

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова

Е. Н. Нарынская

Методические указания к решению
задач по квантовой механике

Учебно-методическое пособие

Ярославль
ЯрГУ
2019

УДК 531:530.145(075.8)
ББК В315я73
Н30

Рекомендовано

*Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного издания. План 2019 года*

Нарынская, Елена Николаевна.

Н30 Методические указания к решению задач по квантовой механике : учебно-методическое пособие / Е. Н. Нарынская ; Яросл. гос. ун-т им. П. Г. Демидова. – Ярославль : ЯрГУ, 2019. – 56 с.

Данное пособие состоит из четырех разделов, в которых рассматриваются задачи на использование основных понятий аппарата квантовой механики. Материал каждого раздела включает в себя краткое изложение теоретического материала по заданной теме, который затем иллюстрируется подробным решением типичных задач. В заключение каждого раздела приводятся задания для самостоятельного решения.

Пособие предназначено для студентов, изучающих дисциплины «Квантовая механика», «Квантовая теория», «Теоретическая физика».

УДК 531:530.145(075.8)
ББК В315я73

©ЯрГУ, 2019

1. Правило квантования Бора-Зоммерфельда

Правило квантования Бора-Зоммерфельда позволяет найти спектр энергии системы, совершающей периодическое движение. Данное правило являлось основным инструментом квантовой механики на этапе ее становления – когда для описания движения системы использовались формулы классической физики, но при этом на само движение накладывалось условие, по сути противоречащее классическому подходу, а именно условие квантования движения, согласно которому разрешены не все возможные состояния системы, а только соответствующие некоторому правилу. Однако, несмотря на имеющуюся парадоксальность – использование формул классической физики для описания квантованных систем, – правило квантования Бора-Зоммерфельда позволяет получить правильный ответ для некоторых основных задач квантовой механики.

Для формулировки правила квантования Бора-Зоммерфельда вспомним определение адиабатического инварианта I_q – величины, которая в случае периодического движения остается постоянной при медленном (адиабатическом) изменении параметров системы:

$$I_q = \oint \mathcal{P}_q dq = \text{const.} \quad (1.1)$$

Здесь q – обобщенная координата, \mathcal{P}_q – соответствующий ей обобщенный импульс, связанный с функцией Лагранжа данной задачи соотношением:

$$\mathcal{P}_q = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}. \quad (1.2)$$

Интегрирование в (1.1) проводится по полному периоду изменения координаты q .

В классической физике инвариант I_q может принимать любые постоянные значения. В квантовой механике, согласно правилу квантования Бора-Зоммерфельда, адиабатический инвариант I_q квантуется и спектр его значений определяется формулой:

$$\oint \mathcal{P}_q dq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (1.3)$$

где $\hbar = h/2\pi$, h – постоянная Планка, n – квантовое число, принимающее только целочисленные значения: $n = 0, 1, 2, \dots$

Выражение для правила квантования (1.3) существенно упрощается в случае одномерного периодического движения. Рассмотрим в качестве примера периодическое движение частицы массы m вдоль оси x с частотой ω .

В случае одномерного движения по оси x в качестве обобщенной координаты удобно выбрать координату x . С учетом (1.2) находим соответствующий ей обобщенный импульс \mathcal{P}_x :

$$\mathcal{P}_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial}{\partial \dot{x}} \left(\frac{m\dot{x}^2}{2} - U(x) \right) = m\dot{x} = p_x, \quad (1.4)$$

где $U(x)$ – потенциальная энергия частицы. Как видно из (1.4), в данном случае обобщенный импульс \mathcal{P}_x совпадает с кинетическим импульсом частицы p_x , который может быть выражен через полную энергию частицы E и ее потенциальную энергию $U(x)$:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + U(x) \quad \rightarrow \quad p_x = \pm \sqrt{2m(E - U(x))}. \quad (1.5)$$

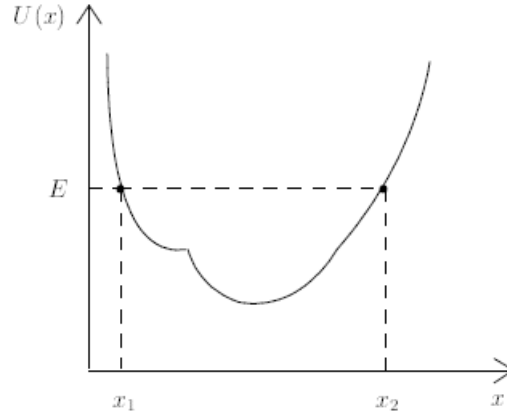


Рис. 1. График потенциальной энергии при одномерном периодическом движении вдоль оси x

Потенциальная энергия в случае периодического движения схематично изображена на рис.1. Как видно из графика, тело совершает циклическое движение в потенциальной яме с границами, расположенными в точках $x = x_1$ и $x = x_2$. Точки x_1

и x_2 являются точками поворота, в которых скорость тела равна нулю и, следовательно, полная энергия в этих точках равна потенциальной. Интегрирование по всему периоду изменения координаты x можно разбить на два этапа: от x_1 до x_2 и в обратном направлении – от x_2 к x_1 :

$$\oint \mathcal{P}_x dx = \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{P}_x dx + \int_{x_2}^{x_1} \mathcal{P}_x dx. \quad (1.6)$$

Подставляя выражение для импульса (1.5) в правую часть выражения (1.6) и учитывая, что при движении по оси ($x_1 \rightarrow x_2$) проекция импульса положительная, а при движении против оси ($x_2 \rightarrow x_1$) – отрицательная, получаем

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx - \int_{x_2}^{x_1} \sqrt{2m(E - U(x))} dx = \\ = 2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx. \end{aligned}$$

Следовательно, правило квантования Бора-Зоммерфельда для одномерного периодического движения может быть записано в виде:

$$2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (1.7)$$

где точки x_1 и x_2 определяются из условия:

$$U(x_1) = U(x_2) = E.$$

Следует отметить, что формула (1.7) справедлива для любого периодического движения с произвольной потенциальной энергией $U(x)$, которая определяет характер движения. Удобство данной формулы состоит в том, что в ней в явном виде выделена энергия E , спектр которой и требуется найти.

Задание 1.1. Используя правило квантования Бора-Зоммерфельда, найти уровни энергии одномерного гармонического осциллятора.

Решение

Чтобы проквантовать движение одномерного гармонического осциллятора, нужно подставить в формулу (1.7) в качестве $U(x)$ потенциальную энергию в виде:

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (1.8)$$

В силу того что потенциальная энергия (1.8) – четная функция ($U(x) = U(-x)$), пределы интеграла в левой части выражения (1.7) будут симметричными:

$$2 \int_{-x_1}^{x_1} \sqrt{2m \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)} dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

или

$$4 \int_0^{x_1} \sqrt{2m \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)} dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.9)$$

Точку x_1 найдем из условия:

$$E = U(x_1) = \frac{m\omega^2 x_1^2}{2} \quad \rightarrow \quad x_1 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}.$$

Вычисление интеграла в (1.9) приводит к следующему результату:

$$\frac{2E\pi}{\omega} = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

откуда для энергетического спектра одномерного гармонического осциллятора окончательно получаем

$$E \equiv E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (1.10)$$

где $n = 0, 1, \dots$

Таким образом, в квантовой механике энергия одномерного гармонического осциллятора принимает дискретный ряд значений (1.10), тогда как в классической физике энергия осциллятора

может принимать любые значения, в том числе и сколь угодно близкие к нулю. При этом низшее энергетическое состояние квантового осциллятора не является состоянием покоя, так как наименьшая энергия при $n = 0$ отлична от нуля и определяется выражением

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

Задание 1.2. Найти уровни энергии частицы массы m с зарядом q , двигающейся в постоянном однородном магнитном поле.

Решение

Введем систему координат так, чтобы магнитное поле было направлено вдоль оси z , при этом вектор индукции магнитного поля будет иметь вид $\vec{B} = (0, 0, B)$, и выберем векторный потенциал магнитного поля в виде $\vec{A} = (0, Bx, 0)$.

В однородном магнитном поле под действием силы Лоренца заряженная частица движется по винтовой линии, навивающейся на линию магнитной индукции. Это винтовое движение можно рассматривать как сумму двух простых движений: равномерного движения вдоль направления поля (в выбранной системе координат – вдоль z -оси) и вращения по окружности в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля (плоскость xOy).

Сила Лоренца, направленная перпендикулярно к скорости частицы, сообщает ей нормальное ускорение:

$$\frac{mv_{\perp}^2}{r} = \frac{|q|}{c} B v_{\perp},$$

где v_{\perp} – перпендикулярная к направлению поля составляющая вектора скорости частицы, r – радиус окружности при движении в плоскости xOy , c – скорость света. Отсюда можно получить частоту вращения частицы в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля:

$$\omega_B = \frac{v_{\perp}}{r} = \frac{|q| B}{mc}. \quad (1.11)$$

Полная энергия заряженной частицы в магнитном поле складывается из кинетической энергии равномерного движения вдоль оси z и энергии вращения в плоскости xOy :

$$E = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{m\omega_B^2 r^2}{2}. \quad (1.12)$$

Движение вдоль направления магнитного поля инфинитное, и проекция импульса p_z может принимать произвольные значения. Вращение же в плоскости xOy периодическое, и, следовательно, энергия этого движения квантуется. Найдём уровни энергии частицы, вращающейся в плоскости xOy , пользуясь правилом квантования Бора-Зоммерфельда.

Вращение частицы по окружности в плоскости xOy можно описать двумя координатами, которые меняются со временем по закону:

$$x = r \cos \omega_B t,$$

$$y = r \sin \omega_B t,$$

где угол $\omega_B t$ меняется от 0 до 2π .

Следовательно, можно построить два адиабатических инварианта, соответствующие двум координатам:

$$I_x = \oint \mathcal{P}_x dx = 2\pi\hbar \left(n_x + \frac{1}{2} \right), \quad (1.13)$$

$$I_y = \oint \mathcal{P}_y dy = 2\pi\hbar \left(n_y + \frac{1}{2} \right). \quad (1.14)$$

Здесь $n_x = 0, 1, \dots$ и $n_y = 0, 1, \dots$ — квантовые числа, определяющие спектр инвариантов I_x и I_y соответственно.

От интегрирования по декартовым переменным в инвариантах I_x и I_y удобно перейти к интегрированию по переменной t , используя соотношения:

$$dx = -\omega_B r \sin \omega_B t dt,$$

$$dy = \omega_B r \cos \omega_B t dt.$$

При этом выражения (1.13) и (1.14) преобразуются к виду:

$$I_x = -\omega_B r \int_0^{2\pi/\omega_B} \mathcal{P}_x \sin \omega_B t dt = 2\pi\hbar \left(n_x + \frac{1}{2} \right), \quad (1.15)$$

$$I_y = \omega_B r \int_0^{2\pi/\omega_B} \mathcal{P}_y \cos \omega_B t dt = 2\pi\hbar \left(n_y + \frac{1}{2} \right). \quad (1.16)$$

Зная функцию Лагранжа частицы с зарядом q в магнитном поле:

$$\mathcal{L} = \frac{mv^2}{2} + \frac{q}{c} (\vec{v}\vec{A}) = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + \frac{q}{c} \dot{y}xB,$$

по правилу (1.2) находим обобщенные импульсы, соответствующие координатам x и y :

$$\mathcal{P}_x = m\dot{x} = -m\omega_B r \sin \omega_B t, \quad (1.17)$$

$$\mathcal{P}_y = m\dot{y} + \frac{q}{c} xB = m\omega_B r \cos \omega_B t + \frac{q}{c} rB \cos \omega_B t. \quad (1.18)$$

Подставляя выражение (1.17) в (1.15), вычислим инвариант I_x :

$$I_x = m\omega_B^2 r^2 \int_0^{2\pi/\omega_B} \sin^2 \omega_B t dt = m\omega_B r^2 \pi.$$

С другой стороны, по правилу квантования Бора-Зоммерфельда

$$m\omega_B r_n^2 \pi = 2\pi \hbar \left(n_x + \frac{1}{2} \right),$$

откуда получаем, что, в отличие от классической физики, в магнитном поле частица может двигаться по окружности только определенного радиуса, спектр значений которого определяется формулой:

$$r_n^2 = \frac{2\hbar}{m\omega_B} \left(n_x + \frac{1}{2} \right). \quad (1.19)$$

Как показывают вычисления инварианта I_y , он равен нулю и, следовательно, не дает никакой дополнительной информации. Поэтому далее переобозначим квантовое число n_x как n , так как задача свелась к одному инварианту I_x , которому соответствует одно квантовое число.

Подставляя результат (1.19) в формулу (1.12), получаем следующее выражение для уровней энергии заряженной частицы в однородном магнитном поле:

$$E_n = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_B \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (1.20)$$

где $n = 0, 1, \dots$

Первое слагаемое в формуле (1.20) соответствует равномерному движению вдоль направления поля. Второе слагаемое описывает дискретный спектр энергии движения в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля. Следует отметить, что по форме оно совпадает с энергией квантового одномерного гармонического осциллятора, совершающего колебания с частотой ω_B .

Задание 1.3. Найти спектр энергетических уровней водородоподобного атома. Рассмотреть случай эллиптических орбит.

Решение

Под водородоподобным атомом понимается атом, в котором вокруг ядра с зарядом Ze вращается один электрон (с зарядом $-e$). Это может быть либо атом водорода ($Z = 1$), либо ионизированный атом гелия ($Z = 2$) и т. д.

Движение электрона по эллиптическим орбитам можно характеризовать двумя обобщенными координатами ρ и φ , которые связаны с декартовыми координатами x и y следующими соотношениями:

$$x = \rho \cos \varphi,$$

$$y = \rho \sin \varphi.$$

Выразим через переменные ρ и φ кинетическую энергию вращения вокруг ядра T и потенциальную энергию кулоновского притяжения U

$$T = \frac{m}{2}(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\varphi}^2),$$

$$U = \frac{-Ze^2}{\rho},$$

и запишем функцию Лагранжа:

$$\mathcal{L} = T - U = \frac{m}{2}(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\varphi}^2) + \frac{Ze^2}{\rho}.$$

Из этого Лагранжиана находим обобщенные импульсы, соответствующие координатам ρ и φ :

$$\mathcal{P}_\rho = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\rho}} = m\dot{\rho},$$

$$\mathcal{P}_\varphi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} = m\rho^2 \dot{\varphi}.$$

Поскольку в данной задаче имеются две степени свободы, можно построить два адиабатических инварианта, которые, согласно правилу квантования Бора-Зоммерфельда, имеют дискретный спектр:

$$I_\varphi = \oint \mathcal{P}_\varphi d\varphi = 2\pi\hbar \left(n_\varphi + \frac{1}{2} \right), \quad (1.21)$$

$$I_\rho = \oint \mathcal{P}_\rho d\rho = 2\pi\hbar \left(n_\rho + \frac{1}{2} \right), \quad (1.22)$$

где $n_\varphi = 0, 1, \dots$ и $n_\rho = 0, 1, \dots$ – квантовые числа, определяющие спектр инвариантов I_φ и I_ρ соответственно.

Вычислим первый инвариант I_φ . Так как обобщенная координата φ является циклической (поскольку не входит явно в функцию Лагранжа), соответствующий ей обобщенный импульс сохраняется:

$$\mathcal{P}_\varphi = m\rho^2 \dot{\varphi} = \text{const.}$$

С учетом этого инвариант I_φ легко вычисляется:

$$I_\varphi = \mathcal{P}_\varphi \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi\mathcal{P}_\varphi.$$

Условие квантования (1.21) приводит к следующему результату:

$$\mathcal{P}_\varphi = \hbar \left(n_\varphi + \frac{1}{2} \right). \quad (1.23)$$

Для того чтобы вычислить инвариант I_ρ , выразим полную энергию электрона в атоме через обобщенные импульсы \mathcal{P}_ρ и \mathcal{P}_φ :

$$E = T + U = \frac{\mathcal{P}_\rho^2}{2m} + U_{eff}(\rho), \quad (1.24)$$

где введена эффективная потенциальная энергия:

$$U_{eff}(\rho) = \frac{\mathcal{P}_\varphi^2}{2m\rho^2} - \frac{Ze^2}{\rho}. \quad (1.25)$$

Первое слагаемое в формуле (1.25) обусловлено центробежными силами, второе – кулоновским притяжением между отрицательно заряженным электроном и положительно заряженным ядром. Графически потенциальная энергия $U_{eff}(\rho)$ представлена на рис. 2. Как видно из этого графика, при $E > 0$ барьер справа ($\rho \rightarrow \infty$) отсутствует и движение электрона становится неограниченным (классический аналог – гиперболические орбиты). Случай отрицательной полной энергии соответствует периодическому движению электрона в ограниченной области внутри атома: при $E = E_3$ орбитой электрона является окружность, при $E > E_3$ электрон движется по эллипсу.

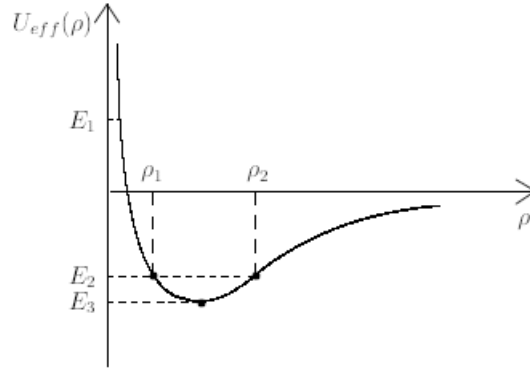


Рис. 2. Эффективная потенциальная энергия электрона в водородоподобном атоме как функция расстояния

Нас интересует движение электрона в области, ограниченной с обеих сторон точками $\rho = \rho_1$ и $\rho = \rho_2$. Точки ρ_1 и ρ_2 – точки поворота, определяющиеся как корни уравнения $E = U_{eff}(\rho)$.

Как видно из выражения (1.24), задача свелась к одномерной задаче по переменной ρ . Поэтому можно воспользоваться результатом, полученным ранее для одномерного периодического движения в потенциальном поле $U(x)$. Выполняя в (1.7) замену $x \rightarrow \rho$, $U(x) \rightarrow U_{eff}(\rho)$, перепишем формулу (1.22) в виде:

$$I_\rho = 2 \int_{\rho_1}^{\rho_2} \sqrt{2m(E - U_{eff}(\rho))} d\rho = 2\pi \hbar \left(n_\rho + \frac{1}{2} \right). \quad (1.26)$$

Подставим в интеграл для I_ρ выражение для эффективной потенциальной энергии (1.25):

$$I_\rho = 2\sqrt{2m} \int_{\rho_1}^{\rho_2} \sqrt{E + \frac{Ze^2}{\rho} - \frac{\mathcal{P}_\varphi^2}{2m\rho^2}} d\rho$$

и сделаем замену переменных:

$$\frac{1}{\rho} = x, \quad dx = -\frac{d\rho}{\rho^2}.$$

В результате получаем

$$I_\rho = 2\sqrt{2m} \int_{1/\rho_2}^{1/\rho_1} \frac{dx}{x^2} \sqrt{E + Ze^2x - \frac{\mathcal{P}_\varphi^2 x^2}{2m}}. \quad (1.27)$$

После интегрирования по частям выражение (1.27) приводится к виду:

$$\begin{aligned} I_\rho = & 2\sqrt{2m} \left(-\frac{1}{x} \sqrt{E + Ze^2x - \mathcal{P}_\varphi^2 x^2/2m} \Big|_{1/\rho_2}^{1/\rho_1} + \right. \\ & \left. + \int_{1/\rho_2}^{1/\rho_1} \frac{dx}{x} \frac{Ze^2 - x\mathcal{P}_\varphi^2/m}{2\sqrt{E + Ze^2x - \mathcal{P}_\varphi^2 x^2/2m}} \right). \end{aligned} \quad (1.28)$$

Первое слагаемое в (1.28) равно нулю, так как подкоренное выражение представляет собой разность полной энергии E и эффективной потенциальной энергии U_{eff} в точках поворота. Второе слагаемое после преобразований может быть записано в форме

$$I_\rho = \sqrt{2m} \left(\frac{Ze^2}{\sqrt{\varepsilon}} - \frac{\sqrt{2}\mathcal{P}_\varphi}{\sqrt{m}} \right) J, \quad (1.29)$$

$$J = \int_{\rho_1}^{\rho_2} \frac{d\rho}{\sqrt{(\rho - \rho_1)(\rho_2 - \rho)}},$$

где введено $\varepsilon = -E > 0$. Для вычисления интеграла J выделим в подкоренном выражении разность квадратов:

$$J = \int_{\rho_1}^{\rho_2} \frac{2d\rho}{\sqrt{(\rho_2 - \rho_1)^2 - (2\rho - \rho_1 - \rho_2)^2}}.$$

После введения новой переменной интегрирования t :

$$t = \frac{2\rho - \rho_1 - \rho_2}{\rho_2 - \rho_1}, \quad t(\rho_1) = -1, \quad t(\rho_2) = 1$$

интеграл преобразуется к более простому виду и легко вычисляется:

$$J = \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} = \arcsin t \Big|_{-1}^{+1} = \pi.$$

Используя этот результат, а также подставляя (1.29) в правило квантования (1.26), получаем

$$\sqrt{2m} \left(\frac{Ze^2}{\sqrt{\varepsilon}} - \frac{\sqrt{2}\mathcal{P}_\varphi}{\sqrt{m}} \right) \pi = 2\pi\hbar \left(n_\rho + \frac{1}{2} \right), \quad (1.30)$$

откуда с учетом квантового значения \mathcal{P}_φ , определяемого выражением (1.23), находим ε :

$$\varepsilon = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2(n_\rho + n_\varphi + 1)^2}. \quad (1.31)$$

Для энергии водородоподобного атома водорода окончательно получаем следующее выражение:

$$E_n = -\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2n^2}, \quad (1.32)$$

где введено квантовое число n , называемое главным квантовым числом, $n = n_\rho + n_\varphi + 1$. Следует отметить, что, в отличие от квантовых чисел n_ρ и n_φ , главное квантовое число изменяется от единицы, $n = 1, 2, \dots$

Задания для самостоятельного решения

1. Проквантовать движение частицы массой m , которая вертикально падает на горизонтальную поверхность и упруго от нее отражается. Найти спектр энергии и допустимые высоты.

2. Определить уровни энергии частицы, находящейся в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, расположенными при $x = 0$ и $x = l$.

3. Найти уровни энергии частицы массы m с зарядом q , движущейся в постоянном однородном магнитном поле. Рассмотреть движение частицы в плоскости xOy в полярных координатах.

4. Найти спектр энергетических уровней водородоподобного атома в случае круговых орбит. Оценить радиус первой орбиты.

2. Операторы в квантовой механике. Алгебра операторов

Оператором \hat{A} называется правило, по которому каждой функции ψ из некоторого класса функций ставится в соответствие другая функция φ , определенная на том же множестве функций, $\varphi = \hat{A}\psi$.

Основная идея применения операторов в квантовой механике заключается в том, что каждой физической величине A ставится в соответствие изображающий ее оператор \hat{A} . При этом среднее значение физической величины A в произвольном состоянии, описываемом волновой функцией ψ , определяется выражением:

$$\overline{A} = \int \psi^*(q) \hat{A} \psi(q) dq. \quad (2.1)$$

Чтобы выполнялся принцип суперпозиции состояний, используемые в квантовой механике операторы должны быть линейными, то есть должны удовлетворять условию:

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2, \quad (2.2)$$

где c_1 и c_2 – произвольные постоянные, ψ_1 и ψ_2 – функции, на которых определен оператор.

Например, оператор возведения в квадрат нелинейный:

$$(\psi_1 + \psi_2)^2 \neq \psi_1^2 + \psi_2^2, \quad (c_1\psi_1)^2 \neq c_1\psi_1^2,$$

а оператор дифференцирования – линейный:

$$\frac{d}{dx}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\frac{d\psi_1}{dx} + c_2\frac{d\psi_2}{dx}.$$

Произведение двух операторов $\hat{A}\hat{B}$ означает, что сначала на функцию ψ действует оператор \hat{B} , в результате этого действия получается новая функция $\varphi = \hat{B}\psi$, на которую затем действует оператор \hat{A} . В общем случае действие оператора $\hat{A}\hat{B}$ может не совпадать с действием оператора $\hat{B}\hat{A}$. Если результат

действия произведения операторов не зависит от порядка множителей $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ (или $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$), то операторы называют коммутирующими. Если $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, то говорят, что операторы не коммутируют между собой. Разность $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ называется коммутатором операторов \hat{A} и \hat{B} и обозначается как

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (2.3)$$

Понятие коммутатора в квантовой механике играет очень важную роль. В частности, можно показать, что если два оператора коммутируют друг с другом, то соответствующие им физические величины могут быть одновременно измерены, то есть иметь одновременно определенное значение. Напротив, если операторы не коммутируют, то соответствующие им величины не могут иметь одновременно определенные значения и, следовательно, не могут быть одновременно измерены.

Из определения (2.3) следует, что коммутатор обладает следующими свойствами:

1. $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$.
2. $[\hat{A}, \hat{A}] = 0$.
3. $[c_1\hat{A}, c_2\hat{B}] = c_1c_2[\hat{A}, \hat{B}]$, где c_1, c_2 – произвольные постоянные.
4. $[\hat{A} + \hat{C}, \hat{B} + \hat{D}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{C}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{D}] + [\hat{C}, \hat{D}]$.

В квантовой механике используются и векторные операторы, примером такого оператора является дифференциальный оператор набла¹

$$\vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z},$$

где $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ – единичные векторы, направленные вдоль осей координат. Действие оператора набла на функцию $\psi(x, y, z)$ выражается формулой

$$\vec{\nabla}\psi = \vec{i} \frac{\partial\psi}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial\psi}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial\psi}{\partial z}.$$

Важную роль в квантовой механике играет понятие эрмитово сопряженного оператора. Оператором, эрмитово сопряженным

¹По умолчанию мы будем использовать декартовую систему координат.

к оператору \hat{A} , называется оператор \hat{A}^+ , удовлетворяющий следующему равенству:

$$\int \psi_1^* (\hat{A} \psi_2) dV = \int (\hat{A}^+ \psi_1)^* \psi_2 dV,$$

где знак « $*$ » означает комплексное сопряжение, под dV понимается совокупность всех переменных, от которых зависят рассматриваемые функции.

Как следует из определения, оператор, эрмитово сопряженный к сумме (разности) операторов, равен сумме (разности) операторов, эрмитово сопряженных к данным

$$(\hat{A} \pm \hat{B} \pm C \dots)^+ = \hat{A}^+ \pm \hat{B}^+ \pm C^+ \dots.$$

Оператор, для которого

$$\hat{A}^+ = \hat{A},$$

называется самосопряженным или эрмитовым оператором. Все операторы, соответствующие реальным физическим величинам, эрмитовы (операторы координаты, импульса, момента импульса и т. д.). Это следует из требования вещественности среднего значения измеряемой величины.

Задание 2.1. Найти оператор, эрмитово сопряженный к оператору произведения $\hat{A}\hat{B}$. Результат выразить через \hat{A}^+ и \hat{B}^+ .

Решение

Согласно определению, эрмитово сопряженным к произведению операторов $\hat{A}\hat{B}$ будет оператор $(\hat{A}\hat{B})^+$, удовлетворяющий равенству:

$$\int \psi_1^* (\hat{A}\hat{B} \psi_2) dV = \int ((\hat{A}\hat{B})^+ \psi_1)^* \psi_2 dV. \quad (2.4)$$

Учитывая, что на функцию ψ_2 сначала действует оператор \hat{B} , в результате чего получается некая новая функция Φ_2 , преобразуем левую часть этого выражения к виду:

$$\int \psi_1^* (\underbrace{\hat{A}\hat{B}\psi_2}_{\Phi_2}) dV = \int (\hat{A}^+ \psi_1)^* \Phi_2 dV = \int (\hat{A}^+ \psi_1)^* (\hat{B} \psi_2) dV.$$

Здесь мы воспользовались определением эрмитово сопряженного оператора для оператора \hat{A} . Обозначая $\hat{A}^+ \psi_1 = \Phi_1$ и применяя то же определение к оператору \hat{B} , получаем

$$\begin{aligned} \int \underbrace{(\hat{A}^+ \psi_1)^*}_{\Phi_1} (\hat{B} \psi_2) dV &= \\ &= \int (\hat{B}^+ \Phi_1)^* \psi_2 dV = \int (\hat{B}^+ \hat{A}^+ \psi_1)^* \psi_2 dV. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Сравнивая этот результат с правой частью равенства (2.4), находим, что

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

Аналогичным образом можно показать, что полученный результат справедлив и для большего числа операторов:

$$(\hat{A}\hat{B} \dots \hat{F})^+ = \hat{F}^+ \dots \hat{B}^+ \hat{A}^+.$$

Задание 2.2. Найти операторы, эрмитово сопряженные к операторам частной производной $\partial/\partial x$, $\partial^2/\partial x^2$, $\partial^n/\partial x^n$.

Решение

По определению эрмитово сопряженного оператора

$$\int \psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial x} dV = \int \left(\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^+ \psi_1 \right)^* \psi_2 dV, \quad (2.6)$$

где $dV = dxdydz$, а интегрирование выполняется по всей области значений координат. Преобразуем интеграл, стоящий слева, к виду, когда оператор производной действует на функцию ψ_1 , а не на функцию ψ_2 . Для этого проинтегрируем его по частям по переменной x :

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial x} dV &= \int dydz \left[\psi_1^* \psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int \left(\frac{\partial \psi_1^*}{\partial x} \right) \psi_2 dx \right] = \\ &= - \int \left(\frac{\partial \psi_1^*}{\partial x} \right) \psi_2 dV, \end{aligned} \quad (2.7)$$

где учтено, что волновая функция должна убывать на бесконечности ($\psi_1(x \rightarrow \pm\infty) = \psi_2(x \rightarrow \pm\infty) = 0$).

Принимая во внимание, что оператор $-\partial/\partial x$ вещественный, исходный интеграл приводится к виду:

$$\int \psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial x} dV = \int \left(-\frac{\partial \psi_1^*}{\partial x} \right) \psi_2 dV = \int \left(-\frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right)^* \psi_2 dV. \quad (2.8)$$

Сравнивая результат (2.8) с определением (2.6), получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^+ = -\frac{\partial}{\partial x},$$

то есть оператор производной не является самосопряженным.

Для того чтобы найти оператор, эрмитово сопряженный к оператору второй производной $\partial^2/\partial x^2$, воспользуемся результатом предыдущей задачи:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)^+ = \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \right)^+ = \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^+ \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^+ = \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right) \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Аналогично для производной n -го порядка

$$\left(\frac{\partial^n}{\partial x^n} \right)^+ = \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^+ \dots \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^+}_{n \text{ раз}} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}. \quad (2.9)$$

Формула (2.9) иллюстрирует, что оператор $\partial^n/\partial x^n$ является эрмитовым, если n – четное, и не является таковым при нечетном n .

Задание 2.3. Доказать эрмитовость оператора

$$\hat{A} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right).$$

Решение

Оператор \hat{A}^+ определяется равенством

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dV = \int (\hat{A}^+ \psi_1)^* \psi_2 dV, \quad (2.10)$$

где $dV = r^2 dr d\Omega$ – элемент объема в сферической системе координат, $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ – элемент телесного угла. Подставим

явный вид оператора \hat{A} в левую часть равенства (2.10) и разобьем исходный интеграл на сумму двух интегралов:

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* (-i\hbar) \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi_2 dV = \\ = -i\hbar \int d\Omega \left[\int_0^\infty \psi_1^* \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial r} \right) r^2 dr + \int_0^\infty \psi_1^* \frac{1}{r} \psi_2 r^2 dr \right]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Рассмотрим первый интеграл. Для того чтобы перенести действие производной $\partial/\partial r$ на функцию ψ_1 , проинтегрируем его по частям. При этом необходимо учесть, что, в отличие от примера, рассмотренного в предыдущей задаче, в данном случае элемент объема dV содержит переменную r , от которой зависит оператор и по которой будем выполнять интегрирование по частям.

Используя формулу интегрирования по частям:

$$\int_{q_1}^{q_2} u dv = v u \Big|_{q_1}^{q_2} - \int_{q_1}^{q_2} v du,$$

обозначая за

$$u = \psi_1^* r^2, \quad dv = \frac{\partial \psi_2}{\partial r} dr,$$

получаем:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \psi_1^* \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial r} \right) r^2 dr &= \psi_1^* \psi_2 r^2 \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \left(\frac{\partial(r^2 \psi_1^*)}{\partial r} \right) \psi_2 dr = \\ &= - \int_0^\infty \left(2r + r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_1^* \psi_2 dr = - \int_0^\infty \left[\left(\frac{2}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_1 \right]^* \psi_2 r^2 dr. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Что касается второго интеграла в выражении (2.11), то, поскольку действие оператора $1/r$ на функцию ψ сводится к умножению функции ψ на вещественную функцию $1/r$, его можно сразу переписать в форме:

$$\int_0^\infty \psi_1^* \frac{1}{r} \psi_2 r^2 dr = \int_0^\infty \left(\frac{\psi_1}{r} \right)^* \psi_2 r^2 dr. \quad (2.13)$$

Подставляя (2.12) и (2.13) в выражение (2.11), получаем

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* (-i\hbar) \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi_2 dV &= \\ &= -i\hbar \int \left[\left(\frac{1}{r} - \frac{2}{r} - \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_1 \right]^* \psi_2 dV = \\ &= \int \left[(-i\hbar) \left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_1 \right]^* \psi_2 dV. \end{aligned}$$

Сравнивая этот результат с определением (2.10), находим, что $\hat{A}^+ = \hat{A}$, то есть оператор \hat{A} – самосопряженный.

Задание 2.4. Вычислить коммутатор $\left[5xy^2, \frac{\partial}{\partial y} \right]$.

Решение

Перед вычислением данного коммутатора упростим его, используя свойство № 3 коммутатора:

$$[c_1 \hat{A}, c_2 \hat{B}] = c_1 c_2 [\hat{A}, \hat{B}].$$

Но при этом учтем, что выносить за коммутатор можно не только числа, но и операторы, зависящие от некоторой переменной, в случае если другие операторы в коммутаторе не зависят от этой переменной. В данном случае вынести можно оператор x , так как относительно оператора производной $\partial/\partial y$ переменная x является постоянной:

$$\left[5xy^2, \frac{\partial}{\partial y} \right] = 5x \left[y^2, \frac{\partial}{\partial y} \right]. \quad (2.14)$$

Раскрывая получившийся коммутатор по определению и для наглядности указывая волновую функцию, на которую непосредственно действуют операторы, получаем

$$\begin{aligned} \left[y^2, \frac{\partial}{\partial y} \right] \psi &= \left(y \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} y \right) \psi = \\ &= y \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial (y \psi)}{\partial y} = y \frac{\partial \psi}{\partial y} - \psi - y \frac{\partial \psi}{\partial y} = -\psi. \end{aligned}$$

В дальнейшем, как это и принято, мы не будем указывать явно волновую функцию, на которую действуют операторы,

и будем записывать ответ в виде:

$$\left[5xy^2, \frac{\partial}{\partial y}\right] = -5x. \quad (2.15)$$

Задание 2.5. Вычислить коммутаторы $[x_k, \hat{p}_j]$, где индексы k, j пробегает значения x, y, z .

Решение

Здесь и далее по умолчанию в качестве исходного представления будем использовать координатное представление, когда волновая функция зависит от координат и времени. В этом представлении операторы координаты и импульса имеют следующий вид:

$$\hat{x}_k = x_k, \quad \hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}.$$

Действие оператора координаты на волновую функцию в этом случае сводится к умножению функции на координату x , поэтому в дальнейшем знак оператора над оператором \hat{x} будем опускать. Подставляя явный вид операторов в искомый коммутатор и раскрывая его по определению, получаем

$$[x_k, \hat{p}_j] = -i\hbar \left[x_k, \frac{\partial}{\partial x_j} \right] = -i\hbar \left(x_k \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} x_k \right).$$

В случае когда $k \neq j$ координата x_k является постоянной величиной относительно производной $\partial/\partial x_j$ и коммутатор равен нулю:

$$[x_k, \hat{p}_j] \Big|_{k \neq j} = -i\hbar \left(x_k \frac{\partial}{\partial x_j} - x_k \frac{\partial}{\partial x_j} \right) = 0.$$

При $k = j$ вычисления приводят к следующему результату:

$$\begin{aligned} [x_k, \hat{p}_j] \Big|_{k=j} &= -i\hbar \left[x_k, \frac{\partial}{\partial x_k} \right] = -i\hbar \left(x_k \frac{\partial}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} x_k \right) = \\ &= -i\hbar \left(x_k \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial x_k} - 1 \right) = i\hbar. \end{aligned}$$

Или

$$[x, \hat{p}_x] = [y, \hat{p}_y] = [z, \hat{p}_z] = i\hbar. \quad (2.16)$$

В общем случае результат вычислений может быть записан через символ Кронекера δ_{kj} :

$$[x_k, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{kj}, \quad \delta_{kj} = \begin{cases} 1, & k = j, \\ 0, & k \neq j. \end{cases}$$

Полученные результаты показывают, что координата вдоль одной из осей может иметь определенное значение одновременно с компонентами импульса по двум другим осям. В то же время не существует состояний, в которых координата и сопряженный ему импульс имеют одновременно определенное значение. По сути, соотношения (2.16) в операторной форме выражают соотношение неопределенности, являющееся фундаментальным для квантовой механики.

Задание 2.6. Вычислить коммутатор $[x^n, \hat{p}_x]$, где n – целое неотрицательное число.

Решение

Для вычисления коммутатора подставим в него оператор импульса

$$[x^n, \hat{p}_x] = -i\hbar \left[x^n, \frac{\partial}{\partial x} \right]. \quad (2.17)$$

Затем, раскрывая коммутатор по определению, получаем

$$\begin{aligned} [x^n, \hat{p}_x] &= -i\hbar \left(x^n \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x^n \right) \\ &= -i\hbar \left(x^n \frac{\partial}{\partial x} - n x^{n-1} - x^n \frac{\partial}{\partial x} \right) = i\hbar n x^{n-1}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Задание 2.7. Вычислить коммутатор $[x, \hat{p}_x^n]$, где n – целое неотрицательное число.

Решение

Вычисление данного коммутатора удобнее проводить в импульсном представлении, в котором операторы координаты и импульса имеют следующий вид:

$$\hat{x} = i\hbar \nabla_{p_x}, \quad \hat{p}_x = p_x,$$

где $\nabla_{p_x} = \partial/\partial p_x$, а коммутатор преобразуется к виду:

$$[x, \hat{p}_x^n] = i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial p_x}, p_x^n \right]. \quad (2.19)$$

Поскольку в импульсном представлении оператор импульса не содержит производной и его действие на волновую функцию сводится к умножению данной функции на импульс, то, как видно из (2.19), при вычислении коммутатора в импульсном представлении мы получим не производную n -го порядка, а переменную в n -степени, которую нужно продифференцировать один раз. Это существенно упрощает вычисление коммутатора.

Воспользуемся свойством № 1 коммутаторов и перепишем коммутатор (2.19) в форме:

$$[x, \hat{p}_x^n] = -i\hbar \left[p_x^n, \frac{\partial}{\partial p_x} \right]. \quad (2.20)$$

Коммутатор (2.20) можно вычислить по определению, а можно воспользоваться результатом, полученным при решении задания 2.6. Действительно, если в выражении (2.17) выполнить следующую замену:

$$x \rightarrow p_x, \quad \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial}{\partial p_x}, \quad (2.21)$$

то получим искомый коммутатор (2.20), для которого сразу можно выписать ответ, произведя замену (2.21) в (2.18):

$$[x, \hat{p}_x^n] = i\hbar n p_x^{n-1}. \quad (2.22)$$

Результат (2.22) справедлив как для импульсного представления, так и для координатного. При использовании данного результата в импульсном представлении необходимо помнить, что в координатном представлении импульс является оператором и нужно использовать для него соответствующее выражение, $\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$:

$$[x, \hat{p}_x^n] = i\hbar n \hat{p}_x^{n-1} = (-1)^{n-1} n (i\hbar)^n \frac{\partial^{n-1}}{\partial x^{n-1}}. \quad (2.23)$$

Легко проверить, что из (2.23) при $n = 1$ воспроизводится результат (2.16), полученный в задании 2.5.

Задание 2.8. Вычислить коммутаторы $[\hat{M}_k, \hat{M}_l]$, где индексы k, l пробегают значения x, y, z .

Решение

Оператор момента импульса определяется в квантовой механике так же, как и в классической физике, но в качестве координат и импульсов теперь используем изображающие их операторы:

$$\vec{\hat{M}} = [\vec{r} \times \vec{\hat{p}}]. \quad (2.24)$$

В проекциях на оси декартовой системы координат компоненты оператора момента импульса имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{M}_x &= y \hat{p}_z - z \hat{p}_y, \\ \hat{M}_y &= z \hat{p}_x - x \hat{p}_z, \\ \hat{M}_z &= x \hat{p}_y - y \hat{p}_x. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Вычислим коммутатор $[\hat{M}_x, \hat{M}_y]$. Для этого подставим в коммутатор явный вид компонент вектора из (2.25) и используем свойства коммутаторов :

$$\begin{aligned} [\hat{M}_x, \hat{M}_y] &= [y \hat{p}_z - z \hat{p}_y, z \hat{p}_x - x \hat{p}_z] = \\ &= [y \hat{p}_z, z \hat{p}_x] - [y \hat{p}_z, x \hat{p}_z] - [z \hat{p}_y, z \hat{p}_x] + [z \hat{p}_y, x \hat{p}_z] = \\ &= y \hat{p}_x [\hat{p}_z, z] - y x [\hat{p}_z, \hat{p}_z] - \hat{p}_y \hat{p}_x [z, z] + \hat{p}_y x [z, \hat{p}_z]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Поскольку сам с собою оператор коммутирует, то два коммутатора равны нулю:

$$[z, z] = [\hat{p}_z, \hat{p}_z] = 0. \quad (2.27)$$

Оставшиеся коммутаторы мы вычисляли ранее в задании 2.5.:

$$[z, \hat{p}_z] = -[\hat{p}_z, z] = i\hbar. \quad (2.28)$$

Подставляя результаты (2.27) и (2.28) в 2.26, получаем

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = i\hbar\hat{M}_z.$$

Аналогично для коммутаторов между другими компонентами вектора получаем

$$[\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = i\hbar\hat{M}_x,$$

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_z] = -i\hbar(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) = -i\hbar\hat{M}_y.$$

Объединить все три результата в одну запись можно в следующей форме:

$$[\hat{M}_k, \hat{M}_l] = i\hbar\varepsilon_{klm} \hat{M}_m. \quad (2.29)$$

Здесь ε_{klm} – тензор Леви–Чивита, который определяется следующим образом: его элементы равны нулю, если хотя бы два индекса одинаковы. Элемент $\varepsilon_{123}(\varepsilon_{xyz})$ принимается равным $+1$; далее все элементы, имеющие комбинацию индексов, получаемую из $123(xyz)$ четным числом перестановок, равны $+1$, а получаемые нечетным числом перестановок равны -1 .

Как видно из (2.29), операторы, соответствующие разным компонентам вектора момента импульса, не коммутируют друг с другом. Следовательно, разные проекции момента импульса не могут быть одновременно измерены.

Задание 2.9. Вычислить коммутатор $[\vec{\nabla}, (\vec{r} \cdot \vec{a})]$, где $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ – постоянный вектор.

Решение

При вычислении коммутаторов с векторными операторами сначала необходимо определиться с тем, какой оператор (функция) получится в результате вычисления коммутатора – скалярный или векторный. Так, если оба оператора в коммутаторе векторные, то результатом вычисления коммутатора будет скалярный оператор (функция):

$$[\vec{A}, \vec{B}] = \vec{A} \cdot \vec{B} - \vec{B} \cdot \vec{A} = \hat{C}.$$

Если же в коммутаторе один из операторов векторный, а другой скалярный, то результатом вычисления коммутатора будет векторный оператор (функция):

$$[\vec{A}, \hat{B}] = \vec{A} \hat{B} - \hat{B} \vec{A} = \vec{\hat{C}} = (\hat{C}_x, \hat{C}_y, \hat{C}_z).$$

В данном случае результатом вычисления коммутатора будет некий вектор:

$$[\vec{\nabla}, (\vec{r} \cdot \vec{a})] = \vec{C} = (C_x, C_y, C_z).$$

Искать вектор \vec{C} можно двумя способами:

1-й способ. При этом способе будем использовать векторные обозначения и вычислять последовательно все компоненты вектора C_x, C_y, C_z :

$$\begin{aligned} C_x &= \left[\frac{\partial}{\partial x}, (\vec{r} \cdot \vec{a}) \right], \\ C_y &= \left[\frac{\partial}{\partial y}, (\vec{r} \cdot \vec{a}) \right], \\ C_z &= \left[\frac{\partial}{\partial z}, (\vec{r} \cdot \vec{a}) \right]. \end{aligned}$$

Вычислим коммутатор, соответствующий x -проекции вектора. Для этого раскроем скалярное произведение векторов в декартовой системе координат:

$$(\vec{r} \cdot \vec{a}) = xa_x + ya_y + za_z$$

и подставим его в коммутатор:

$$C_x = \left[\frac{\partial}{\partial x}, xa_x + ya_y + za_z \right] = a_x \left[\frac{\partial}{\partial x}, x \right] = a_x.$$

Аналогично для двух других проекций получаем

$$C_y = \left[\frac{\partial}{\partial y}, xa_x + ya_y + za_z \right] = a_y \left[\frac{\partial}{\partial y}, y \right] = a_y.$$

$$C_z = \left[\frac{\partial}{\partial z}, xa_x + ya_y + za_z \right] = a_z \left[\frac{\partial}{\partial z}, z \right] = a_z.$$

Таким образом, искомый коммутатор равен вектору \vec{a} :

$$[\vec{\nabla}, (\vec{r} \cdot \vec{a})] = \vec{C} = (a_x, a_y, a_z) = \vec{a}. \quad (2.30)$$

2-й способ. При этом способе будем использовать индексные обозначения, в которых векторы и их скалярное произведение имеют вид:

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad \vec{r} = x_i, \quad \vec{a} = a_i, \quad (\vec{r} \cdot \vec{a}) = x_i a_i, \quad (2.31)$$

где индекс i принимает значения $i = x, y, z$.

Использование индексных обозначений позволяет намного быстрее выполнить необходимые вычисления, так как вместо трех

выражений, соответствующих трём проекциям векторов в случае векторных обозначений (см. первый способ решения), в этом случае мы работаем с одним выражением, в котором содержится информация сразу о всех трех проекциях.

Подставляя выражения для векторов из (2.31) в искомый коммутатор и помня, что один индекс в выражении не может встречаться более двух раз, получаем

$$[\vec{\nabla}, (\vec{r} \cdot \vec{a})] = \left[\frac{\partial}{\partial x_i}, x_k a_k \right] = a_k \left[\frac{\partial}{\partial x_i}, x_k \right].$$

Здесь по индексу k подразумевается суммирование.

Воспользовавшись результатом вычисления коммутатора (см. решение задания 2.5.)

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_i}, x_k \right] = \delta_{ik}$$

и выполняя суммирование по индексу k , окончательно получаем

$$[\vec{\nabla}, (\vec{r} \cdot \vec{a})] = a_k \delta_{ik} = a_i = \vec{a}, \quad (2.32)$$

что в точности воспроизводит результат (2.30).

Задание 2.10. Вычислить коммутатор $[\vec{\nabla}, [\vec{r} \times \vec{a}]]$, где $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ – постоянный вектор.

Решение

Определимся со структурой объекта, который получится в результате вычисления коммутатора, – это будет скалярная величина, так как оба оператора в коммутаторе являются векторами:

$$[\vec{\nabla}, [\vec{r} \times \vec{a}]] = C.$$

Данный коммутатор целесообразно вычислять с использованием индексных обозначений векторов, так как при использовании векторных обозначений вычисления будут слишком громоздкими.

В индексных обозначениях векторное произведение записывается в виде:

$$[\vec{r} \times \vec{a}]_i = \varepsilon_{ijk} x_j a_k.$$

Здесь ε_{ijk} – тензор Леви–Чивита.

Подставляя вектор $\vec{\nabla}$ и векторное произведение векторов \vec{r} и \vec{a} в индексных обозначениях в искомый коммутатор, получаем

$$[\vec{\nabla}, [\vec{r} \times \vec{a}]] = \left[\frac{\partial}{\partial x_i}, \varepsilon_{ijk} x_j a_k \right]. \quad (2.33)$$

После вынесения за знак коммутатора всех постоянных величин коммутатор сведется к вычисленному ранее:

$$\varepsilon_{ijk} a_k \left[\frac{\partial}{\partial x_i}, x_j \right] = \varepsilon_{ijk} a_k \delta_{ij}. \quad (2.34)$$

Выражение (2.34) равно нулю, так как содержит свертку симметричного тензора δ_{ij} и антисимметричного ε_{ijk} . Таким образом,

$$[\vec{\nabla}, [\vec{r} \times \vec{a}]] = 0.$$

Задание 2.11. Найти оператор трансляции:

- а) вдоль оси x на расстояние a ,
- б) на произвольный вектор \vec{a} .

Решение

Действие оператора трансляции вдоль оси x на волновую функцию определяется следующим образом:

$$\hat{T}_a \psi(x, y, z) = \psi(x + a, y, z). \quad (2.35)$$

Разложим функцию $\psi(x, y, z)$ в ряд по степеням a :

$$\begin{aligned} \psi(x + a, y, z) &= \psi(x, y, z) + a \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{a^2}{2!} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \dots = \\ &= \left[1 + a \frac{\partial}{\partial x} + \frac{a^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right] \psi(x, y, z). \end{aligned}$$

Замечая, что выражение, стоящее в квадратных скобках, представляет собой разложение в ряд экспоненты

$$\left[1 + a \frac{\partial}{\partial x} + \frac{a^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} = e^{a \frac{\partial}{\partial x}},$$

волновая функция может быть записана в виде:

$$\psi(x + a, y, z) = e^{a \partial / \partial x} \psi(x, y, z). \quad (2.36)$$

Сравнивая полученный результат с определением (2.35), находим оператор трансляции вдоль оси x на расстояние a , который может быть выражен через оператор импульса:

$$\hat{T}_a = e^{a \frac{\partial}{\partial x}} = e^{\frac{i}{\hbar} a \hat{p}_x}.$$

Оператор сдвига на произвольный вектор $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$ определяется равенством

$$\hat{T}_{\vec{a}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a}),$$

и для него аналогичным образом получаем

$$\hat{T}_{\vec{a}} = e^{(\vec{a} \vec{\nabla})} = e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{a} \vec{p})}.$$

Задание 2.12. Найти оператор, эрмитово сопряженный к оператору трансляции $\hat{T}_{\vec{a}}$.

Решение

Оператор $\hat{T}_{\vec{a}}^+$ определяется равенством:

$$\int \psi_1(\vec{r})^* \hat{T}_{\vec{a}} \psi_2(\vec{r}) dV = \int \left(\hat{T}_{\vec{a}}^+ \psi_1(\vec{r}) \right)^* \psi_2(\vec{r}) dV. \quad (2.37)$$

Рассмотрим интеграл, стоящий слева от знака равенства в этом выражении. Подействуем оператором $\hat{T}_{\vec{a}}$ на функцию $\psi_2(\vec{r})$:

$$J = \int \psi_1^*(\vec{r}) \hat{T}_{\vec{a}} \psi_2(\vec{r}) dV = \int \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r} + \vec{a}) dV$$

и произведем замену переменной:

$$\vec{r} + \vec{a} = \vec{r}'.$$

Так как интегрирование ведется по всему пространству, пределы интегрирования не изменятся. После замены получаем

$$J = \int \psi_1^*(\vec{r}' - \vec{a}) \psi_2(\vec{r}') dV'. \quad (2.38)$$

Функция $\psi_1^*(\vec{r}' - \vec{a})$ может быть представлена как функция $\psi_1^*(\vec{r}')$, на которую подействовал оператор сдвига на вектор $-\vec{a}$:

$$\psi_1^*(\vec{r}' - \vec{a}) = \hat{T}_{(-\vec{a})} \psi_1^*(\vec{r}') = \left(\hat{T}_{(-\vec{a})} \psi_1(\vec{r}') \right)^*, \quad (2.39)$$

где учтено, что оператор $\hat{T}_{(-\vec{a})}$ вещественный и, следовательно, не меняется при комплексном сопряжении. Подставляя результат (2.39) в формулу (2.38) и сравнивая с определением, получаем

$$\int \psi_1^*(\vec{r}) \hat{T}_{\vec{a}} \psi_2(\vec{r}) dV = \int \left(\hat{T}_{(-\vec{a})} \psi_1(\vec{r}) \right)^* \psi_2(\vec{r}) dV,$$

откуда находим

$$\hat{T}_{\vec{a}}^+ = \hat{T}_{(-\vec{a})}.$$

Оператор, эрмитово сопряженный к оператору трансляции на произвольный вектор \vec{a} , есть оператор сдвига на то же расстояние $|\vec{a}|$, но в направлении, противоположном направлению вектора \vec{a} .

Задания для самостоятельного решения

1. Является ли оператор комплексного сопряжения а) линейным; б) эрмитовым ?

2. Возвести в квадрат операторы:

а) $x + \frac{\partial}{\partial x}$, б) $y \frac{\partial}{\partial y}$.

3. При каких условиях на числа α , β , γ оператор

$$\hat{A} \equiv \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial}{\partial x} + i\gamma$$

является а) линейным; б) эрмитовым ?

4. Доказать самосопряженность операторов проекции импульса \hat{p}_x и момента импульса \hat{M}_x .

5. Найти оператор, эрмитово сопряженный к оператору $\hat{A} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} + x \right)$.

6. Найти оператор, эрмитово сопряженный к оператору $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

7. Доказать, что если два эрмитовых оператора \hat{A} и \hat{B} коммутируют, то их произведение тоже является эрмитовым оператором.

8. Выразить в сферических координатах операторы проекций момента импульса \hat{M}_x , \hat{M}_y , \hat{M}_z и оператор квадрата момента импульса \hat{M}^2 .

9. Вычислить коммутаторы (индексы $k, j = 1, 2, 3$ нумеруют проекции векторных операторов на декартовы оси координат x, y, z):

- а) $[\hat{M}_k, \hat{M}^2]$,
 б) $[\vec{\nabla}, (\vec{r} \cdot \vec{a})^2]$, $[\vec{\nabla}, r^2]$, $[\vec{\nabla}, (\hat{p} \cdot \vec{a})]$, $[\vec{\nabla}, [\hat{p} \times \vec{a}]]$, где $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ – постоянный вектор.
 в) $[x, \hat{H}]$, $[\hat{p}_x, \hat{H}]$, где \hat{H} – оператор энергии одномерного гармонического осциллятора.

3. Собственные значения и собственные функции операторов

Для того чтобы в состоянии, описываемом волновой функцией ψ , величина, изображаемая оператором \hat{F} , имела единственное значение, необходимо, чтобы выполнялось условие

$$\hat{F} \psi_f = f \psi_f \quad (3.1)$$

Волновая функция, удовлетворяющая этому условию, называется собственной функцией оператора \hat{F} , числовой коэффициент f называется собственным значением оператора \hat{F} . Спектр собственных значений может быть дискретным, непрерывным и смешанным.

В случае дискретного спектра, состоящего из счетного множества значений, каждому конкретному собственному значению оператора f_1, f_2, \dots, f_n соответствует определенная волновая функция $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$. В этом случае удобно уравнение (3.1) переписать, используя квантовые числа – числа, нумерующие собственные значения и квантовые состояния:

$$\hat{F} \psi_n = f_n \psi_n. \quad (3.2)$$

Собственные функции ψ_n и ψ_m эрмитового оператора, соответствующие разным собственным значениям f_n и f_m , являются ортонормированными:

$$\int \psi_n^* \psi_m dV = \delta_{nm},$$

где δ_{nm} – символ Кронекера.

Примером уравнения на собственные значения и собственные функции является стационарное уравнение Шредингера. Если

гамильтониан системы \hat{H} не зависит явно от времени, то общее решение имеет вид:

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Здесь $\psi_n(\vec{r})$ – собственные функции оператора Гамильтона:

$$\hat{H} \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r}),$$

где E_n – собственные значения оператора полной энергии. Это уравнение называют стационарным уравнением Шредингера.

Задание 3.1. Найти собственные значения и собственные функции $\Phi(\varphi)$ оператора \hat{M}_z .

Решение

Искать собственные функции и собственные значения оператора \hat{M}_z будем из уравнения

$$\hat{M}_z \Phi(\varphi) = M_z \Phi(\varphi). \quad (3.3)$$

Подставляя в уравнение (3.3) оператор \hat{M}_z в сферической системе координат:

$$\hat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

получаем

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi(\varphi) = M_z \Phi(\varphi).$$

Решением этого уравнения является функция

$$\Phi(\varphi) = N e^{iM_z \varphi/\hbar}. \quad (3.4)$$

Из условия однозначности функции

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$$

находим спектр собственных значений M_z :

$$N e^{iM_z \varphi/\hbar} = N e^{iM_z \varphi/\hbar} e^{iM_z 2\pi/\hbar} \quad \Rightarrow \quad 1 = e^{iM_z 2\pi/\hbar},$$

откуда

$$M_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.5)$$

Таким образом, спектр значений оператора \hat{M}_z – дискретный, проекция M_z меняется с шагом, равным \hbar . И каждому значению M_z соответствует определенная функция $\Phi_m(\varphi)$.

Чтобы вычислить коэффициент N , воспользуемся условием нормировки:

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 1.$$

Подставляя в него функцию (3.4), находим коэффициент нормировки:

$$N^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = N^2 2\pi = 1 \quad \Rightarrow \quad N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}},$$

с учетом которого собственная функция оператора \hat{M}_z имеет вид:

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

Квантовое число m называют магнитным квантовым числом.

Задание 3.2. Найти уровни энергии и волновые функции частицы массой m , находящейся в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками:

$$U = \begin{cases} 0, & -l/2 \leq x \leq l/2, \\ \infty, & x < -l/2, x > l/2. \end{cases}$$

Решение

Запишем стационарное уравнение Шредингера для данной системы:

$$\hat{H} \psi = E \psi,$$

где \hat{H} – оператор Гамильтона, равный

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U.$$

С учетом явного вида потенциальной энергии для области внутри потенциальной ямы уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0. \quad (3.6)$$

Здесь введен коэффициент $k^2 = 2mE/\hbar^2 > 0$.

Общим решением дифференциального уравнения (3.6) является функция

$$\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}. \quad (3.7)$$

Здесь первое слагаемое описывает свободное движение вдоль оси x , а второе – против оси x . Квадраты модулей коэффициентов $|c_1|^2$ и $|c_2|^2$ определяют вероятности обнаружить частицу в соответствующих состояниях.

Поскольку по условию задачи стенки ямы бесконечно высокие, частица не проникает за пределы ямы, поэтому вероятность ее обнаружения (а следовательно, и волновая функция) за пределами ямы равна нулю. На границах ямы непрерывная волновая функция также должна обращаться в нуль. Следовательно, граничные условия в данном случае имеют вид:

$$\begin{cases} \psi(-\frac{l}{2}) = 0, \\ \psi(\frac{l}{2}) = 0. \end{cases} \quad (3.8)$$

Подставляя в граничные условия (3.8) волновую функцию (3.7), получаем систему уравнений, из которой могут быть найдены коэффициенты c_1, c_2 :

$$\begin{cases} c_1 e^{-ikl/2} + c_2 e^{ikl/2} = 0, \\ c_1 e^{ikl/2} + c_2 e^{-ikl/2} = 0. \end{cases} \quad (3.9)$$

Система уравнений на параметры c_1, c_2 – линейная и однородная, необходимым и достаточным условием существования для нее ненулевого решения является равенство нулю определителя, составленного из коэффициентов при c_1, c_2 :

$$\det \begin{pmatrix} e^{-ikl/2} & e^{ikl/2} \\ e^{ikl/2} & e^{-ikl/2} \end{pmatrix} = 0. \quad (3.10)$$

Раскрывая определитель (3.10), находим

$$e^{-ikl} - e^{ikl} = 2i \sin(kl) = 0 \Rightarrow k_n = \frac{\pi n}{l}, \quad (3.11)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ – квантовое число, определяющее значения коэффициента k .

Так как k соответствует дискретный ряд значений, $k \rightarrow k_n$, значит, и энергия этой системы тоже принимает лишь определенные дискретные значения, то есть квантуется:

$$E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2.$$

Поскольку мы приравняли определитель системы (3.9) к нулю, уравнения этой системы стали линейно зависимыми, а значит, найти оба коэффициента c_1 и c_2 не сможем. Подставим найденное выражение для k в первое уравнение системы (3.9) и выразим коэффициент c_1 через c_2 :

$$c_1 = -c_2 e^{i\pi n} = -c_2 (-1)^n = c_2 (-1)^{n+1}.$$

Подставляя этот результат в (3.7), получаем волновую функцию:

$$\psi_n(x) = c_2 \left((-1)^{n+1} (e^{ik_n x} + e^{-ik_n x}) \right). \quad (3.12)$$

Коэффициент c_2 найдем из условия нормировки:

$$\int_{-l/2}^{l/2} |\psi_n(x)|^2 dx = 1.$$

Для дальнейших вычислений удобно рассмотреть два случая, соответствующие четному и нечетному значениям квантового числа n .

Для четного n :

$$\begin{aligned} \psi_{n_{\text{чет}}}(x) &= c_2 (-e^{ik_n x} + e^{-ik_n x}) \\ &= -2i c_2 \sin(k_n x) = N \sin(k_n x), \quad N = -2i c_2. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Для нечетного n :

$$\begin{aligned} \psi_{n_{\text{нечет}}}(x) &= c_2 (e^{ik_n x} + e^{-ik_n x}) \\ &= 2 c_2 \cos(k_n x) = N \sin(k_n x), \quad N = 2 c_2. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Подставляя волновые функции (3.13) и (3.14) в условие нормировки и выполняя несложное интегрирование окончательно получаем

$$\begin{aligned} \psi_{n_{\text{чет}}}(x) &= \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right), \\ \psi_{n_{\text{нечет}}}(x) &= \sqrt{\frac{2}{l}} \cos\left(\frac{\pi n}{l} x\right). \end{aligned}$$

Задание 3.3. Найти собственные значения и собственные функции оператора квадрата момента импульса \hat{M}^2 .

Решение

Собственные значения и собственные функции оператора квадрата момента импульса можно найти из уравнения

$$\hat{M}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = M^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (3.15)$$

Здесь $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ – собственная функция оператора \hat{M}^2 , называемая сферической функцией, l – орбитальное квантовое число, $l = 0, 1, 2, \dots$, m – магнитное квантовое число, $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$. Квантовое число m определяет проекцию вектора момента импульса на ось z , а l – длину вектора момента импульса или его квадрат, $M^2 = M^2(l)$ – именно эту закономерность мы и хотим найти.

Функция $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ зависит только от углов сферической системы координат, поскольку оператор \hat{M}^2 в сферической системе координат совпадает с точностью до коэффициента с угловой частью оператора Лапласа в сферической системе координат и не зависит от r :

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

С учетом явного вида оператора \hat{M}^2 легко убедиться, что в уравнении (3.15) разделяются переменные, а значит, сферическая функция может быть представлена в виде произведения двух функций:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = T_l(\theta) \Phi_m(\varphi). \quad (3.16)$$

Действительно, подставляя в уравнение (3.15) явный вид оператора \hat{M}^2 и сферическую функцию в виде (3.16), получаем два уравнения:

$$\begin{aligned} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin^2 \theta \frac{M^2}{\hbar^2} \right) T_l(\theta) &= \lambda^2 T_l(\theta), \\ -\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Phi_m(\varphi) &= \lambda^2 \Phi_m(\varphi), \end{aligned} \quad (3.17)$$

где за λ^2 обозначена постоянная разделения.

Уравнение на функцию $\Phi_m(\varphi)$ после домножения обеих частей на \hbar^2 может приведено к виду:

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^2\Phi_m(\varphi) = \hat{M}_z^2\Phi_m(\varphi) = \hbar^2\lambda^2\Phi_m(\varphi).$$

То есть функция $\Phi_m(\varphi)$ является собственной функцией оператора \hat{M}_z (см. задание 3.1.) и сферическая функция в общем случае имеет следующий вид:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = T_l(\theta) e^{im\varphi}. \quad (3.18)$$

Далее мы не будем решать уравнение (3.17), а найдем собственные значения M^2 и функции $T_l(\theta)$, используя свойства, в том числе коммутационные, некоторых операторов.

Для этого введем повышающий оператор \hat{K}^+ и понижающий оператор \hat{K}^- для момента импульса:

$$\hat{K}^+ = \hat{M}_x + i\hat{M}_y, \quad \hat{K}^- = \hat{M}_x - i\hat{M}_y, \quad (3.19)$$

которые коммутируют друг с другом по следующему правилу:

$$[\hat{K}^+, \hat{K}^-] = 2\hbar\hat{M}_z. \quad (3.20)$$

Операторы \hat{K}^+ и \hat{K}^- называются повышающим и понижающим соответственно, так как действие данных операторов на сферическую функцию, описывающую некоторое состояние $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, приводит к тому, что мы получаем новую функцию, соответствующую состоянию, в котором квантовое число m становится больше или меньше на 1, что физически означает увеличение или уменьшение проекции момента на ось z на \hbar . Действие данных операторов на функцию $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ определяется соотношениями:

$$\begin{aligned} \hat{K}^+ Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= \hbar\sqrt{l(1+l) - m(m+1)} Y_{l,m+1}(\theta, \varphi), \\ \hat{K}^- Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= \hbar\sqrt{l(1+l) - m(m-1)} Y_{l,m-1}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (3.21)$$

При этом, если подействовать операторами \hat{K}^+ и \hat{K}^- на функции, описывающие физические состояния с максимальным и минимальным значениями проекции M_z соответственно, получим

нуль, так как в этом случае повысить или понизить значение квантового числа m уже нельзя:

$$\hat{K}^+ Y_{l,m=m_{max}}(\theta, \varphi) = \hat{K}^+ Y_{l,+l}(\theta, \varphi) = 0, \quad (3.22)$$

$$\hat{K}^- Y_{l,m=m_{min}}(\theta, \varphi) = \hat{K}^- Y_{l,-l}(\theta, \varphi) = 0. \quad (3.23)$$

Найдем выражение для оператора квадрата импульса через повышающий и понижающий операторы. Как для любого вектора, квадрат момента импульса определяется как сумма квадратов его компонент:

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2, \quad (3.24)$$

где компоненты \hat{M}_x и \hat{M}_y выразим из (3.19):

$$\hat{M}_x = \frac{1}{2}(\hat{K}^+ + \hat{K}^-), \quad \hat{M}_y = \frac{i}{2}(\hat{K}^- - \hat{K}^+)$$

и подставим в (3.24):

$$\begin{aligned} \hat{M}^2 &= \frac{1}{4}(\hat{K}^+ + \hat{K}^-)^2 - \frac{1}{4}(\hat{K}^- - \hat{K}^+)^2 + \hat{M}_z^2 = \\ &= \frac{1}{2}(\hat{K}^+ \hat{K}^- + \hat{K}^- \hat{K}^+) + \hat{M}_z^2. \end{aligned}$$

С учетом коммутатора (3.20) выражение для оператора \hat{M}^2 может быть переписано в двух вариантах:

$$\hat{M}^2 = \hat{K}^- \hat{K}^+ + \hbar \hat{M}_z + \hat{M}_z^2, \quad (3.25)$$

$$\hat{M}^2 = \hat{K}^+ \hat{K}^- - \hbar \hat{M}_z + \hat{M}_z^2. \quad (3.26)$$

Поскольку длина вектора не меняется при его вращении в пространстве, мы можем искать длину вектора момента импульса при любой его ориентации в пространстве (при любом значении проекции этого вектора на ось z). Найдем собственные значения оператора \hat{M}^2 в состоянии, при котором проекция вектора момента на ось z максимальная, то есть

$$M_z = m_{max} \hbar = +l \hbar.$$

Запишем уравнение (3.15) для данной физической ситуации:

$$\hat{M}^2 Y_{l,+l}(\theta, \varphi) = M^2 Y_{l,+l}(\theta, \varphi) \quad (3.27)$$

и подставим в него \hat{M}^2 в виде (3.25):

$$\left(\hat{K}^- \hat{K}^+ + \hbar \hat{M}_z + \hat{M}_z^2\right) Y_{l,+l}(\theta, \varphi) = M^2 Y_{l,+l}(\theta, \varphi). \quad (3.28)$$

Действуем в левой части равенства операторами \hat{K}^+ и \hat{M}_z с учетом (3.22) и (3.5) соответственно и находим, что

$$M^2 = \hbar^2 l(l+1). \quad (3.29)$$

Аналогичный результат можно получить для состояния с минимальной проекцией момента на ось z , описываемом функцией $Y_{l,-l}(\theta, \varphi)$. В этом случае для \hat{M}^2 удобно воспользоваться выражением (3.26), чтобы получить нуль при действии на функцию $Y_{l,-l}(\theta, \varphi)$ оператора \hat{K}^- .

Найти сферические функции также можно с помощью повышающего и понижающего операторов. Снова рассмотрим конкретное состояние, например с максимальной проекцией момента на ось z , и из уравнения (3.22) найдем функцию, описывающую данное состояние, $Y_{l,+l}$.

Для этого воспользуемся выражением для повышающего оператора в сферической системе координат:

$$\hat{K}^+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3.30)$$

и, подставляя его и сферическую функцию в виде (3.18) в уравнение (3.22), получаем

$$\hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) T_l(\theta) e^{iml} = 0. \quad (3.31)$$

После дифференцирования по углу φ выражение (3.31) упрощается и сводится к уравнению по переменной θ :

$$\frac{dT_l(\theta)}{T_l(\theta)} = l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} d\theta,$$

интегрируя которое находим функцию $T_l(\theta)$:

$$T_l(\theta) = N (\sin \theta)^l,$$

а значит, и сферическую функцию, соответствующую состоянию с максимальной проекцией момента на ось z при заданном M^2 (заданном квантовом числе l):

$$Y_{l,+l}(\theta, \varphi) = N (\sin \theta)^l e^{il\varphi}. \quad (3.32)$$

Здесь N – нормировочный коэффициент, который определяется из условия нормировки:

$$\int |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1.$$

Выражение (3.32) позволяет найти сферическую функцию при заданном квантовом числе l для состояния с максимальным значением $m = +l$.

Найти сферические функции, соответствующие физическим состояниям с другими значениями квантового числа m (при заданном l), можно из (3.32) с помощью понижающего оператора. Для этого нужно действовать на функцию (3.32) понижающим оператором по правилу (3.21), последовательно понижая значение квантового числа m до минимального:

$$\begin{aligned} \hat{K}^- Y_{l,l}(\theta, \varphi) &= \hbar \sqrt{l(1+l) - l(l-1)} Y_{l,l-1}(\theta, \varphi), \\ \hat{K}^- Y_{l,l-1}(\theta, \varphi) &= \hbar \sqrt{l(1+l) - (l-1)(l-2)} Y_{l,l-2}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

и т. д.

Напомним, что спектр возможных значений квантового числа m при заданном l определяется условием

$$-l \leq m \leq +l,$$

соответственно действовать на сферическую функцию оператором \hat{K}^- и понижать значение квантового числа m при заданном l можно до тех пор, пока оно не станет равным $-l$.

Задания для самостоятельного решения

1. Найти вид понижающего оператора \hat{K}^- в сферической системе координат.

2. С помощью понижающего оператора \hat{K}^- найти сферическую функцию $Y_{l,-l}$, соответствующую состоянию с минимальной проекцией момента импульса на ось z при заданном l .

3. С помощью повышающего и понижающего операторов \hat{K}^+ , \hat{K}^- найти сферические функции, отвечающие состояниям при $l = 1, 2$.

4. Представление операторов в матричной форме

До сих пор мы строили математический аппарат квантовой механики с помощью линейных операторов, изображающих физические величины. Базовыми операторами при этом являются оператор координаты \vec{r} и оператор импульса \vec{p} , практически все остальные необходимые операторы физических величин могут быть через них выражены. Однако существует альтернативный способ построения квантовой механики, в котором операторы представляются в виде матриц. Такой способ обладает большей общностью (есть операторы, например оператор спина, которые могут быть представлены только в виде матрицы), но при этом является более громоздким и иногда создает дополнительные сложности при решении некоторых задач. Два этих подхода к описанию квантовой механики являются эквивалентными. Правила представления оператора в виде матрицы и будут получены в данном разделе.

Пусть нам дан некоторый оператор \hat{F} с дискретным спектром собственных значений f_n и набором собственных функций $\psi_n(q)$:

$$\hat{F} \psi_n(q) = f_n \psi_n(q).$$

Рассмотрим другой оператор \hat{A} , который, действуя на функцию $\chi(q)$, по некоторому правилу переводит ее в функцию $\varphi(q)$:

$$\hat{A} \chi(q) = \varphi(q). \quad (4.1)$$

Будем считать, что оператор \hat{A} , функции $\chi(q)$ и $\varphi(q)$ определены на тех же переменных, что оператор \hat{F} и его собственные функции $\psi(q)$.

Поскольку система собственных функций оператора \hat{F} представляет собой полный набор, следовательно, любую функцию, определенную на той же области переменных, что и функции

$\psi_n(q)$, можно разложить по этим функциям как по базису:

$$\varphi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q), \quad \chi(q) = \sum_n b_n \psi_n(q).$$

Подставим эти разложения в (4.1):

$$\hat{A} \sum_n b_n \psi_n(q) = \sum_n b_n \hat{A} \psi_n(q) = \sum_n c_n \psi_n(q). \quad (4.2)$$

Здесь мы воспользовались свойством линейности оператора \hat{A} .

Домножая это равенство слева на $\psi_m^*(q)$ и интегрируя по всей области изменения координаты x , получаем

$$\sum_n b_n \int \psi_m^*(q) \hat{A} \psi_n(q) dq = \sum_n c_n \int \psi_m^*(q) \psi_n(q) dq. \quad (4.3)$$

Учитывая, что собственные функции оператора с дискретным спектром являются ортонормированными, интеграл в правой части этого выражения легко вычисляется:

$$\sum_n c_n \int \psi_m^*(q) \psi_n(q) dq = \sum_n c_n \delta_{m,n} = c_m, \quad (4.4)$$

и выражение (4.3) преобразуется к виду:

$$c_m = \sum_n A_{mn} b_n, \quad (4.5)$$

где введено обозначение:

$$A_{mn} = \int \psi_m^*(q) \hat{A} \psi_n(q) dq. \quad (4.6)$$

Поскольку наборы коэффициентов c_n и b_n определяют функции $\varphi(q)$ и $\chi(q)$ соответственно, то равенство (4.5), как и (4.1), фактически задает правило перехода от функции $\chi(q)$ к функции $\varphi(q)$. Этот переход осуществляется с помощью коэффициентов A_{mn} . Таким образом, можно определить набор всех величин A_{mn} как оператор \hat{A} в F -представлении. Совокупность величин A_{mn} может быть записана в виде матрицы

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{pmatrix},$$

которую называют матрицей оператора \hat{A} в F -представлении. В представлении именно F , так как матричные элементы оператора \hat{A} (4.6) определяются с помощью собственных функций оператора \hat{F} . Размерность этой матрицы определяется конкретной задачей.

Задание 4.1. Доказать, что в своем собственном представлении матрица оператора диагональная, причем по диагонали стоят собственные значения.

Решение

Пусть функции ψ_n являются собственными функциями оператора \hat{F} с собственными значениями f_n :

$$\hat{F} \psi_n = f_n \psi_n. \quad (4.7)$$

Матричные элементы этого оператора в его собственном представлении определяются выражением

$$F_{nm} = \int \psi_n^*(q) \hat{F} \psi_m(q) dq.$$

Действуя оператором \hat{F} на функцию $\psi_m(q)$ по правилу (4.7), находим

$$F_{nm} = \int \psi_n^*(q) f_m \psi_m(q) dq = f_m \int \psi_n^*(q) \psi_m(q) dq = f_m \delta_{nm},$$

где δ_{nm} – символ Кронекера.

Таким образом, матрица оператора \hat{F} в своем собственном представлении действительно имеет диагональный вид:

$$F = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & f_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & f_n \end{pmatrix},$$

где f_1, f_2, \dots – собственные значения оператора \hat{F} .

Задание 4.2. Найти матричный элемент произведения операторов $\hat{A}\hat{B}$, если известны матричные элементы операторов \hat{A} и \hat{B} .

Решение

По определению матричного элемента оператора (4.6) для произведения операторов записываем

$$(AB)_{nm} = \int \psi_n^*(q) \hat{A}(q) \hat{B}(q) \psi_m(q) dq, \quad (4.8)$$

и, применяя определение эрмитово сопряженного оператора к оператору \hat{A} , получаем

$$(AB)_{nm} = \int (\hat{A}^+(q) \psi_n(q))^* \hat{B}(q) \psi_m(q) dq. \quad (4.9)$$

«Разведем» в этом выражении переменные интегрирования, введя новую переменную q' . Для этого введем под интегралом дельта-функцию Дирака $\delta(q - q')$:

$$(AB)_{nm} = \int (\hat{A}^+(q') \psi_n(q'))^* \hat{B}(q) \psi_m(q) \delta(q - q') dq' dq. \quad (4.10)$$

Очевидно, что, используя свойство дельта-функции Дирака

$$\int_{D_a} f(x) \delta(x - a) dx = f(a),$$

где D_a – область интегрирования, внутри которой лежит точка $x = a$, из выражения (4.10) после интегрирования по переменной q' воспроизводим выражение (4.9).

Далее воспользуемся свойством полноты для волновых функций дискретного спектра:

$$\delta(q - q') = \sum_l \psi_l^*(q) \psi_l(q'),$$

с учетом которого выражение (4.10) может быть записано в форме:

$$\begin{aligned} (AB)_{nm} &= \sum_l \int (\hat{A}^+(q') \psi_n(q'))^* \psi_l(q') dq' \int \psi_l(q) \hat{B}(q) \psi_m(q) dq = \\ &= \sum_l \underbrace{\int \psi_n(q')^* \hat{A}(q') \psi_l(q') dq'}_{A_{nl}} \underbrace{\int \psi_l(q) \hat{B}(q) \psi_m(q) dq}_{B_{lm}}, \end{aligned}$$

то есть

$$(AB)_{nm} = \sum_l A_{nl} B_{lm},$$

что соответствует правилу перемножения матриц. Таким образом, матрица произведения операторов равна произведению матриц отдельных операторов.

Задание 4.3. Найти матрицу оператора \hat{M}_x при $l = 1$.

Решение

Согласно определению (4.6), матричные элементы оператора \hat{M}_x определяются выражением:

$$(M_x)_{\alpha\beta} = \int Y_{\alpha}^*(\theta, \varphi) \hat{M}_x Y_{\beta}(\theta, \varphi) d\Omega, \quad (4.11)$$

где $d\Omega$ – элемент телесного угла.

Поскольку сферические функции $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ определяются двумя квантовыми числами l и m , в данной задаче под каждым из индексов α и β надо понимать множество $\{l, m\}$. При фиксированном значении орбитального квантового числа l размерность матрицы определяется количеством собственных значений квантового числа m . В состоянии $l = 1$ квантовое число m может принимать значения $-1, 0, +1$, следовательно, размерность искомой матрицы будет (3×3) . Для того чтобы перебрать все состояния при заданном l , характеризующиеся разными m , удобно их выписать и затем пронумеровать:

α, β	1	2	3
l	1	1	1
m, m'	-1	0	1

(4.12)

Таким образом матричный элемент $(M_x)_{\alpha\beta}$ можно переписать в терминах квантовых чисел l и m :

$$(M_x)_{\alpha\beta} = \int Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) \hat{M}_x Y_{l,m'}(\theta, \varphi) d\Omega, \quad (4.13)$$

где соответствие между индексами α и β , определяющими порядковый номер матричного элемента, и квантовыми числами l

и m , определяющими физическое состояние, задается таблицей (4.12). Например,

$$(M_x)_{13} = \int Y_{1,-1}^*(\theta, \varphi) \hat{M}_x Y_{1,1}(\theta, \varphi) d\Omega,$$

$$(M_x)_{23} = \int Y_{1,0}^*(\theta, \varphi) \hat{M}_x Y_{1,1}(\theta, \varphi) d\Omega.$$

Вычисление матричных элементов оператора \hat{M}_x можно проводить, используя определение (4.13), но это не самый удобный способ, так как в этом случае для каждого конкретного матричного элемента необходимо подставлять в интеграл конкретные функции $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, оператор \hat{M}_x , действовать оператором на функцию и потом вычислять интеграл от полученного произведения двух функций по телесному углу. Все эти вычисления могут стать достаточно сложными и громоздкими. Задача существенно упрощается, если под интегралом в определении (4.13) не останется оператора, а будут стоять только сферические функции. Это избавит от необходимости вычислять интеграл, так как в силу ортонормированности функций $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ интеграл в этом случае сведется к символам Кронекера:

$$\int Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) Y_{l',m'}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}. \quad (4.14)$$

Чтобы «уйти» от оператора \hat{M}_x в выражении (4.13), выразим оператор \hat{M}_x через повышающий и понижающий операторы \hat{K}^+ и \hat{K}^- :

$$\hat{M}_x = \frac{\hat{K}^+ + \hat{K}^-}{2}. \quad (4.15)$$

Представление оператора \hat{M}_x в такой форме позволяет существенно упростить расчеты, поскольку известен результат действия операторов \hat{K}^+ и \hat{K}^- на произвольную функцию $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$:

$$\hat{K}^+ Y_{l,m}(\theta, \varphi) = N^+(l, m) Y_{l,m+1}(\theta, \varphi), \quad (4.16)$$

$$N^+(l, m) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}, \quad (4.17)$$

$$\hat{K}^- Y_{l,m}(\theta, \varphi) = N^-(l, m) Y_{l,m-1}(\theta, \varphi), \quad (4.18)$$

$$N^-(l, m) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}. \quad (4.19)$$

Подставляя оператор \hat{M}_x в виде (4.15) в формулу (4.13) и действуя операторами \hat{K}^+ , \hat{K}^- на функцию $Y_{l,m'}(\theta, \varphi)$, получаем

$$\begin{aligned} (M_x)_{\alpha,\beta} &= \frac{1}{2} \int Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) (\hat{K}^+ + \hat{K}^-) Y_{l,m'}(\theta, \varphi) d\Omega = \\ &= \frac{1}{2} \int Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) N^+(l, m') Y_{l,m'+1}(\theta, \varphi) d\Omega + \\ &+ \frac{1}{2} \int Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) N^-(l, m') Y_{l,m'-1}(\theta, \varphi) d\Omega. \end{aligned}$$

Принимая во внимание свойство ортонормированности сферических функций (4.14), получаем общее выражение для произвольного матричного элемента оператора \hat{M}_x :

$$(M_x)_{\alpha,\beta} = (M_x)_{lm,lm'} = \frac{1}{2} (N^+(l, m') \delta_{m,m'+1} + N^-(l, m') \delta_{m,m'-1}).$$

Подставляя в последнюю формулу $l = 1$ и $m, m' = 1, 2, 3$, можно легко выписать матрицу оператора \hat{M}_x , которая имеет вид:

$$M_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Задание 4.4. Найти матрицы операторов \hat{M}_z и \hat{M}^2 при $l = 1$.

Решение

Согласно определению (4.6), матричные элементы оператора \hat{M}_z определяются выражением:

$$(M_z)_{\alpha\beta} = \int Y_{\alpha}^*(\theta, \varphi) \hat{M}_z Y_{\beta}(\theta, \varphi) d\Omega, \quad (4.20)$$

где $d\Omega$ – элемент телесного угла, а для установления соответствия между индексами α и β и квантовыми числами l и m можно использовать таблицу (4.12) предыдущего задания.

Так как под интегралом стоят функции, которые являются собственными для оператора \hat{M}_z :

$$\hat{M}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (4.21)$$

то интеграл легко вычисляется в общем виде. Действительно, действуя на функцию $Y_\beta(\theta, \varphi)$ оператором \hat{M}_z и учитывая свойство ортонормированности сферических функций, получаем

$$\begin{aligned}
(M_z)_{\alpha\beta} &= \int Y_\alpha^*(\theta, \varphi) \hat{M}_z Y_\beta(\theta, \varphi) d\Omega = \\
&= \int Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) \hat{M}_z Y_{l,m'}(\theta, \varphi) d\Omega = \\
&= m' \hbar \int Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) Y_{l,m'}(\theta, \varphi) d\Omega = m' \hbar \delta_{m,m'}.
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Как видно из (4.22), отличными от нуля элементами в матрице будут только диагональные элементы, причем по диагонали будут стоять собственные значения $M_z = m\hbar$, соответствующие трем возможным значениям квантового числа $m = 1, 0, -1$.

$$M_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Этот результат иллюстрирует утверждение, доказанное в задании 4.1, так как матрица оператора \hat{M}_z была найдена именно в собственном представлении оператора \hat{M}_z , так как используемые сферические функции являются собственными для оператора \hat{M}_z .

Поскольку сферические функции являются собственными и для оператора \hat{M}^2 :

$$\hat{M}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$

то и матрица оператора \hat{M}^2 будет определена в его собственном представлении, а значит, будет диагональной с собственными значениями M^2 по диагонали. И при $l = 1$ матрицу можно сразу выписать:

$$M^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Здесь диагональные элементы соответствуют собственному значению $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ при $l = 1$.

Задания для самостоятельного решения

1. Показать, что если оператор эрмитов, то диагональные элементы его матрицы вещественны.

2. Найти связь между матричными элементами A_{mn} и A_{nm} , если оператор \hat{A} эрмитов.

3. Используя повышающий и понижающий операторы, найти матричные элементы операторов координаты x и импульса \hat{p}_x для одномерного гармонического осциллятора.

4. Доказать, что матрица оператора Гамильтона для одномерного гармонического осциллятора имеет вид $H_{mn} = m\omega^2(x^2)_{mn}/2 + (p_x^2)_{mn}/2m$.

5. Найти матрицу оператора \hat{M}_y в состоянии $l = 1$.

6. Найти матрицы операторов \hat{M}_x , \hat{M}_y и \hat{M}_z в состоянии $l = 1/2$.

Ответы к заданиям для самостоятельного решения

Раздел 1. Правило квантования Бора-Зоммерфельда

1. $E_n = \left(\frac{3}{2\sqrt{2}} g \pi \hbar \sqrt{m} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right)^{2/3}; \quad (h_{\max})_n = \frac{E_n}{mg}$

Указание к решению: рассмотреть движение частицы в поле силы тяжести, $u(z) = mgz$. За уровень отсчета потенциальной энергии выбрать поверхность, на которую падает тело.

2. $E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi \hbar}{l} \right)^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$.

Указание к решению: учесть, что внутри потенциальной ямы ($0 \leq x \leq l$) потенциальная энергия частицы равна нулю, $U(x) = 0$.

3. $E_n = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar \omega_B \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Указание к решению: для описание движения по окружности в плоскости xOy перейти в полярную систему координат, в которой при движении частицы по окружности будет меняться только одна координата – угол поворота φ . Записать функцию Лагранжа частицы в полярных координатах. Построить и вычислить один инвариант, соответствующий переменной φ .

4. $E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2(n_\rho+1/2)^2}$, радиус первой орбиты $a_0 \sim 0,5 \cdot 10^{-8}$ см.

Указание к решению: учесть, что при движении по окружности задача сводится к задаче с одной степенью свободы – углом φ , так как обобщенная координата $\rho = \text{const}$, то есть $\dot{\rho} = 0$, при этом $\mathcal{P}_\rho = m\dot{\rho} = 0$.

Раздел 2. Операторы в квантовой механике. Алгебра операторов

1. а) не является; б) не является.

2. а) $x^2 + 2x \frac{\partial}{\partial x} + 1 + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$; б) $y \frac{\partial}{\partial y} + y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}$.

3. а) α, β, γ – любые числа;

б) α – вещественное число, β, γ – мнимые числа.

5. $\hat{A}^+ = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} - x \right)$.

6. $\hat{A}^+ = -\frac{\partial}{\partial \varphi}$.

Указание к решению: вычисления проводить в сферической системе координат.

8. $\hat{M}_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right);$

$$\hat{M}_y = -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right); \quad \hat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi};$$

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

Указание к решению: для перехода к сферической системе координат воспользоваться соотношениями для координат:

$$x = r \cos \varphi \sin \theta, \quad y = r \sin \varphi \sin \theta, \quad z = r \cos \theta,$$

и для производных

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi};$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

$$9. \text{ а) } 0. \quad \text{б) } 2\vec{a}(\vec{r} \cdot \vec{a}); \quad 2\vec{r}; \quad 0; \quad 0;$$

$$\text{в) } -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}; \quad -i\hbar m \omega^2 x.$$

Раздел 3. Собственные значения и собственные функции операторов

$$1. \hat{K}^- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

$$2. Y_{l,-l}(\theta, \varphi) = N (\sin \theta)^l e^{-il\varphi}.$$

Указание к решению: искать функцию из уравнения $\hat{K}^- Y_{l,-l}(\theta, \varphi) = 0$.

3. для $l = 1$:

$$Y_{1,1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}; \quad Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta;$$

$$Y_{1,-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi};$$

для $l = 2$:

$$Y_{2,2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}; \quad Y_{2,1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi};$$

$$Y_{2,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1); \quad Y_{2,-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi};$$

$$Y_{2,-2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}.$$

Раздел 4. Представление операторов в матричной форме

1. Указание к решению: записать выражение для диагонального матричного элемента F_{nn} и вычесть из него комплексно сопряженное выражение для этого же элемента F_{nn}^* . Проанализировать полученное равенство, используя определение оператора, эрмитово сопряженного к оператору \hat{F} .

2. Указание к решению: записать выражения для матричного элемента F_{nm} и элемента F_{mn} . Комплексно сопрячь выраже-

ние для матричного элемента F_{mn} и вычесть его из выражения для матричного элемента F_{nm} . Проанализировать полученное равенство, используя определение оператора, эрмитово сопряженного к оператору \hat{F} .

$$3. x_{nm} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\delta_{n,m+1} + \sqrt{m}\delta_{n,m-1});$$

$$(p_x)_{nm} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\sqrt{n}\delta_{n,m+1} - \sqrt{m}\delta_{n,m-1}).$$

Указание к решению: Записать выражения для матричных элементов оператора координаты x_{nm} и оператора импульса $(p_x)_{nm}$, выразить операторы x и \hat{p}_x через повышающий и понижающий операторы для квантового осциллятора. При вычислении матриц обратить внимание, что порядковый номер элементов матриц (номера строки и столбца) меняются от нуля и до бесконечности, так как квантовое число n в задаче о квантовом осцилляторе меняется от нуля и до бесконечности.

4. Указание к решению: для нахождения матрицы оператора гамильтона H_{mn} найти квадраты матриц $(x^2)_{nm}$ и $(p_x^2)_{nm}$, используя результат задания 4.2., и затем подставить в выражение для матрицы оператора Гамильтона $H_{mn} = m\omega^2(x^2)_{mn}/2 + (p_x^2)_{mn}/2m$. Убедиться, что по диагонали стоят собственные значения оператора Гамильтона, определяемые выражением $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

5. матрица оператора \hat{M}_y для $l = 1$:

$$M_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

6. матрицы операторов проекций момента импульса для $l = 1/2$:

$$M_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad M_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Литература

1. Блохинцев, Д. И. Основы квантовой механики / Д. И. Блохинцев. – СПб.: Лань, 2004.
2. Давыдов, А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М.: Наука, 1973.
3. Соколов, А. А. Квантовая механика / А. А. Соколов, Ю. М. Лоскутов, И. М. Тернов. – М.: Наука, 1962.
4. Гречко, Л. Г. Сборник задач по теоретической физике / Л. Г. Гречко, В. И. Сугаков, О. Ф. Томасевич, А. М. Федорченко. – М.: Высшая школа, 1984.
5. Галицкий, В. М. Задачи по квантовой механике / В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. Н. Коган. – М.: Наука, 1981.
6. Гольдман, И. И. Сборник задач по квантовой механике / И. И. Гольдман, В. Д. Кривченков. – М.: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1957.

Оглавление

1. Правило квантование Бора-Зоммерфельда	3
2. Операторы в квантовой механике. Алгебра операторов	15
3. Собственные значения и собственные функции операторов	32
4. Представление операторов в матричной форме	42
4. Ответы к заданиям для самостоятельного решения	51
Литература	54

Учебное издание

Нарынская Елена Николаевна

**Методические указания к решению задач
по квантовой механике**

Учебно-методическое пособие

Редактор, корректор Л. Н. Селиванова

Компьютерная верстка Е. Н. Нарынская

Подписано в печать 5.07.2019.

Формат 60 × 84/16.

Усл. печ. л. 3,25 Уч.-изд. л. 2,5

Тираж 3 экз. Заказ

*Оригинал-макет подготовлен в редакционно-издательском
отделе ЯрГУ*

*Ярославский государственный университет
им. П. Г. Демидова.*

150003, Ярославль, ул. Советская, 14.