psi_n(\xi)$, $\Psi(\xi) = \sum C_n \Psi_n$ і тоді квадрат модуля коефіцієнтів розкладу дасть шукану ймовірність.

УМОВИ МОЖЛИВОСТІ ОДНОЧАСНОГО ВИМІРУ РІЗНИХ ФІЗИЧНИХ ВЕЛИЧИН

Якщо функція деякого стану співпадає з власною хвильовою функцією оператора A, то в цьому стані фізична величина A має певне значення. Очевидно, що якщо ХФ деякого стану є одночасно ВХФ декількох операторів, то в цьому стані існують певні значення всіх фізичних величин, які відповідають цим операторам. Наприклад, у стані, що описує вільний рух частинки

$$\Psi_{\bar{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\exp(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}),$$

певне значення має імпульс p та кінетична енергія $T=p^2/2m$, оскільки ця ХФ одночасно є ВХФ операторів імпульсу та кінетичної енергії.

Таким чином, залежності від стану системи ті чи інші фізичні величини можуть мати певні значення. Доводиться теорема:

якщо дві величини *A* і *B* одночасно можуть мати певні значення, то їх оператори повинні комутувати.

Для того, щоб дві фізичні величини одночасно мали певні значення, необхідно, щоб оператори цих величин комутували між собою. Якщо ж вони не комутують, то це означає, що одночасно вони не можуть мати точних значень. З'ясуємо, у якому співвідношенні знаходяться дисперсії цих величин у довільному стані, що описуються хвильовою функцією Ψ

3. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА

1. ХВИЛЬОВЕ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА

Одним з основних рівнянь квантової механіки є рівняння Шредінгера, яке визначає зміну стану квантових систем із перебігом часу. Воно записується у вигляді:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\psi(x,t). \tag{1}$$

Другими словами аналогічно до класичної механіки у квантовій механіці шукається рівняння руху у вигляді (1), де H— оператор Гамільтона частинки, який співпадає з оператором енергії, якщо він не залежить від часу. Вигляд оператора H визначається властивостями системи. Для **нерелятивістського** руху частинки з масою m у потенціальному полі $U(r)$ оператор H — дійсний і є **сумою операторів кінетичної і потенціальної енергії частинки.**

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\nabla^2 + U(\vec{r}). \tag{2}$$

Якщо ж частинка рухається в електромагнітному полі, то оператор Гамільтона буде комплексним.

Хоча рівняння (1) є рівнянням першого порядку за часом, внаслідок уявної одиниці воно має і періодичні розв'язки. Тому рівняння Шредінгера (1) часто називають ***хвильовим рівнянням Шредінгера,*** а його розв'язок називають хвильовою функцією, яка залежить від часу.

Рівняння (1) при відомому вигляді оператора H дозволяє визначити значення хвильової функції $\Psi(t)$ в довільний наступний момент часу, якщо відоме це значення в початковий момент часу. Таким чином, хвильове рівняння Шредінгера виражає **принцип причинності** у квантовій механіці.

Хвильове рівняння Шредінгера може бути отримане на основі таких формальних міркувань. Рівняння для власних функцій оператора Гамільтона має вигляд:

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (3)$$

де E — власні значення, що відповідають оператору Гамільтона. Оператор Гамільтона має вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\overline{m}}\nabla^2 + U(\vec{r}) \qquad (4)$$

На підставі співвідношення *E=-(ħ/i)∂/∂t* можна виключити з (3) параметр *E*.

Тоді рівняння Шредінгера набуде вигляду:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\overline{m}}\nabla^2 + U(\overline{r})\right]\Psi = +i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (5)$$

або

$$H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \qquad (6)$$

Вони не виводяться у квантовій механіці., так само як не виводиться рівняння Максвела у електродинаміці чи принцип найменшої дії (або рівняння Ньютона) у класичній механіці.

Легко переконатися, що рівняння (1) має місце при

$$H = \frac{\hbar^2}{2\overline{m}}\nabla^2.$$

і хвильовій функції

$$\psi(\vec{r},t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)}.$$

яка описує вільний рух частинки з певним значенням імпульсу. Дійсно

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2\overline{m}}\nabla^2 Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} = -\frac{\hbar^2}{2\overline{m}}(\frac{i}{\hbar})^2 p^2\psi = \frac{p^2}{2\overline{m}}\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} = i\hbar\frac{i}{\hbar}(-E)\psi = E\psi \;\; E = \frac{p^2}{2\overline{m}} \;\; H\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

У загальному випадку справедливість рівняння (1) підтверджується узгодженням з дослідом всіх висновків, які отримуються з допомогою цього рівняння.

Покажемо, що з (1) випливає важлива умова збереження нормування хвильової функції з перебігом часу. Нам необхідно тепер перевірити, чи мають розв'язки рівняння Шредінгера властивості, необхідні для того, щоб можна було зберегти попереднє статистичне тлумачення Ψ-функції: Чи $\Psi^*\Psi d\xi$ — є ймовірністю знайти частинку в елементарному об'ємі $d\xi$.

Перевірка полягає в наступному: якщо $\Psi^*\Psi d\xi$ є ймовірність, то її можна нормувати до одиниці, тобто вимагати, щоб виконувалась умова

$$\int \Psi^*\Psi d\xi = 1,$$

де інтегрування поширено на весь простір. Але в такому випадку умова нормування, встановлена в деякий момент $t=0$, повинна зберігатися і на весь майбутній час, тобто інтеграл, який стоїть зліва, не повинен залежати від часу. Переконаємося, що це має місце в самому загальному випадку, тобто

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^*\Psi d\xi = 0.$$

Оскільки з перебігом часу частинка не зникає з системи, то повинна виконуватись умова нормування для хвильової функції, тобто виконується рівність

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^*\Psi d\xi = 0 \quad \text{звідси} \quad \int \psi^* \psi d\xi = const \tag{7}$$

Справедливо

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = \psi^*\hat{H}\psi - \psi\hat{H}^{\ *}\psi^*$$

або

$$i\hbar\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} = \psi^*\hat{H}\psi - \psi\hat{H}^{\ *}\psi^* \tag{8}$$

Інтегруючи це співвідношення по всіх змінних і враховуючи самоспряженність оператора H, отримаємо:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \psi^*\psi d\xi = 0$$

Зауважимо, що ця умова не суперечить тому, що точка в просторі може переміщатися.

2. ГУСТИНА ПОТОКУ ІМОВІРНОСТІ

Оскільки Ψ є неперервна функція координат, то $\Psi^*\Psi$ ***можна уявити як деяку рідину,*** яка розлита по всьому простору. Ця "рідина" підкоряється закону збереження. Дійсно, інтеграл $\int \Psi^*\Psi^* d\xi$, взятий по повному простору, від часу не залежить. Тому, якщо в певній точці густина ймовірності $\Psi^*\Psi$ зростає (збільшується), то в іншому місці вона відповідно спадає (зменшується): можна собі уявити, що ***ймовірність «тече».***

Оскільки координата x – неперервна, то ймовірність знайти точку – функція від x, т.ч., згідно вище сказаного, ***імовірність можна розглядати як деяку текучу рідину, або в'язкий газ.***

Для таких об'єктів має місце **рівняння неперервності,** ***яке виражає закон збереження густини для локальної частини простору***, тому ми можемо сподіватися, що з рівняння Шредінгера, як наслідок, повинно випливати рівняння неперервності.

$$\frac{\partial \rho}{\partial e} + div\vec{j} = 0 \qquad (1)$$

Для цього у рівняння (8) попереднього параграфу підставимо явний вираз оператора Гамільтона (формула (2) з попереднього параграфу) для руху частинки у потенціальному полі.

$$i\hbar \frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} = \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})\right)\psi - \psi\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\overrightarrow{r})\right)\psi^*$$

або

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^* + \psi^* U(\vec{r})\psi - \psi U(\vec{r})\psi^*).$$

Це рівняння можна переписати так:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right) = \frac{i\hbar}{2m}\nabla\left(\psi^*\nabla\psi\text{-}\psi\nabla\psi^*\right), \qquad (2)$$

дійсно:

$$\nabla\left(\psi^*\nabla\psi\text{-}\psi\nabla\psi^*\right) = \nabla\psi^*\nabla\psi + \psi^2\nabla^2\text{-}\nabla\psi\nabla\psi^*\text{-}\psi\nabla^2\psi^* = \psi^*\nabla^2\psi\text{-}\psi\nabla^2\psi^*$$

Скалярний добуток ∇ на деякий вектор є **div** цього вектора.

Введемо позначення:

$$\rho(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t); \qquad (3)$$

$$\vec{j}(x,t) = \text{-}\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi\text{-}\psi\nabla\psi^*\right), \qquad (4)$$

тоді рівність (2) перепишеться так:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div\vec{j} = 0,$$

де *p* - густина ймовірності, j - вектор густини струму ймовірності.

Оскільки $\Psi^*\Psi^*d\xi$ є імовірність знаходження частинки в об'ємі $d\xi$, то $N\Psi^*\Psi^*d\xi$ буде середнім числом частинок в об'ємі $d\xi$ а $N\Psi^*\Psi^*$ — середньою густиною частинок в цьому об'ємі. Обчисливши цю середню густину для досить великої кількості точок, ми можемо за допомогою деякого геометричного образу, наприклад у вигляді хмарки тієї ж чи іншої густини, побудувати картину розподілу густини для даного моменту часу *t*.

Загальне рівняння Шредінгера дозволяє знайти залежність Ψ, від часу, а знайшовши цю залежність ми можемо передбачити картину розподілу ймовірності і слідкувати за змінами, які відбуваються в системі.

Однак цей спосіб опису недостатній для повного опису картини руху. Ми наблизимося до цього в більшій мірі, якщо зможемо вказати поряд з розподілом часток, також і середнє число часток, які проходять за 1 *с* через площадку 1 см^2 у напрямку додатної нормалі до площадки. Для цього добуток$\Psi^2\Psi$ вже не придатний і треба шукати іншу комбінацію цих же функцій, яка б підходила для опису руху.

Цю комбінацію ми знайдемо, якщо припустимо, що імовірність "тече".

Ми можемо використати вираз "густина струму імовірності" аналогічно до поняття струму у рівняння неперервності класичної гідродинаміки.

3. ЗМІНА СЕРЕДНІХ ЗНАЧЕНЬ ФІЗИЧНИХ ВЕЛИЧИН З ЧАСОМ

Як буде показано пізніше, ***середнє значення фізичних величин у стаціонарних станах не залежить від часу.*** У довільних (не стаціонарних) станах така залежність від часу повинна існувати, оскільки хвильова функція змінюється з часом.

За означенням:

$$\overline{A} = \int \psi^*(x,t)\widehat{A}\psi(x,t)d\tau = \overline{A}(t). \quad (1)$$

Оператор *А* з часом не змінюється, але хвильова функція - змінюється.

Рівняння Шредінгера дозволяють встановити прості правила, згідно з якими можна вичислити зміну середнього значення механічної величини за нескінченно малий проміжок часу. Тому має зміст розглядати границю:

$$\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\overline{A}(t+\Delta t)-\overline{A}(t)}{\Delta t} = \frac{d\overline{A}}{dt}. \quad (2)$$

Знайдемо похідну (2), використовуючи формулу (1). Для цього продиференціюємо під знаком інтеграла по часу:

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \int \frac{\partial\psi^*}{\partial}\widehat{A}\psi d\tau + \int \psi^*\widehat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}d\tau + \int \psi^*\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}\psi d\tau,$$

У першому та другому доданках скористаємось хвильовим рівнянням Шредінгера:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}H\psi;\ \ \frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}H^*\psi^*;$$

$$\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\int\left(H^*\psi^*\right)\overline{A}\psi\, d\tau + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^*\widehat{A}H\psi\, d\tau + \int \psi^*\frac{\partial\widehat{A}}{\partial t}\psi\, d\tau. \quad (4)$$

Використаємо ермітовість оператора Н у першому члені:

$$\int\left(H^*\psi^*\right)\widehat{A}\psi\, d\tau = \int\left(\widehat{A}\psi\right)H^*\psi^*\, d\tau = \int \psi^*\widehat{H}\widehat{A}\psi\, d\tau. \quad (5)$$

Формулу (5) підставимо у (4)

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = \int \psi^*\left\{\frac{1}{i\hbar}\left(\widehat{A}\widehat{H}-\widehat{H}\widehat{A}\right) + \frac{\partial A}{\partial t}\right\}\psi\, d\tau. \quad (6)$$

Величина

$$\frac{1}{i\hbar}\left(\widehat{A}\widehat{H}-\widehat{H}\widehat{A}\right) = \frac{1}{i\hbar}\left[\widehat{A},\widehat{H}\right]. \quad (7)$$

Називається **квантова дужка Пуассона.** Якщо ввести оператор *dA/dt* який визначається співвідношенням:

$$\frac{\mathrm{d}\bar{\mathrm{A}}}{\mathrm{dt}} = \frac{\mathrm{d}\langle \mathrm{A} \rangle}{\mathrm{dt}} = \int \psi^* \frac{\mathrm{d}\hat{\mathrm{A}}}{\mathrm{dt}} \psi \, \mathrm{d}\tau \tag{8}$$

то, враховуючи (6) і (7), отримаємо оператор ну рівність:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathrm{A}}}{\mathrm{dt}} = \frac{\partial \hat{\mathrm{A}}}{\partial \mathrm{t}} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathrm{A}}, \hat{\mathrm{H}}\right]. \tag{9}$$

Таким чином, формула (6) дає:

$$\frac{\mathrm{d}\,\bar{\mathrm{A}}}{\mathrm{dt}} = \frac{\overline{\mathrm{dA}}}{\mathrm{dt}}. \tag{10}$$

Тобто, похідна від середнього дорівнює середньому від похідної деякої фізичої величини.

Із (9) слідує: якщо оператор $\hat{A}$ явно від часу не залежить і комутує з оператором Гамільтона, то середнє значення фізичної величини A не міняється із зміною часу в довільному стані. Дійсно, в цьому випадку

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0; \quad \left[\hat{A}, H\right] = 0,$$

тоді

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = 0 \quad \hat{A} = const,$$

а тому

$$\frac{d\hat{A}}{at} = \int \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt} \psi \; d\tau = 0 \quad \bar{A} = cost.$$

Така величина називається інтегралом квантових рівнянь руху.

4. РІВНЯННЯ РУХУ. ТЕОРЕМА ЕРЕНФЕСТА.

Застосуємо вище отримані співвідношення для координати та імпульсу. Для простоти розглянемо одномірний рух вздовж осі x. Рівняння руху у класичній фізиці — це рівняння, що дозволяє визначити зміну координати та імпульсу з часом.

У квантовій механіці стан системи ми не задаємо імпульсом і координатою, але покажемо, що для операторів координати та імпульсу можна записати аналогічне рівняння.

Знайдемо явний вигляд співвідношень

$$\frac{d\hat{x}}{dt}, \quad та \quad \frac{d\hat{p}}{dt}.$$

Імпульс p_x=p та координата x не залежать явно від часу, тому похідні від операторів, які відповідають цим величинам виражаються лише через дужки Пуассона:

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}, \hat{H}\right]; \quad \frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}, H\right]. \tag{1}$$

Припустимо, що стан руху частинки визначається оператором Гамільтона:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x) \tag{2}$$

Тоді з (1) слідують оператор нерівності, тобто:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}, \hat{H}\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] = \frac{1}{2i\hbar m}(i\hbar\hat{p} + \hat{p}i\hbar) = \frac{\hat{p}}{m},$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\hat{p}}{m}. \tag{3}$$

Знайдемо

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}, \hat{H}\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}, \hat{U}(x)\right].$$

Оскільки

$$[\hat{p}, \hat{p}^2] = 0,$$

то,

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}(-i\hbar)\frac{\partial U}{\partial x} = -\frac{\partial \hat{U}}{\partial x};\ \ \frac{d\hat{p}}{dt} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \tag{4}$$

Дійсно, розглянемо

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, U(x)\right]\psi(x) = \left(\frac{\partial}{\partial x}\cdot U(x) - U(x)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) = \frac{\partial}{\partial x}U(x)\psi(x) - U(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = \frac{\partial U(x)}{\partial x}\cdot\psi(x) + U(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - U(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} = \frac{\partial U(x)}{\partial x}\psi(x).$$

Рівняння (3) встановлює зв'язок між швидкістю та імпульсом, а рівняння (4) виражає закон зміни імпульсу з часом.

Взявши похідну за часом від обох частин рівності (3), одержимо:

$$\frac{d^2\hat{x}}{dt} = \frac{1}{m}$$

використовуючи рівняння (4), одержимо

$$m\frac{d^2\hat{x}}{dt^2} = -\frac{\partial\hat{U}}{\partial x}. \tag{5}$$

Із цієї операторної рівності слідує рівність для середніх значень:

$$m\int \psi^* \frac{d^2}{dt^2}x\psi\, d\tau = -\int \psi^2 \frac{\partial U}{\partial x}\psi\, d\tau, \tag{6}$$

зміст співставлення операторів динамічних змінних полягає в тому, що, знаючи ці оператори і хвильові функції, ми можемо обчислити середні значення відповідних механічних величин:

$$m\frac{\overline{d^2x}}{dt^2} = -\frac{\overline{\partial U}}{\partial x} \tag{7}$$

Якщо використати формулу (10) попереднього параграфа, то одержимо квантове рівняння Ньютона:

$$m\frac{d^2\bar{x}}{dt^2} = -\frac{\partial\bar{U}}{\partial x} = \overline{F_x} \tag{8}$$

— теорема Еренфеста. ***Згідно*** *теореми Еренфеста* у квантовій механіці мають місце співвідношення і закони класичної механіки для середніх значень.

Згідно теореми Еренфеста для узагальнення основних рівнянь класичної механіки на квантовий випадок ми повинні у відповідні класичні співвідношення підставити середні значення операторів.

5. ПЕРЕХІД, ВІД КВАНТОВИХ РІВНЯНЬ РУХУ ДО КЛАСИЧНИХ

Аналогом класичних рівнянь Гамільтона у квантовій механіці є операторні рівняння, які творять зміст теореми Еренфеста:

$$\hat{\dot{x}} = \frac{\hat{p}}{m};\ \hat{\dot{p}} = -\frac{\partial U}{\partial x}.$$

Розглядаємо для простоти одновимірний рух частинки масою m у полі з потенціальною енергією $U=U(x)$. Встановимо, які дії і наближення необхідно зробити для переходу до класичних рівнянь Гамільтона

$$\dot{x} = \frac{p}{m};\ \ \dot{p} = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

Хвильова функція $\Psi(x,t)$ повинна задовільняти рівняння Шредінгера. Розглянемо рівняння для вільної частинки:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}.$$

$$\frac{d}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m};\ \frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\langle\frac{\partial U(x)}{\partial x}\rangle\ .$$

Якщо б у правій частині другого рівняння, замість величини $\langle\partial \mathrm{U}(\mathrm{x})/\ \partial \mathrm{x}\rangle$, стояла величина $\partial U(\langle x\rangle)/\partial\langle x\rangle$, то ми мали б звичайні класичні рівняння руху. Однак рівності між цими величинами немає. Щоб з'ясувати умови, при яких така рівність виконується, розкладемо функці U(x) у ряд біля точки $<x>$,

$$U(x) = U(\langle x\rangle) + U^{'}(\langle x\rangle)\Delta x + \frac{1}{2!}U^{''}(\langle x\rangle)(\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}U^{'''}(\langle x\rangle)(\Delta x)^3,$$

де $\Delta \mathrm{x} = \mathrm{x} - \langle \mathrm{x}\rangle$, а штрихи означають похідні за $<x>$. Підставимо цей вираз у друге усереднене квантове рівняння руху і з урахуванням того, що $<x>=0$, знаходимо

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -U^{'}(\langle x\rangle) - \frac{U^{'''}(\langle x\rangle)}{2}\ \langle(\Delta x)^2\rangle + \cdots$$

Якщо залишити в правій частині рівняння лише перший доданок, то ми отримаємо класичне рівняння Ньютона. Отже, решта доданків — це квантові поправки, які є малими за умови, що

$$\frac{1}{2}|U'''(\langle x\rangle)|\langle(\Delta x)^2\rangle|U'(\langle x\rangle)|.$$

Ця умова переходу від квантових рівнянь руху до класичних, або, як її ще називають — умова квазікласичності, виконуватиметься, якщо поле $U=U(x)$ плавно змінюється з координатою x, а величина $\langle(\Delta \mathrm{x})^2\rangle$ є достатньо малою.

4. НАБЛИЖЕНІ МЕТОДИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ ПРИ НАЯВНОСТІ ВИРОДЖЕННЯ

Нехай наш гамільтоніан незбуреної задачі має ***дискретний вироджений спектр***

$$\hat{H}_0\psi_{n_i}^0 = E_n^0\psi_{n_i}^0\ ,\qquad (1)$$

При чому n_i=1, 2,,..., s; s- кратність виродження.

Наше завдання: знайти наближені розв'язки точного рівняння Шредінгера для збуреної задачі

$$(\mathrm{H_o} + \hat{V})\psi = E\psi. \tag{2}$$

Розкладемо хвильову функцію в ряд по ВХФ оператора $\mathrm{H_o}$:

$$\psi = \sum_{k=n_1}^{n_s} c_k \psi_k^0 \tag{3}$$

Природно, що ми отримали рівність (7) попереднього параграфа, оскільки ψ шукаємо у тому ж виді, але зміняться початкові умови.

У формулі (3) задамо n-й рівень і виберемо нульове наближення

$$\psi_n^0 = \sum_k c_k^0 \psi_k^0 = c_{n_1}^0 \psi_{n_1}^0 + c_{n_2}^0 \psi_{n_2}^0 + \ldots + c_{n_5}^0 \psi_{n_5}^0 + \sum_{k \neq n_i} c_k^0 \psi_k^0 .$$

Умова (10) попереднього параграфа не матиме місця. Ми допускали, що енергії E_n^0 відповідала єдина хвильова функція ψ_n^0. Тепер же енергії E_n^0 відповідає s станів (s хвильових функцій ψ_{ni}). Аналог умови (10) попереднього параграфу набирає вигляду:

$$c_k^0 = \begin{cases} 0, k \neq n_1, n_2, \ldots, n_s ; \\ \neq 0, k = n_1, n_2, \ldots, n_s . \end{cases} \tag{4}$$

Шукаємо першу поправку до енергії. Підставимо (3) в (2):

$$(\mathrm{H_o} + V) \sum_k c_k \psi_k^0 = E \sum_k c_k \psi_k^0(x).$$

Помножимо зліва на $\psi_m^{0*}(x)$ і проінтегруємо по всій області визначення

$$\sum_k c_k \left(\int \psi_m^{0*}(x) H_0 \psi_k^0(x) dx + \int \psi_m^{0*}(x) \hat{V} \psi_k^0(x) dx \right) = E \sum_k c_k \int \psi_m^{0*}(x) \psi_k^0(x) dx.$$

Звідси

$$\sum_k c_k E|_k^0 + \sum_k c_k V_{mk} = \sum_k c_k S_{mk} .$$

Ми одержуємо аналог рівняння (7) попереднього параграфа:

$$\sum_k c_k V_{mk} = \left(E - E_m^0\right) c_m . \tag{5}$$

Ми одержуємо аналог умови (10) попереднього параграфу, формулу (4).

У рівнянні (5) виберемо m=n_1, тоді $E_m^0 = E_n^0$. Оскільки ми шукаємо поправку першого порядку, тому

$$E = E_n^0 + E_n^{(1)}. \tag{6}$$

Підставимо (6) у (5):

$$\sum_k c_k^0 V_{n_1 k} = E_n^{(1)} c_{n_1}^0 \tag{7}$$

Використаємо початкову умову (4). В сумі є члени лише від n_1 до n_s (у не виродженому випадку ми маємо лише один член). Одержимо систему рівнянь, якщо будемо послідовно покладати $m=n_2,n_3,\ldots,n_s$

Тоді

$$\begin{cases} \sum_{k=n_1}^{n_s} c_k^0 V_{n_1 k} = E_n^{(1)} c_{n_1}^0 ; \\ \sum_{k=n_1}^{n_s} c_k^0 V_{n_2 k} = E_n^{(1)} c_{n_2}^0 ; \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \sum_{k=n_1}^{n_s} c_k^0 V_{n_s k} = E_n^{(1)} c_{n_s}^0 ; \end{cases} \quad (8)$$

Розпишемо суму і перенесемо все в ліву частину.

$$\begin{cases} (V_{n_1 n_1} - E_n^{(1)}) c_{n_1}^0 + V_{n_1 n_2} + \ldots + V_{n_1 n_s} c_{n_s}^0 = 0 ; \\ V_{n_3 n_1} c_{n_1}^0 + V_{n_3 n_2} c_{n_2}^0 + \ldots + \left(V_{n_3 n_s} - E_n^{(1)}\right) c_{n_3}^0 = 0 . \end{cases} \quad (8')$$

(8') — це система лінійних однорідних рівнянь відносно невідомих коефіцієнтів$c_{n_1}^0, c_{n_2}^0, \ldots, c_{n_s}^0$. Щоб був нетривіальний розв'язок, необхідно, щоб визначникдорівнював нулю, тобто

$$\begin{vmatrix} V_{n_1 n_1} - E_n^{(1)} & V_{n_1 n_2} & \cdots & V_{n_1 n_s} \\ V_{n_2 n_1} & V_{n_2 n_2} - E_n^{(1)} & \cdots & V_{n_2 n_s} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ V_{n_s n_1} & V_{n_s n_2} & \cdots & V_{n_s n_s} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 . \quad (9)$$

Розкривши цей визначник, ми одержимо рівняння степені S відносно невідомого значення $E_n^{(1)}$. Це рівняння називають ***віковим*** або ***секулярним рівнянням.***

Ми одержимо Sкоренів $E_{nl}^{(1)}$, де l=1,2,...,s. При цьому можуть реалізовуватися певні випадки: корені різні, кратні і рівні.

1. Якщо **корені рівні**, то енергетичний рівень залишається тим самим (лише зміщується, а виродження залишається). В цьому випадку говорять, що ***збурення не знімає виродження.***

2. **Корені різні.** В цьому випадку енергетичний рівень розщеплюється на S рівнів (у 1-му наближенні).

$$E_{n_1} = E_n^{(0)} + E_{n_1}^{(1)} .$$

Кожен з цих нових рівнів буде не виродженим. Кожному енергетичному рівню відповідає своя хвильова функція. Говорять, що ***збурення знімає виродження.***

Хвильову функцію для кожного з цих рівнів у нульовому наближенні можна знайти, якщо у систему (8') замість $E_n^{(1)}$ послідовно підставити значення $E_{nl}^{(1)}$. Тоді зцієї системи можна знайти коефіцієнти $(c_{ni}^0)_l$. Знаючи коефіцієнти, за формулою

$$\psi_l = \sum_{n_i=n_1}^{n_s} (c_i^0)_l \psi_{n_i}^0 ,$$

3. **Корені кратні.** В цьому випадку ***збурення понижує кратність виродження.***

Буває, що матричні елементи оператора збурення *V*, обчислені з допомогою хвильових функцій, що відносяться до одного енергетичного рівня (який вироджений) дорівнює нулю, тобто

$$V_{n_i n_1}; n_i, n_l = n_1, n_2, .., n_s . \tag{10}$$

Якщо має місце рівність (10). то можна переконатися, що $E_n^{(1)} = 0$. Визначник (9) запишеться

$$\begin{vmatrix} -E_n^{(1)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -E_n^{(1)} & \cdots & 0 \\ \cdots & & \dots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & -E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 . \tag{11}$$

Тоді

$$E_{n_1}^{(1)} = 0. \tag{12}$$

Таким чином поправка 1-го наближення у цьому випадку дорівнює нулю. Необхідно шукати наближення 2-го порядку.

Скористаємося (5) і збережемо величини 2-го порядку малості

$$\sum_k c_k V_{mk} = (E - E_m^0) c_m .$$

Виберемо m=*n₁*. Розпишемо до 2-го порядку малості включно

$$\sum_k (c_k^0 + c_k^{(1)} V_{n_1 k} = \left(E_n^o + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} - E_n^0\right) c_{n_1}^0 ;$$

$$\sum_{k=n_1}^{n_s} c_k^0 V_{n_1 k} + \sum_{k\neq n_1}^{n_s} c_k^0 V_{n_1 k} + \sum_{k=n_1}^{n_s} c_k^{(1)} V_{n_1 k} + \sum_{k\neq n_1}^{n_s} c_k^{(1)} V_{n_1 k} = E_n^{(2)} c_{n_1}^0 .$$

Таким чином

$$\sum_{k\neq n_1}^{n_s} c_k^{(1)} V_{n_1 k} = E_n^{(2)} c_{n_1}^0 \tag{13}$$

Ми ще не можемо знайти $E_n^{(2)}$,оскільки невідоме $c_k^{(1)}$ для $k \neq n_1, \dots, n_s$.

Щоб знайти його, скористаємося умовою (5), покладаючи в ній $m \neq n_1, \dots, n_s$ і зберігаючи в ній члени 1-го порядку малості. Одержимо

$$\sum_k c_k^0 V_{mk} = \left(E_n^o + E_n^{(1)} - E_n^0\right)(c_m^0 + c_m^{(1)}) ,$$

$C_m^0 = 0$, оскільки $m \neq n_1, \dots, n_s$. Врахувавши (4):

$$\sum_{k=n_1}^{n_s} c_k^0 V_{mk} + \sum_{k\neq n_1}^{n_s} c_k^0 V_{mn} = (E_n^o - E_m^0) c_m^{(1)}$$

або, звідси

$$c_m^{(1)} = \sum_{k=n_1}^{n_s} c_k^0 \frac{V_{n_1 k}}{E_n^0 - E_m^0}. \qquad (14)$$

Формулу (14) підставимо в (13):

$$\sum_{k\neq n_1}^{n_s} V_{n_1 k} \sum_{l=n_1}^{n_s} \frac{V_{kl}}{E_n^0 - E_k^0} c_1^0 = E_n^{(2)} c_{n_1}^0 .$$

Поміняємо порядок сумування. Аналогічно можна записати і для $m\neq n_1,...,n_s$.

$$\begin{cases} \sum\limits_{l=n_1}^{n_s} \left\{ \sum\limits_{k\neq n_1}^{n_s} \frac{V_{n_1 k} V_{kl}}{E_n^0 - E_k^0} - E_n^{(2)} \delta_{n_1 l} \right\} c_l^0 = 0; \\ \sum\limits_{l=n_1}^{n_s} \left\{ \sum\limits_{k\neq n_1}^{n_s} \frac{V_{n_s k} V_{kl}}{E_n^0 - E_k^0} - E_n^{(2)} \delta_{n_s l} \right\} c_l^0 = 0. \end{cases} \qquad (15)$$

Ми одержали систему рівнянь. Одержимо визначник S-го порядку, але його елементи будуть складні - кожен член пропорційний

$$\sum_{k\neq n_1, n_2, ..., n_s} (...) .$$

Можуть реалізовуватися всі три випадки коренів: кратні, рівні, різні. Відмінність полягає лише у громіздкості.

5. ТЕОРІЯ КВАНТОВИХ ПЕРЕХОДІВ.

Нестаціонарна теорія збурень. Теорія квантових переходів

Однією з важливих задач квантової механіки є обчислення імовірності переходу **з одного квантового стану в інший**. Ця задача може бути подана таким чином. Нехай в момент часу t=0 ми маємо систему, яка характеризується тим, що яка-небудь фізична величина має певне значення$L = L_n$. Така система буде описуватись хвильовою функцією$\psi_n(\xi)$, яка є власною хвильовою функцією оператора L і належить власним значенням $L = L_n$. Про таку систему говорять, що вона знаходиться в квантовому стані n.

З перебігом часу, завдяки дії зовнішніх полів(зміна зовнішніх параметрів) або в силу внутрішніх причин (зміна віддалі і т.д.) стан системи може змінитися.

В результаті, в момент часу і наша система буде описуватися деякою новою хвильовою функцією, яку ми позначимо через $\psi_n(\xi, t)$. Ця нова система, яка виникла із попередньої, буде системою з невизначеним значенням величини L.

Якщо тепер здійснити відбір системи по признаку L (по величині L), то одержимо нову систему з набором значень $L = L_m, L_{m1}, L_{m2}, ...$ і т.д.

Про систему, в якій $L = L_m$ ($m\neq n$) говорять, що вона здійснила квантовий перехід із квантового стану n у квантовий стан m.

Сказане можнапроілюструвати схемою:

t=0 t≠0

$$\psi = \psi_n(\xi) \to \psi' = \psi_n(\xi, t) = \sum_m c_{m,n}(t)\psi_m(\xi)$$

$$\begin{cases} \psi_{m'}(\xi), L = L_m ; \\ \psi_{m'}(\xi), L = L_{m'} ; \\ \psi_{m''}(\xi), L = L_{m''} ; \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.. \end{cases}$$

$L = L_n$ L-невизначено

Розглянемо поняття *ймовірності переходу* із стану n в стан m. Згідно загальної теорії величина$p_{mn}(t) = |c_{mn}(t)|^2$є ймовірність знайти $L=L_m$у стані $\psi_n(\xi, t)$.. Так при t=0 $p_{mn}(0)=0$, якщо $m\neq n$(для m=n $p_{mn}(0)=p_{nn}=1$), то імовірність $p_{mn}(t)$($m\neq n$) називають імовірністю переходу із стану $\psi_n(\xi)$*з* $L=L_n$в стан $\psi_m(\xi)$з $L=L_m$за час t.

Дійсно, при $m\neq n$ $p_{mn}(t)$ дає ймовірність в момент t знайти $L=L_m$, якого при t=0 в системі не існувало, тобто $p_{mn}(0)=0$.

Найбільш важливими задачами з теорії квантових переходів є задачі на знаходження ймовірності переходу із стану з однією енергією E_nв стан з іншою енергією E_m або, як говорять, імовірність переходу з одного квантового ріння на інший.

Стаціонарні стани існують для систем, у яких гамільтоніан від часу не залежить (якщо $H=H(t)$, то енергія не зберігається).

Маємо систему, яка описується гамільтоніаном H_0, який від часу не залежить; і нехай на систему накладено збурення $V=V(t)$. Тоді повний (новий) гамільтоніан з часом буде змінюватися:

$$H(t) = H_0 + \hat{V}(t)\,, \tag{1}$$

причому $V(t)$ малий в розумінні теорії збурень ($V(t)$ може характеризувати взаємодію даної системи з іншими системами, полями і т.д.). В такій системі, яка описується гамільтоніаном (1), стаціонарні стани не реалізовуються. Отже, стаціонарне рівняння Шредінгера для $H(t)$ немає змісту. Таким чином, в цьому випадку ***задачі про знаходження поправок до власного значення енергії не мають місце при обчисленні функції*** (тобто відшукання поправок до хвильової функції).

Щоб дослідити поведінку такої системи, треба розв’язати загальне (хвильове) рівняння Шредінгера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\xi,t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\psi(\xi, t)\,. \tag{2}$$

Щоб розв'язати (2).треба задати початкові умова які взагалі кажучи залежать від поведінки $V(t)$. Виберемо таку умову:

$$V(t=0)=0, \tag{3}$$

що означає, що коли збурення відсутнє, то $H(t)=H_0$, для нього моменту можна застосовувати рівняння Шредінгера.

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n^0(\xi,t)}{\partial t} = H_0 \psi_n^0(\xi,t), \qquad (4)$$

звідси стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$H_0 \varphi_n(\xi) = E_n \varphi_n(\xi), \qquad (5)$$

(вважаємо, що $\varphi_m(\xi)$-відоме).

Загальні розв'язки для стаціонарного рівняння Шредінгера мають вигляд:

$$\psi_n^0(\xi,t) = \varphi_n(\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \qquad (6)$$

Наше завдання: знайти $\varphi_n(\xi,t)$. Для умови (3) будемо вважати, що

$$\psi(\xi,t)|_{V=0} = \psi(\xi,0) = \psi_n^0(\xi,t)\,. \qquad (7)$$

Фізично це означає, що до накладення збурення, система знаходиться в n-му енергетичному стані.

Шукаємо розв'язки рівняння (2). Розкладемо $\psi(\xi,t)$ за власними хвильовими функціями оператора *H₀*.

$$\psi(\xi,t) = \sum_k c_k(t) \psi_k^0(\xi,t)\,. \qquad (8)$$

(8) можна переписати:

$$\psi(\xi,t) = \sum_k c_k(t) \varphi_k(\xi,t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}. \qquad (9)$$

При $t \le 0$ в сумі (8) (або (9)) відмінний від нуля лише один доданок

$$\psi(\xi,0) = \mathrm{C}_n^0 \varphi_n(\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}\,,$$

тобто $c_k^0(t) = \delta_{kn}\,, t \le 0$. Інші коефіцієнти в (8), (9) невідомі.Підставимо (9) в (2), використовуючи (1).

$$i\hbar \sum_k \left\{ \frac{dc_k(t)}{dt} \psi_k^0(\xi,t) + c_k(t) \frac{\partial \psi_k^0(\xi,t)}{\partial t} \right\} = \sum_k (\widehat{H}_0 + V(t)) c_k(t) \psi_k^0(\xi,t))\,. \qquad (10)$$

Розглянемо похідну:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k^0(\xi,t)}{\partial t} = i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} \right) E_k \psi_k^0(\xi,t) = E_k \psi_k^0(\xi,t)\,,$$

а також

$$\widehat{H}_0 \psi_k^0(\xi,t) = H_0 \varphi_k(\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} = E_k \psi_k^0(\xi,t)\,.$$

Врахувавши це і скоротивши одинакові члени, одержимо:

$$i\hbar \sum_k \frac{dc_k(t)}{dt} \varphi_k(\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} = \sum_k \hat{V}(t) c_k(t) \varphi_k(\xi) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}\,. \qquad (11)$$

Характер фізичних задач такий, що оператор *V(t)* залежить від *t* функціонально, тобто *V(t)*не диференціальний оператор.

Використаємо ортоговальність власної хвильової функції оператора *H₀*. Помножимо (11) на $\varphi_m^*(\xi)$ і проінтегруємо по всіх можливих значеннях ξ

$$i\hbar \sum_k \frac{dc_k}{dt} \int \varphi_m^*(\xi)\varphi_k(\xi)d\xi e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} = \sum_k c_k(t) \int \varphi_m^*(\xi)\hat{V}(t)\varphi_k(\xi)d\xi e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} .$$

Введемо позначення

$$V_{mk}(t) = \int \varphi_m^*(\xi)\hat{V}(t)\varphi_k(\xi)d\xi . \tag{12}$$

Тоді, враховуючи ортогональність власної хвильової функції оператора *H₀*

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = \sum_k V_{mk}(t)c_k(t)e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_k)t} . \tag{13}$$

Введемо так звану частоту переходу (борівська частота переходу)

$$\omega_{mk} = \frac{E_m - E_k}{\hbar}. \tag{14}$$

тоді (13) перепишеться:

$$i\hbar \frac{dc_m(t)}{dt} = \sum_k V_{mk}(t)c_k(t)e^{i\omega_{mk}t} . \tag{13´}$$

(13) або (13´) - точні рівняння, так само як і рівняння (2). Оскільки оператор *V(t)*-малий в розумінні теорії збурень, то коефіцієнти розкладу рівнянь (8), (9) можна розкладати в ряд за степенями малості оператора збурення *V* (тобто рівняння (13´) розв'язуємо методом послідовних наближень).

$$c_k(t) = c_k^{(0)}(t) + c_k^{(1)}(t) + c_k^{(2)}(t) + \ldots \tag{15}$$

де c_k^0- це компонента розкладу, коли збурення відсутнє, тоді система знаходиться в *n*-тому стані і тому з початкових умов (як ми вже говорили раніше $c_k^0(t) = \delta_{kn} \cdot c_k^1(t)$ має той же порядок малості, що і *V*.

$$c_k^0(t) = \delta_{kn} . \tag{16}$$

Якщо (16) підставимо в (13´), одержимо:

$$i\hbar \frac{d}{dt}\left\{\delta_{mn} + c_{mn}^{(1)}(t) + c_{mn}^{(2)}(t) + \ldots\right\} = \sum_k V_{mk}(t)\left\{\delta_{kn} + c_{kn}^{(1)}(t) + \ldots\right\}e^{i\omega_{mk}t} . \tag{17}$$

Додатковий значок *n* біля c_k вказує на початковий стан:

$$c_k^{(1)}(t) = c_{kn}^{(1)}(t) . \tag{18}$$

З (17) знайдемо першу поправку:

$$i\hbar \frac{d}{dt}\left\{\delta_{mn} + c_{mn}^{(1)}(t)\right\} = \sum_k V_{mk}(t)\delta_{kn}e^{i\omega_{mk}t} ,$$

звідси

$$i\hbar \frac{dc_{mn}^{(1)}(t)}{dt} = V_{mk}(t)e^{i\omega_{mn}t} . \tag{19}$$

Про інтегрувавши, одержимо:

$$c_{mn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t V_{mk}(t')e^{i\omega_{mn}t'}dt' ; \tag{20}$$

$$c_{mn}^1(0) = 0 .$$

Підставляючи це перше наближення $c_{mn}^{1}(t)$ у праву частину рівняння (13′) знайдемо рівняння для другого наближення:

$$i\hbar\frac{dc_{mn}^{(2)}(t)}{dt} = \sum_k V_{mk}(t)c_{kn}^{(1)}(t)e^{i\omega_{mk}t} \ , \tag{21}$$

звідси

$$c_{mn}^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \sum_k V_{mk}(t)c_{kn}^{1}(t)e^{i\omega_{mn}t}dt \ . \tag{22}$$

Цю пропедуру можна продовжувати і дальше, вона веде до знаходження точного розв'язку $c_{mn}(t)$. Однак, нам прийдеться брати багато наближень або обмежуватися малими відрізками часу *t*.Якщо ж *V(t)*мале, то досить обмежитися першим або другим наближенням.

Як правило у квантовій механіді обчислюється імовірність переходу ω за одиницю часу. Враховуючи, що імовірність знаходження частинки устані *m* дорівнює квадрату модуля амплітуди $|c_{mn}(t)|^2$, ***для імовірності переходу n→m за одиницю часу*** одержимо вираз:

$$w_{nm} = \frac{\partial}{\partial t}|c_m(t)|^2 \ . \tag{23}$$

Формули (20), (23) лежать в основі багатьох квантово-механічних задач першого наближення нестаціонарної теорії збурень. З допомогою цих формул можна, зокрема, побудувати квантову теорію випромінювання.

6. СПІН.

В даний час існування спіна електрона може розглядатися як наслідок із релятивістської теорії електрона, яку розвинув Дірак.

Спін електрона (власний механічний момент) має загальні властивості квантово-механічного моменту. Строго це було доведено з допомогою апарата теорії груп. Зокрема, згідно загальних принципів КМ **спін електрона повинен зображатися лінійним самоспряженим оператором**. Позначимо оператори проекцій спіна на осі координат через

$\hat{S}_x;\hat{S}_y;\hat{S}_z$.

Для них властиві правила перестановки (комутації)

$$\begin{cases} \left[\hat{S}_x,\hat{S}_y\right] = \hat{S}_x,\hat{S}_y - \hat{S}_y,\hat{S}_x = i\hbar\hat{S}_z; \\ \left[\hat{S}_y,\hat{S}_z\right] = \hat{S}_y,\hat{S}_z - \hat{S}_z,\hat{S}_y = i\hbar\hat{S}_x; \\ \left[\hat{S}_z,\hat{S}_x\right] = \hat{S}_z,\hat{S}_x - \hat{S}_x,\hat{S}_z = i\hbar\hat{S}_y. \end{cases} \tag{1}$$

Спираючись на теорію груп можна довести, що правила (1) — єдиноможливі.

Оператор спіна електрона

Для КМ електрона треба ввести нову динамічну змінну — вектор спіна ***S*** з проекціями S_x, S_y, S_z.

Власне значення оператора квадрата спінового моменту

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2; \hat{S}_y^2; \hat{S}_z^2 \ , \tag{2}$$

виражається формулою

$$S(S+1)\hbar^2, \tag{3}$$

де через S позначено відповідне квантове число **внутрішнє** або **спінове квантове** число частки. Часто це квантове число називають величиною спіна частинки.

Та обставина, що оператори проекцій спіна повинні задовільняти тим же комутаційним співвідношенням, що і оператори проекцій орбітального моменту, звичайно, не випадкова.

У попередніх параграфах було показано, оператор проекції орбітального моменту на будь-яку вісь пов'язаний з оператором нескінченно малого повороту навколо цієї осі. Перестановочні співвідношення ((1.12)) є наслідками цієї обставини, тобто наслідками комутаційних співвідношень між операторами нескінченно малих поворотів. Можна показати, що оператори проекцій спіна також пов'язані з операторами повороту, які діють, вже, однак не на координатну, а на спінову функцію. Наслідком комутаційних співвідношень між операторами нескінченномалих поворотів навколо осей *x, y, z і є* перестановочні співвідношення (5.1).

Із (5.1) слідує також:

$$\begin{cases} \left[\hat{S}_x, \hat{S}^2\right] = \hat{S}_x, \hat{S}^2 - \hat{S}^2, \hat{S}_x = 0; \\ \left[\hat{S}_y, \hat{S}^2\right] = \hat{S}_y, \hat{S}^2 - \hat{S}^2, \hat{S}_y = 0; \\ \left[\hat{S}_z, \hat{S}^2\right] = \hat{S}_z, \hat{S}^2 - \hat{S}^2, \hat{S}_z = 0. \end{cases} \tag{4}$$

Таким чином, квадрат повного спіна і одна з його проекцій на довільну вісь можуть бути виміряні одночасно. Дві проекції на різні осі одночасно не мають певних значень. Орбітальний момент імпульсу, як динамічна змінна, виражається через інші динамічні змінні — декартові координати і імпульси, в той час як динамічна змінна, що називається спіном, через інші динамічні змінні не виражається.

Проекція спіна на довільний напрям може приймати два значення: $\pm 1/2\hbar$. Тому оператори $\hat{S}_x; \hat{S}_y; \hat{S}_z$ повинні зображатися двохрядними матрицями, таким чином двохрядна матриця, будучи приведена до діагонального вигляду, містить лише два діагональні члени, і таким чином, має лише два власні значення.

Введемо замість *S* вектор σ, поклавши

$$S = 1/2\hbar\sigma. \tag{5}$$

Очевидно, що всі результати справедливі для a будуть справедливими і для $\boldsymbol{S}$. (5) можна переписати для компонент

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x;\ \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y;\ \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z. \tag{6}$$

ми можемо сказати, що оператори $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, (**спінові матриці**) повинні бути двохрядковими матрицями вигляду

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix};\ \sigma_y = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix};\ \sigma_z = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}; \tag{7}$$

які мають власні значення (±1). Підставляючи (6) в (1) і скорочуючи на $1/4\hbar^2$, одержимо

$$\begin{cases} \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_z; \\ \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y = 2i\sigma_x; \\ \sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z = 2i\sigma_y. \end{cases} \tag{8}$$

Оскільки власні значення $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ дорівнюють ±1, то власні значення операторів $\sigma_x^2, \sigma_y^2, \sigma_z^2$ суть +1. Таким чином, у своєму власному представлені ці матриці повинні мати вигляд

$$\sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};\ \sigma_y^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};\ \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \tag{9}$$

Таким чином вони є одиничними матрицями $\boldsymbol{I}$

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

За вісь проектування домовилися вибрати вісь z довільно орієнтованої декартової системи координат. Тоді S_z повинні бути $+1/2\hbar$ і $-1/2\hbar$, а σ_z будуть числа (+1) і (-1).

З цього слідує, що оператори σ_z в S_z представлені повинні мати вигляд діагональної матриці з діагональними елементами (+1) і (-1)

$$\sigma_Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Розглянемо комбінацію

$$2i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = 2i\sigma_x\sigma_y + \sigma_y 2i\sigma_x,$$

на основі (8) це можна переписати у вигляді

$$(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y)\sigma_y + \sigma_y(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y) = \sigma_y\sigma_z\sigma_y - \sigma_z{\sigma_y}^2 + {\sigma_y}^2\sigma_z - \sigma_y\sigma_z\sigma_y = {\sigma_y}^2\sigma_z - \sigma_z{\sigma_y}^2,$$

але ${\sigma_y}^2 = 1$ — одинична матриця, тому

$$\sigma_y{}^2\sigma_z - \sigma_z\sigma_y{}^2$$

Таким чином

$$2i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = 0\,;$$

(такі оператори називаються антикомутуючими)

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x\,. \tag{12}$$

Тобто матриці σ_x, σ_y, як говорять, антикомутують. Комбінуючи (12) з (8) і застосовуючи циклічну перестановку $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ знаходимо

$$\begin{cases} \sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z; \\ \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x; \\ \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y. \end{cases} \tag{13}$$

Явний вигляд матриці σ_z дається формулою (11). Можна показати, що матриці σ_x, σ_y будуть мати вигляд

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \;\; \sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Матриці (11), (14) відіграють фундаментальну роль у квантовій механіці спіна — вони називаються **матрицями Паулі**.

Для доведення утворимо добутки $\sigma_z\sigma_x$ і $\sigma_x\sigma_z$. За правилами матричного множення маємо

$$\sigma_z\sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}\cdot 1 + a_{21}\cdot 0 & a_{12}\cdot 1 + a_{22}\cdot 0 \\ 0\cdot a_{11} - 1\cdot a_{21} & 0\cdot a_{12} - 1\cdot a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix};$$

$$\sigma_x\sigma_z = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & -a_{12} \\ a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix}.$$

На основі (13) маємо: $(\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z)$:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} a_{11} & -a_{12} \\ a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & a_{22} \end{pmatrix},$$

або

$$a_{11} = -a_{11}; \quad a_{12} = a_{12}; \quad -a_{21} = -a_{21}; \quad -a_{22} = -a_{22};$$

тобто $a_{11} = 0; \quad a_{22} = 0;$

Тому матриця σ_x має вигляд:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Утворимо тепер σ_x^2:

$$\sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{12}a_{21} & 0 \\ 0 & a_{12}a_{21} \end{pmatrix}.$$

Порівнюючи з (9) отримуємо:

$$|a_{12}|^2 = a_{12}a_{21} = 1.$$

Матриця повинна бути самоспряжена, тобто $a_{12} = a_{21}*$. Таким чином $|a_{12}|^2 = 1$. Звідси одержуємо, що $a_{12} = e^{i\alpha}$, тобто

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}. \tag{16}$$

$a_{21} = a*_{12} = e^{-i\alpha}$, де α — дійсне число.

Аналогічно знаходимо, що

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Перемножимо σ_x на σ_y, а потім σ_y на σ_x і використаємо (13), отримаємо:

$$\sigma_x\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha-\beta)} & 0 \\ 0 & e^{i(\beta-\alpha)} \end{pmatrix};$$

$$\sigma_y\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(\beta-\alpha)} & 0 \\ 0 & e^{i(\alpha-\beta)} \end{pmatrix};$$

$$\sigma_y\sigma_x = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z.$$

Звідки

$$e^{i(\alpha-\beta)} = -e^{i(\alpha-\beta)};$$

$$\cos(\alpha-\beta) + i\sin(\alpha-\beta) = -\cos(\alpha-\beta) + i\sin(\alpha-\beta); \Rightarrow \alpha - \beta = \frac{\pi}{2}.$$

Таким чином усі співвідношення задовольняються при довільному α. Тому ми можемо взяти $\alpha = 0, \beta = -\frac{\pi}{2}$. Тоді

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{14.1}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{14.2}$$

Згідно (6) з (11) і (14) одержуємо матриці операторів

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix}; \ \hat{S}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\hbar}{2} \\ i\frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix}; \ \hat{S}_x = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}. \tag{18}$$

Утворимо тепер оператор квадрата спіна електрона. З(18) маємо:

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_x^2 + \hat{S}_x^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 I. \tag{19}$$

Особливості спіна

Вводячи квантові числа m_s і l_s і, які визначають значення проекції спіна на довільний напрям Oz і його квадрат, відповідно, ми можемо написати формули для квантування спіну у повній аналогії з формулами для орбітального моменту

$$S^2 = \hbar^2 l_s (l_s + 1); \quad l_s = \frac{1}{2}; \tag{20}$$

$$S_z = \hbar m_s; \quad m_s = \pm\frac{1}{2}. \tag{21}$$

Поряд з подібністю між орбітальними та спіновими моментами між ними існує принципова відмінність. В той час, як орбітальний момент характеризується квантовим числом l, яке може приймати цілочисельні значення, незалежно від природи частинки, спінове число S приймає обмежений ряд значень, наприклад $S = 1/2$ для більшості елементарних часток. При цьому кожен вигляд елементарних частинок має своє характерне значення спіна. Якщо здійснити перехід до класичної механіки, поклавши $\hbar \to 0$, бо згідно загальних положень КМ, потрібно одночасно перейти до границь великих квантових чисел (див. додаток). Тому хоча по формулі $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ і з умови $\hbar \to 0$ ще не слідує, що $L=0$, оскільки одночасно з $\hbar \to 0$ слід покласти $\hbar \to \infty$. У випадку спінового моменту справа стоїть по-іншому. Оскільки S приймає тільки обмежений ряд значень, перехід до класичної механіки завжди приводить до значення спіна S =0. Ми бачимо, що в класичній механіці немає величини, яка служила б класичним аналогом спіна. Спін — чисто квантове поняття, яке характеризує специфічні властивості мікрочастинок.

7. КВАНТОВА МЕХАНІКА СИСТЕМИ ТОТОЖНІХ ЧАСТИНОК

Хвильова функція системи двох тотожних частинок із спіном ½

Повна хвильова функція $\Psi n(r_1, s_{1z,}r_{2,}s_{2z})$ залежить від просторових і спінових координат обох частинок і антисиметрична в цих змінних. Вважаючи, що зовнішню МП відсутнє, а взаємодія між частинками не залежить від їх спінів, представимо повну хвильову функцію у вигляді добутку хвильових функцій, які залежать лише від просторових і спінових змінних:

$$\Psi n(\overrightarrow{r_1},s_{1z,}\overrightarrow{r_2},s_{2z})=\Phi(\overrightarrow{r_1},\overrightarrow{r_2},)\varphi(s_{1z,}s_{2z}) \qquad (1)$$

Повну спінову функцію системи $\boldsymbol{\varphi}$ представимо у вигляді добутку ВХФ оператора квадрата спіна і його проекції на вісь $\boldsymbol{z}$ кожної з частинок, тобто функції

$$\varphi_{1/2}(1), \varphi_{-\frac{1}{2}}(1), \varphi_{1/2}(2), \varphi_{-\frac{1}{2}}(2)$$

де індекс означає проекцію спіна на вісь **z,** а число в дужках — номер частинки. В самому загальному вигляді функцію φ можна записати:

$$\varphi(1{,}2) = C_1\varphi_{1/2}(1)\varphi_{1/2}(2) + C_2\varphi_{-\frac{1}{2}}(1)\varphi_{-\frac{1}{2}}(2) + C_3\varphi_{1/2}(1)\varphi_{-\frac{1}{2}}(2) + C_4\varphi_{-\frac{1}{2}}(1)\varphi_{1/2}(2),$$

де C_2,C_2,C_3, C_4 -довільні амплітуди. Визначимо спінові ХФ , які описують стан із заданим повним спіном системи і його проекцією на вісь **z .**Повний спін системи частинок приймає два значення: S=1 і S=0. Його проекція на вісь **z** відповідно має значення

S_z:-1, 0,+1; S=1;

S_z: 0 S=0. (в одиницях $\hbar$**)**

Функції φ**,** які описують стан заданим Si S_z, задовільняють рівняння:

$$\begin{cases} \widehat{\overrightarrow{s^2}}\varphi = \hbar^2\ S(S+1)\varphi; \\ \quad \widehat{s_2}\varphi = s_{2\varphi=\hbar m_s\varphi,} \end{cases}$$

(3)де $\hat{\vec{S}} = \widehat{\overrightarrow{S_1}} + \widehat{\overrightarrow{S_2}}$ –оператор повного спіну системи.

Можна показати, що спінова функція системи може бути записана у вигляді:

$$\begin{cases} \varphi_1^1 = \varphi_{1/_2}(1)\varphi_{1/_2}(2); \qquad S = 1;\ S_z = 1; \\ \varphi_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_{1/_2}(1)\,\varphi_{-1/_2}(2) + \varphi_{-1/_2}(1)\varphi_{-1/_2}(2)\right]; \quad S = 1;\ \ S_z = 0; \quad (4) \\ \varphi_{-1}^1 = \varphi_{-1/_2}(1)\varphi_{-1/_2}(2); \qquad S = 1;\ \ S_z = -1; \end{cases}$$

$$\varphi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_{1/_2}(1)\,\varphi_{-1/_2}(2) + \varphi_{-1/_2}(1)\varphi_{-1/_2}(2)\right];\ S = 0;\ \ S_z = 0;$$

де верхній індекс вказує повний спін двох частинок, а нижній — його проекцію на вісь.

Зауважимо, що спінові функції (4) не міняються при перестановці місцями першої і другої частинки.. Таким чином, функції системи (4) *симетричні в спінах* частинок. Спінова функція (5) змінює знак при перестановці, тобто є *антисиметричною.*

Спінові функції (4) утворюють ***спіновий триплет.*** Сукупність трьох компонент триплету еквівалентна трьохкомпонентній спіновій функції частинки із спіном одиниця. Спінова функція (5), яка описує стан частинки із спіном =0, утворює ***спіновий синглет.***

Розглянемо тепер функцію від просторових змінних $\Phi(r_1), (r_2)$.Оскільки повна ХФ (1) антисиметрична, то координата ХФ буде *антисиметрична в стані* S=1 і *симетричною в стан і*S=0. Якщо частинки не взаємодіють і знаходяться в деяких станах Ψ_nтаΨ_m, то координатна ХФ має вигляд:

$$\Phi_a(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2)-\psi_m(\vec{r}_1)\psi_n(\vec{r}_2)); \quad S=1;$$

$$\Phi_s(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n(\vec{r}_1)\psi_m(\vec{r}_2)+\psi_m(\vec{r}_1)\psi_n(\vec{r}_2)); \quad S=0.$$

8. Атом гелію

Особливість спектру гелію полягає в тому, що в ньому зустрічаються ті ж серії, що і у атомі лужних металів, але кожна серія представлена в двох екземплярах: існує дві головні серії, дві різких, дві дифузних і т. д. Ці екземпляри відрізняються від перших своєю структурою: в той час як лінії в одному екземплярі завжди прості (сингленти), у другому — кожна з них розщеплюється на три лінії — триплети.

Через таку відмінність в характері спектральних серій і їх дублюванні спочатку була висловлена гіпотеза, що гелій насправді є сумішшю двох елементів, з яких один (той, що дає триплетні серії) був названий ортогелієм, а інший (який дає синглентні серії) — парагелієм.

Ця гіпотеза, здавалося б, підтверджується тим, що не було відомо ніяких комбінацій між системами синглентгих і триплетних рівнів, так що кожна система серій (сингленти і триплети) була замкнутою.

Гіпотеза виявилась не правильною. Виникнення двох сильно зміщених одна відносно іншої серій термів є наслідком властивостей симетрії системи двох електронів атому гелію, яка пов'язана з тотожністю електронів. Причиною замкнутості серій є особливе правило відбору — так званий закон інтеркомбінацій, в силу якого триплетні рівні комбінують лише з триплетними, а синглентні — лише з синглентними.

Вважаємо, що ядро гелію (навколо якого рухаються два електрони) має нескінченно велику масу. Тому, вважаючи його нерухомим, запишемо гамільтоніан системи з двох електронів у вигляді:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2^2-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{2e^2}{r_{12}}\right)\psi=E\Psi, \qquad (1)$$

де r_1, $\boldsymbol{r}2$-радіус-вектори першого і другого електронів, r_{12} — відстань між ними.

Оскільки гамільтоніан (1) не містить спінових операторів, то розв'язки (1) будемо шукати у вигляді добутків функцій:

$$\Psi = \Phi(r_1,r_2)\varphi(S_{z1},S_{z2}). \tag{2}$$

Було показано, що спінова функція двох електронів буде симетричною відносно перестановки місцями двох частинок, якщо повний спін S=1, і антисиметричною, якщо S=0.

Таким чином видно, що стани атому гелію діляться на дві групи. Стани з S=1 називаються ортостанами, з S=0 парастанами.

Якби (1) точно описував атом гелію, то три ортостани, які відрізняються проекцієюспіна на вісь z, мали б однакову енергію. Однак слаба взаємодія між спіновим та орбітальним магнітним знімає виродження і виникають три близьких підрівня. Енергетичний спектр гелію складається з сукупності синглетних і триплетних рівнів.

Вияснимо до якої групи станів відноситься основний стан гелію. Очевидно, що цією функцією не може бути антисиметрична координатна функція, бо функція перетворюється в нуль.

Дійсно, якщо $\boldsymbol{\Phi(r_1,r_2)}$ — антисиметрична функція двох змінних $\boldsymbol{r_1}$**,** і $\boldsymbol{r_2}$**,** то вона задовільняє співвідношення

$$\Phi(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})=-\Phi(\mathbf{r_2},\mathbf{r_1}). \tag{3}$$

При $\boldsymbol{r_1=r_2=r}$ ми маємо $\boldsymbol{\Phi}(r_1,r_2)=0$.

У нормальному стані ХФ симетрична за координатами і, отже, антисиметрична за спінами. ***Нормальний стан гелію*** — парастан.

Розглянемо конкретно різні можливі стани двох електронів атому гелію.

1) Нехай два електрони будуть ***1s*** електронами.

$N=1, l=0, m=0, L=l_1+l_2=0+0=0$; ⟹ S-стан.

Ми вже показали, що триплетний S-стан неможливий. Дійсно

$$\Psi^a = \Phi^s\psi^a = \Phi^s\psi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\psi_p(1)\psi_m(2) + \psi_p(2)\psi_m(1)\Big) * \psi_0^0; \tag{4}$$

$$\Psi^a = \Phi^a\varphi^s = \begin{cases} \Phi^a\varphi_1^1 \\ \Phi^a\varphi_0^1 \\ \Phi^a\varphi_{-1}^1 \end{cases} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_p(1)\,\psi_m(2) - \psi_p(2)\psi_m(1)) * \begin{cases} \varphi_1^1 \\ \varphi_0^1 \\ \varphi_{-1}^1 \end{cases}. \tag{5,6,7}$$

при $\boldsymbol{p=m}$ (стани однакові)

$$\Psi^a = \Phi^a\varphi^s = 0;$$

$$\Psi^a = \Phi^s\varphi^a \neq 0;$$

основний стан — синглетний.

Стани, в яких спіни паралельні, називаються ортостанами, а ***стани з антипаралельними спінами*** — парастанами. Триплетний стан — ортостан (ортогелій), а синглетний — парастан (парагелій).

Однак ми бачили, що в триплетному стані координатна частина власної ХФ антисиметрична, а в синглентному — симетрична. Тому у виразі енергії взаємодії

$$E^{(1)}=C\pm A. \tag{8}$$

Обмінні сили входять із знаком мінус в ортостані і зі знаком плюс в парастані. Звідси слідує, що ортостани лежать нижче. Ймовірності переходу: вони визначаються матричними елементами $(\vec{r}_i)_{mn} = \int \overrightarrow{(r_i)} \Psi_m^* \Psi_n d\xi.$ Ці матричні елементи представляють квантовий аналог дипольного моменту.Для системи двох частинок матричний елемент

$$x_{mn} = \int (x_1 + x_2) \Psi_m{}^* \Psi_n d\xi; d\xi = \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2.$$

Оскільки електричний момент системи частинок дорівнює сумі електричних моментів окремих частинок. Нехай один із станів — синглентний, а інший — триплетний, але для них координатна ХФ відповідно, симетрична (Φ^s) і антисиметрична ***(Φ^a),*** а тому

$$x_{mn}=\int (X_1+(X_2)\Phi^s\Phi^a d\xi=0.\cdot$$

Оскільки при перестановці частинок величина інтеграла не повинна змінюватися, то це може бути тоді, коли інтеграл =0.

МАТЕРІАЛИ ДЛЯ ПРАКТИЧНИХ РОБІТ І ПРИКЛАДИ РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ

1. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

План

I. Вступ.
1. Неспроможність класичної фізики при поясненні атомних явищ.
2. Що таке квантова механіка?
3. Історія створення квантової механіки.

II. Експериментальні основи квантової механіки.
1. Квантова теорія світла:
   а) Гіпотеза Планка.
   б) Теорія фотонів Ейнштейна.
   в) Ефект Компотна.
2. Закономірності в лінійчатих спектрах. Комбінаційний принцип Рітца.
3. Модель атома Резерфорда-Бора
   а) Постулати Бора і їх експериментальне обґрунтування
   б) Квантування воднево подібних атомів.
4. Корпускулярно-хвильові властивості мікрочастинок
   а) Гіпотеза Луї де Бройля.
   б) Імовірнісне тлумачення хвиль де Бройля
5. Співвідношення невизначеності Гейзенберга.
6. Помилкові тлумачення співвідношення невизначеності.

ПРИКЛАДИ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ

Задача №1

Знайти енергію зв'язку атома, якщо відомо, що при переході 5→2 $\lambda_{5,2}$=108,5·10^{-9} м.

Розв'язування:

1. Із формули Рідберга для воднеподібного атома:

$\omega_{n,m} = Z^2 R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ в даному випадку $\omega_{5,2} = Z^2 R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{25}\right) = \frac{21}{100} Z^2 R.$

$$\omega_{5,2} = \frac{2\pi c}{\lambda_{5,2}} \Rightarrow \frac{2\pi c}{\lambda_{5,2}} = \frac{21}{100} Z^2 R \Rightarrow Z^2 = \frac{200}{21}\frac{\pi c}{R\lambda_{5,2}}.$$

2. $E_{ф} = E_{зв} \Rightarrow k_\infty = 0 \Rightarrow E_{зв} = -E_{в} = \frac{Z^2}{1^2} E_i$

Оскільки $R = \frac{E_i}{\hbar} \Rightarrow E_{зв} = \frac{200}{21}\frac{\hbar\pi c}{E_i \lambda_{5,2}} \approx 5\frac{c\hbar}{\lambda_{5,2}} = 0{,}917 * 10^{-17} Дж.$

Задача №2.

Знайти атомну масу воднеподібного атома, якщо відомо, що $\lambda_{3,2} - \lambda_{2,1}$=59,3·$10^{-9}$м.

Розв'язування:

Серія Лайманаm=1, а Бальмера – m=2.

1. Для $\lambda_{3,2}$ знаходимо: $\omega_{3,2} = z^2R\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{9}\right) = \frac{5}{36}Z^2R$, оскільки

$$\omega_{3,2} = \frac{2\pi c}{\lambda_{3,2}},\text{ то } \lambda_{2,1} = \frac{2\pi c}{\omega_{2,1}} = \frac{8}{3}\frac{\pi c}{Z^2R}.$$

2. Для $\lambda_{2,1}$ знаходимо: $\omega_{1,2} = Z^2R\left(\frac{1}{1}-\frac{1}{4}\right) = \frac{3}{4}Z^2R,$ оскільки

$$\omega_{2,1} = \frac{2\pi c}{\lambda_{2,1}}, mo\lambda_{2,1} = \frac{2\pi c}{\omega_{2,1}} = \frac{8}{3}\frac{\pi c}{Z^2R}.$$

3. Підставимо одержані значення в різницю і отримаємо:

$$\lambda_{3,2} - \lambda_{2,1} = \Delta\lambda = \frac{72}{5}\frac{\pi c}{Z^2R} - \frac{8}{3}\frac{\pi c}{Z^2R} = 11{,}73\frac{\pi c}{Z^2R}.$$

Звідси можна отримати значення Z:

$$\Delta\lambda = 11{,}73\frac{\pi c}{Z^2R} \Rightarrow Z = \sqrt{11{,}73\frac{\pi c}{\Delta\lambda R}} = 0{,}9 * 10 = 9;$$

$Z = 9,$ а це є Фтор (F).

Задача №3.

Вузький пучок α-частинок з кінетичною енергією 1,0 МеВ падає нормально на платинову фольгу товщиною 1,0 мкм. Спостереження розсіяних частинок ведеться під кутом 60° до напрямку падаючого пучка за допомогою лічильника з круглим вхідним отвором площею 1,0 см^2, який розміщено на відстані 10 см від розсівної ділянки фольги. Яка густина розсіяних α-частинок падає на отвір лічильника?

Розв'язування:

$$\frac{\Delta N(\theta)}{N_0} = \Delta P(\theta) - ?$$

1. По суті шукаємо ймовірність попадання

$K_\alpha = 1 \cdot 10^6 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}$*Дж*α в отвір $S_\perp$ або, що те саме, що ймовірність

$M = 195 \cdot 10^{-3}\,\frac{кг}{моль}$ розсіяння α під кутом θ в межах тілесного кута

$Z = 78$ ΔΩ.

$$\theta = 60° \frac{\Delta N(\theta)}{N_0 \Delta\Omega} = f(\theta)$$

$S_\perp = 1 \cdot 10^4 м^2$ - ймовірність розсіювання в межах одиничного тілесного кута.

$d = 1 \cdot 10^{-6} м$

$$l = 0{,}1м \Delta P(\theta) = \frac{\Delta N(\theta)}{N_0} = f(\theta)\cdot\Delta\Omega.$$

2. Розсіювання α-частинок на нерухомих ядрах атомів – розсіювання Резерфорда

$$f(\theta) = n \cdot b \cdot \left(\frac{r_{min}}{4}\right) \cdot \sin^{-4}\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

3. Тілесний кут, під яким спостерігається отвір лічильника $\Delta\Omega = \frac{S_\perp}{l^2}$.

4. Знаходимо концентрацію розсіюючих елементів – ядер, вона така ж сама як концентрація атомів

$$\rho = m_0 \cdot n = \frac{M}{N_A} \cdot n \Rightarrow n = \frac{N_A}{M} \cdot \rho.$$

5. Мінімальному зближенню α і ядра відповідає центральне зіткнення α і ядра (прицільний параметр *b*=0).

6. Із закону збереження енергії (ЗЗЕ)

$$K_\alpha = k\frac{Ze2e}{r_{min}} \Rightarrow r_{min} = k\frac{2Ze^2}{K_\alpha}.$$

7. Знаходимо ймовірність розсіювання

$$\Delta P(\theta) = \frac{N_A}{M}(\rho \cdot d) \cdot \left(k\frac{Ze^2}{2K_\alpha}\right)^2 \sin^{-4}\left(\frac{\theta}{2}\right) \cdot \frac{S_\perp}{l^2}.$$

8. Відповідь: $\Delta P(\theta) = 3{,}30 \cdot 10^{-5}$.

Задача №4

Визначити ω – кутову швидкість обертання електрона на *n*-й коловій борівській орбіті ВПІ. Обчислити цю величину для іона He^+ при *n*=2.

Розв'язування:

Працюємо в рамках моделі Бора.

$$L = mvr^2.$$

1. Кулонівська сила відіграє роль доцентрової

$$m\omega^2 r = k\frac{Zee}{r^2}.$$

2. e^- рухається по колу, момент імпульсу кантується

$$m\omega r^2 = n\hbar.$$

3. Оскільки права частина 2) дискретна, то ω і *r* – дискретні. Отримуємо:

$$\begin{cases} m\omega_n^2 r_n = k\dfrac{Zee}{r_n^2}; \\ m\omega_n r_n^2 = n\hbar. \end{cases}$$

4. Виключаємо ω_n:

$$\omega_n = \frac{n\hbar}{mr_n^2}; m = \frac{n^2\hbar^2}{m^2 r_n^4} \cdot r_n = k\frac{Ze^2}{r_n^2};\ r_n = \frac{n^2}{Z} \cdot \frac{\hbar^2}{kme^2},$$

де

$$\frac{\hbar^2}{kme^2} = r_1,$$

де r_1- радіус Бора.

Як видно із ростом Z електрони все ближче розміщуються до ядра.

5. Знайдемо кутову швидкість обертання e^-:

$$\omega_n = \frac{n\hbar}{m\left(\frac{n^2}{Z}\cdot\frac{\hbar^2}{kme^2}\right)^2} = \frac{mk^2e^4Z^2}{\hbar^3n^3}.$$

6. Відповідь: $\omega=2{,}07\cdot10^{16}$ с$^{-1}$.

Задача№5

У спектрах зірок спостерігається серія (відкрита в 1987 р. Пікерінгом), яка дуже нагадує серію Бальмера для водню і описується формулою $\nu=R(1/2^2-1/k^2)$, де R – стала Рідберга, k= 2,5; 3; 3,5; 4;… Показати, що ця серія належить іонізованому гелію.

Розв'язування:

Для спектрів воднеподібних атомів справджується співвідношення

$$\nu = \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) = Z^2R_H\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right),$$

де $n_2=n_1+1$, n_1+2,…; RH – константа Рідберга для водню. Поклавши Z=2, n_1=4 дістанемо

$$\nu = 4R_H\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right);$$

n=5,6,7,… Після перетворень маємо

$$\nu = R_H\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{k^2}\right); k = 2{,}5; 3; 3{,}5; \ldots$$

Задача №6.

Знайти довжину хвилі де Бройля релятивіських електронів, які підлітають до антикатода рентгенівської трубки, якщо довжина хвилі коротхохвильової лінії суцільного рентгенівського спектра дорівнює 10 нм.

Розв'язування:

Оскільки $\lambda_{гр}$=10 нм – жорстоке випромінювання, то $\lambda_{гр}=10\cdot10^{-12}$м – енергія фотона спів вимірна з енергією спокою електрона.

Слід враховувати релятивіське скорочення маси електрона.

1. Довжина хвилі де Бройля: $\lambda_{гр}=h/p$, де p – імпульс в момент зіткнення з антикатодом;

2. Релятивіський зв'язок імпульсу та енергії:

$$W^2 = W_0^2 + (cp)^2;$$

3. Енергія електрона Wв момент зіткнення з антикатодом:

$$W_ф = W - W_0 \Rightarrow W = W_ф + W_0;$$

4. Отримаємо:

$$cp = \sqrt{W^2 - W_0^2} = \sqrt{(W_0 + W_\phi)^2 - W_0^2};$$

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{\left(m_0c^2 + \frac{hc}{\lambda_{гр}}\right)^2 - (m_0c^2)^2} = \sqrt{\left(2m_0c + \frac{h}{\lambda_{гр}}\right)\frac{h}{\lambda_{гр}}}.$$

5. Знаходимо довжину хвилі де Бройля:

$$\lambda_б = \frac{h}{\sqrt{\left(2m_0c + \frac{h}{\lambda_{гр}}\right)\frac{h}{\lambda_{гр}}}} = \frac{1}{\sqrt{\left(2\frac{1}{\lambda_c} + \frac{1}{\lambda_{гр}}\right)\frac{1}{\lambda_{гр}}}} \approx 8нм.$$

САМОСТІЙНА РОБОТА- опрацювати лекцію, повторити з курсу загальної фізики розділ "Атом Резерфорда-Бора","Сучасні уявлення про будову атома".

2. МАТЕМАТИЧНІ ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

План

1. Основні принципи квантової механіки
2. Фізичні зміни , які використовуються для опису стану квантово-механічної системи
3. Принцип доповненості.
4. Принцип суперпозиції станів.
5. Статистичне тлумачення хвильової функції
6. Лінійні самоспряженні (ермітові) оператори
7. Оператори основних фізичних величин
8. Середні значення механічних величин

Приклади розв'язування задач.

Задача №1

Знайти власні значення і нормовані власні функції оператора:

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Розв'язування:

Знаходимо власні значення оператора моменту кількості руху

$$\hat{L}_z\psi(\varphi) = L_Z\psi(\varphi); \Rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(\varphi) = L_Z\psi(\varphi),$$

$$\int\frac{\partial\psi(\varphi)}{\psi(\varphi)} = \frac{L_Z}{-i\hbar}\int\partial\varphi; \Rightarrow ln\,\psi(\varphi) = \frac{iL_Z}{\hbar}\varphi + ln\,C \Rightarrow \psi(\varphi) = Ce^{\frac{iL_Z}{\hbar}\varphi}.$$

Використаємо граничні умови — умови Борна-Кармана (умови періодичності):

$$\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow$$

$$Ce^{\frac{iL_Z}{\hbar}\varphi} = Ce^{\frac{iL_Z}{\hbar}(\varphi+2\pi)}; \Rightarrow e^{\frac{iL_Z}{\hbar}(\varphi+2\pi)} = 1\,; \Rightarrow \frac{L_z}{\hbar}2\pi = 2\pi m,$$

де m=0,1,2,3,.. . Власне значення кількості руху: $L_z = \hbar m$.

Тоді

$$\psi(\varphi) = Ce^{\frac{im\hbar}{\hbar}} = Ce^{im\varphi}.$$

З умови нормування знаходимокоефіцієнт C

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \Rightarrow \int_0^{2\pi} C^2 1 d\varphi = 1 \Rightarrow C^2 = \frac{1}{2\pi} \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Остаточно $L_z = \hbar m$, де m=0,1,2,3,..

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

Задача№2

Знайти власні значення і нормовані власні функції оператора:

$$\hat{A} = i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} + a\sin\varphi\;.$$

Розв'язування:

1) Шукаємо власні значення оператора, використовуючи формулу:

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi;$$

2) Підставимо дане нам значення оператора, отримаємо:

$$\hat{A}\psi = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} + a\sin\varphi\right)\psi = \lambda\psi;$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\psi(\lambda - a\sin\varphi); \Rightarrow \frac{\partial\psi}{\psi} = \frac{i}{\hbar}(\lambda - a\sin\varphi)d\varphi;$$

$$\ln\psi = \frac{i}{\hbar}(\lambda\varphi + a\cos\varphi) + \ln c;\ \psi(\varphi) = ce^{\frac{i}{\hbar}(\lambda\varphi + a\cos\varphi)};$$

3) Знайдемо власну функцію:з умови періодичності хвильової функції

$$ce^{\frac{i}{\hbar}(\lambda\varphi + a\cos\varphi)} = ce^{\frac{i}{\hbar}(\lambda\varphi + a\cos(\varphi+2\pi))};\ ce^{\frac{i}{\hbar}(2\pi\lambda)} = 1.$$

Із вимог однозначності функції $\Psi(\varphi)$знаходимо спектр власних значень:

$\lambda = m\hbar$, (де $m=0$; ±1; ±2;...)

Із умови нормування на одиницю знайдемо коефіцієнт c:

$$\psi(\varphi) = ce^{\frac{i}{\hbar}(m\hbar\varphi + a\cos\varphi)}$$

$$\Rightarrow c^2\int_0^{2\pi}\left|e^{\frac{i}{\hbar}(m\hbar\varphi + a\cos\varphi)}\right|^2 d\varphi = c^2\int_0^{2\pi} e^{\frac{i}{\hbar}(m\hbar\varphi + a\cos\varphi - m\hbar\varphi - a\cos\varphi)}d\varphi = 1;$$

$$\Rightarrow c^2 = \frac{1}{2\pi};\ c = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Тоді функція буде мати наступний вигляд:

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{i}{\hbar}(m\hbar\varphi + a\cos\varphi)}.$$

Задача №3.

Знайти власні значення оператора квадрату моменту імпульсу $\boldsymbol{L^2}$, що відповідають його власній функції.

$$Y(\theta, \varphi) = A(\cos\theta + 2\sin\theta\cos\varphi).$$

Розв'язування:

Оператор квадрата моменту імпульсу має такий вигляд

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\hat{\lambda}(\theta, \varphi). \quad (1)$$

Власні значення оператора квадрата моменту імпульсу можна знайти з рівняння

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = L^2 Y(\theta, \varphi), \quad (2)$$

де

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

Підставимо $\lambda(\theta, \varphi)$ в рівняння (2), отримаємо:

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

$$-\hbar^2 A\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\big(\sin\theta\,(-\sin\theta + 2\cos\theta\cos\varphi)\big) - \frac{1}{\sin^2\theta}.\,2\sin\theta\cos\varphi\right\} =$$

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

$$\left.2\cos 2\theta\cos\varphi) - 2\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\right\} = -\hbar^2 A\left\{\left(-2\cos\theta + 2\frac{\cos^2\theta - \sin^2\theta}{\sin\theta}\cos\varphi\right) - 2\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\right\} = 2\hbar^2 A\left\{\cos\theta +\right.$$

$$\left.\frac{\cos\varphi(1 - \cos 2\theta)}{\sin\theta}\right\} = 2\hbar^2 A\{\cos\theta + 2\sin\theta\cos\varphi\} = 2\hbar^2 A Y(\theta, \varphi)\ .$$

Звідси слідує, що власне значення оператора квадрата моменту імпульсу дорівнює

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

Задача №4.

Знайти власне значення оператора квадрату моменту кількості руху, яке відповідає його власній функції:

$$Y(\Theta, \varphi) = A(3\cos^2\Theta - 1 + \sin 2\Theta\cos\varphi).$$

Розв'язування:

Запишемо рівняння на знаходження власних хвильових функцій і власних значень:

$$\hat{L}^2 \mathrm{Y}(\Theta, \varphi) = L^2\mathrm{Y} = \lambda\mathrm{Y}$$

тут

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}; \Rightarrow \frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}}{\partial\varphi^2} + \lambda\mathrm{Y} = 0$$

$$\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial \mathrm{Y}}{\partial\Theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}}{\partial\varphi^2}+\lambda\mathrm{Y}=0$$

$\frac{\partial \mathrm{Y}}{\partial\Theta}=\mathrm{A}(-6\cos\Theta\sin\Theta+2\cos 2\Theta\cos\varphi);\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta}=-\mathrm{A}(6\cos\Theta\sin\Theta-$

$2\cos 2\Theta\cos\varphi);\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta}=-\mathrm{A}(6\cos\Theta\sin\Theta-2\cos 2\Theta\cos\varphi);$

$\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta}\right)=-\mathrm{A}(6(-\sin\Theta)\sin^2\Theta+\cos\Theta\, 2\sin 2\,\Theta\cos\Theta-4(-\sin 2\Theta)\sin\Theta\cos\varphi-$

$2\cos 2\Theta\cos\Theta\cos\varphi);$

$$\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta}\right)$$

$$=-\mathrm{A}\left(-6\sin^2\Theta+12\cos^2\Theta+4\sin 2\Theta\cos\varphi-2\frac{1-2\sin^2\Theta}{\sin\Theta}\cos\Theta\cos\varphi\right)=$$

$$-\mathrm{A}\left(-6\sin^2\Theta+12\cos^2\Theta+4\sin 2\Theta\cos\varphi-\frac{2}{\sin\Theta}\cos\Theta\cos\varphi+4\sin\Theta\cos\Theta\cos\varphi\right)=$$

$$=-\mathrm{A}(-6+18\cos^2\Theta+6\cos 2\Theta\cos\varphi-2tg\Theta\cos\varphi);$$

$$\frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}}{\partial\varphi^2}=-\frac{\mathrm{E}\sin 2\Theta\cos\varphi}{\sin^2\Theta}=-12ctg\Theta\cos\varphi=-2\mathrm{A}ctg\Theta\cos\varphi.$$

Вернемось до рівняння (1):

$$-2\mathrm{A}ctg\Theta\cos\varphi+\lambda\mathrm{A}(3\cos^2\Theta-1+\sin 2\Theta\cos\varphi)=0;$$

$$-6\mathrm{A}(3\cos^2\Theta-1+\sin 2\Theta\cos\varphi)=-\lambda\mathrm{A}(3\cos^2\Theta-1+\sin 2\Theta\cos\varphi);\Rightarrow\lambda=6.$$

Знаючи, що $L^2=\hbar^2 l(l+1)$, знайдемо: *l=2*. Отже, $L^2=6\hbar^2$.

Задача №5.

Знайти власні функції $\boldsymbol{\Psi}$ і власні значення оператора $\widehat{\mathbf{A}}=\frac{\mathbf{id}}{\mathbf{dx}}$, якщо$\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a})$;

Розв'язування:

Нехай є оператор $-\frac{id}{dx}$. Для знаходження власних функцій Ψ і власних значень даного оператора потрібно розглянути його дію на деяку функцію $\Psi(x)$:

$$-i\frac{d}{dx}\psi(x)=\lambda\psi(x);-i\frac{d\psi(x)}{\psi(x)}=\lambda dx.$$

Розв'язком даного диференціального рівняння буде функція, яка матиме вигляд

$$Ae^{i\lambda x}=Ae^{i\lambda(x+a)}.$$

Скоротивши на *A* і розписавши експоненту, за формулою Ейлера:

$$e^{ix}=\cos x+i\sin x,$$

отримаємо

$$i\lambda a=i2\pi n;\lambda=\frac{2\pi}{\mathrm{a}}\mathrm{n}.$$

Отже, в результаті маємо власні значення

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{a} n$$

Тоді функція набуде вигляду

$$\psi = Ae^{i\frac{2\pi}{a}nx}.$$

Із умови нормування знаходимо A:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1;\ \int_0^a A^2 1 dx = 1;\ A^2 a = 1; A = \frac{1}{\sqrt{a}}.$$

Остаточно власні функції

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i\frac{2\pi}{a}nx}.$$

Задача №6.

Знайти власні функції і власні значення оператора

$$\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}.$$

Розв'язування:

Зробимо заміну:

$$\Psi(x) = \frac{U(x)}{x};\Rightarrow \widehat{\mathrm{A}}\Psi(x) = \lambda\Psi(x);$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2} + \frac{2}{\mathrm{x}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\right)\Psi(x) = \lambda\Psi(x);\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2}\left(\frac{U(x)}{x}\right) + \frac{2}{\mathrm{x}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\left(\frac{U(x)}{x}\right) = \lambda\frac{U(x)}{x};$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\left(-\frac{1}{\mathrm{x}^2}U(x) + \frac{1}{x}\frac{dU(x)}{dx}\right) + \frac{2}{\mathrm{x}}\left(-\frac{1}{\mathrm{x}^2}U(x)\right) + \frac{1}{\mathrm{x}}\frac{dU(x)}{dx} = \lambda\frac{U(x)}{x};$$

$$\frac{2}{x^3}U(x) - \frac{1}{\mathrm{x}^2}\frac{dU(x)}{dx} - \frac{1}{\mathrm{x}^2}\frac{dU(x)}{dx} + \frac{1}{x}\frac{d^2U(x)}{dx^2} - \frac{2}{x^3}U(x) + \frac{2}{x^2}\frac{dU(x)}{dx} = \lambda\frac{U(x)}{x};$$

$$\frac{1}{x}\frac{d^2U(x)}{dx^2} = \lambda\frac{U(x)}{x};\Rightarrow \frac{d^2U(x)}{dx^2} = \lambda U(x);\Rightarrow U'' - \lambda U = 0;$$

Розв'язком цього рівняння є:

$$U = C_1 e^{-\sqrt{\lambda x}} + C_2 e^{\sqrt{\lambda x}},$$

тобто:

$$\Psi(x) = \frac{C_1 e^{-\sqrt{\lambda x}} + C_2 e^{\sqrt{\lambda x}}}{x}.$$

Розглянемо випадки:

1) $\lambda > 0$ ⇒хвильовафункція $\Psi(x)$—обмежена, скінчена; при$\Psi(x \to \infty) \to\to 0$. Для умови $\Psi(x \to 0) \to 0$ необхідно, щоб $C_1=0$, $C_2=0$.

2) $\lambda < 0$:

$$\Psi(x) = \frac{C_1 e^{-i\sqrt{\lambda x}} + C_2 e^{i\sqrt{\lambda x}}}{x}.$$

прих=0, $C_1+C_2=0$; $C_1=-C_2$; $C_1=C$.

$$\Psi(x) = \frac{C_1 e^{-i\sqrt{\lambda x}} + C_2 e^{i\sqrt{\lambda x}}}{x} = C\frac{-2i\sin\sqrt{\lambda x}}{x} = C'\frac{i\sin\sqrt{\lambda x}}{x}$$

$$\Psi(x) = C'\frac{i\sin\sqrt{\lambda x}}{x}; \Rightarrow \Psi(x) = C^*\frac{\sin\sqrt{\lambda x}}{x}.$$

Самостійна робота- опрацювати матеріал лекції, повторити поняття "Ймовірність випадкових процесів".

3. ВЛАСНІ ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ

План

1. Вступ.
2. Власні функції та власні значення операторів.
3. Властивості власних хвильових функцій.
4. Імовірні можливих значень фізичної величини.
5. Умови можливості одночасного виміру різних фізичних величин.

Приклади розв'язування задач

Задача №1

Знайти власні значення і нормовані власні функції оператора:

$$\hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{z}} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Розв'язування:

Знаходимо власні значення оператора моменту кількості руху

$$\hat{L}_Z\psi(\varphi) = L_Z\psi(\varphi); \Rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(\varphi) = L_Z\psi(\varphi),$$

$$\int\frac{\partial\psi(\varphi)}{\psi(\varphi)} = \frac{L_Z}{-i\hbar}\int\partial\varphi; \Rightarrow ln\,\psi(\varphi) = \frac{iL_Z}{\hbar}\varphi + ln\,C \Rightarrow \psi(\varphi) = Ce^{\frac{iL_Z}{\hbar}\varphi}.$$

Використаємо граничні умови — умови Борна-Кармана (умови періодичності):

$$\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi) \Rightarrow$$

$$Ce^{\frac{iL_Z}{\hbar}\varphi} = Ce^{\frac{iL_Z}{\hbar}(\varphi+2\pi)}; \Rightarrow e^{\frac{iL_Z}{\hbar}(\varphi+2\pi)} = 1; \Rightarrow \frac{L_z}{\hbar}2\pi = 2\pi m,$$

де $m=0,1,2,3,..$.Власне значення кількості руху: $\mathrm{L_z} = \hbar\mathrm{m}$.

Тоді

$$\psi(\varphi) = \mathrm{Ce}^{\frac{\mathrm{im}\hbar}{\hbar}} = \mathrm{Ce}^{\mathrm{im}\varphi}.$$

З умови нормування знаходимо коефіцієнт *C*

$$\int_0^{2\pi}|\psi(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \Rightarrow \int_0^{2\pi} C^2 1 d\varphi = 1 \Rightarrow C^2 = \frac{1}{2\pi} \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Остаточно $\mathrm{L_z} = \hbar\mathrm{m}$, де $m=0,1,2,3,..$

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\mathrm{im}\varphi}.$$

Задача№2

Знайти власні значення і нормовані власні функції оператора:

$$\hat{A} = i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} + a\sin\varphi\ .$$

Розв 'язування:

1) Шукаємо власні значення оператора, використовуючи формулу:

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi;$$

2) Підставимо дане нам значення оператора, отримаємо:

$$\hat{A}\psi = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} + a\sin\varphi\right)\psi = \lambda\psi;$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\psi(\lambda - a\sin\varphi); \Rightarrow \frac{\partial\psi}{\psi} = \frac{i}{\hbar}(\lambda - a\sin\varphi)d\varphi;$$

$$\ln\psi = \frac{i}{\hbar}(\lambda\varphi + a\cos\varphi) + \ln c;\ \psi(\varphi) = ce^{\frac{i}{\hbar}(\lambda\varphi + a\cos\varphi)};$$

3) Знайдемо власну функцію: з умови періодичності хвильової функції

$$ce^{\frac{i}{\hbar}(\lambda\varphi + a\cos\varphi)} = ce^{\frac{i}{\hbar}(\lambda\varphi + a\cos(\varphi+2\pi))};\ ce^{\frac{i}{\hbar}(2\pi\lambda)} = 1.$$

Із вимог однозначності функції $\Psi(\varphi)$ знаходимо спектр власних значень:

$\lambda = m\hbar$, (де $m=0$; ±1; ±2;...)

Із умови нормування на одиницю знайдемо коефіцієнт *c:*

$$\psi(\varphi) = ce^{\frac{i}{\hbar}(m\hbar\varphi + a\cos\varphi)}$$

$$\Rightarrow c^2\int_0^{2\pi}\left|e^{\frac{i}{\hbar}(m\hbar\varphi + a\cos\varphi)}\right|^2 d\varphi = c^2\int_0^{2\pi} e^{\frac{i}{\hbar}(m\hbar\varphi + a\cos\varphi - m\hbar\varphi - a\cos\varphi)}d\varphi = 1;$$

$$\Rightarrow c^2 = \frac{1}{2\pi};\ c = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Тоді функція буде мати наступний вигляд:

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\frac{i}{\hbar}(m\hbar\varphi + a\cos\varphi)}.$$

Задача №3

Знайти власні значення оператора квадрату моменту імпульсу L^2 , що відповідають його власній функції

$$Y(\theta,\varphi) = A(\cos\theta + 2\sin\theta\cos\varphi).$$

Розв 'язування:

Оператор квадрата моменту імпульсу має такий вигляд

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\hat{\lambda}(\theta,\varphi). \qquad (1)$$

Власні значення оператора квадрата моменту імпульсу можна знайти з рівняння

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = L^2 Y(\theta,\varphi), \qquad (2)$$

де

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

Підставимо $\lambda(\theta,\varphi)$ в рівняння (2) отримаємо:

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

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

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

$$\left.2\cos 2\theta\cos\varphi) - 2\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\right\} = -\hbar^2 A\left\{\left(-2\cos\theta + 2\frac{\cos^2\theta - \sin^2\theta}{\sin\theta}\cos\varphi\right) - 2\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\right\} = 2\hbar^2 A\left\{\cos\theta +\right.$$

$$\left.\frac{\cos\varphi(1-\cos 2\theta)}{\sin\theta}\right\} = 2\hbar^2 A\{\cos\theta + 2\sin\theta\cos\varphi\} = 2\hbar^2\, AY(\theta,\varphi)\ .$$

Звідси слідує, що власне значення оператора квадрата моменту імпульсу дорівнює

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

Задача №4.

Знайти власне значення оператора квадрату моменту кількості руху, яке відповідає його власній функції:

$$: Y(\Theta,\varphi) = A(3\cos^2\Theta - 1 + \sin 2\Theta\cos\varphi).$$

Розв 'язування:

Запишемо рівняння на знаходження власних хвильових функцій і власних значень:

$$\hat{L}^2 \mathrm{Y}(\Theta,\varphi) = L^2\mathrm{Y} = \lambda\mathrm{Y}$$

тут

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}; \Rightarrow \frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}}{\partial\varphi^2} + \lambda\mathrm{Y} = 0$$

$$\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}}{\partial\varphi^2} + \lambda\mathrm{Y} = 0$$

$$\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta} = \mathrm{A}(-6\cos\Theta\sin\Theta + 2\cos 2\Theta\cos\varphi);\ \sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta} = -\mathrm{A}(6\cos\Theta\sin\Theta - 2\cos 2\Theta\cos\varphi);$$

$$\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta} = -\mathrm{A}(6\cos\Theta\sin\Theta - 2\cos 2\Theta\cos\varphi);$$

$$\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta}\right) = -\mathrm{A}(6(-\sin\Theta)\sin^2\Theta + \cos\Theta\, 2\sin 2\,\Theta\cos\Theta - 4(-\sin 2\Theta)\sin\Theta\cos\varphi -$$

$$2\cos 2\Theta\cos\Theta\cos\varphi);$$

$$\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial\mathrm{Y}}{\partial\Theta}\right) = -\mathrm{A}\left(-6\sin^2\Theta + 12\cos^2\Theta + 4\sin 2\Theta\cos\varphi -\right.$$

$$\left.2\frac{1-2\sin^2\Theta}{\sin\Theta}\cos\Theta\cos\varphi\right) =$$

$$-\mathrm{A}\left(-6\sin^2\Theta + 12\cos^2\Theta + 4\sin 2\Theta\cos\varphi - \frac{2}{\sin\Theta}\cos\Theta\cos\varphi + 4\sin\Theta\cos\Theta\cos\varphi\right) =$$

$$= -A(-6 + 18\cos^2\Theta + 6\cos 2\Theta\cos\varphi - 2tg\Theta\cos\varphi);$$

$$\frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} = -\frac{E\sin 2\Theta\cos\varphi}{\sin^2\Theta} = -12ctg\Theta\cos\varphi = -2Actg\Theta\cos\varphi.$$

Вернемось до рівняння (1):

$$-2Actg\Theta\cos\varphi + \lambda A(3\cos^2\Theta - 1 + \sin 2\Theta\cos\varphi) = 0;$$

$$-6A(3\cos^2\Theta - 1 + \sin 2\Theta\cos\varphi) = -\lambda A(3\cos^2\Theta - 1 + \sin 2\Theta\cos\varphi); \Rightarrow \lambda = 6.$$

Знаючи, що $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, знайдемо:l=2. Отже, $L^2 = 6\hbar^2$.

Задача №5.

Знайти власні функції Ψ і власні значення оператора $\widehat{A} = \frac{id}{dx}$, якщо $\Psi(x) = \Psi(x+a)$;

Розв 'язування:

Нехай є оператор - $\frac{id}{dx}$. Для знаходження власних функцій Ψ і власних значень даного оператора потрібно розглянути його дію на деяку функцію $\Psi(x)$:

$$-i\frac{d}{dx}\psi(x) = \lambda\psi(x); -i\frac{d\psi(x)}{\psi(x)} = \lambda dx.$$

Розв'язком даного диференціального рівняння буде функція, яка матиме вигляд

$$Ae^{i\lambda x} = Ae^{i\lambda(x+a)}.$$

Скоротивши на A і розписавши експоненту, за формулою Ейлера:

$$e^{ix} = \cos x + i\sin x,$$

отримаємо

$$i\lambda a = i2\pi n;\ \ \lambda = \frac{2\pi}{a}n.$$

отже, в результаті маємо власні значення

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{a}n$$

Тоді функція набуде вигляду

$$\psi = Ae^{i\frac{2\pi}{a}nx}.$$

Із умови нормування знаходимо А:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1;\ \int_0^a A^2 1 dx = 1;\ A^2 a = 1;\qquad A = \frac{1}{\sqrt{a}}.$$

Остаточно власні функції

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{a}}e^{i\frac{2\pi}{a}nx}.$$

Задача №6.

Знайти власні функції і власні значення оператора

$$\hat{A} = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}.$$

Розв'язування:

Зробимо заміну:

$$\Psi(x) = \frac{U(x)}{x};\Rightarrow \widehat{\mathrm{A}}\Psi(x) = \lambda\Psi(x);$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2} + \frac{2}{\mathrm{x}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\right)\Psi(x) = \lambda\Psi(x);\Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2}\left(\frac{U(x)}{x}\right) + \frac{2}{\mathrm{x}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\left(\frac{U(x)}{x}\right) = \lambda\frac{U(x)}{x};$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\left(-\frac{1}{\mathrm{x}^2}U(x) + \frac{1}{x}\frac{dU(x)}{dx}\right) + \frac{2}{\mathrm{x}}\left(-\frac{1}{\mathrm{x}^2}U(x)\right) + \frac{1}{\mathrm{x}}\frac{dU(x)}{dx} = \lambda\frac{U(x)}{x};$$

$$\frac{2}{x^3}U(x) - \frac{1}{\mathrm{x}^2}\frac{dU(x)}{dx} - \frac{1}{\mathrm{x}^2}\frac{dU(x)}{dx} + \frac{1}{x}\frac{d^2U(x)}{dx^2} - \frac{2}{x^3}U(x) + \frac{2}{x^2}\frac{dU(x)}{dx} = \lambda\frac{U(x)}{x};$$

$$\frac{1}{x}\frac{d^2U(x)}{dx^2} = \lambda\frac{U(x)}{x};\Rightarrow \frac{d^2U(x)}{dx^2} = \lambda U(x);\Rightarrow U'' - \lambda U = 0;$$

Розв'язком цього рівняння є:

$$U = C_1 e^{-\sqrt{\lambda x}} + C_2 e^{\sqrt{\lambda x}}\ ,$$

тобто:

$$\Psi(x) = \frac{C_1 e^{-\sqrt{\lambda x}} + C_2 e^{\sqrt{\lambda x}}}{x}$$

Розглянемо випадки:

1) $\lambda > 0 \Rightarrow$хвильова функція $\Psi(x)$—обмежена, скінчена; при $\Psi(x \to \infty) \to\to 0$. Для умови $\Psi(x \to 0) \to 0$ необхідно, щоб $C_1=0$, $C_2=0$.

2) $\lambda < 0$:

$$\Psi(x) = \frac{C_1 e^{-i\sqrt{\lambda x}} + C_2 e^{i\sqrt{\lambda x}}}{x}.$$

при x=0, $C_1+C_2=0$; $C_1=-C_2$; $C_1=C$.

$$\Psi(x) = \frac{C_1 e^{-i\sqrt{\lambda x}} + C_2 e^{i\sqrt{\lambda x}}}{x} = C\,\frac{-2i\sin\sqrt{\lambda x}}{x} = C'\,\frac{i\sin\sqrt{\lambda x}}{x}$$

$$\Psi(x) = C'\,\frac{i\sin\sqrt{\lambda x}}{x};\Rightarrow \Psi(x) = C^*\,\frac{\sin\sqrt{\lambda x}}{x}\ .$$

Задача №7

Знайти нормуючий множник власної хвильової функції оператора імпульсу:

$$\varphi_p = Ce^{\frac{ip}{\hbar x}}.$$

Розв 'язування:

Умова нормування:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{\mathrm{p}}^{*}\,\varphi_{\mathrm{p}'} dx = \delta(p - p') \Rightarrow C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\,dx = \delta(p - p').$$

За означенням δ- функції:

$$\delta(p-p') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\,dx; \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}\,dx = 2\pi\delta\left(\frac{1}{\hbar}(p-p')\right).$$

Тому

$$C^2 = \frac{1}{2\pi}\frac{\delta(p-p')}{\delta\left(\frac{1}{\hbar}(p-p')\right)} = \frac{1}{2\pi\hbar}; \Rightarrow\ C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

Отже, хвильова функція набере вигляду:

$$\varphi_{\mathrm{p}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

Задача №8. Фінітний рух частинки.

Розв'язування:

На основі гіпотези де Бройля ми встановили, що хвильовою функцією вільної частинки є плоска хвиля. У цьому параграфі ми детально розглянемо умови нормування плоских хвиль та їхні властивості. Розгляд будемо вести як для випадку обмеженого об'єму простору, так і для необмеженого об'єму простору, у якому рухається частинка.

Почнемо з одновимірного випадку, коли

$$\Psi(x,t) = ce^{i(kx-\omega t)},$$

де хвильовий вектор та частота пов'язані з імпульсом та енергією частинки:

$$k = \frac{p}{\hbar};\ \ \omega = \frac{E}{\hbar}.$$

Розглядаємо нерелятивістський випадок, коли енергія вільної частинки

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

Оскільки частинка вільна, то енергія та імпульс зберігаються і мають певні значення *p=const, E=const.* Координата частинки *x* повністю невизначена: всі положення є рівно ймовірними,

$$|\psi(x,t)|^2 = |c|^2 = \text{const}.$$

Розіб'ємо простір, у якому рухається частинка, на рівні об'єми (ящики) величиною *l,* і нехай рух частинки відбувається в області $-\frac{l}{2} \le x \ge \frac{l}{2}$ повторюється у всіх решта областях (див. рис.).

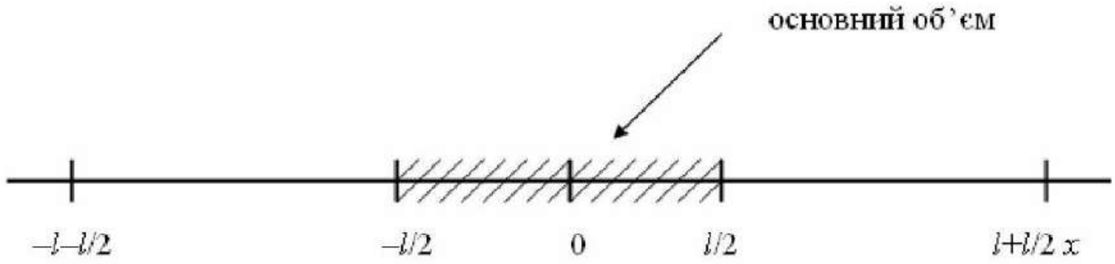


Рис. Розбиття простору на ящики об'ємом l.

Тобто, якщо частинка переходить у сусідню область, то вона поводиться так само, як і в попередній. Це означає, що ми накладаємо на хвильову функцію граничні умови періодичності

$$\Psi(x,t) = \psi(x+l,t)\ .$$

Ми накладаємо цю умову лише для зручності математичного опису. Хоча, взагалі кажучи, і насправді частинка рухається в деякому обмеженому об'ємі простору, який є значно більшим, ніж характерні атомні масштаби, наприклад, це є лабораторія, у якій проводять досліди. Нас цікавлять властивості частинки як такої, а не її властивості, пов'язані з поверхневими ефектами, тобто наявністю стін у лабораторії. Тому невизначена величина об'єму l повинна бути достатньо великою, щоб забезпечити її "фізичну безмежність". При таких розрахунках ми завжди маємо на увазі, що $l \to \infty$. Зрозуміло, що під час обчислення, наприклад, перерізів розсіяння частинок чи будь-якої іншої спостережуваної величини довжина l повинна випасти з остаточних формул. Зауважимо, що ми не можемо замінити граничні умови періодичності на умови $\psi(0) = \psi(\mathrm{l}) = 0$ - це інша задача: частинка, яка рухається в потенціальній ямі з безмежно високими стінками.

З граничної умови періодичності з урахуванням явного вигляду хвильової функції знаходимо:

$$E^{ikx} = e^{ik(x+l)},\ або\ e^{ikl} = 1.$$

Отже,

$$kl = 2\pi n\ , n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

Таким чином, імпульс й енергія кантуються:

$$k = \frac{2\pi}{L} n;\ p = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{L} n;\ \ E = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2} n^2,$$

Умова нормування

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} |\Psi(x,t)|^2\, dx = 1$$

дає

$$|c|^2 = 1;\ \ C = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ia},$$

де a - довільний фазовий множник. Хвильова функція визначається з точністю до довільного фазового множника, який не впливає на фізичні висновки - ця неоднозначність є принциповою і її не можна усунути. Отже, оскільки a не входить в остаточні результати, тому покладемо a=0.

Таким чином, нормована хвильова функція вільної частинки

$$\psi(x,t) \equiv \psi_k(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(kx-\omega t)} ,$$

де k вказує значення імпульсу (індекс стану).

У тривимірному випадку об'єм періодичності вибираємо у формі паралелепіпеда з ребрами l_1, l_2, l_3 вздовж осей x,y,z та величиною $V= l_1 l_2 l_3$. Хвильова функція

$$\psi_{\mathrm{k}}(r,t) = \frac{1}{\sqrt{L_1}} e^{i(k_1 x-\omega_1 t)} \frac{1}{\sqrt{L_2}} e^{i(k_2 x-\omega_2 t)} \frac{1}{\sqrt{L_3}} e^{i(k_3 x-\omega_3 t)} .$$

Хвильовий вектор $k = ik_1 + jk_2 + kk_3$, причому компоненти

$$k_j = \frac{2\pi}{L_j} n_j ,$$

де $n_j = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.;\ j = 1,2,3, \ldots$

Імпульс $p = \hbar k$, а частоти $\omega_{\mathrm{j}} = \hbar k_j^2/2m$. Таким чином, нормована хвильова функція вільної частинки, що рухається в об'ємі V.

$$\psi_k(r,t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(kx-\omega t)} ,$$

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}(k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) = \frac{p^2}{2m\hbar} .$$

Переходимо до вивчення властивостей плоских хвиль. Надалі розглядаємо стаціонарний випадок, опускаючи часовий множник:

$$\Psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr} .$$

Розглянемо інтеграл

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \Psi_{k'}^*(x)\, \Psi_k(x) dx = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} e^{ik'x+ikx} dx = \frac{1}{L} \frac{e^{i(k-k')\frac{L}{2}} - e^{i(k-k')\frac{L}{2}}}{i(k-k')} =$$

$$= e^{-i\pi(n-n')} \frac{e^{2i\pi(n-n')} - 1}{2i\pi(n-n')} = \begin{cases} 0, & n \neq n'; \\ 1, & n = n'. \end{cases}$$

Отже,

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \Psi_{k'}^*(x)\, \Psi_k(x) dx = \delta_{k',k},$$

де $\delta_{k',k}$ - символ Кронекера. Узагальнення на тривимірний випадок очевидне:

$$\int \Psi_{k'}^*(r) \Psi_k(r)\, dr = \delta_{k',k} ;$$

$$\delta_{k',k} = \delta_{k_1,k_1'} \delta_{k_2,k_2'} \delta_{k_3,k_3'} .$$

З теорії рядів Фур'є добре відомо, що система функцій $\{...,\psi_k(x),...\}$ є повною (або замкненою). Це означає, що довільна функція може бути зображена рядом:

$$\Psi(x) = \sum_k C_k \Psi_k(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_k \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx};\ k = \frac{2\pi}{L} n.$$

Знайдемо коефіцієнти розкладу c_k через $\psi(x)$:

$$\int \Psi_{k'}^*(x)\Psi_k(x)\,dx = \sum_k C_k \int \Psi_{k'}^*(x)\Psi_k(x)dx = \sum_k C_k\,\delta_{k,k'} = C_{k'},$$

Таким чином,

$$C_{k'} = \int \Psi_{k'}^*(x)\Psi_k(x)\,dx.$$

Зміст C_k: згідно з принципом суперпозиції, $|C_k|^2$ дорівнює імовірності того, що частинка має імпульс$p = \hbar k$. Отже, C_k дорівнює хвильовій функції частинки, яка має своїм аргументом можливі значення імпульсу $\hbar k$. Ця хвильова функція еквівалентна $\psi(x)$.

Нехай $\psi(x)$ - хвильова функція вільної частинки з імпульсом $\mathrm{p}_0 = \hbar \mathrm{k}_0$

$$\psi(x) \equiv \psi_{k_0}(x),$$

$$C_k = \int \Psi_k^*(x)\Psi_{k_0}(x)\,dx = \delta_{k,k_0};\ |C_k|^2 = \delta_{k,k_0} = \begin{cases} 0,\ k \neq k_0; \\ 1, k = k_0, \end{cases}$$

$-$тобто, як і повинно бути, для вільної частинки імовірність мати імпульс $\hbar\mathrm{k}$ дорівнює одиниці для $\mathrm{k} = \mathrm{k}_0$ і дорівнює нулеві для всіх решти значень k.

Функції C_k повинні задовольняти умову нормування

$$\sum_k |C_k|^2 = 1.$$

Перевіримо:

$$1 = \sum_k C_k^* C_k = \sum_k \int \Psi_k(x)\Psi^*(x)\,dx \int \Psi_k^*(x')\Psi(x')\,dx' =$$
$$= \int dx \int dx' \Psi^*(x)\Psi(x') \sum_k \Psi_k^*(x')\Psi_k(x).$$

Тут

$$\sum_k \Psi_k^*(x')\Psi_k(x) = \frac{1}{L}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{\left(\frac{2\pi i}{L}\right)n(x-x')} = \delta(x-x')\ ,$$

-дельта-функція Дірака. За означенням δ – функції

$$\int_a^b f(x)\delta(x-x')dx = f(x')\ ;\ a < x' < b.$$

Тому продовжуючи рівність, маємо

$$\sum_k |C_k|^2 = \int dx \int dx' \psi^*(x)\psi(x')\,\delta(x-x') = \int dx\,|\psi(x)|^2 = 1\ .$$

Отже умова нормування задовольняється.

Покажемо тепер, що ми справді маємо справу з δ - функцією:

$$\delta(x) = \frac{1}{L}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{\left(\frac{2\pi i}{L}\right)nx} = \frac{1}{L}\lim_{N\to\infty}\left\{\sum_{n=0}^{N} e^{\left(\frac{2\pi i}{L}\right)nx} + \sum_{n=0}^{N} e^{-\left(\frac{2\pi i}{L}\right)nx} - 1\right\} =$$

$$= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{L} \left\{ \frac{1 - e^{\left(\frac{2\pi i}{L}\right)(N+1)x}}{1 - e^{\left(\frac{2\pi i}{L}\right)x}} + к.с. -1 \right\} = \frac{1}{L} \lim_{N\to\infty} \frac{\sin\left[\left(\frac{\pi}{L}\right)(2N+1)x\right]}{\sin\left[\left(\frac{\pi}{L}\right)x\right]} .$$

Далі, якщо$f(x)$ - "хороша" функція ("хороша", або "цивілізована"— означає, що вона сама та її похідні (хоча й не усі) є неперервними), то

$$\int_{-a}^{b} f(x) \frac{1}{L} \lim_{N\to\infty} \frac{\sin\left[\left(\frac{\pi}{L}\right)(2N+1)x\right]}{\sin\left[\left(\frac{\pi}{L}\right)x\right]} dx = \lim_{N\to\infty} \int_{-a}^{b} f(x) \frac{1}{L} \frac{\sin\left[\left(\frac{\pi}{L}\right)(2N+1)x\right]}{\sin\left[\left(\frac{\pi}{L}\right)x\right]} dx =$$

$$= \left\{ \text{йде заміна } \left(\frac{\pi}{L}\right)(2N+1)x = \xi \right\} = \lim_{N\to\infty} \int_{-\left(\frac{\pi}{L}\right)(2N+1)a}^{\left(\frac{\pi}{L}\right)(2N+1)b} f\left(\xi \frac{L}{\pi(2N+1)}\right) *$$

$$* \frac{\sin\xi}{\pi \sin\left[\frac{\xi}{(2N+1)}\right]} \frac{d\xi}{(2N+1)} = f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin\xi}{\pi\xi} d\xi = f(0) .$$

Тому, що

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin\xi}{\pi\xi} d\xi = 1$$

Це і доводить твердження, що

$$\delta(x) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} exp\left(\frac{2\pi i n x}{L}\right) .$$

І також, що

$$\sum_k \Psi_k^*(r')\Psi_k(r) = \delta(r - r') .$$

Узагальнення на тривимірний випадок:

$$\sum_k \Psi_k^*(x')\Psi_k(x) = \delta(x - x') ,$$

де скорочено позначено

$$\sum_k \equiv \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \equiv \sum_{n_1=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_3=-\infty}^{+\infty};$$

$$\boldsymbol{\delta(r - r') = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z')} .$$

Розглянемо тепер хвильову функцію вільної частинки, що рухається в необмеженому об'ємі. Почнемо з розгляду одновимірного випадку $\psi(x,t) = Ce^{i(kx-\omega t)}$, k — неперервна величина тому, що немає граничних умов, які квантують імпульс. Надалі зосередимо увагу на просторовій змінній, опускаючи час t (для фіксованого часу $\omega t = const$ — довільний фазовий множник). Отже $\psi_k(x) = Ce^{ikx}$. Умова нормування не має змісту:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_k(x)|^2 dx = \infty .$$

Розглянемо вираз

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^*(x)\psi_k(x)dx = \lim_{L\to\infty} \int_{-L}^{+L} \psi_{k'}^*(x)\psi_k(x)dx = \lim_{L\to\infty} |C|^2 \int_{-L}^{+L} e^{i(k-k')x} dx =$$

$$= |C|^2 \lim_{L\to\infty} 2 \frac{\sin[(k-k')L]}{(k-k')} = 2\pi|C|^2\delta(k - k') ,$$

тут

$$\delta(k-k^{'}) = \lim_{L\to\infty}\frac{\sin[(k-k')L]}{\pi(k-k')}$$

- дельта-функція Дірака. Справді, для довільної функції $f(k)$ (звичайно вона є "цивілізована" і задовольняє всі потрібні нам умови). Маємо

$$\lim_{L\to\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} f(k')\frac{\sin[(k-k')L]}{\pi(k-k')}dk^{'} = \int_{-\infty}^{+\infty}\delta(k-k^{'})f(k')dk^{'} =$$

$$= \{\text{заміна} : (k-k^{'})L = \xi\} = \lim_{L\to\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} f\left(k-\frac{\xi}{L}\right)\frac{\sin\xi}{\pi\xi}d\xi = f(k).$$

Оскільки

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin\xi}{\pi\xi}d\xi = 1\ .$$

Отже

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(k-k^{'})f(k')dk^{'} = f(k)$$

як і повинно бути за означенням δ -функції.

Виберемо постійну нормування

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

і отримаємо

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{k^{'}}^{*}(x)\psi_k(x)dx = \delta(k-k^{'})$$

нормування на δ - функцію від хвильових векторів

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\ .$$

а якщо в записі через імпульс $\mathrm{p} = \hbar\mathrm{k}$, то

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{p^{'}}^{*}(x)\psi_p(x)dx = \delta(p-p^{'})\ ;\ \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

хвильова функція, що нормується на δ - функцію від імпульсів.

У зв'язку з повнотою системі функцій $\{\psi_p(x)\}$, для „будь-якої" функції $\psi(x)$ існує інтегральний ряд Фур'є

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(p)\psi_p(x)dp\ ;\ C(p) = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_p^{*}(x)\psi(x)dx\ .$$

Величина $|C(p)|^2$ — це густина ймовірності того, що частинка має імпульс в околі значення *p*.

4. ЛІНІЙНИЙ ГАРМОНІЧНИЙ ОСЦИЛЯТОР.

План

1. Малі коливання квантових систем
2. Квантовий лінійний осцилятор
3. Фізичні явища, які пояснюються на основі теорії квантового лінійного осцилятора.

Завдання практичного заняття - роль модельних задач в квантово-механічному дослідженні. Розв'язати рівняння Шредінгера для лінійного гармонічного осцилятора.

В процесі проведення заняття студент повинен:

знати- математичний апарат квантової механіки, відмінності руху класичного і квантового осцилятора.

уміти- застосовувати математичний апарат квантової механіки для дослідження одномірного руху; розв'язувати рівняння Щредінгера, знаходити енергетичний спектр і хвильової функції гармонічного осцилятора.

Дослідити класичний гармонійний осцилятор. Дослідити (розв'язати) рівняння Шредінгера для осцилятора.

Приклади розв’язування задач

Задача №1.

Заряджена частинка виконує гармонічні коливання в електричному полі, напруженість якого напрямленавздовж осі X. Осцилятор коливається також вздовж осі X. Знайти власні функції і власні значення енергії частинки. Чи зміниться частота випромінюваного частинкою світла під впливом однорідного електричного поля? Заряд частинки q, напруженість поля F.

Розв’язування:

Потенціальна енергія осцилятора в електричному полі

$$U = +\frac{kx^2}{2} - eFx,$$

де F -напруженістьелектричного поля. Рівняння Шредінгера запишемо так:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar}\left(E - \frac{kx^2}{2} + eFx\right)u = 0.$$

Перейдемо до нової змінної

$$x' = x - eF.$$

Тоді рівняння набуде вигляду

$$\frac{d^2u}{dx'^2}+\frac{2m}{\hbar}\left(E-\frac{kx'^2}{2}+eFx\right)u=0;\quad E'=E+\frac{e^2F^2}{k}\ .$$

Таким чином дістали рівняння гармонічного осцилятора з енергією E'. Отже

$$u_n=A_n e^{\frac{\beta}{2}x'^2}H(\xi);\ \ E'=\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega\hbar;\ \ \omega=\sqrt{\frac{k}{m}};\ \ \xi=x'\sqrt{\frac{2\pi m\nu_0}{\hbar}}.$$

Частота випромінювання осцилятором світла не зміниться, оскільки вона дорівнює

$$\omega'=\frac{E_{n_2}-E_{n_1}}{\hbar}=(n_2-n_1)\omega.$$

Задача №2

Визначити хвильові функції та енергетичні рівні трьохмірного ізотропного осцилятора.

Розв'язування:

Потенціальна енергія

$$U(r)=\frac{\mu\omega^2r^2}{2}$$

Радіальна частинаR хвильової функції задовольняє рівняння

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}-\frac{\mu^2\omega^2r^2}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R=0.$$

Підставляючи сюди $\chi=Rr$ і вводячи позначення

$$k=\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar};\quad \frac{\mu\omega}{\hbar}=\lambda$$

Отримуємо

$$\chi''+\left(k^2-\lambda^2r^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi=0. \qquad (1)$$

Враховуючи асимптотичну поведінку χ при $r\to 0$ і при $r\to\infty$ розв'язок для χ шукаємо у вигляді

$$\chi=r^{l+1}e^{-\frac{\lambda}{2}r^2}u(r). \qquad (2)$$

Підставляючи (2) в (1), отримаємо рівняння яке визначає функцію, u(r):

$$u''+2\left\{\frac{l+1}{r}-\lambda r\right\}u'-\left\{2\lambda\left(l+\frac{3}{2}\right)-k^2\right\}u=0. \qquad (3)$$

Вводячи нову незалежну змінну $\xi=\lambda r^2$рівняння (3) зводиться до диференціального рівняння наступного типу:

$$\xi\frac{d^2u}{d\xi^2}+\left\{\left(l+\frac{3}{2}\right)-\xi\right\}\frac{du}{d\xi}+\left\{\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}\right)-\frac{1}{2}s\right\}u=0;\quad s\frac{k^2}{2\lambda}=\frac{E}{\hbar\omega}.$$

Розв'язком цього рівняння є вироджена гіпергеометрична функція

$$u=F\left\{\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}-s\right);l+\frac{3}{2};\xi\right\}$$

Умова спадання R при $r\to\infty$ дає:

$$\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}-s\right)=-n_r; \quad (n_r=0,1,2\ldots),$$

а, отже, енергетичні рівні визначаються умовою:

$$E_{n_r l}=\hbar\omega\left(l+2n_r+\frac{3}{2}\right),$$

для яких хвильові функції выдповідно:

$$\psi_{n_r lm}=r^l e^{\frac{\lambda^2}{2}r^2}F\left(-n_r; l+\frac{3}{2}; \lambda r^2\right)Y_{lm}(\vartheta,\varphi).$$

Задача №3

Для лінійного гармонічного осцилятора обчислити середнє значення координати $<x^2>$, середнє значення потенціальної енергії $<U_n>$.

Розв'язування:

Поліноми Ерміта:

$$H_n(\xi)=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\frac{1}{\sqrt{2^n}}(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^2}{d\xi^n}e^{-\xi^2}; \; \xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x.$$

Середні значення визначаються як діагональні матричні елементи:

$$\overline{\mathrm{x}^2}=\int \psi_n{}^* x^2\psi_n dx=(x^2)_{nn}; \; (x^2)_{km}=\sum_l x_{kl}x_{lm}; \; (x^2)_{nn}=\sum_l x_{nl}x_{ln}.$$

Матричні елементи обчислюються так само, як при виведенні правил відбору (див. відповідну лекцію)

$$(x^2)_{nn}=\frac{\hbar}{m_0\omega}\left(\sum_l\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n-1,l}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{n+1,l}\right)\left(\sqrt{\frac{l}{2}}\delta_{n-1,l}+\sqrt{\frac{l+1}{2}}\delta_{n+1,l}\right)=\frac{\hbar}{m_0\omega}\left(\frac{n}{2}+\frac{n+1}{2}\right)=$$

$$\frac{\hbar}{m_0\omega}\frac{2n+1}{2}=\frac{\hbar}{m_0\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)=\overline{\mathrm{x}^2}.$$

Середні значення потенціальної енергії:

$$\mathrm{U}=\frac{kx^2}{2}=\frac{m\omega^2x^2}{2};\Longrightarrow \overline{U}(x)=\frac{m_0\omega^2}{2}\overline{x^2}=\frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\frac{2n+1}{4}.$$

Задача №4

Для лінійного гармонічного осцилятора, загальна енергія якого (5/2) $\hbar\omega$, обчислити середню кінетичну енергію.

Розв'язування:

$E=T+U=5/2\hbar\omega$ - енергія гармонічного осцилятора, де $U=kx^2/2$.

Середнє значення повної енергії можна визначити із наступного співвідношення, врахувавши результати попередньої задачі (середнє значення потенціальної енергії):

$$\bar{E}=\overline{U+T}=\bar{U}+\bar{T}; \; \bar{T}=\bar{E}-\bar{U}=\bar{E}-\frac{k\bar{x}^2}{2}=\bar{E}-\frac{m\overline{x^2}}{2};$$

$$\overline{x^2}=\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right); \Longrightarrow E=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)=\frac{5}{2}\hbar\omega\Longrightarrow n=2.$$

5. РУХ ЧАСТИНКИ В ЦЕНТРАЛЬНО СИМЕТРИЧНОМУ ПОЛІ

План

1. Вступ.
2. Власні функції та власні значення оператора моменту кількості рух.

Завдання заняття – одержати явний вираз оператора в сферичній системі координат, познайомитися з поліномами Лежандра, ввести сферичні функції.

В процесі проведення заняття студент повинен:

знати- приклади центральносиметричних полів, явний вигляд поліномів Лежандра і сферичних функцій; знати власні значення операторів;

вміти- розв'язувати рівняння на знаходження власних функцій і власних значень операторів моменту кількості руху і його проекції в сферичній системі координат.

Приклади розв'язування задач

Задача

Визначити хвильові фунції та рівні енергії частинки масою m і нульовим орбітальним моментом l=0, яка міститься у сферично-симетричній потенціальній з безмежно високими стінками ямі,радіус якої r_0.

Розвязування:

Радіальна частина рівняння Шредінгера (l=0,U=0):

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2mE}{\hbar^2}R = 0\ . \qquad (1)$$

Для розв'язку (1) введемо заміну:

$$\mathrm{R(r)}=\frac{x(r)}{r},$$

В результаті чого для фунції$x(r)$ отримаємо рівняння:

$$\frac{d^2x}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}x = 0. \qquad (2)$$

Позначимо:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Тоді розв'язком рівняння (2) є: x=$Asinkx$,звідки,врахововуючи$R(r_0)$=0,отримаємо:

$$Asinkr_0=0;\Rightarrow kr_0 = \pi n; n = 1,2,3, \dots; \Rightarrow k = \frac{\pi n}{r_0}.$$

Значить

$$E_n = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mr_0^2}n^2;\ \Psi_{n,0,0} = R(r)Y_{0,0}(\theta, \varphi) = c\frac{1}{r}\sin\left(\frac{\pi nr}{r_0}\right);$$

$$\int_0^{r_0}[\Psi]^2\,d\Omega = c^2\int_0^{r_0}\frac{1}{r^2}sin^2\frac{\pi nr}{r_0}\cdot r^2dr\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi = c^2 4\,\pi\int_0^{r_0}\frac{1-cos\frac{2\pi nr}{r_0}}{2}dr =$$

$$= c^2 2\pi\cdot r_0 = 1.$$

Звідки для хвильової фунції маємо:

$$\Psi_{n,0,0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}}\frac{1}{r}sin\left(\frac{\pi nr}{r_0}\right).$$

Задача №2

Знайти <r>,$<r^2>$, $<(\Delta r)^2>$ використовуючи умову результат задачі №1 (№153).

Розв'язування:

Отже:

1) $\bar{r}=\int_0^{r_0}\frac{4\pi}{2\pi r_0}\frac{r}{r^2}\cdot sin^2\frac{\pi nr}{r_0}r^2dr = \int_0^{r_0}\frac{2}{r_0}\cdot sin^2\frac{\pi nr}{r_0}rdr = \frac{2}{r_0}\int_0^{r_0}\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{2\pi nr}{r_0}\right)rdr =$

$$= \frac{1}{r_0}\left(\int_0^{r_0}rdr - \int_0^{r_0}r\cdot cos\frac{2\pi nr}{r_0}dr\right) = \frac{1}{r_0}\left(\frac{r^2}{2}\Big|_0^{r_0} - \left(r\frac{r_0}{2\pi n}sin\frac{2\pi nr}{r_0}\Big|_0^{r_0}\int_0^{r_0}\frac{r_0}{2\pi n}sin\frac{2\pi nr}{r_0}dr\right)\right)=$$

$$= \frac{1}{r_0}\cdot\frac{{r_0}^2}{2} - \frac{1}{r_0}\left(0+\frac{{r_0}^2}{4\pi^2n^2}\cdot\cos\frac{2\pi nr}{{r_0}^2}\Big|_0^{r_0}\right) = \frac{1}{r_0}\left(\frac{{r_0}^2}{2}-\frac{{r_0}^2}{4\pi^2n^2}(1-1)\right)=\frac{1}{r_0}\cdot\frac{{r_0}^2}{2} = \frac{r_0}{2};$$

2) $\overline{r^2} = \frac{4\pi}{2\pi r_0}\int_0^{r_0}\frac{r^2}{r^2}sin^2\frac{\pi nr}{r_0}r^2dr = \frac{1}{r_0}\int_0^{r_0}\left(1-cos\frac{2\pi nr}{r_0}\right)r^2dr = \frac{1}{r_0}\int_0^{r_0}r^2dr -$

$$-\frac{1}{r_0}\int_0^{r_0}cos\frac{2\pi nr}{r_0}r^2dr = \left[u=r^2; du=2rdr; dv=\cos\frac{2\pi nr}{r_0}dr; v=\frac{r_0}{2\pi n}\sin\frac{2\pi nr}{r_0}\right] =$$

$$= \frac{1}{r_0}\frac{r^3}{3}\Big|_0^{r_0} - \frac{1}{r_0}\left(uv - \int_0^{r_0}vdu\right) = \frac{r_0^2}{3} - \frac{1}{r_0}\left(0-\int_0^{r_0}\frac{r_0}{\pi n}\cdot\sin\frac{2\pi nr}{r_0}rdr\right) =$$

$$= [u=r; du=dr; dv== \sin\frac{2\pi nr}{r_0}dr; v=-\frac{r_0}{2\pi nr}\cdot\cos\frac{2\pi nr}{r_0}\Big] = \frac{r_0^2}{3} +$$

$$+\frac{1}{r_0}\frac{r_0}{\pi n}\left(-r\frac{r_0}{2\pi n}\cos\frac{2\pi nr}{r_0}\Big|_0^{r_0} + \int_0^{r_0}\frac{r_0}{2\pi n}\cos\frac{2\pi nr}{r_0}dr\right) = \frac{r_0^2}{3} - \frac{1}{r_0}\frac{r_0}{\pi n}\left(\frac{r_0}{2\pi n}+0\right) +$$

$$+\frac{1}{r_0}\frac{r_0}{\pi n}\frac{{r_0}^2}{4\pi^2n^2}\sin\frac{2\pi nr}{r_0}\Bigg|_0^{r_0} = \frac{r_0^2}{3} - \frac{{r_0}^2}{2\pi^2n^2} + 0 = \frac{r_0^2}{3} - \frac{{r_0}^2}{2\pi^2n^2};$$

$$\overline{\Delta r^2} = \overline{r^2} - r^{-2} = \frac{r_0^2}{3} - -\frac{{r_0}^2}{2\pi^2n^2} - \frac{r_0^2}{4} = \frac{r_0^2}{12} - \frac{{r_0}^2}{2\pi^2n^2} = \frac{r_0^2}{12}\left(1-\frac{6}{\pi^2n^2}\right)$$

Задача№3.

Визначити середнє квадратичне відхилення відстані електрона від ядра для електрона в атомі водню,який находиться в стані з квантовими числами *n*,*l*.

Розв'язування:

$$\sqrt{\overline{r^2} - r^{-2}} = \frac{\sqrt{n^2}(n^2+2) - l^2(l^2+1)^2}{2}.$$

При заданому *n* цей вираз має мінімальне значення для «кругових орбіт»,тобто при

l=n-1;

$$\sqrt{\overline{r^2} - r^{-2}} = \frac{n\sqrt{2n+1}}{2}; \frac{1}{\bar{r}}\sqrt{\overline{r^2} - r^{-2}} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}}.$$

Задача№4

Знайти <r>,<r^2>, <$(\Delta r)^2$>для електрона,якийперебуває в 1-*s* стані атома водню.

Розв'язування:

$\Psi_{1,0=}f_{1,0}Y_{0,0} = f_{1,0}(r)\cdot 1 = f_{1,0}(r);\ f_{1,0}(r) = \tilde{a}_0 e^{\frac{zr}{a}} = \tilde{a}_0\cdot e^{\frac{zr}{a}} = \tilde{a}_0\cdot e^{\frac{r}{a}};$

З умови нормування:

$$\int \psi^* \psi d\xi = \int_0^{4\pi}\int_0^{\infty} \tilde{a}_0^2 \cdot e^{\frac{2r}{a}} r^2 dr d\Omega =$$

$$\left\{\text{інтегрування по частинах: } \left[u = r^2; du = 2rdr; dv = e^{\frac{2r}{a}}dr; v = -\frac{a}{2}e^{\frac{2r}{a}}\right]\right\}$$

$$= 4\pi\cdot\tilde{a}_0^2\left(-r^2\cdot\frac{a}{2}e^{\frac{2r}{a}}\Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} ra\cdot e^{\frac{2r}{a}}dr\right) = 4\pi\cdot\tilde{a}_0^2\int_0^{\infty} ra\cdot e^{\frac{2r}{a}}dr = [u = r; du = dr;$$

$$dv = e^{\frac{2r}{a}}dr; v = -\frac{a}{2}e^{\frac{2r}{a}} = 4\pi\cdot a\cdot\tilde{a}_0^2\left(0 + \int_0^{\infty}\frac{a}{2}e^{\frac{2r}{a}}dr\right) = 4\pi\cdot a\cdot\tilde{a}_0^2\int_0^{\infty}\frac{a}{2}e^{\frac{2r}{a}}dr =$$

$$= -4\pi\cdot\frac{a^2}{4}\tilde{a}_0^2 e^{\frac{2r}{a}}\Big|_0^{\infty} = -4\pi\cdot\frac{a^3}{4}\tilde{a}_0^2 = -\pi a^3\tilde{a}_0^2 = 1; \Rightarrow \tilde{a}_0^2 = -\frac{1}{\pi a^3}; \Rightarrow \tilde{a}_0 = \frac{i}{\sqrt{\pi a^3}}.$$

Отже Ψ-функція має вигляд:

$$\Psi_{1,0} = \frac{i}{\sqrt{\pi a^3}}e^{\frac{r}{a}}.$$

Тоді:

$$\bar{r} = -\int_0^{\infty} 4\pi\frac{i}{\sqrt{\pi a^3}}e^{\frac{r}{a}}\cdot r\cdot\frac{i}{\sqrt{\pi a^3}}e^{\frac{r}{a}}r^2 dr = \frac{4}{a^3}r^3 e^{\frac{r}{a}}dr = \frac{4}{a^3}\int_0^{\infty} 3r^2\frac{a}{2}e^{\frac{2r}{a}}dr =$$

$$\frac{6}{a^2}\int_0^{\infty} 2r\frac{a}{2}e^{\frac{2r}{a}}dr = \frac{6}{a^2}\int_0^{\infty}\frac{a}{2}e^{\frac{2r}{a}}dr = -\frac{3}{2}a\cdot e^{\frac{2r}{a}}\Big|_0^{\infty} = +\frac{3}{2}a;$$

$$\bar{r} = -\int_0^{\infty} 4\pi\frac{i}{\sqrt{\pi a^3}}e^{\frac{2r}{a}}r^4 dr = \frac{4}{a^3}\int_0^{\infty} 4\frac{a}{2}r^3 e^{\frac{2r}{a}}dr = \frac{8}{a^2}\int_0^{\infty} 3r^2\frac{a}{2}e^{\frac{2r}{a}}dr =$$

$$= \frac{12}{a}\int_0^{\infty} 2r^2 \frac{a}{2} e^{\frac{2r}{a}} dr = 12\int_0^{\infty} \frac{a}{2} \cdot e^{\frac{2r}{a}} dr = -6a\frac{a}{2} e^{\frac{2r}{a}}\Big|_0^{\infty} = +3a^2;$$

$$\overline{\Delta r^2} = \overline{\left(r - \overline{r}^2\right)} = \overline{r^2 - 2rr^2 - (r^2)^2} = \overline{r^2}\text{-}2\overline{r}\overline{r} - r^{-2} = \overline{r^2} - r^{-2};$$

$$\overline{\Delta r^2} = 3a^2 - \left(\frac{3}{2}a\right)^2 = 3a^2 - \frac{9a^2}{4} = \frac{3a^2}{4}.$$

Задача №5.

Довести,що в центральносиметричному полі у випадку дискретного спектру мінімальне значення енергії при заданому *l*(*l*-орбітальне квантове число) росте із збільшенням *l*.

Розвязування:

Представимо оператор Гамільтона в наступному вигляді:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2};\ \widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + U(r).$$

Тоді мінімальні значення енергії та власні хвильові функції,що їм відповідають,пов'язані співвідношеннями

$$E_l^{min} = \int \Psi_l * \left\{\widehat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\Psi_l d\tau;$$

$$E_l^{min} = \int \Psi_{l+1} * \left\{\widehat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{(l+1)(l+2)}{r^2}\right\}\Psi_{l+1} d\tau.$$

Останній вираз запишемо у вигляді

$$E_l^{min} = \int \Psi_{l+1} * \left\{\widehat{H}_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right\}\Psi_{l+1} d\tau + \int \frac{\hbar^2 (l+1)}{\mu r^2}\Psi_{l+1}\Psi_{l+1} d\tau.$$

Прирівняємо перший член даного виразу з E_l^{min}. Оскільки Ψ_l відповідає мінімальному власному значенню оператора

$$\widehat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2},$$

то

$$\int \Psi_{l+1} * \left\{\widehat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\Psi_{l+1} d\tau > \int \Psi_l * \left\{\widehat{H}_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\Psi_l\, d\tau.$$

Що стосується інтеграла

$$\int \frac{\hbar^2(l+1)}{\mu r^2}\Psi_{l+1} * \Psi_{l+1} d\tau,$$

то він завжди більший нуля.

Звідси слідує,що $\mathrm{E}_{\mathrm{l}}^{\min} < \mathrm{E}_{\mathrm{l+1}}^{\min}$,тобто вище сказане твердження доведене.

6. НАБЛИЖЕНІ МЕТОДИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

План

1. Вступ.
2. Теорія збурень.
3. Квазікласичне наближення.

Мета - вияснити суть теорії збурень при наявності виродження , одержати секулярне рівняння , розкрити фізичний зміст " зняття виродження".

Завдання - розв'язати наближено точне рівняння Шредінгера при наявності виродження , якщо відомі точні розв'язки незбуреної задачі. Знайти способи відшукання поправок до хвильових функцій , розв'язуючи секулярне рівняння.

В процесі проведення заняття студент повинен:

знати - спосіб розв'язування стаціонарного рівняння Шредінгера; мати поняття про зняття і пониження виродження .

уміти -складати секулярне рівняння і його досліджувати.

Приклади розв'язування задач

Задача №1

На частинку масою m_0 , яка знаходиться в нескінченно глибокій ямі, накладено збурення: $V(x) = V_0 cos\frac{2\pi}{a}x$. Визначити поправки до енергії з точністю до другої поправки включно.

Розв'язування:

Для частинки, яка знаходиться в нескінченно глибокій ямі, відомо:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}n^2;\ \psi_n^0 = \sqrt{\frac{2}{a}}cos\frac{\pi n}{a}x.$$

Знайдемо матричний елемент V_{nm}. За означенням

$$V_{nm} = \int_0^a \psi_n^* V\psi_m dx;$$

$$V_{nm} = \int_0^a \frac{2}{a}cos\frac{\pi n}{a}x\, V_0 cos\frac{\pi n}{a}x\, cos\frac{\pi m}{a}xdx =$$

$$= \frac{2}{a}V_0\int_0^a cos\frac{\pi n}{a}x\, cos\frac{2\pi}{a}x\, cos\frac{\pi m}{a}xdx =$$

$$= \frac{V_0}{4a}\int_0^a (e^{-i\frac{\pi n}{a}x} + e^{i\frac{\pi n}{a}x})\left(e^{-i\frac{\pi m}{a}x} + e^{i\frac{\pi m}{a}x}\right)\left(e^{-i\frac{2\pi}{a}x} + e^{i\frac{2\pi}{a}x}\right)dx =$$

$$= \frac{V_0}{4a}\int_0^a \left(e^{-i\frac{\pi(m+n)}{a}x} + e^{i\frac{\pi(m-n)}{a}x} + e^{i\frac{(-\pi+n)}{a}x} + e^{i\frac{\pi(m+n)}{a}x}\right)\left(e^{-i\frac{2\pi}{a}x} + e^{i\frac{2\pi}{a}x}\right)dx =$$

$$= \frac{V_0}{4a}\int_0^a \left(e^{-i\frac{\pi(m+n+2)}{a}x} + e^{i\frac{\pi(m-n-2)}{a}x} + e^{i\frac{(-\pi+n-2)}{a}x} + e^{i\frac{\pi(m+n+2)}{a}x} + e^{i\frac{\pi(m-n+2)}{a}x}\right)dx =$$

$$\frac{V_0}{4}\left(-\delta_{n,m+2} + \delta_{m,-n-2} + \delta_{n,-m-2} + \delta_{n,m-2} - \delta_{n,m-2} + \delta_{m,-n+2} + \delta_{n,-m+2} + \delta_{n,m+2}\right) =$$

$$\frac{V_0}{4}\left(\delta_{m,-n-2} + \delta_{n,-m-2} + \delta_{m,-n+2} + \delta_{n,-m+2}\right).$$

Тому

$$V_{nm} = \frac{V_0}{4}\left(\delta_{m,-n-2} + \delta_{n,-m-2} + \delta_{m,-n+2} + \delta_{n,-m+2}\right). \qquad (*)$$

для $n=m$, $V_{nm} = 0$. Тому перша поправка до енергії

$$E_n^{(1)} = V_{nm} = 0.$$

Необхідно шукати другу поправку:

$$E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|V_{nm}|^2}{E_m^0 - E_n^0}.$$

Матричний елемент (*) можна переписати у вигляді

$$V_{nm} = \frac{V_0}{4}\left(2\delta_{m,-n-2} + 2\delta_{m,-n+2}\right) = \frac{V_0}{2}\left(\delta_{m,-n-2} + \delta_{m,-n+2}\right);$$

$$|V_{nm}|^2 = \frac{{V_0}^2}{4}\left(\delta_{m,-n-2} + \delta_{m,-n+2}\right);$$

$$E_m^{(2)} = \sum_m \frac{V_0^2}{4}\frac{\left(\delta_{m,-n-2} + \delta_{m,-n+2}\right)}{E_m^0 - E_n^0} == \frac{V_0^2}{4}\left\{\frac{1}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}[(-n-2)]^2 - n^2} + \frac{1}{\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}[(-n+2)]^2 - n^2}\right\} ==$$

$$\frac{ma^2V_0^2}{8\pi^2\hbar^2}\left\{\frac{1}{1+n} + \frac{1}{1+n}\right\} = \frac{ma^2V_0^2}{4\pi^2\hbar^2}\frac{1}{1-n^2}.$$

Таким чином, друга поправка до енергії:

$$E_m^{(2)} = \frac{ma^2V_0^2}{4\pi^2\hbar^2}\frac{1}{1-n^2}$$

Тепер будемо шукати поправки до хвильової функції:

$$C_m^{(0)} = C_{mn}^{(0)} = \delta_{mn}$$

$$C_m^{(1)} = \frac{V_{mn}}{E_m^0 - E_n^0}$$

Для цього використаємо (*):

$$C_m^{(1)} = \frac{V_0}{2}\left(\delta_{m,-n-2} + \delta_{m,-n+2}\right)\frac{1}{E_n^0 - E_m^0};$$

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m \frac{V_0}{2} \frac{\left(\delta_{m,-n-2} + \delta_{m,-n+2}\right)}{E_n^0 - E_m^0} \psi_m^{(0)} = \frac{ma^2 V_0}{2\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2 - 1} \psi_n^{(0)} =$$

$$= \frac{ma^2 V_0}{2\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2 - 1} \sqrt{\frac{2}{a}} cos \frac{\pi n}{a} x.$$

Задача №2

Знайти поправку до енергії основного стану лінійного гармонічного осцилятора за рахунок ангармонічних членів у потенціальній енергії: $V(x) = ax^3 + \beta x^4,$ де $\alpha, \beta - const.$

Розв'язування:

Для лінійного гармонійного осцилятора

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right); \;\; \psi_n(\xi) = e^{-1/2\xi^2} H_n(\xi).$$

Шукаємо першу поправку до енергії:

$$E_n{}^{(1)} = V_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \, (ax^3 + \beta x^4) \psi_n dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 \beta x^4 dx.$$

Перший інтеграл дорівнює нулю із-за непарності підінтегральної функції, тому

$$E_n{}^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 \beta x^4 dx = \beta (x_{nn}^2)^2.$$

Матричний елемент можна шукати у вигляді:

$$x_{nn}^2 = \sum_l x_{nl} x_{ln}$$

$$= \frac{\hbar}{m^2\omega_0} \sum_l \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n-1,l} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n-1,l} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n+1,l} \right) \times (\sqrt{\frac{l}{2}} \delta_{l-1,n}$$

$$+ \sqrt{\frac{l+1}{2}} \delta_{l+1,n}) \, ;$$

$$(x_{nn}^2)^2 = \frac{\hbar^2}{m\omega_0^2} \sum_l \left(\frac{n}{2} \delta_{n-1,l} + \frac{n+1}{2} \delta_{n+1,l} \right) \frac{n+1}{2} \delta_{n+1,l} \times \left(\frac{l}{2} \delta_{l-1,n} + \frac{l+1}{2} \delta_{l+1,n} \right) =$$

$$\frac{\hbar^2}{m^2\omega_0^2} \sum_l \left(\frac{n}{2} \frac{l+1}{2} \delta_{n-1,l} + \frac{n+1}{2} \frac{l}{2} \delta_{n+1,l} \right) = \frac{\hbar^2}{m^2\omega_0^2} \left(\frac{n}{2} \frac{n}{2} + \frac{n+1}{2} \frac{n+1}{2} \right)$$

$$= \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{m^2\omega_0^2} (2n^2 + 2n + 1) =$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m^2\omega_0^2} (n^2 + n + 1).$$

Таким чином перша поправка до енергії:

$$E_n{}^{(1)} = \frac{\beta}{2} \frac{\hbar^2}{m^2\omega_0^2} (n^2 + n + 1).$$

Шукаємо другу поправку до енергії

$$E_n{}^{(2)} = \sum_m \frac{|V_{nm}|^2}{E_m^0 - E_n^0} = \frac{\alpha}{\hbar\omega}\sum_m \frac{\left|(x^3)_{mn}\right|^2}{n-m} = -\frac{15}{4}\alpha^2\frac{\hbar^2}{m^3\omega_0^4}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right).$$

Задача №4.

Атом водню знаходиться в однорідному електричному полі з напруженістю ε,напрямлений вздовж осі *Oz*. Знайти розщеплення рівня енергії, що характеризується головним квантовим числом *n=2* (ефект Штарка).

Розв'язування:

1. Запишемо вираз для хвильової функції

$$\psi^0_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = f_{n,l}Y_{l,m}(\theta,\varphi).$$

Для енергії

$$E_n{}^{(0)} = -\frac{I^2me^4}{2\hbar^2n^2}.$$

2. Оператор збурення можна знайти із формули:

$$\hat{V} = -e(\vec{\varepsilon}\vec{r}) = |e|\varepsilon z = |e|r\varepsilon\, cos\theta$$

3. Для нульового наближення хвильової функції:

$$\psi^0 = \begin{cases} \psi_1^0 = f_{20}Y_{00}; \\ \psi_2^0 = f_{21}Y_{10}; \\ \psi_3^0 = f_{21}Y_{11}; \\ \psi_4^0 = f_{21}Y_{1-1}. \end{cases}$$

Ми маємо справу з виродженням, тому треба розв'язати секулярне рівняння.

$$\begin{vmatrix} V_{11}-E' & V_{12} & V_{13} & V_{14} \\ V_{21} & V_{22}-E' & V_{23} & V_{24} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33}-E' & V_{34} \\ V_{41} & V_{42} & V_{43} & V_{44}-E' \end{vmatrix} = 0.$$

Тоді:

$$\psi_1^0 = \frac{2-\rho}{4\sqrt{2\pi a^3}}e^{-\frac{\rho}{2}};\ \psi_2^0 = \frac{\rho e^{-\frac{\rho}{2}}}{8\sqrt{\pi a^3}}\sqrt{2}cos\theta;\ \psi_{3,4}^0 = \frac{\rho e^{-\frac{\rho}{2}}}{8\sqrt{\pi a^3}}\left(\pm sin\theta e^{\pm i\varphi}\right).$$

Відмінними від нуля будуть лише матричні елементи $V_{12} = V_{21}$

$$V_{12} = V_{21} = |e|\varepsilon\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} \rho e^{-\frac{\rho}{2}} r cos\theta(2-\rho)e^{-\frac{\rho}{2}}cos\theta\frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}}\frac{\sqrt{2}}{8\sqrt{\pi a^3}}sin\theta\, d\theta r^2 dr d\varphi = -3|e|\varepsilon a.$$

Тут використано, що

$$\int_0^\infty e^{-ax}x^n dx = \frac{n!}{a^n}$$

Тобто секулярне рівняння

$$\begin{vmatrix} -E' & -3|e|\varepsilon a & 0 & 0 \\ -3|e|\varepsilon a & -E' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E' \end{vmatrix} = 0,$$

або

$$\begin{vmatrix} -E' & -3|e|\varepsilon a \\ -3|e|\varepsilon a & -E' \end{vmatrix} \begin{vmatrix} -E' & 0 \\ 0 & -E' \end{vmatrix} = 0,$$

звідси

$$E^{(1)^2}\left(E^{(1)^2} - (3|e|\varepsilon a)^2\right) = 0,$$

тоді корені

$$E_{1,2}^{(1)} = 0;\ E_3^{(1)} = -3|e|\varepsilon a;\ \ E_4^{(1)} = 3|e|\varepsilon a.$$

Задача №5

Плоский заряджений ротатор поміщений в одномірному магнітному полі, індукція якого B перпендикулярна площині обертання. Застосовуючи теорію збурень, знайти в першому наближенні енергію і хвильові функції стаціонарних станів. Заряд ротатора e, маса m_0.

Розв'язування:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = \frac{1}{2m_0}\left(\hat{\vec{p}}^2 - \frac{e}{c}\left(\vec{P}\vec{A} - \vec{A}\vec{P}\right) + \frac{e^2}{c^2}\vec{A}^2\right);$$

1) $\left[\vec{p}\vec{A}\right] = -i\hbar\left[\vec{I}\vec{A}\right] = i\hbar\left[\vec{I}\vec{A} - \vec{A}\vec{I}\right]\varphi = -i\hbar\ \left(\nabla\vec{A}\varphi + \vec{A}I\varphi - \vec{A}\left(\vec{\nabla}\varphi\right)\right) = -i\hbar\ div\vec{A} = 0.$

Так як для стаціонарних полів

$$div\vec{A} = 0,$$

тому

$$\vec{P}\vec{A} = -\vec{A}\vec{P}.$$

Тоді

$$\hat{\hat{H}} = \frac{1}{2m_0}\left(\hat{p}^2 - 2\frac{e}{c}\vec{A}\vec{P}\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + \frac{ei\hbar}{m_0}\vec{A}\,\vec{I} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{e}{m_0}\vec{A}\vec{P}.$$

Для стаціонарних полів можна вибрати:

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\left[\vec{B}\vec{r}\right],$$

тому

$$\left(\hat{\vec{A}}, \hat{\vec{P}}\right) = \frac{1}{2}\left(\left[\vec{B}\vec{r}\right]\hat{\vec{P}}\right) = \frac{1}{2}\left(\vec{B}\left[\vec{r}\hat{\vec{P}}\right]\right) = \frac{1}{2}B_z\hat{L}_z;\ \vec{B} = \vec{B}(0,0,B_z).$$

Отже,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{2m_0c}B_z\hat{L}_z = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{ei\hbar}{2m_0c}B_z\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Оператор збурення

$$\hat{V} = \frac{ei\hbar}{2m_0c}B_z\frac{\partial}{\partial\varphi};$$

3)

$$E^{(1)} = V_{mm} = \int_0^{2\pi} \psi_m^{(0)^*} \hat{V}\, \psi_m^{(0)} d\varphi = \frac{ei\hbar B_z}{2m_0c}\frac{1}{2\pi}\int e^{-im\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}e^{im\varphi}d\varphi = \frac{i\hbar B_z}{2m_0c}m,$$

тобто

$$E^{(1)} = \frac{i\hbar}{2m_0c}mB_z.$$

7. ТЕОРІЯ АТОМІВ І МОЛЕКУЛ

План

1. Вступ.
2. Періодична система елементів Менделєєва.
3. Заповнення оболонок в атомах.
4. Природа хімічних сил.
5. Рентгенівське випромінювання.

Мета - дати принцип побудови періодичної таблиці елементів. Заповнення енергетичних станів згідно принципу Паулі, дати поняття оболонки атома, розкрити природу хімічних сил.

В процесі проведення заняття студент повинен:

уміти -визначати способи заповнення оболонок атомів, розуміти принцип побудови періодичної системи елементів Менделєєва.

Приклади розв'язування задач

Задача №1:

Записати повні хвильові функції орто- і парастанів для атомів (або іонів) з електронною конфігурацією $1S^1 2S^2$.

Розв'язування:

$$\psi_{пара} = \Phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_\alpha\left(S_z^{(1)}, S_z^{(2)}\right);$$

$$(\psi_{орто})_k = \Phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_s{}^k\left(S_z^{(1)}, S_z^{(2)}\right),$$

де $k = 1,2,3$.

При запису $\psi_{пара}$ *і* $\psi_{орто}$ використовують позначення:

$$\Phi_{S,A}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_{1S}(\vec{r}_1)\Phi_{2S}(\vec{r}_2) \pm \Phi_{1S}(\vec{r}_2)\Phi_{2S}(\vec{r}_1)];$$

$$\chi_{S,a}{}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(S_z^{(1)})\beta(S_z^{(2)}) \pm \alpha(S_z^{(2)})\beta(S_z^{(1)});\right]$$

$$\chi_S{}^2 = \alpha(S_z^{(1)})\alpha(S_z^{(2)});$$

$$\chi_S{}^3 = \beta(S_z^{(1)})\beta(S_z^{(2)}),$$

де α і β – спінові хвильові функції двох можливих станів частинки зі спіном $\frac{1}{2}$.

Задача №2.

Записати електронні конфігурації атомів аргону (Z=18), криптону (Z=36), паладію (Z=46), цезію (Z=55).

Розв'язування:

$$Ar - 1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6;$$

$$_{36}Kr - 1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6 3D^{10} 4S^2 4P^6;$$

$$_{46}Pd - 1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6 3D^{10} 4S^2 4P^6 4D^{10};$$

$$_{55}Cs - 1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6 3D^{10} 4S^2 4P^6 4D^{10} 5S^2 5P^6 6S^1.$$

Задача №3.

Обчислити множник Ланде для кількох можливих станів.

Розв'язування:

$$g = \left\{1 + \frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}\right\};$$

1) $n = 1, l = 0; \Rightarrow 1S$ *стан* $l_s = \frac{1}{2}$, *тоді* $j = l + l_s = \frac{1}{2}$, *тому стан* $S_{\frac{1}{2}}$

$$g = 1 + \frac{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)+0}{2\frac{13}{22}} = 1 + \frac{\frac{3}{4}+\frac{3}{4}}{2\frac{3}{4}} = 1 + 1 = 2;$$

2) $n = 2, l = 1; j = |l - l_s| = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$, *тому* $2P_{\frac{1}{2}}$

$$g = 1 + \frac{\frac{3}{4}+\frac{3}{4}-1\cdot 2}{2\frac{3}{4}} = 1 + \frac{\frac{3}{2}-2}{\frac{3}{2}} = 1 - \frac{\frac{1}{2}}{\frac{3}{2}} = 1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3};$$

3) $n = 2, l = 1; j = l + l_s = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$, *тому* $2P_{\frac{3}{2}}$

$$g = 1 + \frac{\frac{3}{2}\frac{5}{2}+\frac{3}{4}-2}{2\frac{15}{4}} = 1 + \frac{\frac{9}{2}-2}{\frac{15}{2}} = 1 - \frac{\frac{5}{2}}{\frac{15}{2}} = 1 + \frac{1}{3} = \frac{4}{3};$$

4) $n = 3, l = 2; j = 2 - \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$.

ПРИКЛАДИ ВАРІАНТІВ КОНТРОЛЬНИХ РОБІТ

Варіант 1.

1. Умова ортогональності власних хвильових функцій.
2. Обчислити $[x_i, \hat{P}_k], i, k = 1,2,3$.
3. Знайти власні хвильові функції та власні значения оператора $\hat{A} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} + a\ sin\varphi$.

Варіант 2.

1. Власні хвильові функції та власні значення.
2. Чи можна одночасно виміряти імпульс частники і силу у потенціальному полі?
3. Знайтихвильові функції та власні значения оператора моменту імпульсу.н**.**

Варіант 3.

1. Квантово-механічний гармонійний осцилятор.
2. Провести якісний аналіз стаціонарної теорії збурення при наявності виродження.
3. Задача.

Частинка знаходиться в потенціальній ямі, яка визначається співвідношеннями: $U(x)=0$ при $0<x<l$; $U(x)=U_0$ при $x>l$. Це означає, що ліва стінка ями нескінченно висока. Знайти рівні енергії частинки в ямі. Дослідити якісно, як залежить відстань між рівнями від енергії. Чи скінченне число рівнів? Чи завжди існують зв'язані стани частинки в ямі?

Варіант4.

1. Загальна властивість гамільтоніана, який описує сукупність однакових частинок.
2. Задача. Для лінійного гармонічного осцилятора, загальна енергія якого $(5/2)\hbar\omega$, обчислити середню кінетичну енергію.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Вакарчук І.О. Квантова механіка / І.О.Вакарчук. – Львів.:ЛДУ, 2004. – 580 с.
2. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки/І.Р. Юхновський. – К.:Либідь, 1995. –352 с.
3. Мултановский В.В. Курс теоретической физики. Квантовая механика.:Учеб.пособие для студентов физ.-мат. фак. пед. ин-тов. /В.В. Мултановский, А.С. Василевский. – М.:Просвещение, 1991. – 320 с.
4. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики / Д.И.Блохинцев. – М.:Наука, 1978. – 642 с.
5. МатвеевА.Н. Квантовая механика / А.Н.Матвеев. –М.:Наука,1973. – 346 с.

ДОДАТКИ

Додаток 1

Основні формули векторного аналізу

Наведемо деякі найважливіші поняття і формули векторного аналізу, які використовуються у квантовій механіці. Найважливішими є поняття градієнта скалярної функції, а також дивергенції та ротора векторної функції. Пояснимо коротко ці поняття.

Градієнтом скалярної функції φ (x, y,z), що позначається як grad φ, називається вектор, спрямований у заданій точці вздовж напряму найшвидшого зростання функції *φ (x, y,z),* який чисельно дорівнює просторовій швидкості її зростання у цьому самому напрямі.

У декартовій (ортогональній) системі координат з ортами $\vec{\imath}$, $\vec{\jmath}$, $\vec{k}$ градієнт обчислюється за формулою

$$\text{grad}\ \varphi = \vec{\imath}\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \vec{\jmath}\frac{\partial\varphi}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial\varphi}{\partial z}, \tag{1.1}$$

Використовуючи диференціальний оператор Гамільтона

$$\nabla = \vec{\imath}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{\jmath}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}, \tag{1.2}$$

який читається “ набла ”, можна записати

$$\text{grad}\ \varphi = \nabla\varphi \tag{1.3}$$

У сферичній системі координат оператор ∇ має вигляд, наведений в дод. IV. Зауважимо, що оператор ∇ можна записати також у вигляді похідної по радіусу-вектору $\vec{r}$, тобто

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial\vec{r}} \tag{1.4}$$

тоді

$$\text{grad}\ \varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial\vec{r}} \tag{1.5}$$

Дивергенцією (“розходженням”) вектора $\vec{A}$ *(x, y,z),* що позначається як div $\vec{A}$, називається потік вектора $\vec{A}$ крізь замкнену поверхню S, яка оточує одиничний об’єм у заданій точці:

$$\text{div}\,\vec{A} = \lim_{\Delta V\to 0}\frac{1}{\Delta V}\oint_S A_n dS \tag{1.6}$$

У декартовій системі координат

$$\text{div}\,\vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} \tag{1.7}$$

За допомогою оператора “набла” div $\vec{A}$ записується як скалярний добуток :

$$\text{div}\,\vec{A} = \nabla\vec{A}. \tag{1.8}$$

Ротор (“вихор”) вектора $\vec{A}$ *(x, y,z)* позначається як rot $\vec{A}$. Він є вектором, проекція якого на нормаль до малої площадки ΔS у заданій точці визначається співвідношеннями

$$\text{rot}_n\,\vec{A} = \lim_{\Delta S\to 0}\frac{1}{\Delta S}\oint_L A_l dl\ , \tag{1.9}$$

де L – контур, що обмежує площадку ΔS. Іншими словами, $\text{rot}_n\,\vec{A}$ дорівнює циркуляції вектора $\vec{A}$ вздовж контура, який обмежує площадку одиничної площі. Напрям вектора rot $\vec{A}$ збігається з напрямом нормалі $\vec{n}$ до площадки ΔS, якщо вона орієнтована так, що проекція $\text{rot}_n\,\vec{A}$ має максимальне значення.

У декартовій системі координат

$$\text{rot}\,\vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} = \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right)\vec{i} + \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\vec{j} + \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)\vec{k}. \quad (1.10)$$

Користуючись оператором ∇, можна записати

$$\text{rot}\,\vec{A} = [\nabla\vec{A}], \quad (1.11)$$

де $[\nabla\vec{A}]$ - векторний добуток векторів ∇ і $\vec{A}$.

У деяких випадках, зокрема, якщо функції φ та $\vec{A}$ задано як функції радіуса-вектора, оператор ∇ зручно використовувати у вигляді (1.4); тоді

$$\text{grad}\,\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial\vec{r}}\,;\ \text{div}\,\vec{A} = \frac{\partial}{\partial\vec{r}}\vec{A}\,;\ \text{rot}\,\vec{A} = \left[\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\vec{A}\right] \quad (1.12)$$

Неважко побачити, що формули (1.12) еквівалентні формулам (1.5), (1.7), (1.10).

Наведемо без доведення найважливіші формули векторного аналізу:

$$\text{grad}\,(\varphi\psi) = \nabla(\varphi\psi) = \varphi\nabla\psi + \psi\nabla\varphi = \varphi\text{grad}\psi + \psi\text{grad}\varphi; \quad (1.13)$$

$$\text{div}\,\vec{A}(\varphi\vec{A}) = \nabla(\varphi\vec{A}) = \varphi\nabla\vec{A} + \vec{A}\nabla\varphi = \varphi\text{div}\,\vec{A} + \vec{A}\text{grad}\varphi; \quad (1.14)$$

$$\text{rot}\,(\varphi\vec{A}) = [= \nabla(\varphi\vec{A})] = \varphi[\nabla\vec{A}] + [\nabla\varphi\vec{A}] = \varphi\text{rot}\,\vec{A} + [\text{grad}\varphi\vec{A}]; \quad (1.15)$$

$$\text{div}[\vec{A}\vec{B}] = \nabla[\vec{A}\vec{B}] = \vec{B}[\nabla\vec{A}] - \vec{A}[\nabla\vec{B}] = \vec{B}\text{rot}\,\vec{A} - \vec{A}\text{rot}\,\vec{B}\,; \quad (1.16)$$

$$\text{rot}[\vec{A}\vec{B}] = (\vec{B}\nabla)\vec{A} - (\vec{A}\nabla)\vec{B} + \vec{A}\text{div}\,\vec{B} - \vec{B}\text{div}\,\vec{A}\,; \quad (1.17)$$

$$\text{div grad}\,\varphi = \nabla\nabla\varphi = \nabla^2\varphi = \nabla\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\,; \quad (1.18)$$

$$\text{rot grad}\,\varphi = 0\,; \quad (1.19)$$

$$\text{div rot}\,\vec{A} = 0\ \ ; \quad (1.20)$$

$$\text{rot rot}\,\vec{A} = \text{grad div}\,\vec{A} - \Delta\vec{A}\,. \quad (1.21)$$

До формул (1.13) – (1.21) слід додати ще два інтегральних співвідношення:

теорему Гаусса

$$\oint_S A_n dS = \int_V \text{div}\,\vec{A}\,dV\,; \quad (1.22)$$

теорему Стокса

$$\oint_L A_l dl = \int_S \text{rot}_n\,\vec{A}\,dS. \quad (1.23)$$

Додаток 2

Дельта-функція Дірака

Дельта-функція Дірака визначається виразами

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty, & x = x_0 \\ 0, & x \neq x_0 \end{cases};$$

$$\int_a^b \delta(x - x_0)\,dx = 1, \quad a < x_0 < b;$$

$$\int_a^b f(x)\delta(x - x_0)\,dx = f(x_0), \quad a < x_0 < b;$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(a)$$

***Додаток* 3**

Інтеграл Ф'урє

Інтеграл Ф'урє має вигляд

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk,$$

якщо $f(x)$ – дійсна функція, а її модуль $|f(x)|$ інтегрований на інтервалі $-\infty < x < +\infty$

Функція

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dk$$

Називається перетворенням Фур'є (фурє-образом).

Додаток 4

Деякі визначені інтеграли

а) $$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, \quad n = 0, 1, 2 \dots$$

б) Інтеграли Пуассона

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax^2} dx = \begin{cases} \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \ldots \cdot (n-1)}{2^{\frac{n}{2}+1}} \sqrt{\frac{\pi}{a^{n+1}}}, & n = 0, 2, 4, \dots \\ \frac{\frac{n-1}{2}!}{2a^{\frac{n+1}{2}}}, & n = 1, 3, \dots \end{cases},$$

Зокрема,

$$I_1 = \int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}, \qquad I_2 = \int_0^{\infty} x e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a},$$

$$I_3 = \int_0^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}, \qquad I_4 = \int_0^{\infty} x^3 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a^2},$$

Додаток 5

ОСНОВНІ ФІЗИЧНІ КОНСТАНТИ

Назва	Символ і значення в СІ
Нормальне прискорення вільного падіння	$g = 9{,}81\ \text{м/с}^2$
Гравітаційна стала	$G = 6{,}67259 \cdot 10^{-11}\ \text{м}^3/(\text{кг} \cdot \text{с}^{-2})$
Універсальна газова стала	$R = 8{,}314510\ \text{Дж/К} \cdot \text{моль})$
Молярний об'єм ідеального газу за нормальних умов (T=273,15 K, p=101325 Па)	$V_0 = \frac{RT}{p} = 22{,}41410 \cdot 10^{-3}\,\text{м}^3/\text{моль}$
Число Авогадро	$N_A = 6{,}0221367 \cdot 10^{23}\text{моль}^{-1}$
Число Лошмідта	$n_0 = \frac{N_A}{V_0} = 2{,}686763 \cdot 10^{25}\text{м}^{-3}$

Стала Больцмана	$k = \dfrac{R}{N_A} = 1{,}380658 \cdot 10^{-23}$ Дж/К
Число Фарадея	$F = N_A \cdot e = 96485{,}309$ Кл/моль
Швидкість світла в вакуумі	$c = 299792458$ м/с
Магнітна стала (абсолютна магнітна проникність)	$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Н/А^2
Електрична стала (абсолютна діелектрична проникність)	$\varepsilon_0 = (\mu_0 c^2)^{-1} = 8{,}85418 \cdot 10^{-12}$ Ф/м
Атомна одиниця маси	1 а.о.м. $= 1{,}660540 \cdot 10^{-27}$ кг
Елементарний заряд	$e = 1{,}602177 \cdot 10^{-19}$ Кл
Маса спокою електрона	$m_e = 9{,}109389 \cdot 10^{-31}$ кг
в атомних одиницях маси	$m_e = 5{,}485799 \cdot 10^{-4}$ а.о.м.
Енергія спокою електрона	$m_e c^2 = 0{,}510999$ МеВ
Питомий заряд електрона	$-e/m_e = -1{,}758819 \cdot 10^{-11}$ Кл/кг
Класичний радіус електрона	$r_e = 2{,}817941 \cdot 10^{-15}$ м
Маса спокою протона	$m_p = 1{,}672623 \cdot 10^{-27}$ кг
в атомних одиницях маси	$m_p = 1{,}007726$ а.о.м.
Енергія спокою протона	$m_p c^2 = 938{,}27231$ МеВ
Питомий заряд протона	$e/m_p = 9{,}578831 \cdot 10^{7}$ Кл/кг
Відношення маси протона до маси електрона	$m_p/m_e = 1836{,}152701$
Маса спокою нейтрона	$m_n = 1{,}674929 \cdot 10^{-27}$ кг
в атомних одиницях маси	$m_n = 1{,}008665$ а.о.м.
Енергія спокою нейтрона	$m_n c^2 = 939{,}56563$ МеВ
Відношення маси нейтрона до маси електрона	$m_n/m_e = 1838{,}683662$
Відношення маси нейтрона до маси протона	$m_n/m_p = 1{,}001378$
Стала Планка	$h = 6{,}626075 \cdot 10^{-34}$ Дж $\cdot$ с
Стала Стефана-Больцмана	$\sigma = 5{,}67051 \cdot 10^{-8}$ Вт$/(m^2 \cdot K^4)$
Стала в законі зміщення Віна	$b = 2{,}897756 \cdot 10^{-3}$ м $\cdot$ К
Стала Рідберга	$R_\infty = 10973731{,}534$ м$^{-1}$
Комптонівська довжина хвилі:	
електрона	$\lambda_e = h/m_e c = 2{,}426310 \cdot 10^{-12}$ м
протона	$\lambda_p = h/m_p c = 1{,}321410 \cdot 10^{-15}$ м
нейтрона	$\lambda_n = h/m_n c = 1{,}319591 \cdot 10^{-15}$ м
Радіус першої борівської орбіти	$r_1 = 0{,}529177 \cdot 10^{-10}$ м
Магнетон Бора	$\mu_B = e\hbar/2m_e = 9{,}27 \cdot 10^{-24}$ Дж/Тл
Ядерний магнетон	$\mu_N = e\hbar/2m_p = 5{,}05 \cdot 10^{-27}$ Дж/Тл
Магнітний момент електрона	$\mu_e = 928{,}47701 \cdot 10^{-26}$ Дж/Тл
в магнетонах Бора	$\mu_e/\mu_B = 1{,}001159652$
в ядерних магнетонах	$\mu_e/\mu_N = 1838{,}282000$
Магнітний момент протона	$\mu_p = 1{,}410607 \cdot 10^{-26}$ Дж/Тл
в магнетонах Бора	$\mu_p/\mu_B = 1{,}521032 \cdot 10^{-3}$
в ядерних магнетонах	$\mu_p/\mu_N = 2{,}792847$
Магнітний момент нейтрона	$\mu_n = 0{,}996237 \cdot 10^{-26}$ Дж/Тл
в магнетонах Бора	$\mu_n/\mu_B = 1{,}041875 \cdot 10^{-3}$

ПЕРІОДИЧНА СИСТЕМА ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ

Періоди	Групи елементів									
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII		
1	H 1 $1s^1$ Гідроген 1,0079							He 2 $1s^2$ Гелій 4,0026	Символ, Протонне число O 8 $[He]2s^22p^4$ Оксиген 15,999 Відносна атомна маса Назва елемента Електронна формула	
2	Li 3 $[He]2s^1$ Літій 6,941	Be 4 $[He]2s^2$ Берилій 9,0122	B 5 $[He]2s^22p^1$ Бор 10,811	C 6 $[He]2s^22p^2$ Карбон 12,011	N 7 $[He]2s^22p^3$ Нітроген 14,007	O 8 $[He]2s^22p^4$ Оксиген 15,999	F 9 $[He]2s^22p^5$ Флуор 18,998	Ne 10 $[He]2s^22p^6$ Неон 20,179		
3	Na 11 $[Ne]3s^1$ Натрій 22,990	Mg 12 $[Ne]3s^2$ Магній 24,305	Al 13 $[Ne]3s^23p^1$ Алюміній 26,982	Si 14 $[Ne]3s^23p^2$ Силіцій 28,086	P 15 $[Ne]3s^23p^3$ Фосфор 30,974	S 16 $[Ne]3s^23p^4$ Сульфур 32,066	Cl 17 $[Ne]3s^23p^5$ Хлор 35,453	Ar 18 $[Ne]3s^23p^6$ Аргон 39,948		
4	K 19 $[Ar]4s^1$ Калій 39,098	Ca 20 $[Ar]4s^2$ Кальцій 40,078	21 Sc $[Ar]3d^14s^2$ Скандій 44,956	22 Ti $[Ar]3d^24s^2$ Титан 47,88	23 V $[Ar]3d^34s^2$ Ванадій 50,942	24 Cr $[Ar]3d^54s^1$ Хром 51,996	25 Mn $[Ar]3d^54s^2$ Манган 54,938	26 Fe $[Ar]3d^64s^2$ Ферум 55,847	27 Co $[Ar]3d^74s^2$ Кобальт 58,933	28 Ni $[Ar]3d^84s^2$ Нікель 58,69
	29 Cu $[Ar]3d^{10}4s^1$ Купрум 63,546	30 Zn $[Ar]3d^{10}4s^2$ Цинк 65,39	Ga 31 $[Ar]3d^{10}4s^24p^1$ Галій 69,723	Ge 32 $[Ar]3d^{10}4s^24p^2$ Германій 72,59	As 33 $[Ar]3d^{10}4s^24p^3$ Арсен 74,922	Se 34 $[Ar]3d^{10}4s^24p^4$ Селен 78,96	Br 35 $[Ar]3d^{10}4s^24p^5$ Бром 79,904	Kr 36 $[Ar]3d^{10}4s^24p^6$ Криптон 83,80		
5	Rb 37 $[Kr]5s^1$ Рубідій 85,468	Sr 38 $[Kr]5s^2$ Стронцій 87,62	39 Y $[Kr]4d^15s^2$ Ітрій 88,906	40 Zr $[Kr]4d^25s^2$ Цирконій 91,224	41 Nb $[Kr]4d^45s^1$ Ніобій 92,906	42 Mo $[Kr]4d^55s^1$ Молібден 95,94	43 Tc $[Kr]4d^55s^2$ Технецій (99)	44 Ru $[Kr]4d^75s^1$ Рутеній 101,07	45 Rh $[Kr]4d^85s^1$ Родій 102,91	46 Pd $[Kr]4d^{10}5s^0$ Паладій 106,42
	47 Ag $[Kr]4d^{10}5s^1$ Аргентум 107,87	48 Cd $[Kr]4d^{10}5s^2$ Кадмій 112,41	In 49 $[Kr]4d^{10}5s^25p^1$ Індій 114,82	Sn 50 $[Kr]4d^{10}5s^25p^2$ Станум 118,71	Sb 51 $[Kr]4d^{10}5s^25p^3$ Стибій 121,75	Te 52 $[Kr]4d^{10}5s^25p^4$ Телур 127,60	I 53 $[Kr]4d^{10}5s^25p^5$ Йод 126,90	Xe 54 $[Kr]4d^{10}5s^25p^6$ Ксенон 131,29		
6	Cs 55 $[Xe]6s^1$ Цезій 132,91	Ba 56 $[Xe]6s^2$ Барій 137,33	57 *La $[Xe]5d^16s^2$ Лантан 138,91	72 Hf $[Xe]4f^{14}5d^26s^2$ Гафній 178,49	73 Ta $[Xe]4f^{14}5d^36s^2$ Тантал 180,95	74 W $[Xe]4f^{14}5d^46s^2$ Вольфрам 183,85	75 Re $[Xe]4f^{14}5d^56s^2$ Реній 186,21	76 Os $[Xe]4f^{14}5d^66s^2$ Осмій 190,2	77 Ir $[Xe]4f^{14}5d^76s^2$ Іридій 192,22	78 Pt $[Xe]4f^{14}5d^96s^1$ Платина 195,08
	79 Au $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^1$ Аурум 196,97	80 Hg $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^2$ Меркурій 200,59	Tl 81 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$ Талій 204,38	Pb 82 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^2$ Плюмбум 207,2	Bi 83 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$ Бісмут 208,98	Po 84 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^4$ Полоній (209)	At 85 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^5$ Астат (210)	Rn 86 $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^6$ Радон (222)		
7	Fr 87 $[Rn]7s^1$ Францій (223)	Ra 88 $[Rn]7s^2$ Радій 226,03	89 **Ac $[Rn]6d^17s^2$ Актиній (227)	104 Rf $[Rn]5f^{14}6d^27s^2$ Резерфордій (261)	105 Db $[Rn]5f^{14}6d^37s^2$ Дубній (262)	106 Sg $[Rn]5f^{14}6d^47s^2$ Сиборгій (263)	107 Bh $[Rn]5f^{14}6d^57s^2$ Борій (262)	108 Hs $[Rn]5f^{14}6d^67s^2$ Гасій (265)	109 Mt $[Rn]5f^{14}6d^77s^2$ Майтнерій (266)	110 Uun $[Rn]5f^{14}6d^87s^2$ Унуннілій
Вищі оксиди	R_2O	RO	R_2O_3	RO_2	R_2O_5	RO_3	R_2O_7	RO_4		
Леткі сполуки з Гідрогеном				RH_4	RH_3	H_2R	HR			

*Лантаноїди

58 Ce 140,12 Церій $[Xe]4f^25d^06s^2$	59 Pr 140,91 Празеодим $[Xe]4f^35d^06s^2$	60 Nd 144,24 Неодим $[Xe]4f^45d^06s^2$	61 Pm (147) Прометій $[Xe]4f^55d^06s^2$	62 Sm 150,36 Самарій $[Xe]4f^65d^06s^2$	63 Eu 151,96 Європій $[Xe]4f^75d^06s^2$	64 Gd 157,25 Гадоліній $[Xe]4f^75d^16s^2$	65 Tb 158,93 Тербій $[Xe]4f^95d^06s^2$	66 Dy 162,50 Диспрозій $[Xe]4f^{10}5d^06s^2$	67 Ho 164,93 Гольмій $[Xe]4f^{11}5d^06s^2$	68 Er 167,26 Ербій $[Xe]4f^{12}5d^06s^2$	69 Tm 168,93 Тулій $[Xe]4f^{13}5d^06s^2$	70 Yb 173,04 Ітербій $[Xe]4f^{14}5d^06s^2$	71 Lu 174,97 Лютецій $[Xe]4f^{14}5d^16s^2$

**Актиноїди

90 Th 232,04 Торій $[Rn]5f^06d^27s^2$	91 Pa (231) Протактиній $[Rn]5f^26d^17s^2$	92 U 238,03 Уран $[Rn]5f^36d^17s^2$	93 Np (237) Нептуній $[Rn]5f^46d^17s^2$	94 Pu (244) Плутоній $[Rn]5f^66d^07s^2$	95 Am (243) Америцій $[Rn]5f^76d^07s^2$	96 Cm (247) Кюрій $[Rn]5f^76d^17s^2$	97 Bk (247) Берклій $[Rn]5f^96d^07s^2$	98 Cf (251) Каліфорній $[Rn]5f^{10}6d^07s^2$	99 Es (252) Ейнштейній $[Rn]5f^{11}6d^07s^2$	100 Fm (257) Фермій $[Rn]5f^{12}6d^07s^2$	101 Md (258) Менделевій $[Rn]5f^{13}6d^07s^2$	102 No (259) Нобелій $[Rn]5f^{14}6d^07s^2$	103 Lr (260) Лоуренсій $[Rn]5f^{14}6d^17s^2$

s-елементи *p-елементи* *d-елементи* *f-елементи*

З М І С Т

Навчально- методичне видання

Основи квантової механіки

Методичні рекомендаці для студентів фізико-математичного факультету

Укладачі:
Іванко Володимир Вікторович
Саєнко Олег Васильович
Дідора Тарас Дмитрович

Комп'ютерна верстка
Дизайн обкладинки
Комп'ютерний набір та редагування
В. В. Іванко, Л. І. Інзик
Відповідальний за випуск В. В. Іванко
У виданні використані фото з мережі Інтернет

Підписано до друку 30.08.2021 р.
Формат 60х84/16. Папір офсетний.
Гарнітура Times New Roman. Друк офсетний.
Ум.-друк. арк. 6,98. Обл.-вид. арк. 9,73
Тираж100 прим. Зам. №34

Макетовано в ПНПУ імені В.Г. Короленка,
вул. Остроградського, 2, м. Полтава, 36003

Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи
до державного реєстру серія ДК №3817 від 01.07.2010 р.